第 32 回数値流体力学シンポジウム
F08-2

最密充填格子上の格子ボルツマンモデル

A Lattice Boltzmann Model on Close-pack Lattice

○ 宮内敦, RIST, 650-0047 神戸市中央区港島南町 1-5-2, E-mail: miyauchi@rist.or.jp:
Atsushi Miyauchi, RIST, 1-5-2 Minatojima-minami, Kobe, Japan

Lattice-gas cellular automata or lattice Boltzmann models sometimes suffer incorrectness or insufficient accuracy which influenced by the arrangement of underlaying nodal-points or cells. In this article, I proposed to use a kind of hexagonal close-pack lattice for those methods instead of regular and widely used Cartesian lattice. At first, a novel coordinate system for the lattice to make identification of nodal points easy to be used from popular languages such as C/C++ is introduced. Then sets of lattice velocities are described to discuss isotropy of lattice tensors of second and fourth ranks. Finally, weights to construct equilibrium distribution in lattice BGK method are shown.

１．はじめに

純粋に離散的な流体解析の手法として格子気体オートマトン法（LGCA）や格子ボルツマン法（LBM）が知られている[1]．ナヴィエ・ストークス方程式よりもミクロなレベルでの流体の振る舞いを模擬していることや、計算アルゴリズムが簡素なために並列計算に向いていることなどから、昨今利用の機会が増えてきた超並列計算機への適用という点でも関心が高い．一方で両者とも比較的低マッハ数の流れに限定されるなど制約や欠点もいくつか存在する．例えば LGCA の欠点の一つとして、２次元では容易に満たされる運動量移流テンソルの等方性が３次元では実現困難なことが挙げられる．現在では FCHC と呼ばれる巧妙な方法で４次元速度を３次元に射影することで形式的には解決されているが、衝突項の処理に巨大な参照表が必要なこともあり、実際の応用例は極めて少数に限られている[2]．LBM は状態占有数を実数値化することで LGCA のノイズを軽減すると同時に等方性の問題も解決した．それに加えて衝突項の取り扱いも単一緩和時間の導入により著しく簡単化された．しかし格子への制約は大きく緩和されたものの、実用上は数値誤差や安定性の観点からもより等方的な格子が望ましいことに依然として変わりないと考えられる．

本発表では最密充填格子の一つである面心立方格子における LBM の試みを報告する．まず面心立方格子を効率よくデータ配列に割付ける座標系を提案し、次に D3Q19-FCC と D3Q43-FCC の格子速度とそれによって定義される４階格子テンソルの等方性を議論する．そして最後にこの格子速度に基づく平衡速度分布の構成方法について述べる．

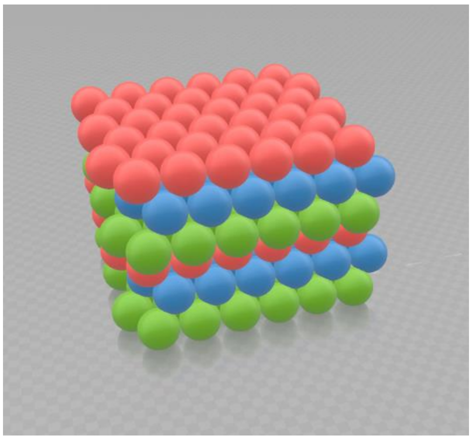

Fig. 1　Stereographic view of FCC lattice.

２．最密充填格子

空間内に最も高い密度で球を詰め込んだ配置として最密充填格子が知られている．これは２次元の三角格子を鉛直方向に積み重ねてゆくことで実現される。さらにそれには２層を繰り返す六方最密充填格子と、３層を繰り返す面心立方格子（Fig. 1）の２種類が可能である．これらはどちらも同じ充填密度をもつが、空間をボロノイ分割すると、最密充填格子はその表面が６つの菱形と６つの台形から構成されるのに対し、面心立方格子は１２の菱形で構成されており、等方性に関しては面心立方格子の方が優れていることが解る．さてここで面心立方格子に基底ベクトル系を設定しよう。通常は単位胞の稜線方向にとるが、面心立方格子の単位胞は圧し潰された細長の図形であるために３次元の立体をデータ配列に格納しようとすると大きな余白が必要となりメモリ効率が悪い．さらに格子点の参照はリストベクトルを介した間接アクセスとなるためにキャッシュミスを頻発することになる。そこで我々はこの問題を解決するために y と z の２方向にジグザグの座標軸を持つ屈折デカルト座標を提案した[3]．その場合に x-y 座標の配置は Fig. 2 のようになる．見易くするために図では一層分だけ示し z 軸も省略してある。z 軸は三角柱にらせん状に巻きついた配置となる．

