B202 格子ボルツマン法に基づく流体運動のモデル化と数値シミュレーション

Modeling and Numerical Simulation of Fluid Motion Based on Lattice Boltzmann Method

○正 高田尚樹 (産総研)

Naoki TAKADA, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, 16-1,Onogawa, Tsukuba, Ibaraki

This paper describes a review of the lattice Boltzmann method (LBM) to simulate fluid flows, in which a macroscopic fluid consists of mesoscopic particles repeating collisions and translations. The main advantages are, high efficiency of parallel computing, easy boundary condition for solid body with complicated geometry, and that an interface in multiphase fluid can be reproduced without its geometric boundary condition in a self-organizing way by repulsive interaction between particles. LBM uses distribution function as variable of real number density of particle distinguished by their discrete velocities, to define macroscopic variable, fluid density, velocity, pressure, temperature and so on. Set of particle velocity is selected under the constraint that a velocity space is spherical-symmetric enough to reproduce isotropic fluid motion. The time- and spatial development of particle velocity distribution functions is governed by so-called lattice Boltzmann equation (LBE) that is discretized with finite difference schemes and includes convection, collision, gravity force and other force terms. The lattice BGK model is a well-known collision operator, based on an assumption that the particle distributions relax to a state of local equilibrium at constant rate during collision steps. The relaxation time is concerned with transport coefficients, viscosity and heat conductivity. An available equilibrium distribution form to derive the Navier-Stokes equations from LBE corresponds to Taylor-expansion polynomial of the Maxwell-Boltzmann distribution function with flow velocity on low Mach number. LBM models for fluid motions are developed flexibly with one or combination of various techniques, that is, addition of external term in LBE, multi-speed particle velocity set, time- or/and space-depending relaxation time period, full-matrix collision operator, modified equilibrium distribution functions, multiple distribution function system for scalar variables, etc. As a result, any macroscopic fluid dynamics can be recovered from ensemble average behavior of mesoscopic particles, according to the Chapman-Enskog expansion procedure. In addition, LBM also possesses potential to describe other dynamic systems, where the equilibrium state of particle velocity takes non-Maxwell formula and particle is regarded just as a carrier for information of variable in the field. In this paper, two kinds of numerical result are presented, three-dimensional 2-bubble motion in a circular tube filled with stagnant liquid under gravity, and large eddy simulation of incompressible fluid flow in a two-dimensional square cavity for high Reynolds number. The former simulation was carried out with the binary fluid model proposed by Swift et al., while, in the latter one, the standard Smagorinsky eddy viscosity model was incorporated into the relaxation time depending on local strain rate, which can be calculated from local non-equilibrium components of particle distribution functions without differential operation of flow velocity.

Key Words: Lattice Boltzmann Method, Computational Fluid Dynamics, Fluid Flow, Numerical Simulation, Mesoscopic Approach

1. 緒言

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)[1][2]は，連続体としての流体を仮想的な粒子の集合体とみなし，粒子が繰り返す衝突の相互作用と並進を通してマクロスケールの流体現象を創発的に再現する統計力学的モデル化手法である．格子気体セルオートマトン(LGCA)法[3]に基づいて提案された本手法は，(1)並列計算への高い適応性，(2)複雑形状の物体に対する境界条件の容易性，(3)多相流体界面の自己組織的な再現，等の利点を有するため，単相流[4]のみならず，多相流，磁性流体運動，熱対流，砂岩中の微視的流動，多孔質媒体中の非 Newton 流体流れ等，様々な工学分野における流動現象のモデル開発と数値解析が進められてきた[2]．単相流 LBM 解析のソフトウェア[5]が市販·利用されている一方，近年は利点(3)に注目して多相流体モデルの開発や数値解析への適用に関する研究が精力的に行われている[2]。本報では，これまで開発されてきた格子ボルツマン法の基礎方程式と流体モデルを整理して述べ，解析例として 3 次元 2 気泡運動[6],[7]と 2 次元正方 Cavity 流れの LES[8]を取り上げる．

2. 格子ボルツマン方程式(LBE)の一般形

2.1 粒子の速度分布に対する基礎方程式

LBM は，単位質量を持つ仮想粒子を離散的な粒子速度 $\mathbf{e}_a$ で分類し，各集団の粒子数密度を表す関数 f_a (速度分布関数) とその平衡状態 f_a^{eq} を定義する．粒子の集合体である流体の巨視的変数，密度 n，流速 $\mathbf{u}$ および温度 T は粒子を基準に無

