

数値流体力学の手法としての差分格子ボルツマン法

神戸大学名誉教授 薦原 道久

Michihisa Tsutahara
Professor Emeritus
Kobe University

1. まえがき

近年、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method) は、数値流体力学の有力な一手法としての地位を確立した感がある。従来のナヴィエ・ストークス方程式ではなく離散化 BGK 方程式を基礎とするところから、ナヴィエ・ストークスとは違った流れが生じる場合がある。しかし、そのモデルの特質を理解することにより、実在の流体現象をより現実的に解くことが可能な場合もあり、これからのこの手法の適用範囲は広がっていくものと考えられる。この小論では、格子ボルツマン法の簡単なモデルの説明と、いくつかの応用についてのべる。

2. 格子ボルツマン法 (LBM) と差分格子ボルツマン法 (FDLBM)

格子ボルツマン法では以下の離散化 BGK 方程式を基礎方程式とする。

$$\frac{\partial f_i(t, \mathbf{x})}{\partial t} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i(t, \mathbf{x})}{\partial x_\alpha} = -\frac{1}{\tau} (f_i(t, \mathbf{x}) - f_i^{(0)}(t, \mathbf{x})) \quad (1)$$

ここで f_i は粒子の分布関数、添え字 i は粒子の速度方向でそれぞれの方向の粒子に対して粒子数 (実数) が定義される。 c_i は粒子の速度で α はデカルト座標の指標である。 τ は単一緩和係数と呼ばれる定数で、 $f_i^{(0)}$ は粒子分布の平衡状態を表す局所平衡分布関数で、流体力学変数である密度 ρ 、流速 $\mathbf{u}$ 、内部エネルギー e 、そして粒子の速度の関数であらわされる。

$$f_i^{(0)} = f_i^{(0)}(\rho, u_\alpha, e, c_i) \quad (2)$$

式(1)を完全移流形 (クーラン数 1) の差分で定式化した

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = f_i(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{\tau} [f_i(t, \mathbf{x}) - f_i^{(0)}(t, \mathbf{x})] \quad (3)$$

を時間発展的に解くのが従来の LBM である⁽¹⁾。ここで、流体力学変数は

$$\rho = \sum_{i=1}^N f_i = \sum_{i=1}^N f_i^{(0)}, \quad \rho u_\alpha = \sum_{i=1}^N f_i c_{i\alpha} = \sum_{i=1}^N f_i^{(0)} c_{i\alpha}, \quad \rho \left(\frac{1}{2} u_\alpha^2 + e \right) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} f_i c_{i\alpha}^2 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} f_i^{(0)} c_{i\alpha}^2 \quad (4, a, b, c)$$

と定義される．ここで e は内部エネルギーである．分布関数と局所平衡分布関数とで同じ量を定義することにより，粒子の衝突過程（式(1)および(3)の右辺）でこれらの量が保存されることが分かる．これらは粒子の移動の際にも保存されるので，流れ場全体で保存される．

式(1)を従来の差分法を用いて解く方法を，特に差分格子ボルツマン法 (FDLBM) と呼んで区別する場合が多い⁽²⁾．後述するように，格子ボルツマン法は分子気体力学の方程式を基礎としており，圧縮性流体を取り扱うことになる．しかしモデルの簡便さを重視する立場から，熱を含めたエネルギー保存則（粒子の運動エネルギー保存）を考えないモデルがあり，ここでは非熱モデルと呼んでおく．このモデルでは音速（線形圧縮波の位相速度）は一定値となる．熱流体モデルに対しては，速度の異なるいくつかの粒子を導入する必要がある．

格子ボルツマン法のモデルが，ナヴィエ・ストークス方程式で表される流れを与えるためには，チューニング，特に局所平衡分布関数を適切に決定する必要がある．こういう操作が必要なのは，格子ボルツマンモデルの自由度が低く，そのままでは自然にオイラー方程式やナヴィエ・ストークス方程式を回復しないためである．

