格子ボルツマン法・
差分格子ボルツマン法

Ph. D.　蔦原　道久　著

コ ロ ナ 社

ま　え　が　き

本書の旧版（「格子気体法・格子ボルツマン法―新しい数値流体力学の手法―」，コロナ社）が出版されてから18年ばかりが過ぎた。幸い旧版はほかに類書がなかったこともあって，多くの読者に受け入れられたようである。しかし当然ながら，格子Boltzmann法はこの間著しい発達を遂げた。

この度コロナ社から改訂版の話があり，少し考えたがお引き受けすることとした。著者の中ではこの分野はそろそろ店じまいということで，論文別刷など処分を始めていたところであったからである。それと，著者の神戸大学での研究自体，少し世界全体から見て主流から外れたところがあると感じてもいた。

具体的にいうと，著者の研究室では格子Boltzmann法そのものではなく，差分格子Boltzmann法をおもに進めてきたのである。詳細は本文で述べているが，格子Boltzmann法が離散化された方程式を対象としているのに対し，差分格子Boltzmann法は基本的に偏微分方程式を対象としている。

著者自身は，その偏微分方程式を差分で解くということを調べているうちに，著者なりにさまざまなことが見えてきたように思える。そして，本書ではそのことについてもいくつか述べている。

著者はこの研究を始める前は，このテーマに大きな期待はしていなかった。しかし，研究を進めるに従い，この研究には流体の多くの要素が絡んでいて，流体現象を理解するおおいなるヒントが潜んでいると考えるようになった。とりあえず，格子Boltzmann法を使ってみようという読者にはやや難しいかもしれないが，少し述べていく。

格子Boltzmann法はChapman-Enskog展開という近似によって，流体力学でなじみ深いNavier-Stokes方程式が出てくる。そうすると，「格子Boltzmann法＝Navier-Stokes方程式の解法」ということになりそうである

が，なかなかそうはいかない。Chapman-Enskog 展開がそのまま成り立たない領域，正確にいうと展開の高次の項が無視できない領域があり，その領域では Navier-Stokes 方程式での流れと異なった流れとなってしまう。

しかし，その領域がどこにあるのかはなかなかわかりにくい。古い解説にもこの点についてなにも書いていない。これは，流れが偏微分方程式で表されるとしても，各項の大きさが領域によって異なってくるということであるが，これは方程式には出ていない。これを理解するには，流れの物理面に対する理解が必要である。私はイメージする力だと思うが，実際にそこでなにが起こっているか，流体現象に対する透察力がないとわからない。

格子 Boltzmann 法は離散化 BGK 方程式を基礎としており，Navier-Stokes 方程式ではないということは別の視点から流体を見ることができ，むしろ流体現象に対する理解が深まると考えている。Navier-Stokes 方程式の限界などは，Navier-Stokes 方程式だけ扱っていては見えてこない。これが，格子 Boltzmann 法を使っていると見えてくる。

また，流体といっても気体，液体があり，Navier-Stokes 方程式では圧縮性・非圧縮性モデルとして理想化してとらえられる。液体であってもわずかながら圧縮性はある。これらの特性は格子 Boltzmann 法のモデルでは，間接的にであれ粒子間の力（分子間力に対応）を導入することにより，液体を再現できる。

また，これらさまざまな流体の特性の変化は，結局は格子 Boltzmann モデルにおける局所平衡分布関数を変えることで達成できるのである。つまり，さまざまな力学的な特性の違いも，単にその局所平衡状態が異なるだけであるということがわかるのである。もちろん，密度の違いなどを表現するには，なんらかの工夫が必要である。

そして，格子 Boltzmann 法の計算モデルと Navier-Stokes 方程式との最大の違いは，おそらく前者が粒子ごとの線形波動方程式を解くのに対し，後者は複雑な非線形連立偏微分方程式を解くことであろう。そのうえ，前者の波動方程式は信号が一定速度で一定方向に伝播するという，非常に簡単な微分方程式