次元化されており,f_aおよびf_a^{eq}を用いて次式で与えられる.

$$n\begin{pmatrix}1\\ \mathbf{u}\\ \dfrac{u^2+DT}{2}\end{pmatrix}=\sum\nolimits_a f_a\begin{pmatrix}1\\ \mathbf{e}_a\\ \mathbf{e}_a^2/2\end{pmatrix}=\sum\nolimits_a f_a^{eq}\begin{pmatrix}1\\ \mathbf{e}_a\\ \mathbf{e}_a^2/2\end{pmatrix} \quad (1)$$

記号Σは速度種類 a に関する総和,D は空間次元数である.

分布関数f_aの時間空間発展は,粒子の並進と衝突に基づき,次の Lattice Boltamann Equation (LBE)[2]によって記述される.

$$\frac{\partial f_a(t,\mathbf{r})}{\partial t}+e_{a,\alpha}\frac{\partial f_a(t,\mathbf{r})}{\partial r_\alpha}=\Omega_a[f(t,\mathbf{r})] \quad (2)$$

t は時間,$\mathbf{r}$ は空間座標を示す.左辺第2項は移流項,右辺第1項は衝突項である.上式は,単位体積内における仮想粒子の数が速度$\mathbf{e}_a$での流出入と衝突による速度変化によって時間的に変動することを表す.次式は式(2)の一般形である.

$$\frac{\partial f_a(t,\mathbf{r})}{\partial t}+e_{a,\alpha}\frac{\partial f_a(t,\mathbf{r})}{\partial r_\alpha}+G_\alpha\frac{\partial f_a(t,\mathbf{r})}{\partial e_{a\alpha}} =\Omega_a[f(t,\mathbf{r})]+W_a(t,\mathbf{r}) \quad (3)$$

ここで,右辺第3項は重力加速度の効果,左辺最終項は,重力以外の力による変動成分に対応する.これまで提案されてきたLBMの流体モデルは全て,式(2)の形式に整理して記述されることが可能であり,衝突項,外力項,および平衡分布関数の具体的な式は,対象とする各種流れ場に対して巨視的な場の支配方程式を再現するように定義されている.

2.2 粒子速度,時間および空間の離散化

粒子速度$\mathbf{e}_a$の集合は,流体力学を再現するため,速度空間の球対称性(物理空間の等方性)を再現・維持するように決められる.それには幾つかの選択肢があり,2次元では正三角形格子上での粒子速度や正方格子上の9,13,16,および21種類の粒子速度(静止粒子を含む)などが挙げられる.

式(1)および(2)は,上述の速度集合の条件下で,時間と空間を任意の有限差分スキームで離散化して計算される.標準的なLBMは,時間刻み幅を1とし,時空間2次精度を持つLagrange型のLBE[2]を用いる.

$$f_a(t+1,\mathbf{r}+\mathbf{e}_a)=f_a(t,\mathbf{r})+\Omega_a[f(t,\mathbf{r})] \quad (4)$$

上式は,格子気体セルオートマトン法において粒子分布を表す Bool 変数の発展方程式と同じ形式であり,粒子の速度方向に沿う辺を持つ同じ大きさの空間格子を流れ場に一様に配置する.一方,有限差分格子ボルツマンモデル(FDLBM)では,粒子速度空間と物理空間の離散化を別々に行うことによって式(3)以外の差分スキームの導入が可能であり[9],他の計算手法と同様に境界適合座標系への拡張が図られている.

2.3 衝突項

衝突項は,粒子間の等方的な相互作用による数密度の変化を示し,巨視的場における拡散現象を再現する.一般的な流体力学の系に対する衝突は,粒子の質量,運動量,および運動エネルギーを瞬時局所的に保存するよう定義される.最も簡単な形は格子BGKモデル[10]と呼ばれ,次式で与えられる.

$$\Omega_a[f(t,\mathbf{r})]=-\frac{1}{\tau(t,\mathbf{r})}\left[f_a(t,\mathbf{r})-f_a^{eq}(t,\mathbf{r})\right] \quad (5)$$

分母の$\tau(t,\mathbf{r})$は,粒子分布が平衡状態に達するまでの緩和時間を表し,Newton 流体では定数τ_0として扱われる.

$$\tau(t,\mathbf{r})=\tau_0=\text{constant}. \quad (6)$$

平衡緩和時間(6)は流れ場の輸送係数に関係する.後述の平衡分布を式(5)に適用すると,等温の Newton 流体に対する動粘性係数ν_0を次式のように与える.

$$\nu_0=c_S^2\tau_0 \quad (7)$$

ここで,c_Sは音速であり,粒子の基準速さ c に対して,2次元7速度方向で $c/2$, 下記の9速度方向で $c/\sqrt{3}$ に相当する[10].