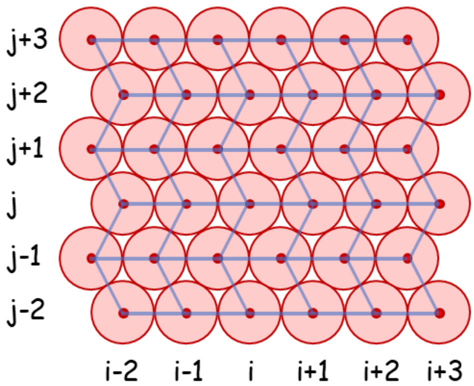

Fig. 2　Two dimensional configuration in a slice.

面心立方格子では任意の球に接触する球は全て等距離で１２個存在する．屈折デカルト座標では任意の位置 (i, j, k) 周りの隣接球の位置は以下の式で表される．

$$(i+1,j,k),\quad (i-\alpha+1,j+1,k),\quad (i-\alpha,j+1,k),$$
$$(i-1,j,k),\quad (i-\alpha+1,j-1,k),\quad (i-\alpha,j-1,k),$$

$$(i+\eta+\beta\xi, j+\xi, k+1), \quad (i+\eta+\beta\zeta, j-\zeta, k-1),$$
$$(i+\eta+\beta\xi-1, j+\xi, k+1), \quad (i+\eta+\beta\zeta-1, j-\zeta, k-1),$$
$$(i-\alpha\zeta+\beta\eta, j+\xi-1, k+1), (i-\alpha\xi+\beta\eta, j-\zeta+1, k-1)$$

ここで図中に導入されている補助変数は floor 関数と modulo を用いて以下のように定義されている.

$$\xi = \left\lfloor \frac{(k\%3)}{2} \right\rfloor, \quad \eta = \left\lfloor \frac{((k+1)\%3)}{2} \right\rfloor, \quad \zeta = \left\lfloor \frac{((k+2)\%3)}{2} \right\rfloor$$
$$\alpha = j\%2, \qquad \beta = (j+1)\%2$$

屈折デカルト座標の実用上の注意点として、並列化のために領域分割する場合に接続面の対応付けを容易にするため y 方向を 2 格子、 z 方向を 3 格子間隔で分割する必要があることが挙げられる. また、 x 及び y 座標軸方向は断面が平面的にならないために形状適合性の点でデカルト座標に見劣りし、壁境界の適用に工夫にも必要となる。

3. 格子速度と格子テンソル

中心となる球周りの第 2 隣接球までを表示すると Fig. 3 のようになる. この図に示したように、最隣接球は全て等距離であり上下 3 層に分布するが、第 2 隣接球は 3 種類の距離に分類され上下 5 層にわたって分布する. 格子速度としてこれらの中から適当な球を取捨選択することによって LGCA や LBM を構成することができる. 選択した格子速度からは格子テンソルが定義されるが、奇数階テンソルの成分は対称性から恒等的に 0 となる. LGCA において運動量移流テンソルは 2 階と 4 階の格子テンソルの差になるので、物理的に正しい計算を行うにはこれらの等方性が重要である. 2 階テンソルが等方的であるためには 2 つの添字に関してクロネッカーのデルタとなればよいが、これは幾何学的に対称な格子速度では大抵満たされる. 一方で 4 階テンソルの等方性を格子速度の見かけの対称性のみから正しく推測することは困難で、実際に計算してみなければ判断できない.

