Title	格子ボルツマン法による並列アルゴリズムの開発
Author(s)	羽生，匡之
Citation	
Issue Date	1999-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/1222
Rights	
Description	Supervisor:松澤 照男，情報科学研究科，修士

修 士 論 文

格子ボルツマン法による並列アルゴリズムの開発

指導教官　松澤照男 教授

北陸先端科学技術大学院大学
情報科学研究科情報システム学専攻

羽生 匡之

1999 年 2 月 15 日

要 旨

本研究では、数値流体解析法のひとつである Lattice Boltzmann 法の並列計算を扱う。Lattice Boltzmann 法のアルゴリズム、並列化、計算結果について述べる。

目 次

第 1 章

はじめに

格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, 以下 LBM) は、流体力学研究における力学的な考えを基にした、比較的新しい数値解法である。流体を格子の上で衝突と並進を繰り返す多数の仮想粒子の集合と考え、その粒子の動きを計算し流体の運動を求める。

現在多く研究が行われている数値流体解析は、巨視的な物理量を変数に持つ Navier-Stokes 方程式を時間・空間的に離散化して解く、差分法などの方法である。しかし流体を構成する個々の粒子がその挙動に係わる複雑な流れ (例えば非混合二相流、多孔質からの噴流、化学変化を伴う流れ、相変化等) に対しては従来法は扱いが難しかった。これに対して LBM は、仮想粒子を流れを構成する最小の構造と考え、微視的に流体を扱う。そのため複雑な現象を比較的容易にモデル化できる。扱いの難しかった複雑な現象の研究が報告されている。

LBM の解法は完全陽的で格子点における計算は局所的であるので、並列計算に向いている。

本研究では、領域分割法による並列化に生じる通信上の問題の解決を支援する多くの機能を持つ Massage Passing Interface を活用し格子ボルツマン法に基ずく並列 2 次元流体シミュレーションを検討、開発し、性能の評価を行なった。

第 2 章

格子ボルツマン法

ここでは、格子ボルツマン法について解説する。

2.1 離散式

希薄気体力学で用いられるボルツマン方程式を考える。f を確率密度分布関数、$\boldsymbol{v}$を粒子の速度、時間 t、場所$\boldsymbol{x}$とすると、ボルツマン方程式は次のように書ける。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{collision} \tag{2.1}$$

ここで、$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{collision}$ は粒子同士の衝突による単位時間当りの変化率を表している。各項を次のように離散化する。$f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)$ は、時間 t、場所$\boldsymbol{x}$ において、速度 $\boldsymbol{e}_{\sigma i}$を持つ粒子の分布関数である。

$$\begin{aligned}
f &= f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) \\
\frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)}{\Delta t} \\
\boldsymbol{v} &= \boldsymbol{e}_{\sigma i} \\
\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t + \Delta t)}{\Delta x}
\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_{\sigma i} \Delta t \tag{2.2}$$

とおくと、式（2.1）の左辺は、以下のようになる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)}{\Delta t} + \boldsymbol{e}_{\sigma i}\frac{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t+\Delta t)}{\Delta x} \\
&= \frac{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)}{\Delta t} + \boldsymbol{e}_{\sigma i}\frac{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t+\Delta t)}{\boldsymbol{e}_{\sigma i}\Delta t} \\
&= \frac{1}{\Delta t}\{f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) + f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t+\Delta t)\} \\
&= f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) \qquad (2.3)
\end{aligned}
$$

式（2.1）の右辺の衝突項を単一緩和係数 τ を用いて簡略化すると、離散式は次のように表される。

$$
f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - f_{\sigma i}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t)] \qquad (2.4)
$$

ここで、$f_{\sigma i}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t)$ は、局所平衡分布関数と呼ばれるものである。

2.2　格子ボルツマン方程式

格子ボルツマン法で数値計算を行なうには、格子を用意する必要がある。2 次元の問題ではふつう正三角形か平方格子を使うが、今回は図 2.1 のように 2 次元平方格子を考える。（理由は第 4 章で述べる。）流体を構成する粒子は各ノードに存在でき、最近接ノードにのみ移動できるとする。平方格子の場合、軸方向と対角方向に移動する粒子と停止粒子が存在する。軸方向、対角方向に移動する粒子を $\boldsymbol{e}_{1i}$, $\boldsymbol{e}_{2i}$ とすると速度ベクトルは以下のように定義される。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_{1i} &= \left(\cos\frac{i-1}{2}\pi, \sin\frac{i-1}{2}\pi\right), \quad i = 1, \ldots, 4, \\
\boldsymbol{e}_{2i} &= \sqrt{2}\left(\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right)\right), \quad i = 1, \ldots, 4,
\end{aligned}
$$

粒子の速度はそれぞれ $|\boldsymbol{e}_{1i}| = 1$, $|\boldsymbol{e}_{2i}| = \sqrt{2}$ である。

3 つのタイプの粒子の存在確率は、平衡分布関数 $f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)$ で表わす。ここで σ は粒子の種類（0,1,2）で、i は速度方向（軸方向、対角方向それぞれ $i = 1, 2, 3, 4$）である。$\sigma = 0$ のとき停止粒子を表し、単に f_{01} とする。分布関数 $f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)$ は、ノード $\boldsymbol{x}$、時間 t で速度 $\boldsymbol{e}_{\sigma i}$を持った粒子の見つかる確率である。
粒子の分布関数の変化は、次の格子ボルツマン方程式で表す。

$$
f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_{\sigma i}, t+1) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) = \Omega_{\sigma i} \qquad (2.5)
$$

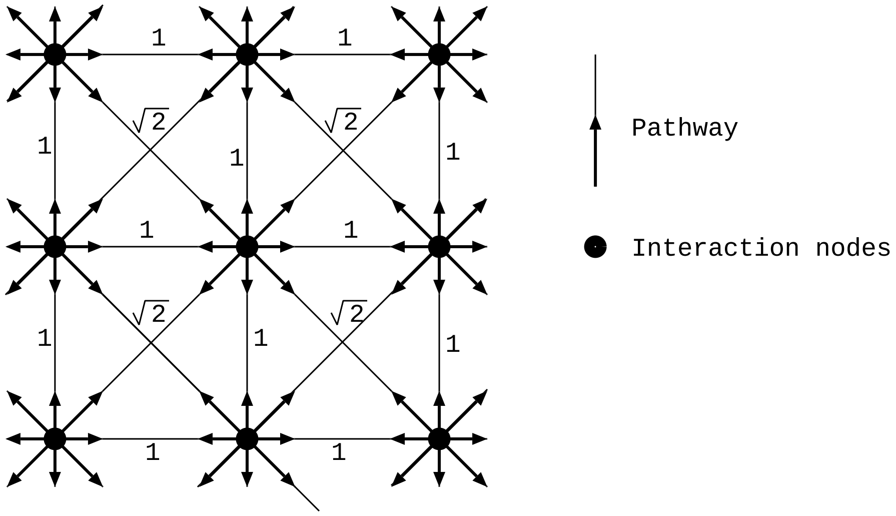


図 2.1: Schematic of a square lattice

$\Omega_{\sigma i}$は衝突による粒子分布の変化の割合を表す衝突演算子である。Bhatnager、Gross、Krook(BGK)は単一緩和近似を使い衝突演算子を簡単にした。格子ボルツマン BGK 方程式は

$$f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_{\sigma i}, t+1) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{1}{\tau}\left[f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - f_{\sigma i}{}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t)\right] \tag{2.6}$$

ここで $f_{\sigma i}^{(eq)}$ は 格子点 $\boldsymbol{x}$、タイムステップ t での平衡分布であり、τは平衡に近づく割合を操作する単一平衡緩和時間である。ノードあたりの密度ρと微視的速度$\boldsymbol{u}$ は粒子分布関数の項で定義される。

$$\sum_{\sigma}\sum_{i} f_{\sigma i} = \rho, \tag{2.7}$$

$$\sum_{\sigma}\sum_{i} f_{\sigma i}\boldsymbol{e}_{\sigma i} = \rho\boldsymbol{u} \tag{2.8}$$

