計算数理工学論文集 Vol. 7, No.2 (2008 年 3 月)，論文 No. 14-080317 JASCOME

任意の比熱比を有する2次元オイラー方程式に対する格子ボルツマン法の提案

LATTICE BOLTZMANN METHOD FOR THE EULER EQUATION WITH ARBITRARY SPECIFIC HEAT RATIO IN TWO DIMENSIONS

瀬田 剛 [1)]，石川 朗 [2)]

Takeshi SETA and Akira ISHIKAWA

1) 富山大学大学院理工学研究部 (〒 930-8555 富山市五福 3190, E-mail: seta@eng.u-toyama.ac.jp)
2) 富山大学大学院理工学教育部 (〒 930-8555 富山市五福 3190)

We propose a two-dimensional lattice Boltzmann model for compressible Euler equation. Ten weight functions are needed to satisfy ten conditions for the derivation of the mass, momentum, and energy conservation equations with arbitrary specific heat ratio. Some of the conditions are needed to introduce the energy level that is the difference between the total energy and the internal energy. We add ten different groups of the discrete velocities corresponding to the ten weight functions. This LB model is able to ensure the numerical stability for the calculation of the shock wave problem at Mach number less than 0.92. Numerical simulations agree well with exact solutions for adiabatic sound propagation with a wide range of specific heat ratio. The numerical examples show that the model can be used to simulate Sod's and Roe's shock tube problems with arbitrary specific heat ratio.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Lattice Boltzmann Method, Compressible Flow

1. はじめに

格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) [(1)] は，1) 線形な対流過程からナビエ・ストークス方程式の非線形な対流過程が導出でき，2) 時間と空間に対し 2 次精度を有し，3) ポアソン方程式の反復計算が不要であり，4) 並列処理計算機への適用性が高く，5) 境界条件の設定が容易であることなどから，非圧縮性流体解析のみならず，圧縮性流体，混相流，自然対流など様々な流体解析に適用されている [(2, 3, 4)]．チャップマン・エンスコーグ展開により LBE から導出される方程式は，圧縮性流体に対する方程式系である．エネルギ方程式の導出を可能にすることで，圧縮性流体解析に対する格子ボルツマンモデルが多数提案されている [(5)−(10)]．しかし，F. J. Alexander[(6)] らによって提案されたモデルでは，比熱比が 2 に固定されていた．この問題に対し，Y. Guangwu[(7)] や片岡 [(8)] らはエネルギ・レベルを導入することで，比熱比を任意の値に設定可能にした．片岡らは η_k から導出されるエネルギ $\sum_k \sum_m f_{km}\eta_k^2/2$ と離散速度に基づくエネルギ $\sum_k \sum_m f_{km}c_k^2/2$ の和によって，全エネルギ E を定義したのに対し，Y. Guangwu らは，エネルギ・レベル ε_k から導出されるエネルギ $\sum_k \sum_m f_{km}\varepsilon_k$ のみで全エネルギ E を定義している．これらのモデルの平衡分布関数には，流速 u 周りにテーラー展開されたマクスウェル・ボルツマン分布が，そのままの形式では使われていない．渡利 [(9, 10)] は，7 階テンソルまで等方な正八角形の離散速度を用いることで，マクスウェル・ボルツマン分布形の平衡分布関数に対応した圧縮性流体解析モデルの提案に成功している．ただし，正八角形の離散格子を用いるため，従来型の格子ボルツマン法には適用されず，離散速度格子と空間格子とが分離された FDLBM (Finite Difference Lattice Boltzmann Method) [(11)] が用いられている．

本研究では，u 周りにテーラー展開されたマクスウェル・ボルツマン分布の平衡分布関数を用い，2 次元オイラー方程式に対し，比熱比を任意に設定できる格子ボルツマンモデルを提案する．離散速度の方向に $\pi/4 \times n$ (n は整数) 以外の向きを用いても，オイラー方程式の導出が可能であり，計算精度および数値的安定性が保証されることを，音速の計測計算と，比熱比 $\gamma = 1.4$ における Sod と Roe の衝撃波管問題によ