を解くことになる。

つまり格子 Boltzmann 法は，そのモデルの特徴，そして計算法における優れた特徴を持つ流体シミュレーション法であり，従来の流体シミュレーション手法とは少し違ったアプローチとなる。

本書では，著者が関わったさまざまな格子 Boltzmann モデルについて紹介している。これらのモデル開発にいろいろとご指導いただいた関係の皆様，そして実際に開発を推し進めてもらった当時の学生諸君には，この場を借りて感謝の意を表したい。特に旧版の共著者であった，片岡武氏および高田尚樹氏には本研究の原動力となって進めていただいた。ご両人の研究のますますの発展を祈念している。さらに，今回の改訂についてお世話いただいた，コロナ社の方々に感謝いたします。

2018 年 10 月

蔦原　道久

付属の DVD について

本書の付属として，10 のプログラムをソースをつけて DVD に収めている。詳細は 6 章「付属のプログラムについて」を参照いただくとして，このプログラム作成，整理で多大なるご協力をいただいた，赤松克児様には御礼申し上げるとともに，氏の当分野におけるこれからのご貢献を願うものである。

【注意】

目　　　　　次

1.　流体力学の基礎

2.　偏微分方程式に対する数値計算法

3.　格子 Boltzmann 法

4.　差分格子 Boltzmann 法およびほかの離散化法による定式化

5.　格子 Boltzmann 法におけるモデル

6.　付属のプログラムについて

1. 流体力学の基礎

流体力学では，一般には**連続体**としての流体という概念を考え，これに保存則を適用して基礎方程式（支配方程式）を導く。そして，これらの基礎方程式を，与えられた境界条件，初期条件のもとで解くことが流体力学の課題である。方程式を解く際には，厳密に解析的に解くことはもちろんであるが，多くは近似的に解かれる。また，本書のテーマでもある数値的に解を求めることも，最近のコンピュータの発達により容易になってきている。

本章では，あとの章でも必要となる流体力学の基礎を簡単に述べる。

1.1　流体とはなにか

ここで計算の対象にしている流体とはなにか，ということについて考えてみよう。流体とは，空気や水など気体，液体といった文字どおり流れる物体を総称したものである。地球内部のマグマや電離した気体（プラズマ），あるいは磁性を持つ金属の粉をコロイド状に油に溶かせた液体（磁性流体）も，もちろん流体である。

気体も液体も分子でできており，その分子の間にはなにもない。つまり，不連続である。しかし気体を例にとると，**標準状態**〔温度 0℃（273 K），圧力 1 気圧（1.013×10^5 Pa)〕において，およそ $2.687\times10^{25}\ \mathrm{m}^{-3}$（Loschmidt 数）の分子がある。つまり，一辺が $1\,\mu=0.001$ mm の立方体の中にさえ約 2.687×10^7 個の分子が存在することになる。これらを一つひとつ追跡することは不可能である。また普通，空気の運動を考える場合など，分子の一つひとつの運動を調べる必要はない。

そこで，流体を**連続体**として取り扱う方法が考えられる。これは非常に小さな体積を持つ**流体粒子**（一つの粒子ではないことに注意）というものを考え，その中で分子の運動の平均をとる。例えば，流体を構成する分子が１種類だけであるとすると，流速 $\boldsymbol{u}$ は

$$\boldsymbol{u}=m\sum_{i=1}^{n}\frac{\boldsymbol{v}_i}{nm} \tag{1.1}$$

と表される。ここで，m は気体分子１個の質量，$\boldsymbol{v}_i$ は i 分子の速度，n は考えている流体粒子内の分子の数である。また，密度 ρ は

$$\rho=\frac{nm}{V} \tag{1.2}$$

と表される。ここで，V は考えている流体粒子の体積である。

つまり，気体を連続的な流体と考える場合，任意の時間で，空間の点において定義される密度，速度といった巨視的な変数は，考えている点まわりに小さな広がりを持つ体積を考え（これを前述した流体粒子と呼ぶ），その範囲での空間的な平均値を扱っていると考えるのである。そして，時間的，空間的に連続なこれら巨視的な変数だけを用いて，流体現象を記述することが可能となる。これを連続体近似と呼ぶが，この近似により，流れの運動を支配する方程式は場の偏微分方程式で表されることになる。