ある空間内に限って平衡状態になった場合の粒子数の分布、局所平衡分布関数は、格子ボルツマン方程式（2.6）から Capman-Enskog 展開を用いて巨視的な方程式を導く仮定で決定できる。それぞれのタイプの粒子に対して次のようなに局所平衡分布関数を決定できる。（この決定は第 3 章で述べる。）

$$\begin{aligned}
f_{0i}^{(eq)} &= \frac{4}{9}\rho\left[1-\frac{3}{2}u^2\right], \\
f_{1i}^{(eq)} &= \frac{1}{9}\rho\left[1+3(\boldsymbol{e}_{1i}\cdot\boldsymbol{u})+\frac{9}{2}(\boldsymbol{e}_{1i}\cdot\boldsymbol{u})^2-\frac{3}{2}u^2\right], \\
f_{2i}^{(eq)} &= \frac{1}{36}\rho\left[1+3(\boldsymbol{e}_{2i}\cdot\boldsymbol{u})^2+\frac{9}{2}(\boldsymbol{e}_{2i}-\boldsymbol{u})^2-\frac{3}{2}u^2\right].
\end{aligned} \tag{2.9}$$

単一平衡緩和時間 τ は次のように粘性 ν と関係している。

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \tag{2.10}$$

νは格子単位で計った動粘性率である。

2.3　ナビア・ストークス方程式との関係

格子ボルツマン方程式（2.6）からナビア・ストークス方程式を導くには普通のボルツマン方程式と同様に Chapman-Enskog 展開を用いる。平衡分布関数として式（2.9）を導くと、流速 u が小さい場合次の連続の式とナビア・ストークス方程式を得られる。

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{2.11}$$

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta\{2\mu(S_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}u_{\gamma\gamma}\delta_{\alpha\beta})\} \tag{2.12}$$

ここで、∂_t、 ∂_α は時間、空間の α 成分についての偏微分を表す。$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)$ である。ギリシャ文字の添字は空間成分 x または y で、例えば u_α はベクトル $\boldsymbol{u}$ の α 成分を表す。また、アインシュタインの総和規約をとるものとする。

物理量との対応を示すために格子ボルツマン方程式（2.6 ）において、時間ステップを幅を 1 からτに改めた。方程式（2.6 ）の左辺で、$\boldsymbol{e}_i \to \boldsymbol{e}_i\tau,\quad 1 \to \tau$ と置換し、以下のようにした。

$$f_{\sigma i}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}_{\sigma i}\tau, t + \tau) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{1}{\tau}\left[f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - {f_{\sigma i}}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t)\right] \tag{2.13}$$

$|\boldsymbol{e}_{\sigma i}| = e$ とすると音速 C_s、圧力 p、動粘性率 ν と格子ボルツマン方程式のパラメータの関係は、以下のようになる。

$$C_s^2 = \frac{1}{3}e^2 \tag{2.14}$$

$$p = C_s^2\rho = \frac{1}{3}e^2\rho \tag{2.15}$$

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \tag{2.16}$$

系を特徴づける長さを L、代表速度を U とすると、レイノルズ数 Re は

$$Re = \frac{UL}{\nu} \tag{2.17}$$

となる。

第 3 章

ナビア・ストークス方程式の導出

lattice Boltzmman 方程式から Chapman-Enskog 展開をすることにより連続の式や ナビア・ストークス方程式といった巨視的な流れの方程式を導くことができる。また、それを導く過程で等方性、ガリレオ不変性、速度非依存の圧力の条件から、平衡分布関数の係数を決定できる。

本研究で用いた格子系状に基づき、以上の 2 点を導出方法を解説する。

3.1 2 次元 9 速度モデル

正方格子の格子点の上に以下の 3 種の粒子を定義する

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_{1i} &= (\quad 0 \quad , \quad 0 \quad), \\
\boldsymbol{e}_{1i} &= \left(\cos\frac{i-1}{2}\pi, \sin\frac{i-1}{2}\pi\right), \quad i = 1, \ldots, 4, \\
\boldsymbol{e}_{2i} &= \sqrt{2}\left(\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi + \frac{\pi}{4}\right)\right). \quad i = 1, \ldots, 4,
\end{aligned}
$$

ここで、テンソル$\Sigma_i(e_{\sigma i\alpha}e_{\sigma i\beta}\ldots)$（ここでは$\alpha, \beta, \ldots = 1 or 2$ は$\boldsymbol{e}_{\sigma i}$の要素を表す）を考える。対称性の性質から奇数次のテンソルは 0 に等しい。また偶数次の二次テンソルは次の式を満たさなければならない。

$$\sum_i e_{\sigma i\alpha}e_{\sigma i\beta} = 2{e^2}_{\sigma}\delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha,\beta = 1,2, \tag{3.1}$$

ここで$\delta_{\alpha\beta}$はクロネッカーデルタで、$e_1 = 1, e_2 = \sqrt{2}$ は$\boldsymbol{e}_{1i}, \boldsymbol{e}_{2i}$の長さである。
4 次精度テンソルは次のようになる。

$$\sum_i e_{\sigma i\alpha}e_{\sigma i\beta}e_{\sigma i\gamma}e_{\sigma i\theta} = \begin{cases} 2\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}, & \sigma = 1, \\ 4\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 8\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}, & \sigma = 2, \end{cases} \tag{3.2}$$

ここで$\alpha = \beta = \gamma = \theta$のとき$\delta_{\alpha\beta\gamma\theta} = 1$ となり、それ以外のとき 0 である。また、$\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} = (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\theta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\theta} + \delta_{\alpha\theta}\delta_{\beta\gamma})$ である。

Chapman-Enskog 過程は力学理論のボルツマン方程式を解く漸近展開方法である。漸近展開式で小さいクヌーセン数（平均自由過程と流れの代表的長さの比）を使う。格子単位は巨視的代表長さより十分小さいとする。微小格子時間単位 δ を使うと、物理単位での格子 BGK 方程式は、

$$f_{\sigma i}(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{e}_{\sigma i}, t+\delta) - f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) = -\frac{1}{\tau}\left[f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - {f_{\sigma i}}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t)\right] \tag{3.3}$$

のようになる。$f^{(0)}_{\sigma i}(\boldsymbol{x},\mathrm{t})$ の一般形を、ボルツマン方程式の平衡解である Maxwell-boltzmann 分布を考え、$\boldsymbol{u}$ について 2 次オーダーまで展開した式を仮定する。

$$f^{(0)}_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) = A_\sigma + B_\sigma\left(\boldsymbol{e}_{\sigma i}\cdot\boldsymbol{u}\right) + C_\sigma(\boldsymbol{e}_{\sigma i}\cdot\boldsymbol{u})^2 + D_\sigma u^2 \tag{3.4}$$

$A_\sigma, B_\sigma, C_\sigma, D_\sigma$は、$u$ ではなくρに依存して決定される数である。
方程式 (3.3) をテイラー展開し、$O(\delta^2)$ の項まで保持すると、

$$\delta\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\boldsymbol{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\right]f_{\sigma i} + \frac{\delta^2}{2}\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\boldsymbol{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\right]^2 f_{\sigma i} + O(\delta^3) = -\frac{1}{\tau}\left[f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - f^{(0)}_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t)\right] \tag{3.5}$$

