

2 相流格子ボルツマン法の海岸工学への適用

木 原 直 人*・山 下 隆 男**

界面現象への適用に有効な 2 相流の CFD として, 格子ボルツマン法が注目され, モデルの理論体系, 適用性が飛躍的に発達している。本研究では, まず格子ボルツマン法の理論体系を簡単にレビューした。次に 2 相流格子ボルツマン法のいくつかの計算例を示し, 利点, 問題点を明らかにした。さらに, 大気・海洋相互作用問題である大気から波浪への運動量輸送問題に適用し, 従来の研究成果と定性的に一致することを示した。この結果及び, 格子ボルツマン法の近年の急速な進展状況から判断して, この手法の海岸工学への適用性が期待できることを示した。

1. 緒 言

大気・海面の運動量輸送は, 高潮・高波発達のエネルギー入力であり, 大気への水蒸気, 熱輸送は台風, 集中豪雨, 龍巻の発達を支配している。これらの海面交換過程を定量的に再現することで, 海洋および気象の予測精度の向上が期待できる。しかし, 大気・海洋間の海面は不連続, 跳躍, 強非線形, 不規則性であるため, これまでの巨視的な連続体の CFD (Computational Fluid Dynamics) では解析が困難であることが多く, 2 相流で微視的な物質輸送まで発展させることが可能な CFD が追求されてきた。このようなモデルの一つとして, 格子気体法 (LGCA: Lattice Gas Cellular Automata) がある。この手法では, 仮想的な流体粒子を追跡することにより流体運動をシミュレートする。しかし, 巨視的な連続体の数値計算に適用させる上で, 統計誤差の発生等の決定的な欠点があった。これらの欠点を克服した CFD として, 格子ボルツマン法 (LBM: Lattice Boltzmann Method) が近年注目され, モデルの理論体系, 適用性が飛躍的に発達している。この手法は, これまでのように流体の支配方程式である Navier-Stokes 式を連続体として解く方法とは異なる。離散化された微視的なボルツマン方程式を解き, そこに多重尺度展開である Chapman-Enskog 展開 (Chapman・Cowling, 1970) を用いることにより, 連続体の運動方程式と対応させる方法であり, 粒子性を考慮した流体解析が可能であることが特色である。

本研究では, まず LBM の理論体系, 適用性について簡単にレビューする。次に 2 相流 LBM の海岸工学問題への適用に対していくつかの計算例を示し, 利点, 問題点を示す。さらに, 大気・海洋界面交換過程問題への今後の拡張を考慮し, 2 相流 LBM の発展性を検討する。

2. 格子ボルツマン法の概要

格子気体法では仮想粒子の追跡ツールとして Bool 変

数を用いており, それによって巨視的な物理量 (密度, 運動量) の斑, すなわち統計誤差が生じる。LBM では, Bool 変数の代わりに, 熱統計力学のボルツマン方程式のような, 実数の速度分布関数を離散化し用いることで, 流れが滑らかになり, 統計誤差を解消する。このような背景から 1990 年代前半では LBM は LGCA の改良モデルとして扱われ, モデルの理論体系, 適用限界に関して LGCA と同様のものが使われてきた。しかし, 近年, LBM の基礎方程式である格子ボルツマン方程式がボルツマン方程式の特殊な有限差分法で, 時・空間ともに 2 次精度を持つことが明らかになり (He・Luo, 1997), LBM の理論体系が熱統計力学としての性質を確立した (Luo, 2000)。

(1) 支配方程式

LBM では, 各々の格子点上で相空間を離散化し, 仮想粒子の速度分布関数を用いることで流体運動を追跡する。図-1 に 2 次元正方形格子 (2D9Q) の速度分布関数の配置を示す。支配方程式である格子ボルツマン方程式は, 次式のようにボルツマン方程式を離散化することにより導出される。

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{r}, t) = \Omega_i(f(\mathbf{r}, t)) \quad \cdots \cdots (1)$$