2007 年 12 月 28 日受付，2008 年 2 月 4 日受理

り検証する．

2. 格子ボルツマン法

格子ボルツマン法では，分布関数 $f_{km}(\mathbf{x},t)$ が，以下の動力学方程式に従い運動する．

$$f_{km}(\mathbf{x}+\mathbf{c}_{km}\delta t, t+\delta t) - f_{km}(\mathbf{x},t) = -\frac{f_{km}(\mathbf{x},t) - f_{km}^{eq}(\mathbf{x},t)}{\tau}. \tag{1}$$

ここで，$\mathbf{c}_{km}$ は離散速度ベクトル，k は離散速度の大きさに対するインデックス，m は離散速度の方向に対するインデックス，τ は緩和時間である．$f_{km}^{eq}(\mathbf{x},t)$ は平衡分布関数であり，u^3 までテーラー展開したマクスウェル・ボルツマン分布で与えられる．

$$f_{km}^{eq} = \rho w_k\left[\left(1-\frac{u^2}{2e}\right) + \frac{1}{e}\left(1-\frac{u^2}{2e}\right)(\mathbf{c}_{km}\cdot\mathbf{u}) + \frac{1}{2e^2}(\mathbf{c}_{km}\cdot\mathbf{u})^2 + \frac{1}{6e^3}(\mathbf{c}_{km}\cdot\mathbf{u})^3\right]. \tag{2}$$

ρ は密度，w_k は重み関数を表す．渡利や片岡が提案したように，エネルギに自由度 η_k を加えることで，密度 ρ，流速 u_α，全エネルギ E が，

$$\rho = \sum_k\sum_m f_{km}, \tag{3}$$

$$\rho u_\alpha = \sum_k\sum_m f_{km}c_{km\alpha}, \tag{4}$$

$$\rho\left(E+\frac{u^2}{2}\right) = \sum_k\sum_m f_{km}\left(\frac{c_k^2}{2}+\eta_k\right), \tag{5}$$

のように定義される．ここで，全エネルギ E と内部エネルギ e は比熱比 γ に関して，

$$e = (\gamma-1)E, \tag{6}$$

の関係がある．本研究では，式 (1) から

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \tag{7}$$

$$\frac{\partial\rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial\rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\beta} + \frac{\partial P}{\partial x_\alpha} = 0, \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(E+\frac{u^2}{2}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left[\rho u_\alpha\left(E+\frac{u^2}{2}\right)\right] + \frac{\partial P u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \tag{9}$$

を導出する．ここで，P は圧力であり，状態方程式，

$$P = \rho e, \tag{10}$$

を満足する．温度 T と音速 a は，それぞれ，

$$T = e, \tag{11}$$

$$a = \sqrt{\gamma e}, \tag{12}$$

のように定義される．式 (7)-(9) の導出のための平衡分布関数に対する条件は，

$$\sum_k\sum_m f_{km}^{eq} = \rho, \tag{13}$$

$$\sum_k\sum_m f_{km}^{eq}c_{km\alpha} = \rho u_\alpha, \tag{14}$$

$$\sum_k\sum_m f_{km}^{eq}c_{km\alpha}c_{km\beta} = \rho e\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \tag{15}$$

$$\sum_k\sum_m f_{km}^{eq}\frac{c_k^2}{2}c_{km\alpha} = \rho u_\alpha\left(2e+\frac{u^2}{2}\right), \tag{16}$$

$$\sum_k\sum_m f_{km}^{eq}\eta_k = \rho E - \rho e = \frac{2-\gamma}{\gamma-1}\rho e, \tag{17}$$

$$\sum_k\sum_m f_{km}^{eq}c_{km\alpha}\eta_k = (\rho E-\rho e)u_\alpha = \frac{2-\gamma}{\gamma-1}\rho e u_\alpha, \tag{18}$$