格子単位系パラメータτの値は平均自由過程とだいたい同じ値である必要がある。ゆえに$\tau\delta$ は物理単位系での平均自由過程とほぼ等しい。平均自由過程がδと同じオーダー（あるいはτが同じオーダー）であると仮定すると、δはクヌーセン数の役割を演じる。しかしながらτがδ よりことも可能である。過程は変更する必要があり、粘性の表現は下に与えられる表現とわずかに違ってくる。$f_{\sigma i}$を $f^{(0)}_{\sigma i}$ について展開する。

$$f_{\sigma i} = f^{(0)}_{\sigma i} + \delta f^{(1)}_{\sigma i} + \delta^2 f^{(2)}_{\sigma i} + O(\delta^3) \tag{3.6}$$

- 保存則
  $\Sigma_\sigma \Sigma_i f_{\sigma i}^{(0)} = \rho$, $\Sigma_\sigma \Sigma_i f_{\sigma i}^{(0)} \boldsymbol{e}_{\sigma i} = \rho \boldsymbol{u}$
- 強制則
  $n \geq 1$ に対して $\Sigma_\sigma \Sigma_i f_{\sigma i}^{(n)} = 0$, $\Sigma_\sigma \Sigma_i f_{\sigma i}^{(n)} \boldsymbol{e}_{\sigma i} = 0$

これらの制限は非平衡分布が密度や運動量の局所値に影響しないということを意味している。

このことより質量について $f_{\sigma i}$ を代入し、展開する。

$$\begin{aligned}
\sum_\sigma \sum_i \rho\{A_\sigma &+ B_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u}) + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2\} \\
&= \sum_\sigma \sum_i \rho\{A_\sigma + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2\} \\
&= \rho\{\sum_\sigma A_\sigma \sum_i 1 \\
&\quad + \sum_\sigma C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}u_x + e_{\sigma iy}u_y)^2 \\
&\quad + \sum_\sigma D_\sigma \sum_i (u_x u_x + u_y u_y)\} \\
&= \rho\{\sum_\sigma A_\sigma \sum_i 1 \\
&\quad + \sum_\sigma (u_x u_x)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}) + D_\sigma \sum_i 1] \\
&\quad + \sum_\sigma (u_y u_y)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}) + D_\sigma \sum_i 1] \\
&\quad + \sum_\sigma (u_x u_y)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma iy})]\} \qquad \text{（ここで、}\textstyle\sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}) = 0\text{）} \\
&= \rho
\end{aligned}$$

よって

$$A_0 + 4A_1 + 4A_2 = \rho \tag{3.7}$$

$$2C_1 + 4C_2 + D_0 + 4D_1 + 4D_2 = 0 \tag{3.8}$$

$$\tag{3.9}$$

となる。同様に運動量についても考える。

$$2B_1 + 4B_2 = \rho \tag{3.10}$$

違なる時間スケールにおける変化を議論するために、t_0, t_1 を $t_0 = t, t_1 = \delta t, \cdots$ とおくと、

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \delta \frac{\partial}{\partial t_1} + \ldots \tag{3.11}$$

式（3.11）の右辺第１項は対流の伝搬、第２項目は粘性拡散のような穏やかな変化の時間スケールである。

式 (3.6)、(3.11) を方程式 (3.5) に代入する。

$$\begin{aligned} & \delta[\partial_{t_0} + \delta\partial_{t_1} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)](f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \\ + & \frac{\delta^2}{2}[\partial_{t_0} + \delta\partial_{t_1} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)]^2(f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \\ = & -\frac{1}{\tau}[(f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) - f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x},t)] \end{aligned}$$

δ^2オーダーまで整理すると

$$\begin{aligned} \delta & [(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)}] \\ +\delta^2 & [\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(1)} + \frac{1}{2}(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)^2 f_{\sigma i}^{(0)}] \\ = & -\frac{1}{\tau}(\delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \end{aligned}$$

δ オーダーの方程式は、

$$\left(\partial_{t_0} + \boldsymbol{e}_{\sigma i}\cdot\nabla\right) f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_{\sigma i}^{(1)} \tag{3.12}$$

δ^2のオーダーの式は (3.12) を使い単純化できる。

$$\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + \left(\partial_{t_0} + \boldsymbol{e}_{\sigma i}\cdot\nabla\right)\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) f_{\sigma i}^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_{\sigma i}^{(2)} \tag{3.13}$$

σ, i に関して式 (3.12) の和をとり、保存則を適用すると。

$$\partial_{t_0}\rho + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.14}$$

同様に方程式 (3.12) に$\boldsymbol{e}_{\sigma i}$ を掛け、和をとると次のようになる。

$$\partial_{t_0}\left(\rho\boldsymbol{u}\right) + \nabla\cdot\Pi^{(0)} = 0 \tag{3.15}$$

ここで$\Pi = \Sigma_\sigma\Sigma_i(\boldsymbol{e}_{\sigma i}\boldsymbol{e}_{\sigma i})f_{\sigma i}$は運動量流速テンソルである。同様に$\rho, \boldsymbol{u}$に対する$\delta^2$のオーダーの方程式は式（3.13）から次のようになる。

$$\partial_{t_1}\rho = 0 \tag{3.16}$$

$$\partial_{t_1}(\rho\boldsymbol{u}) + \nabla\cdot\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\Pi^{(1)} = 0 \tag{3.17}$$

平衡分布の表現を置き換えて、$\Pi^{(0)}$は次のように書ける。

$$\begin{aligned}\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} &= \left[2A_1+4A_2+\left(4C_2+2D_1+4D_2\right)u^2\right]\delta_{\alpha\beta}\\ &\quad +8C_2u_\alpha u_\beta+\left(2C_1-8C_2\right)u_\alpha u_\beta\delta_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{3.18}$$

最初の項は圧力項で、ほかは非線形項である。圧力非依存の速度を得るため u^2の係数は次を満たすように選ばれる。

$$4C_2+2D_1+4D_2=0 \tag{3.19}$$

ガリレオ不変性の性質を持つために、非等方性の項が消えるように次のようにする。

$$2C_1-8C_2=0 \tag{3.20}$$

式 (3.18) は

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta}=\left(2A_1+4A_2\right)\delta_{\alpha\beta}+8C_2u_\alpha u_\beta \tag{3.21}$$

となる。

$$8C_2=\rho \tag{3.22}$$

$$2A_1+4A_2=c_s^2\rho \tag{3.23}$$

と仮定すると（c_sは音速）、$\pi^{(0)}$の最終的表現は次のようになる。

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta}=c_s^2\rho\delta_{\alpha\beta}+\rho u_\alpha u_\beta \tag{3.24}$$

式 (3.24) を式 (3.15) に代入し、

$$\partial_{t_0}(\rho\boldsymbol{u})+\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u})=-\nabla\left(c_s^2\rho\right) \tag{3.25}$$

方程式 (3.14)(3.25) は格子ボルツマン方程式のδオーダーの展開から導かれるオイラー方程式である。圧力は $p=c_s^2\rho$で与えられる。

δ^2に対して正確に方程式を導くには、$\nabla\cdot\Pi^{(1)}$の量を見積もる必要がある。方程式 (3.12) で表される非平衡分布を$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta}$に代入し、方程式 (3.14)、(3.24) を使うと次のように導かれる。

$$\begin{aligned}\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} &= -\tau\{\partial_{t_0}\left[(c_s^2\rho)\delta_{\alpha\beta}+\rho u_\alpha u_\beta\right]+\partial_\gamma B_1u_\theta 2\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}\\ &\quad +\partial_\gamma B_2u_\theta\left(4\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta}-8\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}\right)\}\\ &= -\tau\{-c_s^2\gamma_{\alpha\beta}+\partial_\gamma(\rho u_\gamma)+\partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta)+\partial_\alpha(2B_1-8B_2)u_\beta\delta_{\alpha\beta}\\ &\quad +4\partial_\gamma(B_2u_\gamma)\delta_{\alpha\beta}+4\partial_\alpha(B_2u_\beta)+4\partial_\beta(B_2u_\alpha)\}\end{aligned} \tag{3.26}$$