ここで, $f_i(\mathbf{r}, t)$ は速度ベクトル $\mathbf{e}_i$ をもつ単一粒子速度分布関数であり, $\Omega_i(f(\mathbf{r}, t))$ は衝突項で局所分布関数に依存する。左辺は並進項, 右辺は衝突項をそれぞれ表し, 衝突過程と並進過程を繰り返しながら時間発展する。右辺の非線形衝突項を直接解くことは非常に複雑であるため, BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) 近似 (Bhatnagar ら, 1954) を用いて衝突項を次式のように簡略化する。

$$\Omega_i(f(\mathbf{r}, t)) = 1/\tau (f_i - f_i^{eq}) \cdots \cdots (2)$$

ここで, τ は緩和係数, f_i^{eq} は局所平衡分布関数である。この BGK 近似は, 時間 dt の間に着目している空間中で dt/τ の分子が衝突により速度分布関数を局所平衡分布になることを意味している。この BGK 近似はその簡易さにより最も頻繁に用いられてきたが, その適用限界のため, 最近では線形衝突項の改良が進められている。

* 学生会員 工修 京都大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻
** 正会員 工博 京都大学大学院助教授 防災研究所

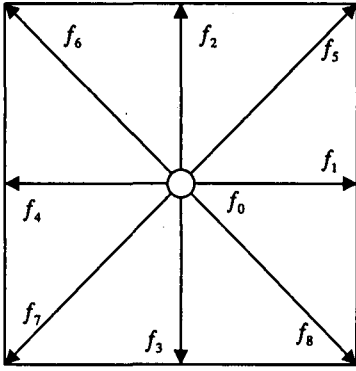


図-1 2次元9速度モデルの分布関数。 (f_0) は静止している仮想粒子の分布関数である。）

平衡分布関数 f_i^{eq} には次式の Maxwell-Boltzmann 分布関数を用いる。

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{e} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) \quad (3)$$

この平衡分布関数に3次の Hermite-Gauss の求積法を用いて相空間を離散化する。これにより、2D9Q モデルの平衡分布関数は以下のように示される。

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left\{ 1 + \frac{(\mathbf{e} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\mathbf{e} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right\}$$

$$w_i = \begin{cases} 4/9 & i=0 \\ 1/9 & i=1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & i=5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (4)$$

また巨視的変数である密度 ρ 、運動量 $\rho \mathbf{u}$ 、運動量流束テンソルは、局所的な平衡分布関数と微視的速度のモーメントにより次式で求めることができる。

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq} \quad (5)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e} = \sum_i f_i^{eq} \mathbf{e} \quad (6)$$

$$\frac{D\rho RT}{2} + \frac{1}{2} \rho u_\alpha u_\beta = \sum_i f_i e_\alpha e_\beta = \sum_i f_i^{eq} e_\alpha e_\beta \quad (7)$$

ここで、 D は空間の次元、 e_α 、 e_β はそれぞれ直交座標での α -方向、 β -方向の微視的な速度成分である。

(2) 巨視的な流体方程式の導出

微視的スケールの格子ボルツマン方程式を多重尺度展開を用いることで巨視的な流体の運動方程式が導出される。このことから LBM は微視的スケールと巨視的スケールの橋渡しのモデルであるといえる。この多重尺度展開には Chapman-Enskog 展開、漸近理論 (S-展開) (Inamuro ら, 1997)、successive 近似 (Swift ら, 1995) 等がある。ここでは一般的によく用いられる Chapman-Enskog 展開を用いた導出法を簡単に述べる。

Chapman-Enskog 展開では、微小な摂動パラメータと

して、分子の平均自由行路 l_p と巨視的な代表的な長さ L_M との比であるクヌーセン数 Kn を用い、時空間変数を多重尺度で展開する。

$$Kn = \frac{l_p}{L_M} \quad (8)$$

粒子速度分布関数は平衡状態周りで次式のように展開される。

$$f = f^{eq} + f^{neq} = f^{(0)} + \varepsilon f^{(1)} + \varepsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad (9)$$

ここで、 $\varepsilon = Kn$: クヌーセン数、 $f^{eq} = f^{(0)}$ 、 $f^{neq} = O(Kn)$ である。

また、多重尺度展開により時空間変数は、

$$\left. \begin{aligned} t &= \varepsilon^{-1} t_1 + \varepsilon^{-2} t_2 \\ \mathbf{r} &= \varepsilon^{-1} \mathbf{r}_1 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