ここでは，熱流体モデルについて述べる．著者らが用いてきた差分ボルツマン法では，高レイノルズ数流れに対応して負の粘性を導入した

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x_\alpha} - \frac{A}{\tau} c_{i\alpha} \frac{\partial \{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)\}}{\partial x_\alpha} = -\frac{1}{\tau} \{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)\} \quad (8)$$

を用いている．式 (1) をそのまま計算に用いると，粘性率 μ が緩和時間 τ のオーダーとなる．また衝突項の安定条件は，時間刻み Δt に対して $\Delta t < \tau/2$ であり，高レイノルズ数においては，時間刻みを小さくとる必要がある．負の粘性を導入することにより，大きな τ に対しても，粘性率を小さく設定できる．

局所平衡分布関数は一般に，粒子速度とマクロな流れの速度の多項式

$$f_{\sigma i}^{(0)} = F_{\sigma} \rho \left[1 - 2B c_{\sigma\alpha} u_{\alpha} + 2B^2 c_{\sigma\alpha} c_{\sigma\beta} u_{\alpha} u_{\beta} + B u^2 - 2B^2 c_{\sigma\alpha} u_{\alpha} u^2 - \frac{4}{3} B^3 c_{\sigma\alpha} c_{\sigma\beta} c_{\sigma\gamma} u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} \right] \quad (6)$$

と表される⁽³⁾．ここで σ は粒子の分類を表す．上式の係数を下記の束縛条件

$$\sum_i f_i^{(0)} = \rho \quad \sum_i f_i^{(0)} c_{i\alpha} = \rho u_{\alpha}$$

$$\sum_i f_i^{(0)} \frac{c_i^2}{2} = \rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) \quad \sum_i f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} = \rho \left(\frac{2}{D} e \delta_{\alpha\beta} + u_{\alpha} u_{\beta} \right)$$

$$\sum_i f_i^{(0)} \frac{c_i^2}{2} c_{i\alpha} = \rho u_\alpha \left(\frac{D+2}{D} e + \frac{u^2}{2} \right) \quad (7a,b,c,d,e,f,g)$$

$$\sum_i f_i^{(0)} \frac{c_i^2}{2} c_{i\alpha} c_{i\beta} = \rho \left[\frac{2}{D} e \left(\frac{D+2}{D} e + \frac{u^2}{2} \right) \delta_{\alpha\beta} + u_\alpha u_\beta \left(\frac{D+4}{D} e + \frac{u^2}{2} \right) \right]$$

$$\sum_i f_i^{(0)} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = \rho \left[\frac{2}{D} e (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\gamma\alpha} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) + u_\alpha u_\beta u_\gamma \right]$$

により決定すると、このモデルはナヴィエ・ストークス方程式を回復することになる。また D は空間の次元である。図1に2次元の熱流体モデルの1例を示す。

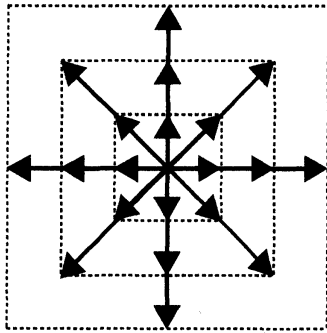


図1 2次元熱流体に対する粒子のモデル
矢印は粒子の速度の方向と大きさを表す。
8方向の粒子が必要なのは、流れの等方性を確保するためである。

式(6)で定義された局所平衡分布関数を式(1)あるいは(3)に代入し計算を進めるとナヴィエ・ストークス方程式の解が得られる。その証明には一般にチャップマン・エンスコグ展開と呼ばれている解析手法が用いられる。

いま粒子の分布関数 f_i のうち、局所平衡分布関数からのずれ（非平衡成分） $\{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)\}$ が非常に小さいとき、分布関数を局所平衡分布関数の周りで下記のように展開する。

$$f_i = f_i^{(0)} + f_i^{neq} = f_i^{(0)} + f_i^{(1)} + f_i^{(2)} + \dots, \quad (9)$$