である．ここで，$\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタ関数であり，

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha=\beta, \\ 0 & \alpha\neq\beta, \end{cases} \tag{19}$$

のように定義される．本論文中の η_k は，片岡や渡利らによって用いられた $\eta_k^2/2$ と同等である．

式 (2) の重み係数 w_k を適切に設定することで，式 (13)-(18) の条件を満足させることができる．重み係数 w_k に対する条件として，式 (13) から，

$$\sum_k\sum_m w_k = 1, \tag{20}$$

$$\sum_k\sum_m w_k c_{km\alpha}c_{km\beta} = e\delta_{\alpha\beta}, \tag{21}$$

が，式 (14) から，

$$\sum_k \sum_m w_k c_{km\alpha} c_{km\beta} c_{km\lambda} c_{km\zeta} = e^2 \Delta_{\alpha\beta\lambda\zeta}, \tag{22}$$

が導出される．ここで，

$$\Delta_{\alpha\beta\lambda\zeta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\lambda\zeta} + \delta_{\alpha\lambda}\delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta}\delta_{\beta\lambda}, \tag{23}$$

である．式 (16) から，

$$\sum_k \sum_m w_k c_k^2 c_{km\alpha} c_{km\beta} c_{km\lambda} c_{km\zeta} = 6e^3 \Delta_{\alpha\beta\lambda\zeta}, \tag{24}$$

が得られる．式 (17) から，

$$\sum_k \sum_m w_k \eta_k = \frac{2-\gamma}{\gamma-1} e, \tag{25}$$

$$\sum_k \sum_m w_k \eta_k c_{km\alpha} c_{km\beta} = \frac{2-\gamma}{\gamma-1} e^2 \delta_{\alpha\beta}, \tag{26}$$

が，式 (18) から，

$$\sum_k \sum_m w_k \eta_k c_{km\alpha} c_{km\beta} c_{km\lambda} c_{km\zeta} = \frac{2-\gamma}{\gamma-1} e^3 \Delta_{\alpha\beta\lambda\zeta}, \tag{27}$$

が導出される．

式 (20)-(27) の α，β，λ，ζ についてアインシュタインの縮約規則に従い整理すると，w_k に対して，2 次元モデルでは 10 個の拘束条件が得られる．例えば，Fig.1(a) に示される 2 次元 25 速度モデルでは，重み関数は w_0 から w_6 までの 7 つになるため，更に 3 個の重みを増やす必要がある．重み関数 w_k は離散速度の大きさに対応して 1 つ定義されるため，重み関数を付加するためには，離散速度の数を増加しなければならない．Fig.1(b) に示す $c(\pm 2, \pm 1)$ と $c(\pm 1, \pm 2)$ で構成される離散速度に対し重み w_7 を定義し，Fig.1(c)，(d) に示す $c(\pm 3, \pm 1)$ と $c(\pm 1, \pm 3)$，$c(\pm 3, \pm 2)$ と $c(\pm 2, \pm 3)$ で構成される離散速度に対し，それぞれ，重み w_8，w_9 を定義する．本モデルでは，Fig.1(a) の 2 次元 25 速度モデルに，テンソルの等方性を有する，Fig.1(b)，(c)，(d) の離散速度を付加することで，重み関数の数を増やす．Fig.1(a) の w_0 と w_7-w_9 に対する離散速度上にのみ，エネルギ・レベル η_k を一定値 η として与え，w_1-w_6 には対しては $\eta_k = 0$ とすると，式 (20)-(27) から，

$$\begin{aligned} w_0 = 1 - 4(w_1 + w_2 + w_3 + w_4 + w_5 + w_6) \\ -8(w_7 + w_8 + w_9), \end{aligned} \tag{28}$$