時空間変数 t_1 、 $\mathbf{r}_1$ は、 t 、 $\mathbf{r}$ よりも大きな現象を表現し、 t_2 は t_1 よりもさらに長周期の運動を表している。それぞれの微分演算子は、

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

となる。BGK 近似を用いた格子ボルツマン方程式の左辺を2次のオーダーまでテイラー展開し、高次の項を無視する。

$$\begin{aligned} e_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{1}{2} e_{i\alpha} e_{i\beta} \delta t \frac{\partial^2 f_i}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \\ + e_{i\alpha} \delta t \frac{\partial^2 f_i}{\partial r_\alpha \partial t} + \frac{1}{2} \delta t \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} = -\frac{1}{\tau \delta t} (f_i - f_i^{eq}) \end{aligned} \quad (12)$$

上式を局所平衡分布 f_i^{eq} の周りで Chapman-Enskog 展開し、 ε の1次の項をまとめる。

$$\frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{eq} + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} e_{i\alpha} f_i^{eq} = -\frac{1}{\tau \delta t} f_i^{(1)} \quad (13)$$

さらに、 ε の2次の項までをまとめると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{eq} + \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + e_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\alpha} f_i^{eq} \\ + \frac{1}{2} \delta t \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} f_i^{(1)} + e_{i\alpha} \delta t \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial r_\alpha} f_i^{eq} \\ + \frac{1}{2} \delta t \frac{\partial^2}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} f_i^{eq} e_{i\alpha} e_{i\beta} = -\frac{1}{\tau \delta t} f_i^{(2)} \end{aligned} \quad (10)$$

となる。

ε の1次の項である式 (13) の両辺を微視的速度での全粒子の総和をとると巨視的な変数による質量保存則が導出される。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (15)$$

式 (13) を考慮して、式 (14) を変形すると、

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2} \right) f_i^{eq} + e_{ia} \frac{\partial}{\partial r_{1a}} f_i^{eq} \\ & + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + e_{ia} \frac{\partial}{\partial r_{1a}} f_i^{(1)} \right] \\ & = -\frac{1}{\tau \delta t} [f_i^{(1)} + f_i^{(2)}] \dots\dots\dots (16) \end{aligned}$$

となり、この両辺に微視的速度をかけ全粒子の総和をとると、巨視的で連続な運動方程式である Navier-Stokes の式が導出される。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{P} = 0 \dots\dots\dots (17)$$

ここで、 $\mathbf{P}$ は運動量流束テンソルである。

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\alpha\beta} &= \mathbf{P}_{\alpha\beta}^{(0)} + \mathbf{P}_{\alpha\beta}^{(1)} \\ &= \sum_i e_{ia} e_{i\beta} f_i^{eq} + \left(1 + \frac{1}{2\tau} \right) \sum_i e_{ia} e_{i\beta} f_i^{(1)} \dots\dots (18) \end{aligned}$$

ここで $\nabla \mathbf{P}_{\alpha\beta}^{(0)}$ は移流項と圧力項を、 $\mathbf{P}_{\alpha\beta}^{(1)}$ は粘性項を表している。また、式 (13) より、分布関数の非平衡部分は次式となり、

$$f_i^{(1)} = -\tau \delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{eq} + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} e_{ia} f_i^{eq} \right) \dots\dots\dots (19)$$

平衡分布関数に微視的速度 をかけ総和をとった、

$$\begin{aligned} \sum f_i^{eq} e_{ia} e_{i\beta} e_{i\gamma} &= \rho R T (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\gamma\alpha} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) \\ &\quad + \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma \end{aligned}$$

を考慮すると、次式となる。

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\alpha\beta}^{(1)} &= \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \sum_i e_{ia} e_{i\beta} f_i^{(1)} \\ &= -\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta t R T \rho \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} \right) \dots\dots\dots (20) \end{aligned}$$