ここで f_i^{neq} は非平衡成分を表し、この非平衡成分が $f_i^{(l)} = O(\varepsilon^l)$ ($l=1, 2, \dots$) の

ように $\varepsilon (\ll 1)$ のべきのオーダーの項に展開できるとする。ここで ε は分子気体力学でのクヌッセン数 ($Kn = \text{分子の平均自由行程} / \text{流れの基準の長さ}$) に対応し、非常に小さいとする。また時間微分係数、空間微分係数も同様に

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x_{1\alpha}} \quad (10)$$

$\partial / \partial t_l = O(\varepsilon^l)$ および $\partial / \partial r_l = O(\varepsilon^l)$ ($l=1, 2, \dots$). と多重尺度展開できるとする。

定義式(1)および(4)から

$$\sum f_i^{(l)} = 0, \quad \sum f_i^{(l)} c_{i\alpha} = 0, \quad \sum \frac{1}{2} f_i^{(l)} c_{i\alpha}^2 = 0, \quad (l=1, 2, 3, \dots) \quad (11)$$

とするのがチャップマン・エンスコグ展開である。

この展開における分布関数の非平衡成分のモーメントがすべてのオーダーごとに0になるという仮定は、十分条件ではあるが特殊な仮定といえる。実際に各オーダーでの0でない密度、運動量、エネルギー等は定義されている。

しかし、格子ボルツマン法のモデルをナヴィエ・ストークス方程式との関連でのみ考えるならこの仮定は問題ない。そしてこの仮定は、格子ボルツマンモデルを簡略化するうえで非常に有効な仮定である。そういう意味から、格子ボルツマンモデルはチャップマン・エンスコグ展開に対応したモデルであるといえる。

これらの展開を式(8)に代入して ε のべきで整理し、 ε の1次のオーダーまで考えると

$$\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_1} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial x_{i\alpha}} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (12)$$

となり、 ε の2次のオーダーまで考えると

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2} \right) f_i^{(0)} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial x_{i\alpha}} + \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_1} + \left(1 - \frac{A}{\tau} \right) c_{i\alpha} \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial x_{i\alpha}} = -\frac{1}{\tau} (f_i^{(1)} + f_i^{(2)}) \quad (13)$$

を得る。詳細は省くが式(13)にそれぞれ1, $c_{i\alpha}$, および $c_{i\alpha}^2/2$ をかけて、各格子点で加え合わせるとナヴィエ・ストークス方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} (\rho u_\alpha) = 0 \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_{i\beta}} (\rho u_\alpha u_\beta) = -\frac{\partial P}{\partial x_{i\alpha}} + \frac{\partial}{\partial x_{i\beta}} \mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_{i\alpha}} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_{i\beta}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \left(\lambda \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_{i\gamma}} \right) \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \left(\rho e + P + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) u_\alpha \\ = \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \left(\kappa' \frac{\partial e}{\partial x_{i\alpha}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \left\{ \mu u_\beta \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_{i\alpha}} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_{i\beta}} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}} \left(\lambda \frac{\partial u_\beta}{\partial x_{i\beta}} u_\alpha \right) \end{aligned} \quad (16)$$

が導かれる。ここで圧力 P , 粘性率 μ , 第2粘性率 λ , 熱伝導率 κ' は

$$P = \frac{2}{D} \rho e, \quad \mu = \frac{2}{D} \rho e (\tau - A), \quad \lambda = -\frac{4}{D^2} \rho e (\tau - A) = -\frac{2}{D} \mu, \quad \kappa' = \frac{2(D+2)}{D^2} \rho e (\tau - A), \quad (17a,b,c,d)$$