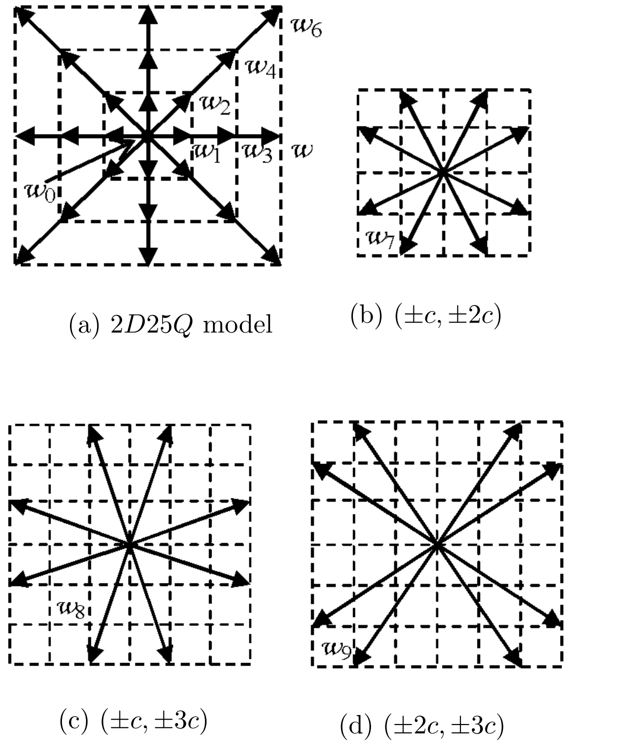


Fig. 1　Schematic of lattice nodes

$$\begin{aligned} w_1 = -\frac{1}{16464c^6}\Big(&-9072c^6 + 12348c^4 e - 8722c^2 e^2 + 2688e^3 \\ &+\frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} c^2 e (9072c^4 - 6835c^2 e + 1917e^2)\Big), \end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned} w_2 = -\frac{1}{32928c^6}\Big(&9072c^6 - 24696c^4 e + 22099c^2 e^2 - 7833e^3 \\ &-\frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} c^2 e (9072c^4 - 9432c^2 e + 2652e^2)\Big), \end{aligned} \tag{30}$$

$$\begin{aligned} w_3 = -\frac{1}{41160c^6}\Big(&2268c^6 - 3087c^4 e - 2450c^2 e^2 + 2415e^3 \\ &-\frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} c^2 e (2268c^4 - 6376c^2 e + 2868e^2)\Big), \end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned} w_4 = -\frac{1}{41160c^6}\Big(&-1134c^6 + 3087c^4 e - 3920c^2 e^2 + 1365e^3 \\ &+\frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} c^2 e (1134c^4 + 144c^2 e + 258e^2)\Big), \end{aligned} \tag{32}$$

$$\begin{aligned} w_5 = -\frac{1}{246960c^6}\Big(&-1008c^6 + 1372c^4 e + 1470c^2 e^2 - 3360e^3 \\ &+\frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} c^2 e (1008c^4 - 6291c^2 e + 6093e^2)\Big), \end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned} w_6 = -\frac{1}{493920c^6}\Big(&1008c^6 - 2744c^4 e + 3675c^2 e^2 - 1785e^3 \\ &-\frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} c^2 e (1008c^4 + 2088c^2 e - 1404e^2)\Big), \end{aligned} \tag{34}$$

$$w_7 = \frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} \frac{e^2(99c^2 - 37e)}{1120c^4}, \tag{35}$$

$$w_8 = \frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} \frac{e^2(9e-8c^2)}{840c^4}, \tag{36}$$

$$w_9 = \frac{2-\gamma}{\eta(\gamma-1)} \frac{e^2(3e-5c^2)}{672c^4}, \tag{37}$$

のように，10 個の重み関数 w_k が一意に求まる．式 (35)-(37) から明らかなように，$\gamma = 2$ の場合，$w_7 = w_8 = w_9 = 0$ となり，式 (29)-(34) の各重み関数における比熱比 γ とエネルギ・レベル η に関する項もゼロになる．つまり，本 LB モデルでは，重み関数に比熱比 γ に関する項を付加することにより，格子ボルツマン法において，比熱比が $\gamma = 2$ と一定になる問題を解決している．