1.2　流体運動を支配する方程式

詳細は，流体力学の教科書を参照していただくとして，流体力学では，流れの中に適当な大きさの体積をとり，**質量，運動量，エネルギーの保存則**を適用することにより，基礎方程式を導く。ここでは，流体の性質として，方向性を持たない，つまり等方的な流体を考える。

まず，質量の保存を表す連続の式は**ベクトル**表記で

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla(\rho\boldsymbol{u})=0 \tag{1.3}$$

と書ける。あとでも使うので**テンソル**表記も示すと

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i)=0 \tag{1.4}$$

となる。テンソルについては，詳細は付録で解説する。これらの式で，ρ は流体の密度で，時間，空間で変化するとしている。t は時間，∇ は**ナブラ演算子**であって x, y, z が**直角座標**（**デカルト座標**）を表すとすると

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{i}+\frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j}+\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{k}=\frac{\partial}{\partial x_1}\boldsymbol{i}+\frac{\partial}{\partial x_2}\boldsymbol{j}+\frac{\partial}{\partial x_3}\boldsymbol{k} \tag{1.5}$$

である。ここで，$\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$ は x, y, z それぞれの方向の単位ベクトルである。式（1. 4）では，左辺第 2 項での添え字 i は 1，2，3 の整数をとり，$(x_1, x_2, x_3)=(x, y, z)$ を表しているものとする。また，この項では i が x_i と u_i とで重なって出ており，このときは i に 1，2，3 と代入し，それらを加え合わせると約束する。つまり

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i)=\frac{\partial}{\partial x_1}(\rho u_1)+\frac{\partial}{\partial x_2}(\rho u_2)+\frac{\partial}{\partial x_3}(\rho u_3)$$

である。また，u_1, u_2, u_3 は速度ベクトル $\boldsymbol{u}$ のそれぞれ x_1, x_2, x_3 方向成分である。つまり，x, y, z 成分であり

$$\boldsymbol{u}=(u_1, u_2, u_3)=(u_x, u_y, u_z)$$

と書ける。

連続の式（1.3）および（1.4）は，それぞれベクトルあるいはテンソルで書かれているが，式（1.3）ではナブラ演算子 ∇ が式（1.5）からわかるようにベクトルとして扱えるので，左辺第 2 項はこのベクトルと速度ベクトルの内積と解釈でき，スカラーである。また，式（1.4）では，添え字は足し合わされてしまうので，最終的には消えてしまって，一つの量を表すにすぎない。したがって，連続の式は一つのスカラー式である。

式（1.3）は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\rho=-\rho\nabla\cdot\boldsymbol{u} \tag{1.6}$$

と書き直すことができる。この式の左辺の微分演算子は，流体力学では

$$\frac{D}{Dt}=\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla \tag{1.7}$$

と書き，**実質微分**あるいはLagrange微分と呼ばれる。これは，流体粒子に沿って移動する観測者から見た時間変化を表している。ここでは，密度の変化である。

また，右辺の $\nabla\cdot\boldsymbol{u}$ は速度場 $\boldsymbol{u}$ の発散と呼ばれ，流体の膨張（収縮）を表している。つまり，連続の式は，流体粒子に沿って密度の変化は，その粒子が膨張（収縮）することにより減少（増加）することを表している。

また，流体が**非圧縮**であれば，密度は流体粒子に沿って見た場合一定値となるから

$$\frac{D\rho}{Dt}=0 \tag{1.8}$$

であり，これから連続の式（1.6）は

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0 \tag{1.9}$$

となる。

式（1.7）をテンソル表記すると

$$\frac{D}{Dt}=\frac{\partial}{\partial t}+u_i\frac{\partial}{\partial x_i} \tag{1.10}$$