格子BGK衝突演算式(5)において,式(6)のかわりに局所のひずみ速度に依存する平衡緩和時間を用いることによって,LBMを非Newton流体流れの計算[11],渦粘性を導入するLarge Eddy Simulation (LES)による乱流解析[8]等に適用できる.

2.4 平衡分布関数

LBM に基づく流体モデルにおいて,平衡状態における粒子の速度分布関数f_a^{eq}は,式(1)および(2)によって巨視的に再現される系を規定する重要な役割を持つ.流体解析での一般的な平衡分布は,Maxwell 分布の粒子速度を離散化し,低 Mach 数の流速で Taylor 展開することによって得られる[2],[12].

$$f_a^{eq}=n\left[A_a+B_a\mathbf{e}_a\cdot\mathbf{u}+C_a(\mathbf{e}_a\cdot\mathbf{u})^2+D_au^2 +E_a(\mathbf{e}_a\cdot\mathbf{u})^3+F_a(\mathbf{e}_a\cdot\mathbf{u})u^2+\dots\right] \quad (8)$$

係数 A_a, B_a, C_a 等は,Chapman-Enskog の方法もしくは S 展開の方法によって LBE(2)から Navier-Stokes 方程式を導出できるように決定される[12].通常,等温流体に適用する平衡分布関数は速度の2次の項までを含み,2次元9速度の粒子分布(l=1, 2, i=1, 2, 3, 4)については次式で定義される[2].

$$f_{l,i}^{eq}=w_l\,n\left[1+3\mathbf{e}_{l,i}\cdot\mathbf{u}+\frac{9}{2}(\mathbf{e}_{l,i}\cdot\mathbf{u})^2-\frac{3}{2}u^2\right] \quad (9)$$

$$f_0^{eq}=\frac{4}{9}n\left[1-\frac{3}{2}u^2\right] \quad (10)$$

$$\mathbf{e}_{l,i}=c\sqrt{l}(\cos\theta,\sin\theta),\ \theta=(i-l^{-1})\pi/2 \quad (11)$$

$$w_1=1/9,\quad w_2=1/24$$

LBM のスキームは,平衡分布に式(8)や(9),(10)と異なる関数形を採用することによって Navier-Stokes 方程式以外の任意の方程式で記述される系の計算にも適用できる.

2.5 重力項

Maxwell 分布から導かれる平衡分布の式(8)を用いる場合,重力 G の項は平衡状態に近い場に対して次式で与えられる.

$$G_\alpha\frac{\partial f_a}{\partial e_{a\alpha}}\cong G_\alpha\frac{\partial f_a^{eq}}{\partial e_{a\alpha}}=-\frac{1}{T}G_\alpha(e_{a,\alpha}-u_\alpha)f_a^{eq} \quad (12)$$

上式の T は流体温度であり,式(12)の1階の粒子速度モーメントの和は$-n\mathbf{G}$に等しい.本項は,自然熱対流[13]や密度成相流の計算で用いられ得る.尚,系全体に重力をかけずに浮力を加えるような場合には,次の外力項が考慮される.

2.6 付加変動項

式(3)右辺第2項 W_aは,上記2.5の重力以外の力 $\mathbf{F}$ の作用によって変化する速度$\mathbf{e}_a$を持つ粒子の数密度を表しており,

次のように一般的に記述される．

$$W_a = nB_a\left(\mathrm{e}_a \cdot \mathrm{F}\right) \tag{13}$$

式中の重み係数 B_a は，式(8)のものに相当する．F としては，二相流中の浮力[6]，多相多成分流体モデルの相互作用力や 1 成分気液モデルの擬似ポテンシャルによる力等[14]がある．