3. 計算結果

初期条件として密度分布に

$$\rho_L = 1.01 \qquad x < 0, \tag{38}$$

$$\rho_R = 1.00 \qquad x \geq 0, \tag{39}$$

の小さな変動を与え，圧縮衝撃波の進行速度から，音速を計測する．全領域を周期境界条件とし，初速度は全領域で 0 である．γ の値を変えた場合の，内部エネルギ e と音速との関係を Fig.2 に示す．ここで，格子サイズは $2,000 \times 2$，$c = 1.0$，$\eta = 2.0c^2$，$\tau = 1.0$ とする．式 (12) の関係を実線で，LBM による計算結果を ($\circ$) で示す．Fig.2 より，全比熱比 γ に対して，計算結果が，理論値と一致していることが分る．

次に，$\gamma = 1.4$ における Sod の衝撃波管問題 [12] に対する計算結果を Fig.3 に示す．Sod の衝撃波管問題では，初期条件を次式のように設定する．

$$(\rho_L, u_L, P_L) = (1, 0, 1) \qquad x < 0, \tag{40}$$

$$(\rho_R, u_R, P_R) = (0.125, 0, 0.1) \qquad x \geq 0. \tag{41}$$

格子点数は 300×2，格子間距離は $c = 1.0$，緩和時間は $\tau = 1.0$，エネルギ・レベルは $\eta = 1.8c^2$ とした．本モデルによる計算結果を太線で，Y. Guangwu[7] の結果を細線で，厳密解を破線で示す．Y. Guangwu の結果と比較し，数値拡散が強くなっているが，Y. Guangwu のモデルで観察された圧力分布 (Fig.3(b)) や流速分布 (Fig.3(c)) における数値振動が，本モデルでは抑制されている．Y. Guangwu の LB モデルでは，9 速度正方格子 ($2D9Q$) モデルを 2 つ重ね，静止粒子を 1 つにした 17 速度の離散速度モデルが用いられる [7]．1 つの静止粒子に対するエネルギ・レベルを ε_0，2 種類の 9 方向の運動粒子に対するエネルギ・レベルを，それぞれ，ε_1，ε_2 とし，全エネルギは，

$$\rho\Big(E + \frac{u^2}{2}\Big) = \sum_k \sum_m f_{km} \varepsilon_k, \tag{42}$$

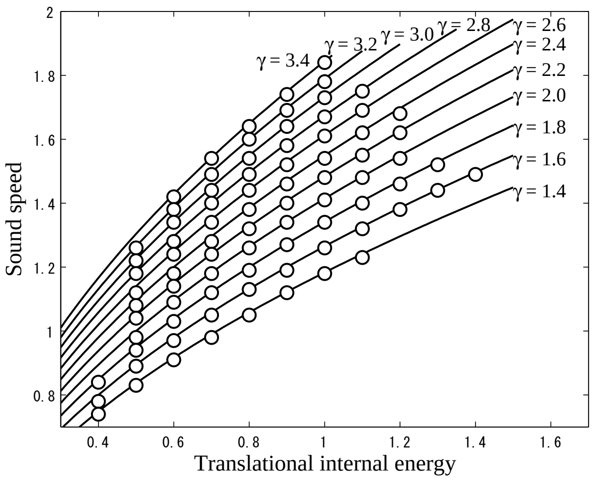


Fig. 2　Numerical simulaitons of adiabatic sound speed as a function of internal energy.

によって定義される．このため，Y. Guangwu のモデルでは，エネルギ・レベル間の関係を調整するパラメータ λ を含め，ε_0，ε_1，ε_2，τ，c の計 6 個のパラメータを設定する必要がある．更に，平衡分布関数に u 周りに展開したマクスウェル・ボルツマン分布をそのまま利用していないため，平衡分布関数内の各係数を設定する条件も付け加えられている．一方，本モデルでは，特に条件式を付け加える必要なく，平衡分布関数内の重み関数が，式 (28)-(37) のように一意に決定され，調整パラメータは τ，c，η の 3 個だけである．

