格子ボルツマン法による自由表面流解析の安定性に関する検討

東北大学　　　学生会員　○菅　裕介
東北大学大学院　正 会 員　　越村　俊一

1. はじめに

格子ボルツマン法（Lattice Boltzmann Method，以下LBM）は，流体運動の方程式であるNavier-Stokes方程式系を離散化し，流体を連続体として解くという従来の数値流体力学とは異なり，分子の2体衝突を基礎とする分子気体力学の基礎方程式であるボルツマン方程式から発展した手法である．従って，LBMでは流体運動を微視的な仮想の流体粒子の動きとして表現する．

LBMの利点としては，計算スキームが完全に陽的に表現されるため計算効率が非常に高いことや，基本的に粒子の並進と衝突のみを考慮するため，複雑な物理現象（多層流，砕波現象）も簡便なアルゴリズムで再現することが可能であることが挙げられる．しかし，高レイノルズ数流れにおける計算やパラメータの設定によって計算が不安定になるといった問題点を残しており，いわゆる計算スキームの安定条件(CFL条件)以外にも安定性を考慮すべき条件がある．

本研究では格子間隔や時間刻み幅の組み合わせを一意的に決定しなければ計算安定性が担保できないという状況を解消するため，パラメータ設定の計算安定性への影響について検討を行った．

2. 格子ボルツマン法

(1) 格子形状

LBMは流体を格子上での並進，衝突によってのみ運動する仮想的な粒子の集合体と見なし，格子上の粒子の分布関数を用いて流体の巨視的変数である密度や流速を求める手法である．空間は規則的な格子によって離散化され，粒子の運動はその格子に沿って有限な方向に制限される．本研究では**図-1**の2次元9速度格子モデルを用いる．このモデルで9方向の速度ベクトルの成分は$\boldsymbol{e} = \Delta \boldsymbol{x}/\Delta t$（$\Delta \boldsymbol{x}$は格子間隔,$\Delta t$は時間刻み幅）を用いて式(1)のようになる．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_1 &= (0,0)^T, \\ \boldsymbol{e}_{2,\dots,5} &= (\pm1,0)^T, (0,\pm1,)^T \qquad (1) \\ \boldsymbol{e}_{6,\dots,9} &= (\pm1,\pm1)^T \end{aligned}$$

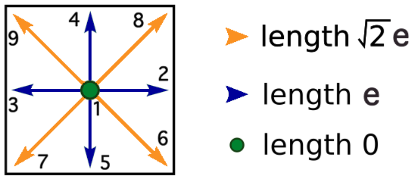

図-1　LBMの2次元9速度格子モデル

(2) 粒子分布関数

LBMでは粒子分布関数f_iの時間発展を解くことになる．ここで粒子分布関数$f_i(\boldsymbol{x},t)$は時間tにおいて，位置$\boldsymbol{x}$の格子点上に存在する速度ベクトル$\boldsymbol{e}_i$を持つ粒子の数（存在頻度）を示す関数である．その定義から巨視的変数である密度は$\rho = \sum_i f_i$となり，流速は$\boldsymbol{u} = \frac{1}{\rho}\sum_i \boldsymbol{e}_i f_i$となる．

(3) 格子ボルツマン方程式

ボルツマン方程式における衝突演算子において，格子BGKモデルを用いることで式(2)のように格子ボルツマン方程式が導かれる．

$$\begin{aligned} f_i(\boldsymbol{x}, t+\Delta t) &= f_i'(\boldsymbol{x}, t+\Delta t) \\ &- \frac{1}{\tau}\{f_i'(\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_i^{eq}(\rho,\boldsymbol{u})\} \qquad (2) \end{aligned}$$

$$\tau = 3\nu\frac{\Delta t}{\Delta \boldsymbol{x}^2} + \frac{1}{2} \qquad (3)$$

格子BGKモデルとは各方向の粒子分布が同じ割合で平衡状態に向かうと仮定するものであり，式(2)では粒子分布が1回の衝突ごとに$1/\tau$の割合で非平衡量が減少し，平衡状態に近づくこと表している．ここでτは単一時間緩和係数と呼ばれる流体の粘性を表すパラメータであり，動粘性係数νと式(3)のような関係が成り立つ．動粘性係数は0以上であることから，$\tau > 1/2$が格子ボルツマン方程式の安定条件となる．

また式(2)のf_i^{eq}はMaxwell-Bolzmann分布を離散化することで得られる局所平衡分布関数である．非圧縮流体において式(4)のように定められる．

$$f_i^{eq} = w_i\rho\left[1 + 3\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{u} - \frac{3}{2}u^2 + \frac{9}{2}(\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{u})^2\right] \qquad (4)$$

$$where\ w_1 = \frac{4}{9},\ w_{2,\dots,5} = \frac{1}{9},\ w_{6,\dots,9} = \frac{1}{36}$$

仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1106，TEL: 022-795-7515，FAX: 022-795-7514

