

非ニュートン粘弾性流体の格子ボルツマン法 による数値シミュレーション

一ノ瀬 祥一

ichinose@u-shizuoka-ken.ac.jp
静岡県立大学食品栄養科学部

2012年8月10日 名古屋工業大学機械工学科・特別講義

1. Introduction Lattice Boltzmann Method

- Lattice Boltzmann Method 1988 McNamara and Zanetti
テキストブック S. Succi, 2001, A.A. Mohamad, 2011
- ボルツマン輸送方程式(Sec.3) に基礎をおいた 散逸系 物理一般の離散モデル (数値シュミレーション)
- 従来のシュミレーション :
Finite Element Method(FEM)
Finite Difference Method(FDM)
Molecular Dynamics Method(MDM)
e.t.c.

1. Introduction 特徴

- 運動量（速度）一座標の空間（**phase space**）を離散化し、そこで多体系の 分布関数 $f_{\vec{p}}(\vec{x}, t)$ を調べる。
- 力学方程式（Advection, Diffusion, Navier-Stokes, etc）は時間空間の **スケール変換** に対応したパラメータ展開（Chapmann-Enskog Expansion）から出る
- 適応範囲が、従来の方法に比べ、格段に広い。**非ニュートン流体**、多層系、熱的非一様系、圧縮系などへの拡張ができる or できそう。
- プログラムが簡単。境界条件、初期条件

糸引き現象がおもしろい ▶ 納豆 ▶ 津波 ▶ 水滴

ソフトマター（食品、生体、化粧品、...）の特徴をよく引き出している簡単なモデル、leading は 1 次元 → 厳密解がある (1D Burgers Eq.)
散逸現象、非線形、非平衡、確率現象、開放系...

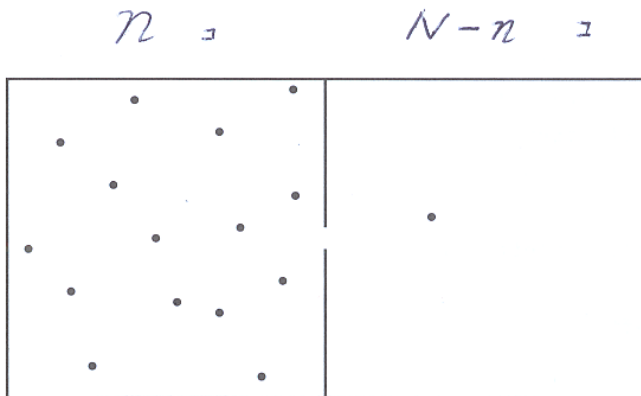
1. Introduction 納豆の糸引き

Figure: Nattoito



2. A Simplest Non-equilibrium System

Figure: 2rooms



2. A Simplest Non-equilibrium System

図のように小さな穴のあいた壁で仕切られた箱空間を考える。中に N 個の自由粒子がランダムに運動している。単位時間あたり 1 個の粒子がその穴を通りぬけるとする。時刻 t 秒での左の部屋の粒子数：
 $n(t)$

$$n(t+1) - n(t) = \begin{cases} -1 & r \leq \frac{n}{N} \\ +1 & r > \frac{n}{N} \end{cases}$$

$$= -\frac{n - rN}{|N - n|}, \quad (1)$$

$$rN \rightarrow n^{eq} \quad \text{各ステップごとに異なる} \quad (2)$$

$0 \leq r < 1$ は乱数、各ステップごとに異なる (random 変数)。

2. A Simplest Non-equilibrium System

$t + \Delta t$ での粒子数を $n + \Delta n$ とすると

$$\Delta n = \left[\frac{-n(t)}{N} + \frac{N - n(t)}{N} \right] \Delta t \quad . \quad (3)$$