最後に，$\gamma = 1.4$ における Roe の衝撃波管問題 [13] に対する計算結果を Fig.4 に示す．Roe の衝撃波管問題では，初期条件を次式のように設定する．

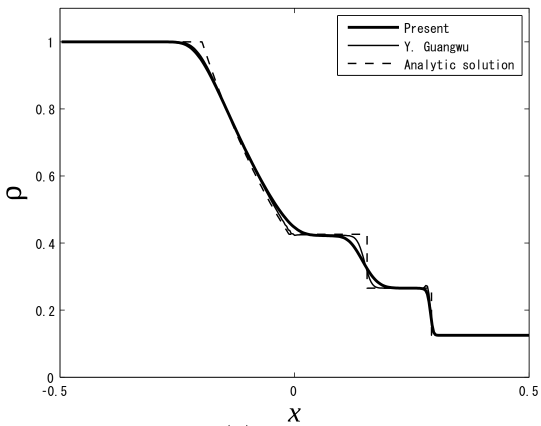
$$(\rho_L, u_L, P_L) = (1, -1, 1.8) \qquad x < 0, \tag{43}$$

$$(\rho_R, u_R, P_R) = (1, 1, 1.8) \qquad x \geq 0. \tag{44}$$

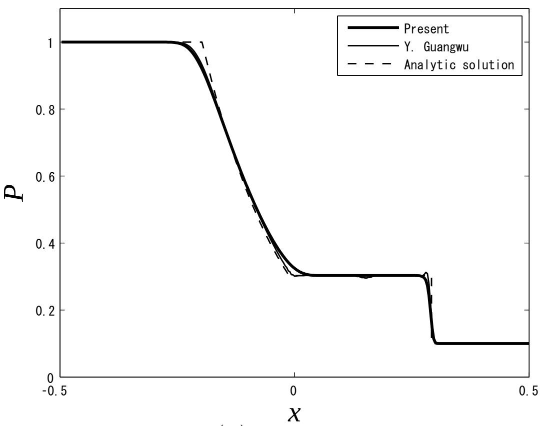
格子点数は 200×2，格子間距離は $c = 2.0$，緩和時間は $\tau = 1.0$，エネルギ・レベルは $\eta = 1.0c^2$ とした．本モデルによる計算結果を太線で，Y. Guangwu[7] の結果を細線で Fig.4 に示す．Fig.4(a)，(d) の $x = 0$ において観察されるバルク粘性による急激な密度およびエネルギ上昇が，Y. Guangwu の結果と比較し，本モデルでは抑制されていることが分る．以上の数値計算により，本 LB モデルによる圧縮性流体解析が可能であることが証明された．

4. 結言

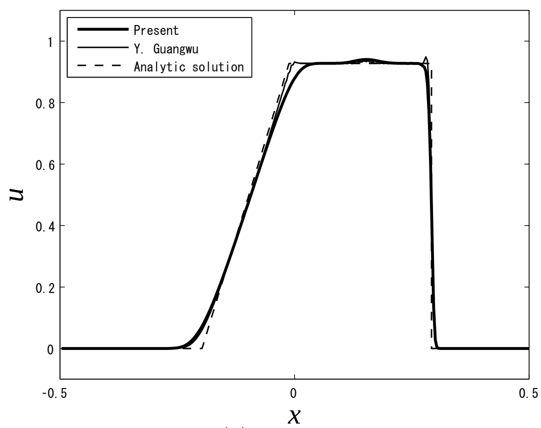
斜め方向の離散速度を用いることで，平衡分布関数が，u 周りにテーラー展開されたマクスウェル・ボルツマン分布で定義される圧縮性流体解析格子ボルツマン法を，従来型の格子上に定義できた．また，エネルギ・レベル η_k を導入することにより，比熱比を任意の値に設定可能にした．比熱比と初期温度を変え，本モデルの音速を計測したところ，マルチスケール展開から導出される音速の関係式に従うことが示された．$\gamma = 1.4$ における Sod と Roe の衝撃波管問題に対する