となる。式 (20) と Navier-Stokes の式の粘性項とを比較することにより、動粘性係数と緩和係数との関係が次式となることがわかる。

$$\nu = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta t R T \dots\dots\dots (21)$$

以上のように、 ε の 1 次の項と 2 次の項とを共に考慮することにより、ニュートン流体の連続体としての運動方程式が導出できる。

3. 2 相流格子ボルツマン法

2 相流解析は、海岸工学では固・液 2 相流問題である漂砂解析、液・液 2 相流問題の内部波解析、気・液 2 相流問題の大気・海洋相互作用解析等がある。これらの界面現象は界面近傍で微視的スケールの複雑な構造を持っているため、微視的なスケールで粒子間相互作用を考慮できるモデルが有効である。多層流解析モデルとしては Front Tracking 法や Level Set 法のような界面を追跡する手法がよく知られているが、2 相流格子ボルツマン法はこれら従来の CFD とは異なり、界面が局所的な粒

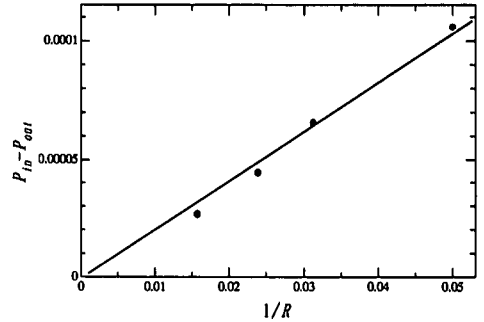


図-2 液滴の半径の逆数と外部-内部圧力差との関係

子間相互作用により自動的に生じるため、複雑な界面挙動にも対応できる。さらに、計算時間も経済的である。

主な 2 相流 LBM モデルとしては、先駆的な存在で 2 色の仮想粒子を追跡する Gunstensen ら (1991) をはじめ、分子間ポテンシャルの概念を初めて導入した Shan・Chen (1993)、非平衡熱力学的な界面の概念を自由エネルギーを用いることで取り込んだ Swift ら (1995)、界面の追跡をモデル化した He ら (1999)、分子気体動力学に基づいた Luo・Ghimajni (2002)、等がある。これらのモデルの適用性を検討した結果 (木原, 2003)、He らのモデルが最も拡張性が高いと考えられるので、本研究ではこのモデルを用いる。

(1) 表面張力の評価

微視的スケールの 2 相流数値問題において界面の変形、界面間の相互作用を再現するには表面張力を正確に評価することが重要である。表面張力の評価の正確さを示す検討基準として、ラプラスの法則を用いる。これはバルク流体中に液滴又は気泡がある場合、表面張力により、バルク流体の圧力 P_{out} と、中にある液滴の圧力 P_{in} との差が表面張力 σ に比例し、液滴の半径 R に反比例する次式の関係を示している。

$$P_{in} - P_{out} = \frac{\sigma}{R} \dots\dots\dots (22)$$

図-2 に、液滴の半径をそれぞれ変化させ、バルク気体の圧力と液滴の圧力との差と、液滴の半径の逆数との関係を求めた結果を示す。これにより 2 相流 LBM では表面張力がほぼ正確に評価できていることが確認される。

(2) 粘性係数の評価

2 次元 Couette-Poiseuille 流れをシミュレートすることにより粘性係数が正確に評価されているかどうかを検討する。図-3(a) に示すように、2 枚の水平な板の間に粘性係数の異なる 2 種類の流体 (上層: $\mu=1$, 下層: $\mu=12$) が同じ厚さで水平に位置している。上板は一定流速 U_0 で移動し、水平方向に一定の圧力勾配を与える。流れが平衡状態になったときの流速を、2 相流 LBM の結果