と表され、音速は

$$c_s = \sqrt{2e}. \quad (18)$$

となる。

3. 空力音の直接計算

空力音の数値計算 (Computational Aero-acoustics) には、まず音源をもとめ、それから音響方程式を解いて音場を求める間接法と、直接流れ場と音場を解いてしまう直説法とがある。ここでは差分格子ボルツマン法による直接計算の結果を示す。

3. 1 エオルス音の直接計算

図2は2次元円柱から放射されるエオルス音の音圧場と渦度場を示す。マッハ数は0.7で、マッハ数が低い場合の円柱背後のカルマン渦放出に伴う振動流による音以外に、渦同士の干渉による音の放射が見られる。

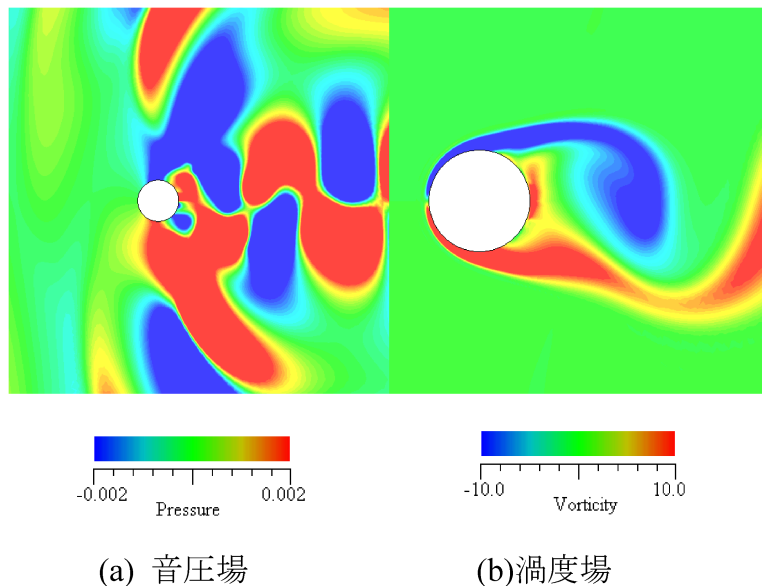


図2 一様流中の円柱周りの音場（エオルス音）と渦度場。流れのマッハ数は $M=0.7$ でレイノルズ数は $Re=150$ である。

3. 2 移動物体周りの流れ

従来の格子ボルツマン法においては、格子はオイラー的に空間に固定されており、移動する固体物体に対する境界条件は格子点間の値を内挿によって求めることになる。差分格子ボルツマン法においては **arbitrary Lagrangian Eulerian formulation (ALE)** を用いることで、物体周りの境界を変えることなく計算が可能である⁽⁴⁾。

以下の計算例はトンネルに高速列車が進入する際の微気圧波発生シミュレーション⁽⁵⁾であるが、トンネルに固定された静止座標と列車とともに移動する座標との接合を、単一の曲線座標系とし移動座標の移動につれて接合部分を切り