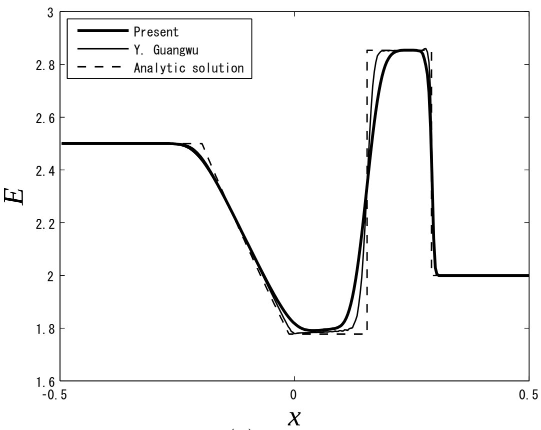
(a) density



(b) pressure

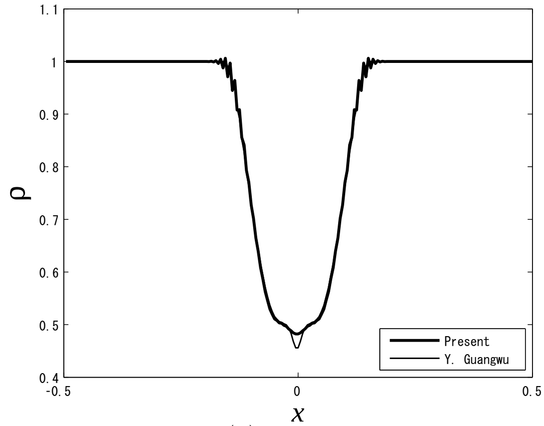


(c) velocity

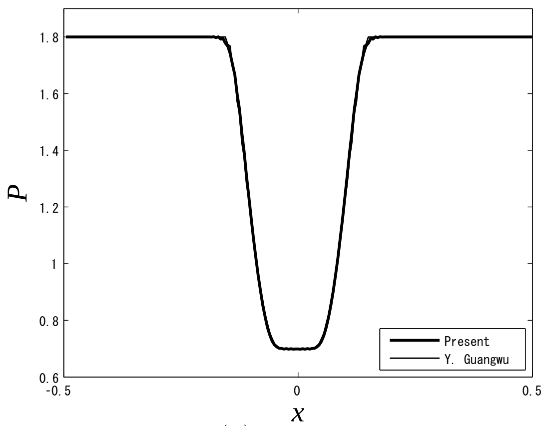


(e) energy

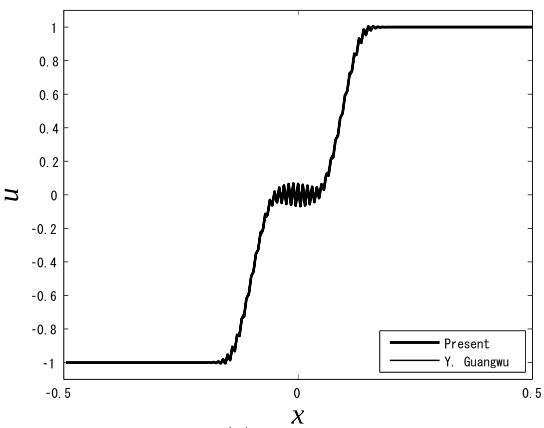
Fig. 3 Comparisons between numerical and theoretical results of Sod's test. Output at $t = 50$.



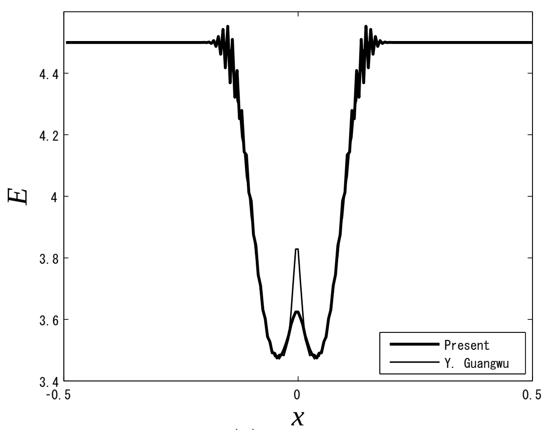
(a) density



(b) pressure



(c) velocity



(e) energy

Fig. 4 Comparisons between present and Y. Guangwu's results of Roe's test. Output at $t = 10$.