となり，連続の式（1.8），（1.9）は

$$\frac{D\rho}{Dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+u_i\frac{\partial\rho}{\partial x_i}=0 \tag{1.11}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=0 \tag{1.12}$$

と書ける。

ここで，非圧縮流体の条件（1.9）についてひとことつけ加える。この条件は，必ずしも領域全体で密度が同じであるということを意味しない。成層流のように空間的には密度変化はあるが，流体粒子に沿って密度が変化しない，つまり非圧縮であるとみなされる場合，条件（1.9）が成り立つのである。言い換えると，空間的に密度変化があっても，流体が非圧縮であれば，全空間で流

体の膨張・収縮はない，あるいは体積変化はないということである。

つぎに，**運動方程式**はテンソル表記で

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)=F_i+\frac{\partial}{\partial x_i}(-p+\lambda\theta)+\frac{\partial}{\partial x_j}\mu e_{ij} \tag{1.13}$$

と書ける。上式において添え字が少し複雑なので説明する。ここでは，添え字 i は次元を表し，1, 2, 3 すなわち x, y, z を想定している。一方，左辺第 2 項および右辺第 3 項に現れる j は重なっているので，1, 2, 3 を代入して足し合わせてしまう。つまり，運動方程式は 3 次元で 3 方向に三つ独立な式があることになる。

ここで，右辺の θ は**体積膨張率**であり

$$\theta=\frac{e_{ii}}{2}=\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=\nabla\cdot\boldsymbol{u} \tag{1.14}$$

と定義される。また，e_{ij} は変形速度テンソルと呼ばれ

$$e_{ij}=\frac{\partial u_j}{\partial x_i}+\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{1.15}$$

と定義される。F_i は重力などの外力で，p は圧力，λ は**第 2 粘性率**，μ は単に**粘性率**と呼ばれる。式（1.13）は応力テンソル τ_{ij} が

$$\tau_{ij}=(-p+\lambda\theta)\delta_{ij}+\mu e_{ij} \tag{1.16}$$

と書けることから，応力と変形速度との間の線形関係を仮定しており，こういった流体は Newton 流体と呼ばれる。ここで，δ_{ij} は Kronecker のデルタと呼ばれ

$$\delta_{ij}=\begin{cases}1, & i=j\text{ の場合}\\ 0, & i\neq j\text{ の場合}\end{cases}$$

と定義される。

λ および μ が定数であると仮定すると，式（1.13）はベクトル表記で

$$\rho\left[\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t}+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}\right]=\boldsymbol{F}-\nabla p+(\lambda+\mu)\nabla\theta+\mu\nabla^2\boldsymbol{u} \tag{1.17}$$

ここで，$\boldsymbol{F}$ は単位質量当りの体積力である。

また，テンソル表記で

索　　引

【S】

【T】

【U】

【W】

【数字】

── 著 者 略 歴 ──

1971 年　京都大学工学部航空工学科卒業
1971 年　神戸大学助手
1982 年　米国ミシガン大学博士課程修了（応用力学専攻），Ph.D.
1992 年　神戸大学教授
1994 年　神戸大学大学院教授
2011 年　神戸大学名誉教授

格子ボルツマン法・差分格子ボルツマン法
Lattice Boltzmann and Finite Difference Boltzmann Methods

2018 年 12 月 17 日　初版第 1 刷発行　★

検印省略

著　　者　蔦(つた)　原(はら)　道(みち)　久(ひさ)
発 行 者　株式会社　コ ロ ナ 社
　　　　　代 表 者　牛 来 真 也
印 刷 所　新 日 本 印 刷 株 式 会 社
製 本 所　有限会社　愛千製本所

112-0011　東京都文京区千石 4-46-10
発 行 所　株式会社　**コ ロ ナ 社**
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan
振替 00140-8-14844・電話(03)3941-3131(代)
ホームページ　http://www.coronasha.co.jp

ISBN 978-4-339-04658-8　C3053　Printed in Japan　（大井）