替える手法を用いた。接合部でのノイズは見られず，列車がトンネル突入後すぐに列車前方の圧力が上昇し，これが強い音波として伝播するのがわかる。

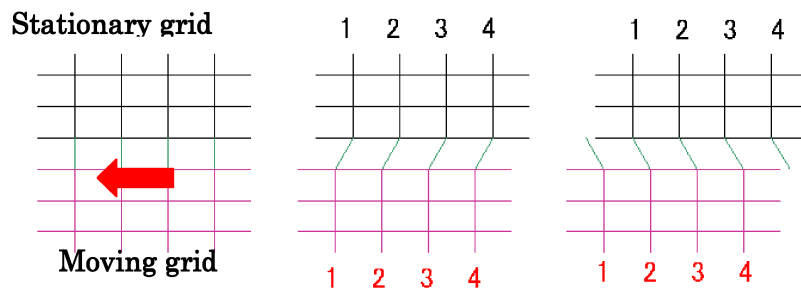


図3 静止格子と移動格子およびそれらの接合

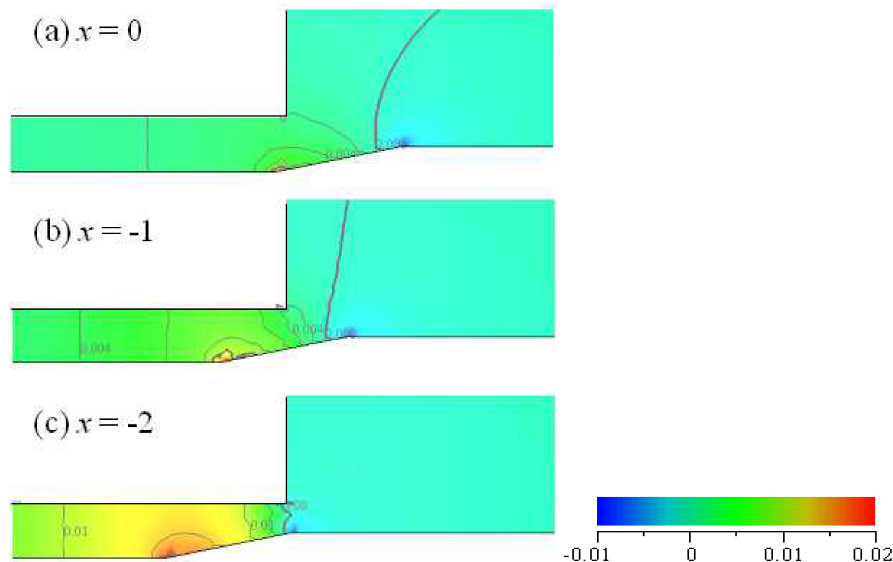


図4 列車がトンネルに突入する際の圧力波の発生（下側の移動境界が列車で x は列車の先端位置）

4. 気液二相流のモデル

格子ボルツマンモデルは基本的に気体のモデルであり，これを液体の計算に用いる場合，何らかの修正が必要である．もちろん，単相の場合流れのマッハ数が小さい場合，密度変化は小さく実質的に非圧縮性流れが得られ，密度は陽に現れないので液体の流れを計算しているとみなすことは可能である．しかし気液が共存する場合，気液の物理量の違いを考慮したモデルが必要となる．

最も大きな問題は，大きな密度比であり空気，水の場合 800 倍の密度比がある．粒子の数を 800:1 としても，800 倍の密度の気体を考えることとなり，爆発

的に膨張する。何らかの分子間力を考えなければならないが、液体の物性モデルが明快でないので、我々は気体とは別の粒子を導入し、この気体の性質をマクロな量から分布関数を再定義する方法で、液相のモデルを構築した。

二流体のモデルは、二種類の粒子の発展方程式を解くことになる。

$$\frac{\partial f_i^k}{\partial t} + c_{ia} \frac{\partial f_i^k}{\partial x_a} = -\frac{1}{\tau} (f_i^k - f_i^{(0)k}) \quad (19)$$

ここで $k = G, L$ はそれぞれ気相、液相を表す。ここでは時間刻みを十分小さくするので、式(5)のような負の粘性は導入していない。

液層に対して考慮すべき付加的な性質は、先述した気体に比較して大きな密度、音速の違い、そして界面における表面張力の効果を、どのようにモデル化するかである。ここではこれらの効果を、マクロの流速を調整することでモデル化した。すなわち衝撃的な体積力を、各時間ステップに粒子に加える。ただしこの体積力は仕事をするので、熱流体に対してはエネルギーから差し引く。

$$u_a \rightarrow u_a + \tau F_a, \quad \frac{1}{2} u^2 + e \rightarrow \frac{1}{2} u^2 + (e - W), \quad W = \frac{1}{2} \tau^2 F^2 \quad (20a,b,c)$$