$\Delta t \rightarrow 0$

$$\frac{dn}{dt} = 1 - \frac{2n(t)}{N} \quad (4)$$

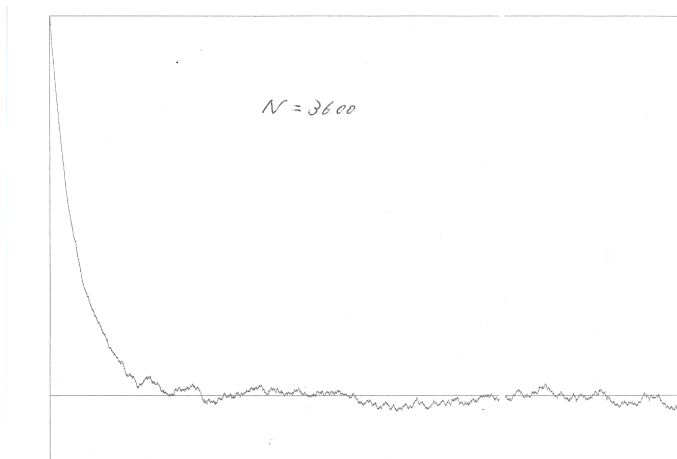
$$\text{故に } n(t) = \frac{N}{2}(1 + e^{-2t/N}) \rightarrow \frac{N}{2} \text{ 平衡値} \quad (5)$$

ステップごとのサイコロ振り (偶然) による差分方程式 (時間発展)
から Differential Eq. (決定論)

Note: No Use of Newton's law. cf Molecular Dynamics Method

2. A Simplest Non-equilibrium System

Figure: randomBox



3. ボルツマンの輸送方程式

Boltzmann 方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}_{ex}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \int d^3 v_1 \int d\sigma v_r (f' f_1' - f f_1)$$

$$f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad , \quad \mathbf{v}_r = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1 \quad (6)$$

H 定理

$$H \equiv \int \int d^3 v d^3 x f \ln f = -k S \quad \text{単調非増加} \quad (7)$$

平衡条件

$$\frac{dH}{dt} = 0 \rightarrow f^{eq} \propto e^{-c_3 \frac{m}{2} (\mathbf{v}-\mathbf{c})^2} \quad \text{Maxwell-Boltzmann 分布} \quad (8)$$

3. ボルツマンの輸送方程式

質量および運動量保存

$$\text{全質量} = \int \rho(\mathbf{x}, t) d^3x = \int d^3x d^3v f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \rightarrow$$

$$\text{密度 } \rho(\mathbf{x}, t) = \int d^3v f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$$

$$\text{各点 } \mathbf{x} \text{ における運動量保存 } 0 = \int d^3v (\mathbf{v} - \mathbf{u}) f \rightarrow$$

$$\text{流速 } \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int d^3v \mathbf{v} f \quad (9)$$

温度、熱流の導入

$$\text{温度 } \frac{3}{2} k T(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{1}{\rho} \int d^3v \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f$$

$$\text{熱流 } \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{1}{2} \int d^3v m w^2 \mathbf{w} f, \quad \mathbf{w} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{u}$$

3. ボルツマンの輸送方程式

流体の運動方程式 (輸送方程式より)

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} \equiv \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{P}$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{P})_i = \partial_j P_{ij} \quad , \quad P_{ij} = m \int d^3v (v_i - u_i)(v_j - u_j) f$$

応力テンソル (11)

熱流の運動方程式も同様

3. ボルツマンの輸送方程式

ニュートン流体（定義）

$$P_{ij} = p\delta_{ij} - \eta(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}\nabla_k u_k), \quad \eta : \text{粘性係数} \quad (12)$$

非ニュートン流体： 上の形以外すべて

平衡分布関数 f^{eq} Maxwell-Boltzmann 分布

$$f^{eq}(\mathbf{v}) = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT} \right) \quad (13)$$

4. Lattice Boltzmann Method(1)

MacNamara, Zanetti 1988

Boltzmann Transport Equation (L. Boltzmann 1872)

$$\frac{\partial f_{\vec{v}}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f_{\vec{v}} + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f_{\vec{v}}}{\partial v^i} = \Omega \quad , \quad f_{\vec{v}} = f_{\vec{v}}(\vec{x}, t), \quad \vec{v} = \vec{v}(\vec{x}, t) \quad ,$$