ここでアインシュタインの総和規約を使った。等方性を保持するため次のようにする。

$$2B_1 - 8B_2 = 0 \tag{3.27}$$

方程式 (3.10) を思いだし、B_1、B_2は決定することができる。

$$B_2 = \frac{\rho}{12}, \quad B_1 = \frac{\rho}{3} \tag{3.28}$$

それゆえ方程式 (3.26) は次のように書ける。

$$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} = -\tau\left\{\frac{1}{3}\partial_\gamma(\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{3}\partial_\alpha(\rho u_\beta) + \frac{1}{3}\partial_\beta(\rho u_\alpha) - c_s^2\partial_\gamma(\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} + \partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta)\right\} \tag{3.29}$$

最後の項は式 (3.25) を使い簡単にできる。

$$\partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) = -u_\alpha\partial_\beta(c_s^2\rho) - u_\beta\partial_\alpha(c_s^2\rho) - \partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \tag{3.30}$$

それゆえ式 (3.29) は

$$\begin{aligned}\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} \quad = \quad & -\tau\{(\frac{1}{3} - c_s^2)\partial_\gamma(\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{3}\partial_\alpha(\rho u_\beta) + \frac{1}{3}\partial_\beta(\rho u_\alpha) \\ & + u_\alpha\partial_\beta(c_s^2\rho) + u_\beta\partial_\alpha(c_s^2\rho) + \partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)\}\end{aligned} \tag{3.31}$$

となる。ρ、$\boldsymbol{u}$に関する $O(\delta)$、(δ^2) の方程式と方程式 (3.14)、(3.25)、(3.16) (3.17)、(3.31) を組み合わせると、誤差の項 $O(\delta^2)$ が消えた正しい形の連続方程式がわかる。

$$\partial_t + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.32}$$

また運動量方程式は次の形で書かれる。

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) \quad = \quad & -\partial_\alpha(c_s^2\rho) \\ & + \delta\{\partial_\alpha[(\tau - \frac{1}{2})(\frac{1}{3} - c_s^2)\partial_\gamma(\rho u_\gamma)] \\ & + \partial_\beta(\tau - \frac{1}{2})[\frac{1}{3}\rho(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \\ & + (\frac{1}{3} - c_s^2)(u_\alpha\partial_\beta\rho + u_\beta\partial_\alpha\rho) \\ & + -\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)]\} + O(\delta^2)\end{aligned} \tag{3.33}$$

方程式 (3.8),(3.23) で与えられる A_σの制限を考慮して、

$$A_0 = \frac{4}{9}\rho, \qquad A_1 = \frac{1}{9}\rho, \qquad A_2 = \frac{1}{36}\rho$$

こうすると式 (3.8) は満たされ、音速が次のようになる。3.1

$$c_s^2 = \frac{1}{3}$$

式 (3.33) は次のように簡単になる。

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) &= -\partial_\alpha(c_s^2\rho) + \partial_\beta(2\nu\rho S_{\alpha\beta}) \\ &\quad + \delta\partial_\beta(\tau - \frac{1}{2})\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \\ &\quad + O(\delta^2) \end{aligned} \tag{3.34}$$

ここで $S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)$ は srain-rate テンソルで $p = c_s^2\rho$である。νは動粘性であり、今は物理単位系で測られている。

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6}\delta \tag{3.35}$$

物理単位系での特徴長さが L とすると、Re は $Re = \frac{UL}{\nu}$を使い計算できる。もし方程式が格子単位系で書かれていたら、δ は方程式の中に明示的には現れない。右辺の三番目の項は非圧縮流の非線形ズレの項である。二次元でのナビア・ストークス方程式を思い出すと、

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta\{2\mu(S_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}u_{\gamma\gamma}\delta_{\alpha\beta})\} \tag{3.36}$$

$$\partial_t\rho + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.37}$$

である。非圧縮流に対してナビア・ストークス方程式は次のようになる。

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta(2\nu S_{\alpha\beta}) \tag{3.38}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0 \tag{3.39}$$

方程式 (3.34) は $O(\delta u^3)$ と $O(\delta^2)$ の項が消えてしまえば、非圧縮ナビア・ストークス方程式 (3.39) と正確に同じであるように見える。一方、方程式 (3.32) はρの変化を無視すれば式 (3.39) に近似できる。

残りの係数 D_0、D_1、D_2は方程式 (3.9)、(3.19) と関係していて、ひとつ自由なパラメーターがある。粒子 2 のすべての係数は対応する粒子 1 の係数の$\frac{1}{4}$であるので、$D_1 = 4D_2$である必要性がある。結局残りの係数は次のように決定される。

$$D_0 = -\frac{2}{3}\rho, D_1 = -\frac{1}{6}\rho, D_2 = -\frac{1}{24}\rho$$

最終的に平衡分布関数は Section 2. の方程式 (2.9) で与えられる。

3.2　2次元17速度モデル

熱まで考慮に入れた Lattice Boltzmman 法のためには、エネルギー保存のために粒子の速度の種類を２種以上にする必要がある。しかし巨視的な方程式の導き方は基本的に同じである。

前半のほうは前セクションとほとんど同じなので、簡単に説明する。

正方形格子上のそれぞれのノード上に、５種類の粒子がある。

速度ベクトル $\mathbf{e}_{\sigma i}$を、次のように定義する。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_{1i} &= (\quad 0 \quad , \quad 0 \quad), \\
\boldsymbol{e}_{1i} &= \left(\cos\frac{i-1}{2}\pi, \sin\frac{i-1}{2}\pi\right), \quad i=1,\ldots,4, \\
\boldsymbol{e}_{2i} &= \sqrt{2}\left(\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi+\frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi+\frac{\pi}{4}\right)\right). \quad i=1,\ldots,4, \\
\boldsymbol{e}_{3i} &= 2\left(\cos\frac{i-1}{2}\pi, \sin\frac{i-1}{2}\pi\right), \quad i=1,\ldots,4, \\
\boldsymbol{e}_{4i} &= 2\sqrt{2}\left(\cos\left(\frac{i-1}{2}\pi+\frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i-1}{2}\pi+\frac{\pi}{4}\right)\right). \quad i=1,\ldots,4,
\end{aligned}
$$

微小格子時間単位 δ を使うと、物理単位での格子 BGK 方程式は

$$f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{e}_{\sigma i}, t+\delta) - f_{\sigma i}(\mathbf{x},t) = -\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x},t) - f_{\sigma i}^{(eq)}(\mathbf{x},t)] \tag{3.40}$$

前セクションの 2 次元 9 速度モデルと同様に $f_{\sigma i}^{(eq)}(\boldsymbol{x},\mathrm{t})$ の一般形を、ボルツマン方程式の平衡解である Maxwell-boltzmann 分布を考え、$\boldsymbol{u}$ について２次オーダーまで展開した式を仮定すると、

$$f_{\sigma i}^{(eq)}(\mathbf{x},t) = \rho\{A_\sigma + B_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u}) + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2\} \tag{3.41}$$

式 (3.40) をテイラー展開し、$O(\delta^2)$ の項まで保持すると、

$$
\begin{aligned}
\delta\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\right] f_{\sigma i} &+ \frac{\delta^2}{2}\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\right]^2 f_{\sigma i} + O(\delta^3) \\
&= -\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x},t) - f_{\sigma i}^{(eq)}(\mathbf{x},t)]
\end{aligned} \tag{3.42}
$$

$f_{\sigma i}$を $f_{\sigma i}^{(0)}$について展開する。

$$f_{\sigma i} = f_{\sigma i}^{(0)} + +\delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)} + O(\delta^3) \tag{3.43}$$