3. LBM における流体モデルの開発

LBM では，以下に示すいずれかの方法あるいは全ての方法を用いることによって，様々な種類の流れ場に対して流体モデルを開発することが可能である．

3.1 粒子速度分布の変更

静止状態以外に 1 種類の速さしか持たない速度集合は，衝突時に運動エネルギーを保存しないので，基本的には等温流体に対してのみ適用されるが，複数の速さを取る粒子分布ではエネルギーを式(1)で定義できるようになり，1 種類の分布関数の LBE だけで熱輸送の計算が可能になる．一般に，粒子速度がより速くなると，再現可能な温度範囲は広がる[12]．

3.2 付加変動項の外付け

本方法は最も簡単で，浮力や表面張力に起因する粒子間相互作用を表す項を LBE(2)に外付けする(2.6 節)．

3.3 衝突演算の変更

本方法は，衝突演算子 Ω_a を変更することによって，粒子の等方的拡散運動を流体の性質に合せて変更する．

3.3.1 演算形式の変更

衝突演算子には，単一時間緩和近似に基づく格子 BGK モデル以外に，分布関数の積で表される古典的なモデルや，それを線形化して得られるマトリクスモデルがある[2]．これらは，粘性と熱伝導を定義する平衡緩和時間を別々に与えることによって，より柔軟に Prandtle 数を設定できる．

3.3.2 平衡緩和時間の変更

2.3 で述べたように，BGK 衝突演算(5)で時間と空間に依存する緩和時間は，粘弾性流体等の非 Newton 流体の粘性係数や，渦粘性モデルが付加された LES の粘性係数を与える．

3.3.3 平衡分布関数の補正

Maxwell 分布の展開で得られる平衡分布(8)に新たな項を加えることは，Navier-Stokes 方程式を拡張して他の流れ場を記述する支配方程式を導く．Swift らの 1 成分系気液モデル[15]は，二相流体界面の表面張力を表す項を，Eggels らの LES モデル[16]は，サブグリッドスケール(SGS)乱流応力による変動項を，それぞれ式(8)に追加している．

3.4 複数の分布関数の定義

等温の単相流体流れは，LBE(2)のみによって容易に計算され得る．しかし，多重の時間・空間スケールを持つ，または多相・多成分流体で構成されるような複雑系の流れ場では，支配的な巨視的変数が多数存在するため，流動現象を 1 種類の分布関数だけで記述することは困難である．そこで，各スカラー量の変数を個別に定義する分布関数に対する複数の LBE を同時に解く方法が適用される．スカラー変数の次元が数密度と異なる場合，その粒子は，変数が定義される場の中で情報を伝達するキャリアと見なされ，気体分子との物理的・直接的関係から離れて定義される．そのため，平衡分布の形も，Maxwell 分布の展開式(8)に限らず，場を適切に再現する範囲で任意に与えることができる．この多分布関数系 LBM の適用可能範囲は一般に 1 分布関数のものより広い．密度の他にカップリングされるスカラー量は，相体積率，温度，乱流エネルギー，エネルギー散逸率，物質濃度など，流れ場の支配方程式系に合せて選択される．以下に，その代表的な流れ場を例示する．

3.4.1 多成分流体・多相流体流れ

非混和多成分流体において，各成分の粒子数密度に対する分布関数を持つ多相流体モデルと，VOF 法の液相体積率関数や Level Set 法の高さ関数のように相分布の情報を与える Index Function に関する分布関数を持つ二相流体モデル[15],[17]が提案されている．

3.4.2 熱対流

自然対流のような流れ場の動的温度分布は，温度を式(1)で定義する熱流体モデルでも計算可能である[12],[18]が，標準的な格子 BGK 衝突演算では平衡緩和時間(衝突演算の固有値の逆数)が運動量とエネルギーのモードで同じであるため，粘性と熱伝導の各係数を別々に設定することが難しい．これに対し，Passive Scalar Model[19]は，温度に関する分布関数を追加し，温度の移流拡散方程式を導く LBE を導入する．温度の LBE に流体運動の LBE と異なる緩和時間を設定することにより，Prandtl 数の変更が容易である上，熱流体モデルより数値的に安定である．本モデルでは，温度の代わりに任意の物質濃度もスカラー変数に選択できる．

3.4.1 乱流の Reynolds 平均数値シミュレーション

Succi らは，Reynolds 平均 Navier-Stokes 方程式を基礎として，変動流エネルギーとその平均散逸率に対する 2 種類の分布関数を導入し，それらの発展方程式を解く k-ε 型格子ボルツマンモデルを提案している[20]．