$f_{\vec{v}}(\vec{x}, t)$: 分布関数 $\Omega = \Omega(f)$: 衝突項 (演算子) . (13)

BGKW 近似 (Bhatnagar, Gross and Krook 1954, Welander 1954)

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} (f_{\vec{v}} - f_{\vec{v}}^{eq}) \quad , \quad \tau : \text{緩和時間} \quad ,$$

$f_{\vec{v}}^{eq}$: Maxwell-Boltzmann distribution function . (13)

(Single-time relaxation, Diagonal form)

4. Lattice Boltzmann Method(2)

Discretization of \vec{v} ($\vec{F} = 0$)

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f_i = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad , \quad \text{注意 } i : \text{ Not summed}$$

For 2 dimension $\{c_i\} = \{c_0; c_1, c_2, c_3, c_4; c_5, c_6, c_7, c_8\}$ See Fig.4 .(1)

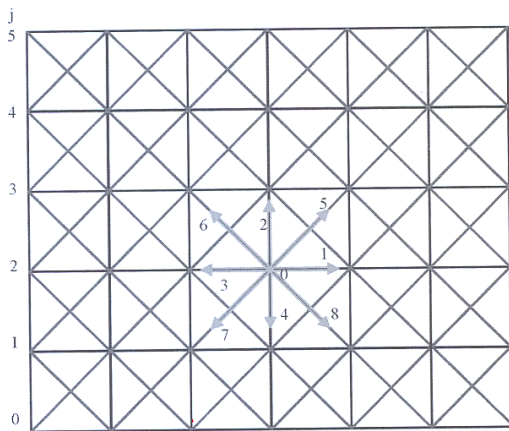
Discretization of t

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)) \quad . \quad (15)$$

(Direction-fixed form)

4. Lattice Boltzmann Method(3)

Figure: D2Q9lattice.eps



4. Lattice Boltzmann Method(4)

1D diffusion Eq. for temperature $T(x, t)$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \quad (16)$$

has the global scale invariance.

$$t \rightarrow \frac{t}{\epsilon^2} \quad , \quad x \rightarrow \frac{x}{\epsilon} \quad . \quad (17)$$

ϵ : positive scale parameter

1次元の場合 $(c_i) = (c_1, c_2) = (1/2, -1/2)$
 仮定

$$f_i^{eq}(x, t) = w_i \Theta(x, t) \quad . \quad (18)$$

質量保存

$$\sum_{i=1}^2 f_i^{eq}(x, t) = \Theta(x, t) \quad . \quad (19)$$

4. Lattice Boltzmann Method(5)

運動量保存

$$\sum_{i=1}^2 c_i f_i^{eq}(x, t) = 0 \quad . \quad (20)$$

→ $w_1 = w_2 = 1/2$

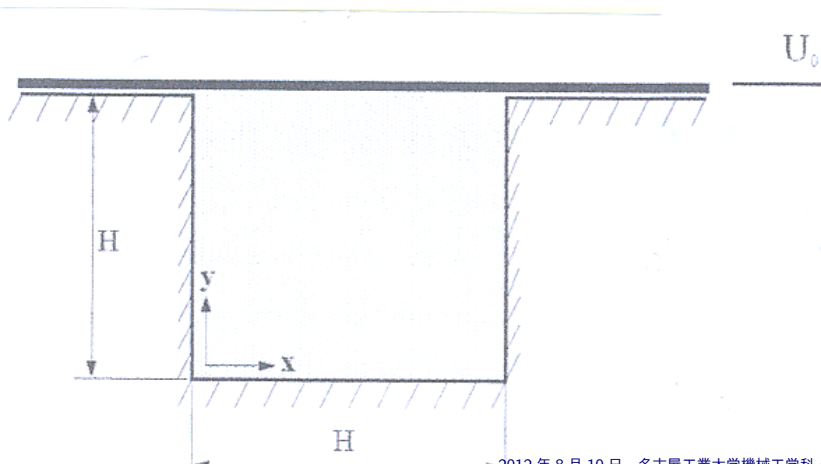
$\epsilon (\ll 1)$ 展開 (“ゆっくり” と見える座標で見る)

$$f_i(x, t) = f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2 + \dots \quad . \quad (21)$$

$$0 = \frac{\partial \Theta}{\partial t} - \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} \quad , \quad \alpha = \tau - \frac{\Delta t}{2} \quad . \quad (22)$$