保存則　$\sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(eq)} = \rho, \quad \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(eq)} \mathbf{e}_{\sigma i} = \rho \mathbf{u}, \quad \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(eq)} \varepsilon_\sigma = \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2$

強制則　$\sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(n)} = 0, \quad \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(n)} \mathbf{e}_{\sigma i} = 0, \quad \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(n)} \varepsilon_\sigma = 0 \quad (n \geq 1)$

ここではエネルギーまで考慮しているので、保存則、強制則にも当てはまる。これらの制限は非平衡分布が密度や運動量、エネルギーの局所値に影響しないということを意味している。

式（3.43）の質量の保存則に、式（3.41）を代入すると、

$$\begin{aligned}
\sum_\sigma \sum_i \rho\{A_\sigma &+ B_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u}) + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2\} \\
&= \sum_\sigma \sum_i \rho\{A_\sigma + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2\} \\
&= \rho\{\sum_\sigma A_\sigma \sum_i 1 + \sum_\sigma C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}u_x + e_{\sigma iy}u_y)^2 + \sum_\sigma D_\sigma \sum_i (u_x u_x + u_y u_y)\} \\
&= \rho\{\sum_\sigma A_\sigma \sum_i 1 + \sum_\sigma (u_x u_x)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}) + D_\sigma \sum_i 1] \\
&\quad + \sum_\sigma (u_y u_y)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}) + D_\sigma \sum_i 1] + \sum_\sigma (u_x u_y)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma iy})]\} \\
&= \rho
\end{aligned}$$

よって、

$$A_0 + 4A_1 + 4A_2 + 4A_3 + 4A_4 = \rho \tag{3.44}$$

$$2C_1 + 4C_2 + 8C_3 + 16C_4 + D_0 + 4D_1 + 4D_2 + 4D_3 + 4D_4 = 0 \tag{3.45}$$

運動量についても同様に、

$$2B_1 + 4B_2 + 8B_3 + 16B_4 = 1.0 \tag{3.46}$$

エネルギーについて

$$2A_1 + 4A_2 + 8A_3 + 16A_4 = T \tag{3.47}$$

$$C_1 + 4C_2 + 16C_3 + 64C_4 + 2D_1 + 4D_2 + 8D_3 + 16D_4 = \frac{1}{2} \tag{3.48}$$

違なる時間スケールにおける変化を議論するために、t_0, t_1 を $t_0 = t, t_1 = \delta t, \cdots$ とおくと、

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \delta\frac{\partial}{\partial t_1} + \ldots \tag{3.49}$$

式 (3.43)、(3.49) を方程式 (3.42) に代入する。

$$
\begin{aligned}
\delta[\partial_{t_0} + \delta\partial_{t_1} &+ (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)](f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \\
&+ \frac{\delta^2}{2}[\partial_{t_0} + \delta\partial_{t_1} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)]^2(f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \\
&= -\frac{1}{\tau}[(f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) - f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x},t)]
\end{aligned}
$$

δ^2オーダーまで整理すると

$$
\begin{aligned}
\delta & \quad [(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)}] \\
+\delta^2 & \quad [\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(1)} + \frac{1}{2}(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)^2 f_{\sigma i}^{(0)}] \\
= & \quad -\frac{1}{\tau}(\delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)})
\end{aligned}
$$

δ オーダーの方程式は、

$$(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau}f_{\sigma i}^{(1)} \tag{3.50}$$

δ^2のオーダーの式は (3.50) を使い単純化できる。

$$\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) f_{\sigma i}^{(1)} = -\frac{1}{\tau}f_{\sigma i}^{(2)} \tag{3.51}$$

$$\sum_\sigma\sum_i[(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)}] = \sum_\sigma\sum_i -\frac{1}{\tau}f_{\sigma i}^{(1)} \tag{3.52}$$

δ^2のオーダーの式は (3.50) を使い単純化できる。

$$\partial_{t_0}\sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(0)} + \nabla\cdot\sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(0)}\mathbf{e} = -\frac{1}{\tau}\sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(1)} \tag{3.53}$$

σ, i に関して式 (3.50) の和をとり、保存則を適用すると。

$$\partial_{t_0}\rho + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = 0 \tag{3.54}$$

同様に方程式 (3.50) に$\boldsymbol{e}_{\sigma i}$ を掛け、和をとると次のようになる。

$$\partial_{t_0}\rho\mathbf{u} + \nabla\cdot\Pi^{(0)} = 0 \tag{3.55}$$

$\Pi = \sum_\sigma\sum_i(\mathbf{e}_{\sigma i}\mathbf{e}_{\sigma i})f_{\sigma i}$ は運動量流速テンソルである。同様に$\rho, \boldsymbol{u}$に対するδ^2のオーダーの方程式は式（3.51）から次のようになる。

$$\partial_{t_1}\rho = 0 \tag{3.56}$$

$$\partial_{t_1}(\rho\mathbf{u}) + \nabla\cdot\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\Pi^{(1)} = 0 \tag{3.57}$$

平衡分布の表現を置き換えて、$\Pi^{(0)}$は次のように書ける。

$$
\begin{aligned}
\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} \quad = \quad & \rho\{\sum_{\sigma}(\sum \mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}A_{\sigma}) + [\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma iy}\mathbf{e}_{\sigma iy})C_{\sigma}) + \sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})D_{\sigma})]u^2\}\delta_{\alpha\beta} \\
& +\rho(8C_2 + 28C_4 + 128C_5)u_{\alpha}u_{\beta} \\
& +\rho(2C_1 - 8C_2 + 32C3 - 28C_4 - 128C_5)u_{\alpha}u_{\beta}\delta_{\alpha\beta} \qquad (3.58)
\end{aligned}
$$

最初の項は圧力項で、ほかは非線形項である。圧力非依存の速度を得るため u^2の係数は次を満たすように選ばれる。

$$
\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma iy}\mathbf{e}_{\sigma iy})C_{\sigma}) + \sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})D_{\sigma}) = 0 \qquad (3.59)
$$

ガリレオ不変性の性質を持つために、非等方性の項が消えるように、

$$
2C_1 - 8C_2 + 32C3 - 28C_4 - 128C_5 = 0 \qquad (3.60)
$$

式 (3.58) は

$$
\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho(\sum_{\sigma}(\chi^2_{\sigma x}A_{\sigma}))\delta_{\alpha\beta} + \rho(8C_2 + 28C_4 + 128C_5)u_{\alpha}u_{\beta} \qquad (3.61)
$$

以下を仮定すると

$$
\begin{aligned}
8C_2 + 28C_4 + 128C_5 \quad &= \quad 1 \qquad (3.62) \\
2A_1 + 4A_2 + 8A_3 + 16A_4 \quad &= \quad T \qquad (3.63)
\end{aligned}
$$

$\Pi^{(0)}$は最終的には、

$$
\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho T\delta_{\alpha\beta} + \rho u_{\alpha}u_{\beta} \qquad (3.64)
$$

式 (3.55) に, 式 (3.64) を代入すると、

$$
\partial_{t_0}(\rho\mathbf{u}) + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla(\rho T) \qquad (3.65)
$$