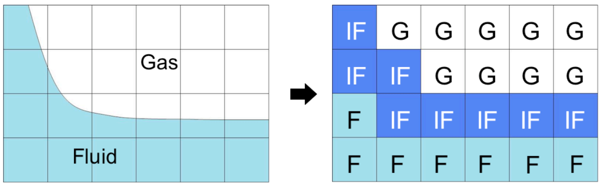

図-2　自由表面再現の模式図

3. 自由表面探索

自由表面を表現するために流体の充填率$\epsilon = m/\rho$によって流体（F）セル（$\epsilon = 1$），空隙（G）セル（$\epsilon = 0$），界面（IF）セル（$0 < \epsilon < 1$）の3種類のセルを定義する．流体セルは流体で満たされているセル，空隙セルは全く流体を含まないセル，界面セルは流体を一部含むセルである．時間発展によりセル変換の閾値κを用いて界面セルが流体セルに変化（$\epsilon > 1+\kappa$）したり，空隙セルに変化（$\epsilon < -\kappa$）していないかを調べることで**図-2**のように自由表面を探索することが可能である．本研究では$\kappa = 1.0\times10^{-3}$に設定して自由表面探索を行った．

4. 数値計算例における計算不安定の検証

ダムブレイク現象のシミュレーションで，表-1に示すパラメータセットにおいて計算の不安定（数値の発散）が生じることを確認した．LBMにおいて巨視的変数を導くために用いられている変数は粒子分布関数に限られるので，その時間発展を追うことで特異な変化を示す格子点を特定し，そのセルに関して計算過程を時系列で追跡することで数値発散に至る計算のプロセスを，以下の通り確認した．

a) プロセス–I（対象はIFセル）

1. **ρ増加**　流入の集中により1.05〜1.10g/cm^{3}程度に増加．
2. **f^{eq}増加**　式(4)のρの増加が影響．
3. **f_i増加**　式(2)のf^{eq}の増加が影響．
4. **ρ振動**　2,3ステップで密度が振動し不安定になる．
5. **$\boldsymbol{u}$増加**　流速$\boldsymbol{u} = \frac{1}{\rho}\sum_i \boldsymbol{e}_i f_i$において$\rho$の減少が影響．
6. **ϵ増加**　$\epsilon = m/\rho$においてρの減少が影響．
7. **セルの変換**　$\epsilon > 1+\kappa$を満たし，Fセルへの変換が成立．
　→隣接するセルでプロセスⅡが発生．
8. **$f_1^{eq} < 0$**　$f_1^{eq} = w_i\rho(1-\frac{3}{2}\boldsymbol{u}^2)$における$\boldsymbol{u}$の増加が影響．
9. **$f_1 < 0$**　式(2)において$f_1^{eq} < 0$となることによる．
10. **$\rho = 0$**　$f_1^{eq} < 0$の影響で$\rho = \sum_i f_i < 0$となり，$\rho = 0$として補正される．($\boldsymbol{u}$も同様に$\boldsymbol{u} = 0$で補正．)

b) プロセス–II（プロセス–Iの7より発生）

表-1　計算パラメータ

Δx	分解能	Δt	τ
0.002m	500×500	$1.0\times10^{-4}s$	0.575

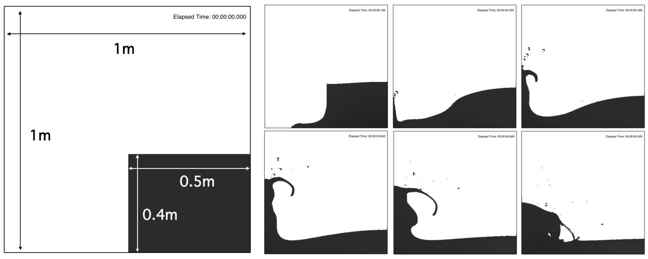

図-3　計算領域と流体の時間推移

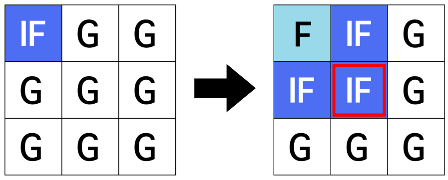

図-4　セル変換例

1. **セルの変換**　プロセスIのセル変換に伴い，隣接するGセルがIFセルに変換される．
2. **$\boldsymbol{u}$の補間**　隣接するFセルの平均で補間されるが，たとえば**図-4**の赤枠で示したセルの場合，隣接するFセルは１つなので，そのセルの$\boldsymbol{u}$がそのまま補間される．

5. 結論

格子ボルツマン法による自由表面流の解析プログラムにおいて，不安定になる条件を検討した．

プロセスIにおいて，F(Fluid)セルで密度が0という矛盾した状態になる．これは水の非圧縮流体としての仮定に反し，密度が大幅に増加することに原因がある考えられる．シミュレーションからは密度の値が1.10g/cm^{3}を超えるとプロセスIが生じているものと見られる．また，プロセスⅡによって，異常な数値が隣接するセルに補間されるため数ステップの間に数値の発散が領域全体に伝搬するものと考えられる．以上よりプロセスI発生の制御とτが0.5に接近時の安定性の検討が今後の課題である．

参　考　文　献

N. Thürey (2007)： Physically based Animation of Free Surface Flows with the Lattice Boltzmann Method.　University of Erlangen–Nuremberg, Phd-Thesis, 145p.

Zhou, J. G. (2003)：Lattice Boltzmann Method for Shallow Water Flows. Springer, 124p.