4. Lattice Boltzmann Method(6)

Figure: LidDrivCav.eps



5. Non-Newtonian Flow の場合 (1)

例 Lid Driven Cavity

M.M. Hedayat, M.H. Borghel, A. Fakhari and K. Sadeghy, 2010

2 dim square cavity, lid-driven cavity flow

Pinho model (F.T. Pinho, 2003)

$$\eta^{eff} = (K_v |\dot{\gamma}|^{n-1}) \cdot (K_e |\dot{\epsilon}|^{p-1})$$

η^{eff} : effective viscosity K_v, K_e, n, p : constants
 $\dot{\gamma}$: rate of shear $\dot{\epsilon}$: rate of extension . (23)

See [Movies](#): VelDist1.0, V1.5, vVel

6. 1次元 Burgers 方程式 (1)

厳密に解ける場合

B.M, Boghosian, P. Love and J. Yezpez, 2004

1D2Q $\{c_1, c_2\}$

$$\text{密度 } \rho(x, t) = f_1(x, t)[N_+(x, t)] + f_2(x, t)[N_-(x, t)]$$

$$\text{速度 } u(x, t) = f_1(x, t)[N_+(x, t)] - f_2(x, t)[N_-(x, t)]$$

逆に

$$\text{右向き分布関数 } N_+ = \frac{1}{2}(\rho + u)$$

$$\text{左向き分布関数 } N_- = \frac{1}{2}(\rho - u) \quad (24)$$

H 関数

$$\text{仮定 } H = \frac{1 + \alpha}{2} h(N_+) + \frac{1 - \alpha}{2} h(N_-)$$

α : left-right asymmetry parameter \rightarrow collision property (25)

6. 1次元 Burgers 方程式 (2)

平衡分布関数

$$0 = \left. \frac{\partial H}{\partial u} \right|_{\rho} \rightarrow \text{厳密解 } u^{eq} = \frac{2}{\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha}} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{4} \left\{ \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \right\}^2} \right] \quad (26)$$

緩和時間 τ を「LB 変換の際、H 関数があまり変化しない」という条件の τ^* とパラメータ κ で定義する。 $0 \leq \kappa \leq 1$

下記の形のスケール変換 (parabolic ordering) を導入し、摂動計算を行う。時間は ε^2 倍し、空間は ε 倍する。

$$\begin{aligned} \Delta t &\rightarrow \varepsilon^2 \Delta t \\ c \Delta t = \Delta x &\rightarrow \varepsilon c \Delta t = \varepsilon \Delta x \end{aligned} \quad (27)$$

最終的に ε^2 計算のところから、Burgers 方程式が導かれる。

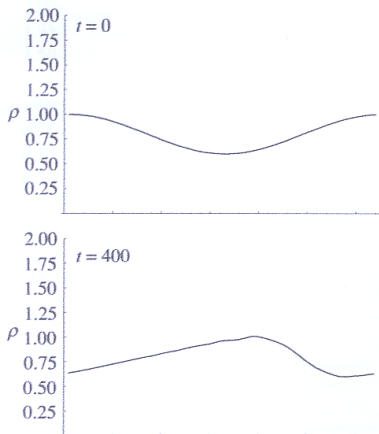
$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \quad w \equiv -\frac{c\alpha}{\Delta t} \rho, \quad \nu \equiv \frac{\kappa c^2}{2\Delta t} \quad (28)$$

6. 1次元 Burgers 方程式 (3)