(3.54),(3.65) 式は、格子ボルツマン方程式のδ オーダーの展開から導かれたオイラー方程式である。圧力は、$p = \rho T$で与えられる。

粘性の影響を考えるため、δ^2までの精度の方程式を導くと、量 $\nabla\cdot\Pi^{(1)}$を評価する必要がある。(3.50) 式に表現された非平衡分布を$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta}$に代入し、(3.54),(3.64) 式を使って導くと、

$$
\begin{aligned}
\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} \quad = \quad & -\tau\,\{\partial_{t_0}[(\rho T)\delta_{\alpha\beta} + \rho u_{\alpha}u_{\beta}] + \partial_{\gamma}(B_1\rho)u_{\theta}2\delta_{\alpha\beta\gamma\theta} \\
& +\partial_{\gamma}B_2\rho u_{\theta}(4\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 8\delta_{\alpha\beta\gamma\theta})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& +\partial_\gamma(B_3\rho)u_\theta 32\delta_{\alpha\beta\gamma\theta} \\
& +\partial_\gamma B_4\rho u_\theta(32\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta}-28\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}) \\
& +\partial_\gamma B_5\rho u_\theta(64\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta}-128\delta_{\alpha\beta\gamma\theta})\} \qquad (3.66) \\
= & -\tau\{-\delta_{\alpha\beta}\partial_\gamma(\rho T u_\gamma)+\partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta)+\partial_\alpha(2B_1-8B_2+32B_3-28B_4-128B_5)\rho u_\beta\delta_{\alpha\beta} \\
& +\partial_\gamma((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} \\
& +\partial_\alpha((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\beta) \\
& +\partial_\beta((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\alpha)\}
\end{aligned}
$$

ここは、アインシュタイン規約が使われている。

式 (3.66) について、等方性を維持するため、

$$2B_1-8B_2+32B_3-28B_4-128B_5=0 \qquad (3.67)$$

よって

$$
\begin{aligned}
\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} = & -\tau\{\partial_\gamma((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} \\
& +\partial_\alpha((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\beta)+\partial_\beta((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\alpha) \\
& -\partial_\gamma(\rho T u_\gamma)\delta_{\alpha\beta}+\partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta)\} \qquad (3.68)
\end{aligned}
$$

最後の項は、式 (3.65) を使い簡単になる。

$$
\begin{aligned}
& \partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) \\
= & u_\beta\partial_{t_0}(\rho u_\alpha)+(\rho u_\alpha)\partial_{t_0}(u_\beta) \\
= & -u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-u_\beta\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\gamma)-u_\alpha u_\beta\partial_{t_0}(\rho)+u_\alpha\partial_{t_0}(\rho u_\beta) \\
= & -u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-u_\beta\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\gamma)+u_\alpha u_\beta\partial_\gamma(\rho u_\gamma)-u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\alpha\partial_\gamma(\rho u_\beta u_\gamma) \\
= & -u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-u_\alpha u_\beta u_\gamma\partial_\gamma(\rho)-\rho u_\beta u_\gamma\partial_\gamma(u_\alpha)-\rho u_\alpha u_\gamma\partial_\gamma(u_\beta)-\rho u_\alpha u_\beta\partial_\gamma(u_\gamma) \\
= & -u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \qquad (3.69)
\end{aligned}
$$

ゆえに、式 (3.68) は、

$$
\begin{aligned}
\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} = & -\tau\{(\partial_\gamma((4B_2+32B_4+64B_5)-T)\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} \\
& +\partial_\alpha((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\beta)+\partial_\beta((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\alpha) \\
& -u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)\} \qquad (3.70)
\end{aligned}
$$

$\rho, \mathbf{u}$ についての $O(\delta), O(\delta^2)$ の方程式と、式 (3.54),(3.65),(3.57)(3.70) から連続式と一致する式が得られる。

$$\partial_t\rho+\nabla\cdot(\rho\mathbf{u})=0 \qquad (3.71)$$

運動量に関する式は、

$$
\begin{aligned}
\partial_t(\rho u_\alpha) \quad + \quad & \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = \\
& -\partial_\alpha(\rho T) \\
& +\delta\left\{[(\tau - \frac{1}{2})\partial_\gamma(\rho((4B_2 + 32B_4 + 64B_5) - T)u_\gamma)]\right. \\
& +\partial_\beta(\tau - \frac{1}{2})[(4B_2 + 32B_4 + 64B_5)\rho(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \\
& \left. + (u_\alpha\partial_\beta\rho((4B_2 + 32B_4 + 64B_5) - T) + u_\beta\partial_\alpha\rho((4B_2 + 32B_4 + 64B_5) - T))]\right\} \\
& +O(\delta^2) \qquad (3.72)
\end{aligned}
$$

式（3.72）の右辺第 4 項に注目し、

$$4B_2 + 32B_4 + 64B_5 - T = 0 \qquad (3.73)$$

と仮定すると、式 (3.72) は、

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) \quad = \quad -\partial_\alpha(p) + \partial_\beta N_{\alpha\beta} + O(\delta^2) \qquad (3.74)$$

$N_{\alpha\beta} = -\mu(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)$ は、ニュートン流体に対する応力テンソルであり、$p = \rho T$は、圧力である。

また、静粘性係数μは、緩和係数τと以下のように関係づけられる。

$$\mu(= \nu\rho) = (\tau - \frac{1}{2})\rho T\delta \qquad (3.75)$$

エネルギー保存則に関しては、

$$\partial_t(\rho T + \frac{1}{2}\rho u^2) + \nabla\cdot Q^{(0)} + \nabla\cdot Q^{(1)} = 0$$

$Q^{(0)} = \sum_\sigma\sum_i(\mathbf{e}_{\sigma i}\varepsilon_\sigma)f_{\sigma i}^{(0)}$について、対称性のため、x 成分のみ展開する。

$$
\begin{aligned}
Q_x^{(0)} \quad &= \quad \sum_\sigma\sum_i(e_{\sigma ix}\varepsilon_\sigma)f_{\sigma i}^{(0)} \\
&= \quad \sum_\sigma \varepsilon_\sigma\rho B_\sigma\sum_i e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}u_x
\end{aligned}
$$

対流によって運ばれるエネルギー量を $Q^{(0)} = (P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)\mathbf{u}$ とすると、$Q_x^{(0)} = (P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)u_x = (P + \rho T)u_x + (\frac{1}{2}\rho u_x^2)u_x + (\frac{1}{2}\rho u_y^2)u_x$

上の2式より

$$
\begin{aligned}
\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})\varepsilon_{\sigma}\rho B_{\sigma}) &= P+\rho T \qquad (P=\rho T) \\
&= 2\rho T
\end{aligned}
$$

よって

$$
B_1+4B_2+16B_3+64B_4=2T \tag{3.76}
$$

$Q^{(1)}=\sum_{\sigma}\sum_{i}(\mathbf{e}_{\sigma i}\varepsilon_{\sigma})f_{\sigma i}^{(1)}$ について

$$
\begin{aligned}
Q_x^{(1)} &= \sum_{\sigma}\sum_{i}(e_{\sigma ix}\varepsilon_{\sigma})f_{\sigma i}^{(1)} \\
&= \sum_{\sigma}\sum_{i}(e_{\sigma ix}\varepsilon_{\sigma})\left\{-\tau(\partial_{t0}+\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)}\right\} \\
&= -\tau\{\partial_{t0}\sum_{\sigma,i}\varepsilon_{\sigma}e_{\sigma ix}f_{\sigma i}^{(0)}+\frac{\partial}{\partial x}\sum_{\sigma,i}\varepsilon_{\sigma}e_{\sigma ix}f_{\sigma i}^{(0)}e_{\sigma ix}+\frac{\partial}{\partial y}\sum_{\sigma,i}\varepsilon_{\sigma}e_{\sigma ix}f_{\sigma i}^{(0)}e_{\sigma iy}\}
\end{aligned}
$$