また運動量とエネルギーを切り離し、分布関数の発展方程式(13)の右辺のソース項として導入することは可能であるが、このソース項は用いるモデルによって形が違ふ。ここで用いた局所平衡分布関数を通して修正する方法は、モデルによらず一般的である。

一方、気液界面では、二粒子の拡散を抑えるため、下記の式に示される方法で分離を行う⁽⁶⁾。

$$f_i'^G = \frac{n_G}{n_G + n_L} (f_i^G + f_i^L) + \kappa \frac{n_G n_L}{(n_G + n_L)^2} (f_i^{G(0)} + f_i^{L(0)}) \cos \varphi|_i$$

$$f_i'^L = \frac{n_L}{n_G + n_L} (f_i^G + f_i^L) - \kappa \frac{n_G n_L}{(n_G + n_L)^2} (f_i^{G(0)} + f_i^{L(0)}) \cos \varphi|_i \quad (21a,b)$$

ここで φ は、界面での密度勾配と粒子の速度方向の間の角度で、 κ は分離係数でこの値が大きいくほど界面は薄くなる。また詳細は省くが、表面張力は界面の曲率を求め、曲率に比例する表面張力を、式(20)の F を通して与えた。

一方、気液の密度の違いは、同じ外力に対して流体の加速度が変わるということモデル化した。ここでは外力を修正する方法で定式化している。すなわち、液相に対応した粒子に対し外力を下記の式で定義しなおす。

$$\mathbf{F}_m = -\left(-\frac{1}{n} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mu}{n} \nabla^2 \mathbf{u} \right) + \left(-\frac{1}{mn} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} - \frac{1}{n} \frac{\partial P'}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mu'}{mn} \nabla^2 \mathbf{u} \right) \quad (22)$$

ここで m は、気液の密度比で水・空気として $m = 800$ とする。同様に音速の違いは、液体に対するマクロな構成方程式（圧力と密度の関係式）から、圧力を定義しなおすことにより、上式の P' に以下の式を代入する。

$$P' = P_0 + \beta \frac{n - n_0}{n_0} \quad (23)$$

ここで β は体積弾性率である。

図5は、二次元水滴が水面に衝突した直後の空中音と水中音の伝播の様を示したものである⁽⁷⁾。左図は音圧の分布で、水中音は最初期に単極的な放射を示しているが、時間がたつと二重極的になっている。また空中音に比べ水中音の音速が大きい。右図は音の指向性である。中心の水平線が水面で、上へ伝播する音が空中音で、下に伝播するのが水中音である。