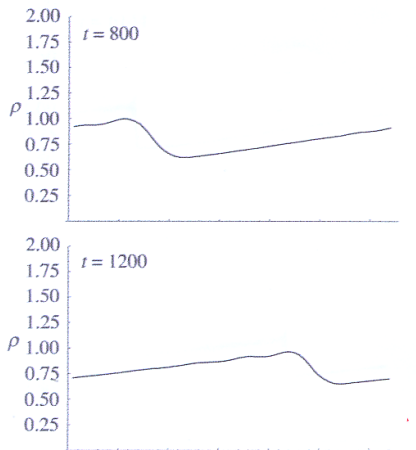
また摂動の高次が ρ に寄与しないという条件より

$$h(z) = z \exp(-1/z) + \text{Ei}(-1/z),$$
$$\text{Ei}(-z) = - \int_z^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (\text{積分指数関数}) \quad (29)$$

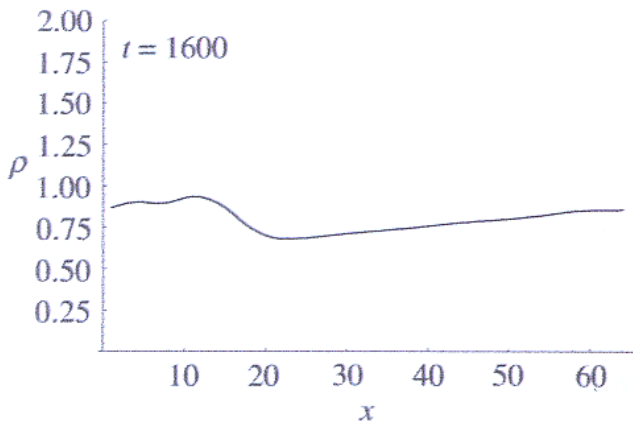
6. 1次元 Burgers 方程式 (4)

Figure: 1D Burgers $t=0, 400$ ($N=64$)

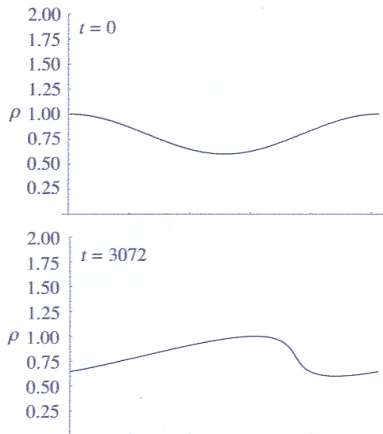
6. 1次元 Burgers 方程式 (5)

Figure: 1D Burgers $t=800, 1200$ ($N=64$)

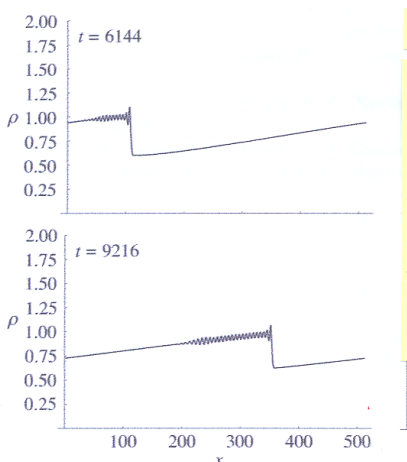
6. 1次元 Burgers 方程式 (6)

Figure: 1D Burgers $t=1600$ ($N=64$)

6. 1次元 Burgers 方程式 (7)

Figure: 1D Burgers $t=0, 3072$ ($N=512$)

6. 1次元 Burgers 方程式 (8)

Figure: 1D Burgers $t=6144, 9216$ ($N=512$)

7. Final Comment(1)

幾何学（一般相対性理論）が粘弾性流体の解析に非常に大切であることが最近わかってきている。

I. Bredberg, C. Keeler, V. Lysov and A. Strominger, arXiv:1101.2451
"From Navier-Stokes to Einstein"

V. Lysov and A. Strominger, arXiv:1104.5502
"From Petrov-Einstein to Navier-Stokes"

7. Final Comment(2)

Figure: Andromeda