上の式の最後の $\{\}$ 内の各項を、$Q_x^{(1)}.1, Q_x^{(1)}.2, Q_x^{(1)}.3$ と分けて考える。
$Q_x^{(1)}.1$ について、

$$
\begin{aligned}
&Q_x^{(1)}.1 \\
&= \partial_{t0}\sum_{\sigma}\sum_{i}\varepsilon_{\sigma}e_{\sigma ix}f_{\sigma i}^{(0)} \\
&= \partial_{t0}Q_x^{(0)} \\
&= \partial_{t0}\{(P+\rho T+\frac{1}{2}\rho u^2)u_x\} \\
&= u_x\partial_{t0}(P+\rho T+\frac{1}{2}\rho u^2)+(P+\rho T+\frac{1}{2}\rho u^2)\partial_{t0}u_x \\
&= u_x\partial_{t0}(\rho T+\frac{1}{2}\rho u^2)+u_x\partial_{t0}(\rho T)+(2\rho T+\frac{1}{2}u^2)\frac{1}{\rho}\{\partial_{t0}(\rho u_x)-u_x\partial_{t0}\rho\} \\
&= u_x\{-\mathbf{u}\cdot\nabla(P+\rho T+\frac{1}{2}\rho u^2)\}+u_x\{-\mathbf{u}\cdot\nabla(\rho T)\} \\
&\quad +(2\rho T+\frac{1}{2}\rho u^2)\frac{1}{\rho}\{-\frac{\partial}{\partial x}(\rho T)-\mathbf{u}\cdot\nabla(\rho u_x)+u_x\mathbf{u}\cdot\nabla\rho\} \\
&= -2T\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) \\
&\quad -\frac{7}{2}u_xu_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho T)-\frac{1}{2}u_yu_y\frac{\partial}{\partial x}(\rho T)-3u_xu_y\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) \\
&\quad -2Tu_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x)-2Tu_y\frac{\partial}{\partial y}(\rho u_x) \\
&\quad +2Tu_xu_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho)+2Tu_xu_y\frac{\partial}{\partial y}(\rho)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& +O(u^4) \\
= \quad & -2T\frac{\partial}{\partial_x}(\rho T) \\
& -\frac{7}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_x u_x \rho T) + 7u_x\rho T\frac{\partial}{\partial x}(u_x) \\
& -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_y u_y \rho T) + u_y\rho T\frac{\partial}{\partial x}(u_y) \\
& -3\frac{\partial}{\partial y}(u_x u_y \rho T) + 3u_x\rho T\frac{\partial}{\partial y}(u_y) + 3u_y\rho T\frac{\partial}{\partial y}(u_x) \\
& -2Tu_x u_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho) - 2Tu_y u_x\frac{\partial}{\partial y}(\rho) - 2T\rho u_x\frac{\partial}{\partial x}(u_x) - 2T\rho u_y\frac{\partial}{\partial y}(u_x) \\
& +2Tu_x u_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho) + 2Tu_x u_y\frac{\partial}{\partial y}(\rho) \\
& +O(u^4) \\
= \quad & -2\rho T\frac{\partial}{\partial x}(T) - 2T^2\frac{\partial}{\partial x}(\rho) \\
& -\frac{7}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_x u_x \rho T) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_y u_y \rho T) - 3\frac{\partial}{\partial y}(u_x u_y \rho T) \\
& +5\rho T u_x\frac{\partial}{\partial x}(u_x) + \rho T u_y\frac{\partial}{\partial y}(u_x) + \rho T u_y\frac{\partial}{\partial x}(u_y) + 3\rho T u_x\frac{\partial}{\partial y}(u_y) \\
& +O(u^4) \\
= \quad & -2\rho T\frac{\partial}{\partial x}(T) - 2T^2\frac{\partial}{\partial x}(\rho) \\
& -\frac{7}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_x u_x \rho T) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_y u_y \rho T) - 3\frac{\partial}{\partial y}(u_x u_y \rho T) \\
& +\rho T u_x\frac{\partial}{\partial x}(u_x) + \rho T u_y\frac{\partial}{\partial y}(u_x) + \rho T u_y\frac{\partial}{\partial x}(u_y) - \rho T u_x\frac{\partial}{\partial y}(u_y) \\
& +O(u^4)
\end{aligned}
$$

$Q_x^{(1)}.$ について、

$$
\begin{aligned}
& Q_x^{(1)}.2 \\
& \quad = \quad \frac{\partial}{\partial x}\sum_\sigma\sum_i \varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f_{\sigma i}^{(0)} e_{\sigma ix} \\
& \quad = \quad \frac{\partial}{\partial x}(\sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho A_\sigma \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} \\
& \qquad\qquad + \sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho C_\sigma (u_x u_x) \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} \\
& \qquad\qquad + \sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho D_\sigma (u^2) \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix}
\end{aligned}
$$

$$+\sum_{\sigma}\varepsilon_{\sigma}\rho C_{\sigma}(u_y u_y)\sum_{i} e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})$$

$Q_x^{(1)}.3$ について、

$$\begin{aligned} &Q_x^{(1)}.3 \\ &= \frac{\partial}{\partial y}\sum_{\sigma}\sum_{i}\varepsilon_{\sigma}e_{\sigma ix}f_{\sigma i}^{(0)}e_{\sigma ix} \\ &= \frac{\partial}{\partial y}(\sum_{\sigma}\varepsilon_{\sigma}\rho C_{\sigma}(2u_x u_y)\sum_{i} e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}) \end{aligned}$$

$Q_x^{(1)} = \kappa\frac{\partial}{\partial x}(T) + \mu\left\{u_x\frac{\partial}{\partial x}(u_x) + u_y\frac{\partial}{\partial y}(u_x) + u_y\frac{\partial}{\partial x}(u_y) - u_x\frac{\partial}{\partial y}(u_y)\right\}$ と仮定すると、（ニュートン流体、非圧縮性、フーリエの式）

$$\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})\varepsilon_{\sigma}\rho C_{\sigma} + \sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})\varepsilon_{\sigma}\rho D_{\sigma}) = \rho\frac{7T}{2} \tag{3.77}$$

$$\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma iy}\mathbf{e}_{\sigma iy})\varepsilon_{\sigma}\rho C_{\sigma} + \sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})\varepsilon_{\sigma}\rho D_{\sigma}) = \rho\frac{T}{2} \tag{3.78}$$

$$\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma iy}\mathbf{e}_{\sigma iy})\varepsilon_{\sigma}\rho C_{\sigma}) = \rho\frac{3T}{2} \tag{3.79}$$

$$\sum_{\sigma}(\sum(\mathbf{e}_{\sigma ix}\mathbf{e}_{\sigma ix})\varepsilon_{\sigma}\rho A_{\sigma}) = 2\rho T^2 \tag{3.80}$$

$$\kappa = 2\mu = (\tau - \frac{1}{2})\rho T \tag{3.81}$$

以上、近似できた式は、

質量保存則

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

運動量保存則

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla\cdot((\rho\mathbf{u})\mathbf{u}) = -\nabla P - [\nabla\cdot\mathbf{N}]$$

エネルギー保存則

$$\frac{\partial(\rho(T+\frac{1}{2}u^2))}{\partial t} + \nabla\cdot((\rho(T+\frac{1}{2}u^2))\mathbf{u}) = -\nabla\cdot(P\mathbf{u}) + \kappa\nabla^2 T - (\nabla\cdot[\mathbf{N}\cdot\mathbf{u}])$$

ニュートン流体、非圧縮性、理想気体の仮定

$$\begin{aligned} N_{\alpha\beta} &= -\mu(\frac{\partial u_\alpha}{\partial\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial\alpha}) \\ \nabla\cdot\mathbf{u} &= 0 \\ P &= \rho T \end{aligned}$$

また、単一緩和係数の制限から

$$\kappa = 2\mu = (\tau - \frac{1}{2})\rho T$$

このため、扱える流体のプラントル数 Pr は

$$\begin{aligned} Pr &= \frac{c_p \nu}{\kappa} \\ &= \frac{\rho \nu}{\kappa} \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

と固定される。

第 4 章

実装の詳細

4.1 レイノルズ数

レイノルズ数について調べるために、次のパラメータを定義する。

L	系を特徴づける長さ
N	長さ L に含まれる格子数
U	特徴的な速度
M	マッハ数 ($\frac{U}{C_s}$)