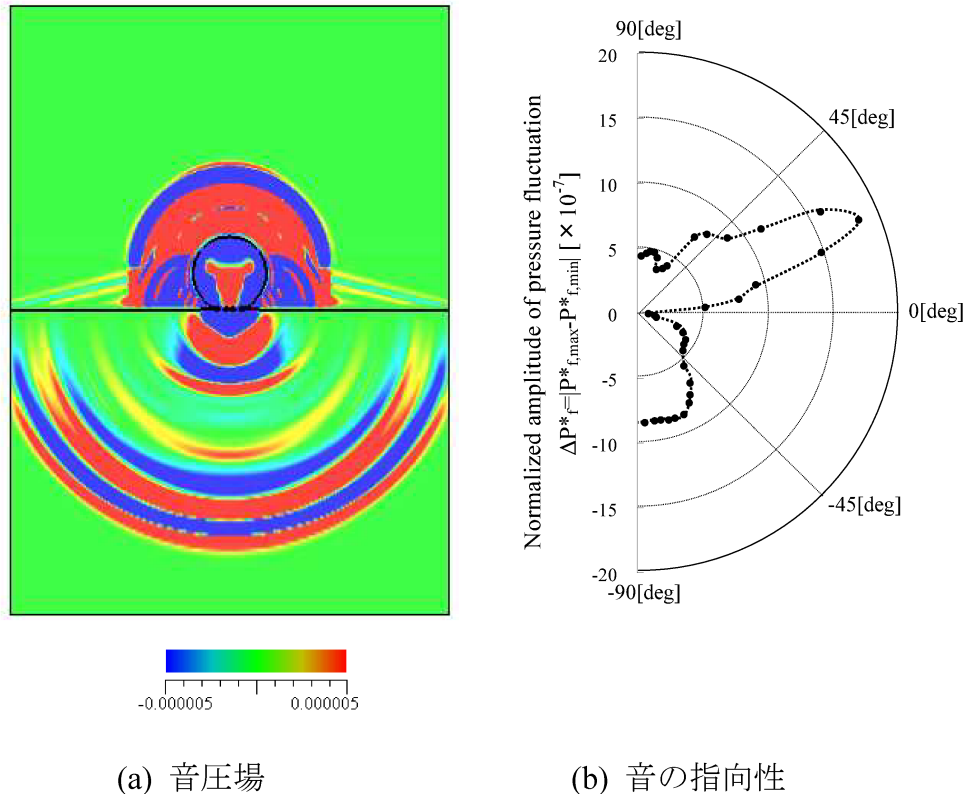


図5 液滴が水面に衝突した直後の空中音と水中音，および音の指向性

5. 蒸発・凝縮流れのシミュレーション

気相から液相あるいは固相への変化は、凝縮あるいは凝固，そしてその逆は蒸発，昇華と呼ばれるが，ここでは凝縮・蒸発と呼んでおく。これらの相変化を伴う気体の流れはナビエ・ストークス方程式では解けない。

相変化面（凝縮相）の近傍にクヌッセン層が生じ、クヌッセン数0の極限では相変化面でマクロな量のとびが生じる。ナビエ・ストークス方程式ではこのとびの量を境界条件として用いるが、このとびの量が予測できない。しかしたとえば真空乾燥に用いる真空槽内の圧力(数 Pa)においては凝縮相や固体近傍の流れを除いて、ナビエ・ストークス方程式で支配されるのである。従って、この流れを、ボルツマン方程式で解くのは効率が悪い。格子ボルツマン法では、

このとびの量を含めて結果オーライで解析ができる。

ここでは水蒸気と空気のように凝縮気体・非凝縮気体が共存する場合を考える。この場合それぞれの気体に対して、2相流同様に2粒子モデルを導入し、凝縮気体をc、非凝縮気体をnの添字で区別する。これらの気体は、気液のモデルと異なり、分離せず混和する。

凝縮相での凝縮気体の境界条件は、気相に出て行く粒子に対しては水の温度、飽和蒸気密度、速度0で定義される平行分布関数で定義する。水に向かう粒子はそのまま液化する。非凝縮気体に対しては、すべて水の温度になって、平衡分布関数で定義される速度分布で跳ね返るとする。

いま平均自由行程 λ を次式のように定義する。

$$\lambda = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{2e_1} \tau \quad (24)$$

ここで e_1 は基準の凝縮相での温度に対応する内部エネルギーである。ただ、格子ボルツマンモデルで有限のクヌッセン数流れを計算するのは注意を要する。すなわちナビエ・ストークス方程式より高いオーダーの流れは一般的に非等方となり、ほとんどのモデルがナビエ・ストークス方程式までしか保証していないからである（ナビエ・ストークスさえ完全に保証していないモデルも多い）。

本問題における流れを決定するパラメータを、凝縮相の温度比 $T_2/T_1=1$ 、凝縮相の飽和蒸気密度比 $\rho_2/\rho_1=2$ 、クヌッセン数 $Kn=\lambda/L=0.01$ 、非凝縮気体が計算領域内に含まれる割合 $\rho_n^w/\rho_1=0.5$ である。非凝縮気体、凝縮気体それぞれの粒子の質量は同じとした。図6に平行平板間の蒸発・凝縮流れの結果の一例を示す。