4. LBM による流れの数値シミュレーション

ここでは，2 種類の流れ場の数値シミュレーション結果を短く述べる．最初に，Swift らの Binary Fluid Model[15]に基づく 3 次元 2 気泡運動の計算結果[6],[7]を示す．本モデルは，前節の 3.3.3 と 3.4 で述べたように，二相流体挙動を再現するため，式(8)に表面張力項を加えた平衡分布関数と，浮力項(2.6 節)を含む 2 種類の分布関数の LBE(2)を用いる．Fig.1 に示されるように，気泡は上昇しながら相互に接近し，最終的に合一することが定性的に良く再現されている．

次に，Hou らによって提案された LES 乱流モデル[8]による 2 次元正方 Cavity 流れの計算について述べる．本モデルでは，分布関数は空間フィルターで疎視化されたグリッドスケール流れに対して定義され，BGK 衝突演算子は SGS 応力を考慮した平衡緩和時間 τ_{total} を持つ．Smagorinsky 渦粘性モデルの導入により，粘性係数 ν は次式で定義される．

$$\nu = \frac{\tau_{total}}{3} = \frac{1}{3}\left(\tau_0 + 3C_s^2\Delta^2\left|\overline{S}\right|^2\right), \tag{14}$$

ここで，Δは空間フィルター幅，$|\overline{S}|$ は局所のひずみ速度の大きさ，C_S は Smagorinsky 定数であり，平衡分布は式(9)および(10)に相当する．本計算では，LBE(2)の離散化に 2 次精度の風上差分と Runge-Kutta スキームを用いている．

Fig.2 に示す流線および渦度場の結果は，標準的な LBE(4)では計算が困難な Reynolds 数 10,000 に対するもので，LES 流体モデルが高 Reynolds 数流れを実用的範囲で数値的に安定して解くことができることを示している．

尚，流れ場におけるひずみ速度は，速度勾配を取ることな

しに分布関数の局所的な非平衡成分から直接求められる[8]. このように，LBM は，仮想粒子の速度分布によって既存の流体解析手法と異なる局所的な情報を与えることができる．

5. 結言

本報では，格子ボルツマン法(LBM)における粒子の速度分布関数の支配方程式と流体モデルの概要を述べ，3 次元気泡運動計算および乱流 LES の結果を示した．上節の解説からわかるように，LBM は流体運動だけでなく様々な種類の系の振舞いを再現することが可能であり，それらの系に対する格子ボルツマンモデルは，いくつかの主要な方法を用いて容易に開発され得る．よって，冒頭で述べた長所を活用した LBM による数値解析は今後広く行われると考えられる．

参考文献

(1) McNamara,G. and Zanetti,G., *Phys.Rev.Lett*. **61**, (1988), 2332-2335.

(2) Chen,S. and Doolen, G.D., *Annu. Rev. Fluid Mech*., **30**, (1998), 329-364.

(3) Frisch,U., et al., Complex Systems 1 (1987), 649-707.

(4) Takada,N. and Tsutahara,M., *Comp.Fluids*,**27** (1998),807- 828.

(5) 内田勝也，奥村健二，自動車技術協会学術講演会前刷集, No.83-98, (1998), 17-20.

(6) Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A., and Fujiwara, S., *Comp.Phys.Commu*.,**129** (2000), 233-246.

(7) Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A., and Hosokawa, S., *J. Nuclear. Sci. Tech*., **38** (2001), 330-341.

(8) Hou,S., Sterling,J., Chen,S., and Doolen,G.D., *Fields Institute Communications*, **6** (1996),151-166.

(9) Cao,N.,Chen,S.,Jin,S.,and Martinez,D., *Phys.Rev. E*, **55** (1997), 21-24.

(10) Qian,Y.H.,d'Humieres,D.,andLallemand,P.,*Europhys.Lett*.,**17** (1992),479-482.

(11) Aharonov,E.,and Rothman,D.H., *Geophysical Research Letter*, **20** (1993), 679-682.

(12) 高田尚樹,山越康弘,蔦原道久，日本機械学会論文集 B 編, **64** (1998), 3934-3941.

(13) He, X., Chen,S., and Doolen, G.D., *J.Comp.Phys*, **146** (1998), 282-300.

(14) 瀬田剛，河野浩二, Martinez,D., Chen,S., 日本機械学会論文集 B 編, **65** (1999), 1955-1963.