計算結果から，本モデルによって，圧縮性流体解析が可能であることが示された．なお，内部エネルギは $0.4 < e < 1.4$，比熱比は $1.4 < \gamma < 3.4$ の範囲で安定に計算ができ，衝撃波管問題では，マッハ数が $M = 0.926$ までの亜音速流れの計算が可能であった．η_k の値を各離散速度に対して一定としたが，今後，Y. Guangwu[7] や渡利 [10] らのように，離散速度の大きさによって η_k の値を変更することにより，数値拡散や数値的安定性に影響があるか検証する必要がある．また，オイラー方程式までの導出しか保証しなかったため，粘性項の影響も考察する必要がある．

5．謝辞

本研究の実施に当たり，大変に貴重なご意見を頂いた渡利實博士，東京工業大学高橋亮一名誉教授，富山大学竹越栄俊名誉教授，富山大学奥井健一名誉教授に深謝する．

参考文献

(1) Chen, S. and Doolen, G. D.：Lattice Boltzmann Method for Fluid FLows，Annu. Rev. Fluid Mech.，**30**(1998)，pp. 329–364.

(2) Yoshino, M., Hotta, Y., Hirozane, T., and Endo, M. ：A Numerical Method for Incompressible Non-Newtonian Fluid Flows Based on the Lattice Boltzmann Method, J. Non-Newtonian Fluid Mechanics **147**(2007)，pp. 69–78.

(3) Seta, T. and Okui, K.：Effects of Truncation Error of Derivative Approximation for Two-Phase Lattice Boltzmann Method，J. Fluid Science and Technology，**2**(2007)，pp. 139–151.

(4) Seta, T. and Ryoichi, T.：Numerical Stability Analysis of FDLBM，J. Statistical Physics，**107**(2002)，pp. 557–572.

(5) Sun, C.：Simulations of compressible flows with strong shocks by an adaptive lattice Boltzmann model，J. Computational Physics，**161**(2000)，pp. 70–84.

(6) Alexander, F. J., Chen, S., and Sterling, J. D.：Lattice Boltzmann Thermohydro-.dynamics，Phys. Rev. E，**47**(1993)，pp. r2249–r2252.

(7) Guangwu, Y., Chen, Y., and Hu S.：Simple lattice Boltzmann model for simulating flows with shock wave, Phys. Rev. E，**59**(1999)，pp. 454–459.

(8) Kataoka, T. and Tsutahara, M.：Lattice Boltzmann model for the compressible Navier-Stokes equations with flexible specific-heat ratio，Phys. Rev. E，**69**(2004)，pp. 035701(R) (4 pages).

(9) Watari, M., and Tsutahara, M.：Supersonic flow simulations by a three-dimensional multispeed thermal model of the finite difference lattice Boltzmann method，Physica A，**364**（2006），pp. 129–144.

(10) Watari, M.：Finite difference lattice Boltzmann method with arbitrary specific heat ratio applicable to supersonic flow simulations，Physica A，**382**(2007)，pp. 502–522.

(11) Cao, N., Chen, S., Jin, S., and Martínez, D.：Physical symmetry and lattice symmetry in the lattice Boltzmann method，Phys. Rev. E，**55**(1997)，pp. R21–R24.

(12) Sod, G. A.：Numerical study of a converging cylindrical shock，J. Fluid Mech.，**83**(1977)，pp. 785–794.

(13) Einfeldt, B., Munz, C. D., Roe P. L., and Sjögreen, B.：On Godunov-type methods near low densities，J. Computational Physics，**92**(1991)，pp. 273–295.