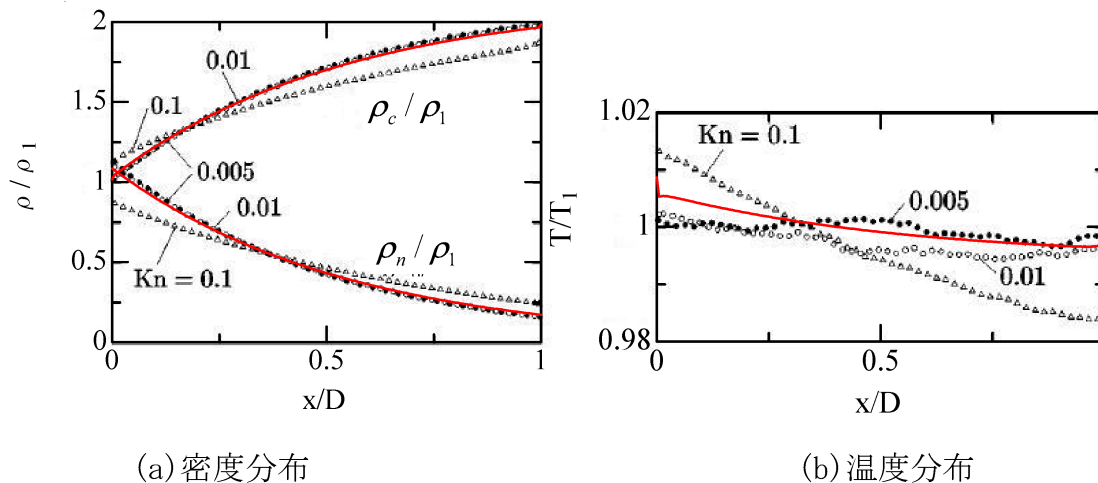


図6 非凝縮気体を含む蒸発・凝縮流れ（比較用の黒点でのデータは青木らのモンテカルロ法による計算⁽⁸⁾）

6. まとめ

格子ボルツマン法，特に著者らが用いてきた差分格子ボルツマン法について，解説するとともに，いくつかの計算例を示した．ナヴィエ・ストークス方程式での計算が難しい問題についても例を示して述べた．

文 献

- (1)Succi S., “Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond”, Clarendon Press, Oxford (2001).
- (2) 蔦原道久，渡利實，棚橋隆彦，矢部孝，「C F D 最前線」，日本機械学会編，共立出版 (2007)．
- (3)蔦原道久，高田尚樹，片岡武，“格子気体法，格子ボルツマン法”，コロナ社，(1999)．
- (4)Tamura, A. and Tsutahara, M.: Simulation of Flows and Acoustic Field around Moving Body by ALE Formulation in Finite Difference Lattice Boltzmann Method, Journal of Environment and Engineering, Vol.2, No.3, (2007) 458-469.
- (5)赤松克児，蔦原道久「差分格子ボルツマン法によるトンネル圧縮波の発生と伝播特性」日本機械学会論文集 B 編，76 巻 771 号 (2010) 1793-1801.
- (6)Latva-Kokko, M., and Rothman, D. H. : Diffusion properties of gradient -based lattice Boltzmann models of immiscible fluids, Physical Review E, Vol.71, (2005) 056702.
- (7)Tajiri, S., Tsutahara M. and Tanaka H.,: Direct simulation of sound and under water sound generated by a water drop hitting a water surface using the finite difference lattice Boltzmann method, Computers & Mathematics with applications, Elsevier, Vol.59, No.7, (2010) 2411-2420.
- (8)Aoki K. and Masukawa N., Gas flows caused by evaporation and condensation on two parallel condensed phases and the negative temperature gradient: Numerical analysis by using a nonlinear kinetic equation, Phys. Fluids 6, (1994), pp.1379-1395.