(15) Swift, M.R., Orlandini, E., Osborn, W., and Yeomans, J.M., *Phys. Rev. E*, **54** (1996), 5041-5052.

(16) Eggels, J.G.M., *Int. J. Heat and Fluid Flow*, **17** (1996), 307-323.

(17) 稲室隆二，小西伸治，田島秀一，荻野文丸，日本混相流学会年会講演会 2001 論文集(2001), 287-288.

(18) 高田尚樹,蔦原道久，日本機械学会論文集B 編, **65** (1999), 92-99.

(19) Shan,X., *Phys.Rev. E*, **55** (1997), 2780-2788.

(20) Succi,S.,Amati,G.,and Benzi,R., *J.Stat.Phys*., **81** (1995),5-16.

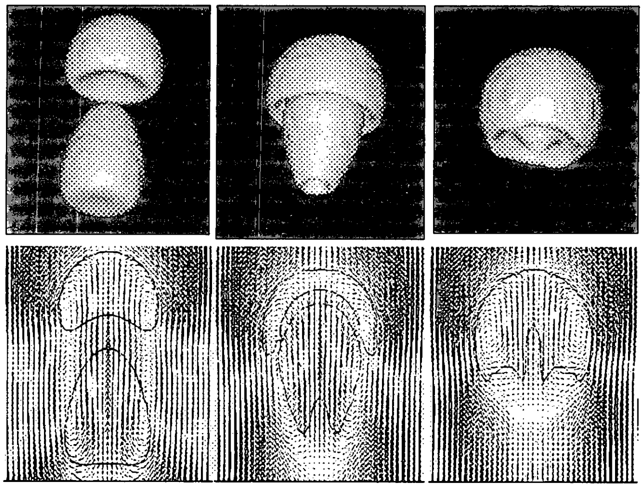
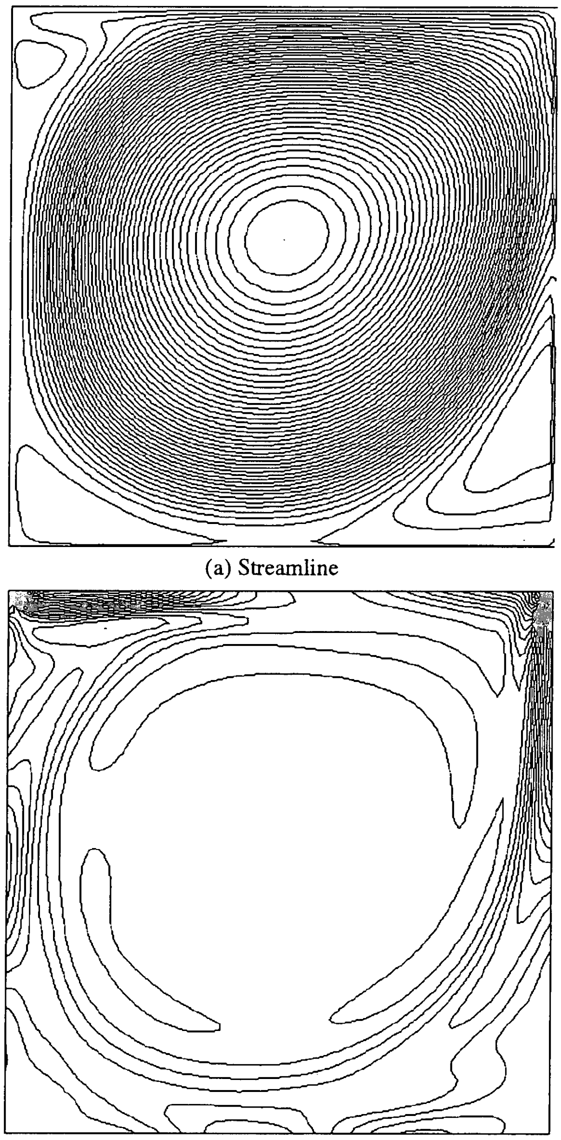


Fig. 1 3D view of interface and flow velocity on vertical cross section around two bubbles rising in circular tube filled with stagnant liquid for Eötvös number=50.1 and Morton number=1.5.



(a) Streamline

(b) Vortisity

Fig. 2 Large eddy simulation of incompressible fluid flow in a two-dimensional square cavity for Reynolds number= 10,000 at dimensionless time=4.4.