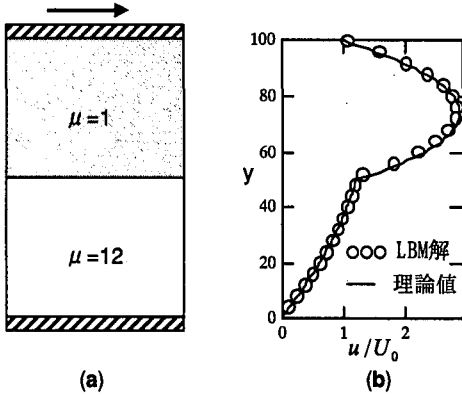


図-3 Couette-Poiseuille 流れの LBM 解と理論解との比較

と理論解とを比較したものが図-3(b)である。この図より理論解と非常によく一致していることがわかる。しかし、2 相流 LBM では界面厚さとして 5~10 格子が必要となるため、実現現象の界面厚さより過大となり、これが計算結果に影響を与えることがわかった。

4. 大気・海洋相互作用問題への適用

大気から海面への運動量輸送には、摩擦抗力と形状抗力に分けられる。最近の研究により、高波浪時の風波の発達には形状抵抗に大きく依存していることが指摘されている (Banner・Peirson, 1998)。そこで 2 相流 LBM を用いて、波動運動をしている液体上に、位相速度と同方向の流速をもつ気体の運動を、位相速度で移動する座標系を用いて数値計算をする。

(1) 計算条件

大気と海洋の密度比は約 1 : 800 であるが、計算の安定性の制約のため、ここでは 1 : 12 の 2 流体を仮定する。初期条件として、(1) 液側の波動運動はストークスの第一次近似解を用いた、(2) 上層の気体は混合距離理論に基づき、水平流速のみを与えた (図-4)。波速 c は 0.56 m/s、周波数 2.78 Hz とした。境界条件は左右周期境界条件、上方は透過条件、下方は波動運動が連続する条件とした。ここでは形状抵抗 ($\rho d\eta/dx$) に注目しているため、気体

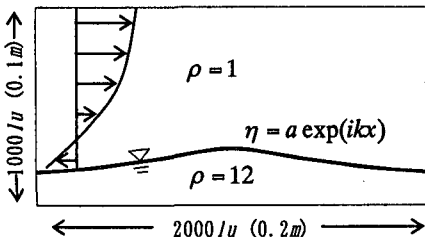


図-4 右向きに移動する波の位相速度をもつ移動座標で見た計算領域

の圧力分布に着目し、静水面から波数 k で無次元化した高さ $kz=2.2$ 上での気体の流速 U_0 を用いた波齢 (c/U_0) を変化させた。

(2) 計算結果

図-5(a) に波齢 0.448, time step 33000 (3.3 s) の、 $u=1$ m/s, $\rho=1$ kg/m³ で無次元化した海面での圧力と海面位置を表している。圧力が海面位相に対して風下側にずれていることがわかる。このずれが形状抵抗 (pressure drag) を大きくする原因であり、一波長の無次元 pressure drag は 8.51 となり、気体から液体への運動量フラックスが正の値をもち、波動運動を発達させる。これに対して波齢が 1.56 でその他の条件は同じ場合の圧力と海面位置の関係が図-5(b) である。上述した波齢の若い例とは逆に、圧力が海面位相に対して風上側にずれており、一波長の無次元 pressure drag は -1.48 となり、波動運動を減衰させる。

図-6 に波齢を 0.448 から 1.56 に変化させたときの、無次元 pressure drag の変化を示す。これにより波速と U_0 が 0.9 より大きくなると波齢に関係なく負の pressure drag が生じることがわかる。また、高風速時には pressure drag が卓越することもわかる。この結果は Bnanner・Peirson (1998) の結果と定性的に一致している。

5. 結 語

2 相流 LBM の長所と問題点、海岸工学への適用について検討してきた。その結果、長所は (1) 自動的に界面が生じるため、複雑な界面変形に対応できる、(2) 正確に表面張力、粘性係数の影響が考慮されている、(3) 局所的に物理パラメータ (粘性係数等) を変化させることができ