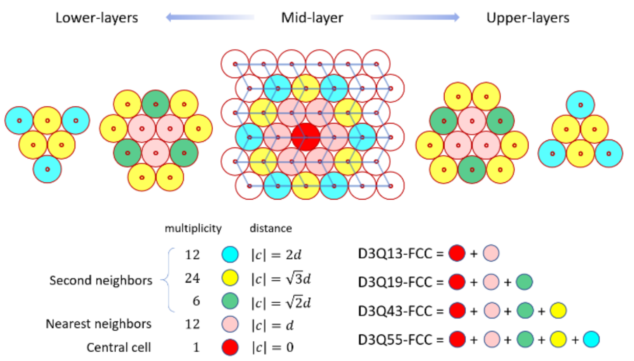

Fig. 3 Lattice velocities.

計算してみると、面心立方格子の 4 階格子テンソルで非零の成分は添字が xxxx, yyyy, zzzz, xxyy, yyzz, zzxx の 6 つのみとなる. さらにそのうち xxxx と yyyy、yyzz と zzxx は同じ値になるので、独立なものは 4 つである. 球間距離を d とすると、これらの非零成分の値は D3Q19-FCC の場合は次のようになる.

$$C^{xxxx} = C^{yyyy} = 13d^4/2, \qquad C^{zzzz} = 16d^4/3,$$
$$C^{yyzz} = C^{zzxx} = 10d^4/6, \qquad C^{xxyy} = 13d^4/6,$$

D3Q43-FCC の場合も以下に示す.

$$C^{xxxx} = C^{yyyy} = 103d^4/2, \qquad C^{zzzz} = 160d^4/3,$$
$$C^{yyzz} = C^{zzxx} = 46d^4/3, \qquad C^{xxyy} = 103d^4/6,$$

等方性は添字 xxxx, yyyy, zzzz が等しく、また xxyy, yyzz, zzxx も等しく、かつ前者が後者の 3 倍である時に成立することが既に知られている. ここに示したように、立方体格子と同様に面心立方格子でも 4 階テンソルは厳密に等方的にはならない. しかし面心立方格子では x と y に関係する成分のみ着目すると部分的に等方性を満たしていることが判る. さらに成分間の比の最小値と最大値を計算すると D3Q19-FCC は 1.6 から 3.0 の間。D3Q43-Fcc では 3.0 から 3.5 の間となり、立方格子の D3Q19(2.5)や D3Q27(1.5)よりいくぶん等方的になっている.

4. 格子ボルツマンモデル

面心立方格子上での非熱流体の格子ボルツマンモデルを最も標準的な方法で構成する. まず衝突項に BGK 近似を適用すると、格子速度 c_i の速度分布 F_i は次式で時間を 1 ステップ前進される.

$$F_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) = F_i(x, t) - \frac{1}{\tau}\left(F_i - F_i^{eq}\right)$$

ここで平衡速度分布 F_i^{eq} を格子速度によって表現しておく必要がある. そのためには偶数次の格子テンソルの重み付き和が同じ次数のマックスウェル分布のモーメントに等しくなるように重み係数を決定する. 具体的な計算手順は文献(2)にゆずり、ここでは D3Q19-FCC の結果だけを以下に記す.

$$W_0/\rho_0 = \frac{10}{27}, \qquad W_1/\rho_0 = \frac{4}{81}, \qquad W_2/\rho_0 = \frac{1}{162},$$
$$\frac{k_B T}{m} = \frac{2d^2}{9},$$

格子ボルツマンモデルの場合には格子テンソルの加重和をとるので等方性は必須ではないが、数値的観点からは高い等方性は誤差の相殺に有利に働くと考えられる。最後に今後の展開として、熱流体へ適用を検討している。 6 次のモーメントまで合わせるので、さらに速度の多い D3Q43-FCC が必要となるが等方性は良くなるので既存法と数値的な差が表れるかも知れない.

5. まとめ

最密充填格子の一つである面心立方格子を LGCA と LBM に適用した。 4 階格子テンソルは完全に等方的とはならないが、立方格子からは一定の改善が見られた. また BGK 近似を用いた非熱流体の格子ボルツマンモデルを導出した。

参考文献

(1) 蔦原, 高田, 片岡, 格子気体法・格子ボルツマン法, コロナ社, (1999)

(2) Wolf-Gladrow, D. A., *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*, Springer Verlag, Berlin, (2000)

(3) Miyauchi, A., Iwamoto, K., Arjunan, S. N. V., and Takahashi, K., “pSpatiocyte: A Parallel Stochastic Method for Particle Reaction-Diffusion Systems,” arXiv:1605.03726, (2016)