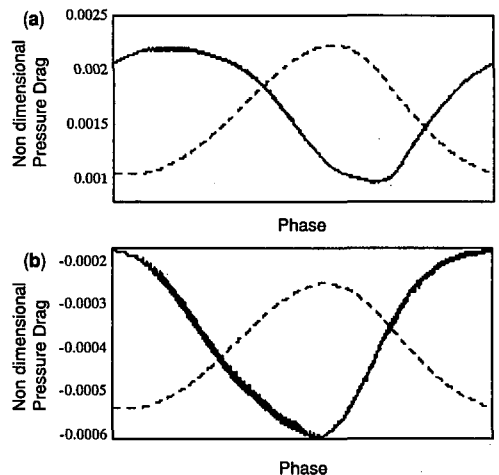


図-5 海面での無次元 pressure drag (実数) と海面位相 (破線)

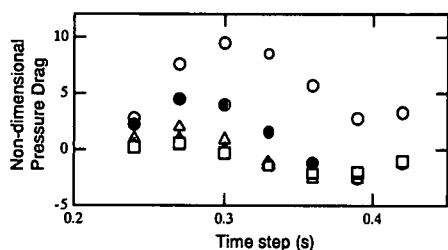


図-6 無次元 pressure drag の時間変化。(波齢は○ 0.448, ● 0.62, △ 0.93, ▲ 1.19, □ 1.56)

る, (4) 粒子間の相互作用が容易に導入できる, (5) 物質輸送モデルへの拡張に適していることがわかった。また, 短所は(1)界面での相の分離が急なため, そこで数値不安定が生じる, (2)界面で, 微小ではあるが, 界面法線方向流速に振動が生じる, (3)空気と海水のような, 密度差の大きな2流体への適用が困難である, (4)微視的スケールモデルであるため, 数十m~数百mの現象への適用が困難であることがわかった。

しかし, 今回は気・液2相流モデルに着目したが, LBMは固・液2相流モデル, 熱流体モデルとしての適用が優れているため, 漂砂メカニズムの解明, 海洋熱塩循環問題等への適用が期待できる。また, 近年の急速な発達により, 今回は採用していないが密度差1:1000の2相流体モデルも開発されている(稲室, 2001)。このような背景からも海岸工学の数値問題への適用性は高いと考えられる。

参 考 文 献

稲室隆二 (2001): 格子ボルツマン法—新しい流体シミュレー

ション法—, 物性研究, 72巻, 2号, pp. 193-228.

- 木原直人 (2003): 格子ボルツマン法を用いた2相流相互作用の数値解析, 修士論文, pp. 23-40.
- Banner, M. and W. Peirson (1998): Tangential stress beneath wind-driven air-water interfaces, *J. Fluid Mech.*, Vol. 364, pp. 115-145.
- Bhatnagar, P., E. Gross and M. Krook (1954): A model for collision processes in gases. 1: small amplitude processes in charged and neutral one-component system. *Phys. Rev.*, Vol. 94, pp. 5111-525.
- Chapman, S. and T. Cowling (1970): *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*, 3rd ed., Cambridge Math. Library
- Gunstensen, A., D. Rothman, S. Zaleski and G. Zanetti (1991): Lattice Boltzmann model of immiscible fluids, *Phys. Rev. A*, Vol. 43, pp. 4320-4327.
- He, X., S. Chen and R. Zhang (1999): A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability, *J. Comp. Phys.*, Vol. 152, pp. 642-663.
- He, X. and L. Luo (1997): A priori derivation of the Lattice Boltzmann equation, *Phys. Rev. E*, Vol. 55, pp. 6333-6336.
- Inamuro, T., M. Yoshino and F. Ogino (1997): Accuracy of the lattice Boltzmann method for small Knudsen number with finite Reynolds number, *Phys. Fluids*, Vol. 9, pp. 3535-3542.
- Luo, L. (2000): Theory of the lattice Boltzmann method: Lattice Boltzmann models for nonideal gases, *Phys. Rev. E*, Vol. 62, pp. 4982-4996.
- Luo, L. and S. Girimaji (2002): Lattice Boltzmann model for binary mixtures, *Phys. Rev. E*, Vol. 66, 035301(R).
- Shan, X. and H. Chen (1993): Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Phys. Rev. E*, Vol. 47, pp. 1815-1819.
- Swift, M., E. Orlandini, W. Osborn and J. Yeomans (1995): Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 75, pp. 830-833.