系を特徴づける長さ L と格子数 N の関係は

$$L = \tau e N \tag{4.1}$$

となり、マッハ数 M は流速と粒子速度で以下のように表せる。

$$M = \frac{U}{C_s} = \sqrt{3}\frac{U}{e} \tag{4.2}$$

これによりレイノルズ数 Re は以下のように表せる。

$$Re = \frac{UL}{\nu} = \frac{1}{\sqrt{3}}MN \tag{4.3}$$

式（4.3）より、高いレイノルズ数の流れを計算するには、

- 速度を上げる。（Mを大きくする。）
- グリッドを細かくする。（Nを大きくする。）

とすればよい。しかし 格子ボルツマン方程式から ナビエ・ストークス方程式を導く際に、マッハ数 M が 小さいという条件を用いているため、流体の速度はあまり大きくとれない。したがって格子ボルツマン法 を用いて高レイノルズ数流れを数値計算するには、より細かいグリッド を使用する必要があり、大容量のメモリを備えた計算機が要求される。

分散メモリ型の並列計算機上の格子ボルツマンコード は、単に高速計算を目指すだけでなく、大容量をいかした高レイノルズ数流れのシミュレーションが可能になるという利点がある。

4.2 格子形状

格子ボルツマン法を行なう格子には正三角形状の格子と正方形状の格子がある。同じ最大速度、同じ格子サイズでは、三角形よりも正方格子の方が、高いレイノルズ数を達成できることが知られている。[2] またキャビッティー流れのシミュレーションにおいては、正方格子の方が境界条件の扱いが簡単である。

本研究では正方格子上で格子ボルツマン法を構築することにした。

4.3 境界条件

正方格子上での格子ボルツマン法の境界条件について説明する。

- 断熱固定壁（滑べりなし）
  滑べりなし断熱固定壁では、境界格子点での流速が０で、衝突後のエネルギーの変化がないことから、粒子が来た方向に戻る Bounce-back 条件を用いる。図（4.1）において、２、３、４から６、７、８の方向に衝突してきた粒子は、２、３、４の方向に流出する。

- 断熱固定壁（滑べりあり）
  滑べりありの壁では、境界格子点での速度が０でなくてもいいことから、粒子は壁に反射するように流出する。図（4.2）で、６、７、８の方向に来た粒子は、それぞれ４、３、２の方向に流出する。

  上のどちらの境界条件でも、この後に衝突演算に向かう。

- 物理量を持つ壁
  物理量を持つ壁の扱いは、粒子が壁に到達した後、その境界格子点がもつ物理量に

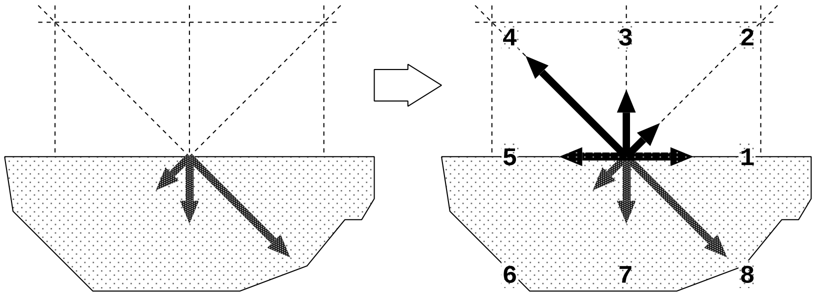


図 4.1: 断熱固定壁（滑べりなし）

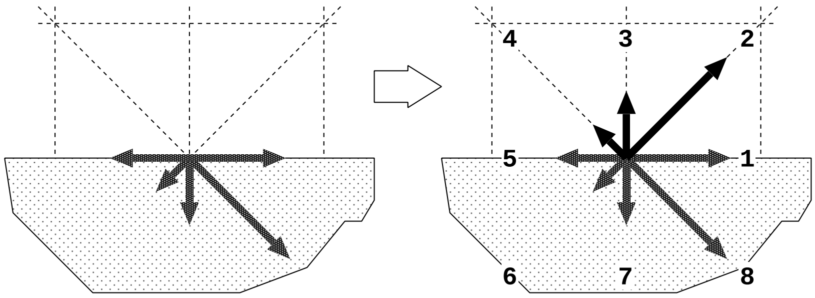


図 4.2: 断熱固定壁（滑べりあり）

対応した平衡分布関数 $f_{\sigma i}^{eq}$ の確率密度の割合になるように補正して、流出するようにする。

$$n = a + b + c \tag{4.4}$$

$$m = f_{22}^{eq} + f_{13}^{eq} + f_{23}^{eq} \tag{4.5}$$

$$d = \frac{f_{22}^{eq}}{m}n, e = \frac{f_{13}^{eq}}{m}n, f = \frac{f_{23}^{eq}}{m}n \tag{4.6}$$

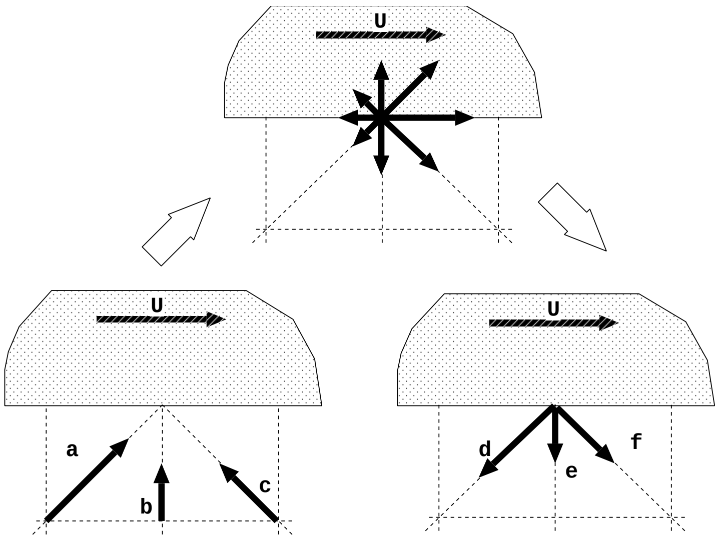


図 4.3: 物理量を持つ壁

4.4　計算の流れ

格子ボルツマン法の計算は基本的には、衝突演算と並進演算である。粒子は格子上のみを移動する。粒子が格子点上に到達すると他の方向から到達した粒子と衝突し、分布関数が変化する。粒子が衝突するのは格子点上のみで移動中は衝突しない。

以下に計算手順を示す。

1. 初期化
2. 衝突演算：式（2.9）より局所平衡分布関数を求める。
3. 衝突演算：式（2.6）右辺より衝突後の平衡分布関数を求める。
4. 並進演算：式（2.6）左辺に従い、粒子の平衡分布関数を移動する。
5. 境界条件を与える。
6. 物理量の算出：式（2.7)、(2.8)（2.15)、より密度ρ、流速$\boldsymbol{u}$、圧力 p を求める。
7. データ出力
8. タイムステップの更新：計算終了のタイムステップか定常に達していれば終了
9. 2. に戻り、計算を継続。

第 5 章

格子ボルツマン法の並列化

マッハ数 M、格子数 N、のとき、格子ボルツマン法のレイノルズ数 Re は、前章の議論より

$$Re = \frac{1}{\sqrt{3}} MN \tag{5.1}$$

この式と格子ボルツマン法の制限により、高レイノルズ数流れを数値計算するには、より細かいグリッドを使用する必要があり、大容量のメモリを備えた計算機が要求される。

分散メモリ型の並列計算機上の格子ボルツマンコードは、単に高速計算を目指すだけでなく、大容量をいかした高レイノルズ数流れのシミュレーションが可能になるという利点がある。

本研究では、並列計算機 Cray-T3E を用いて並列計算を行なった。ノード間通信として Message Passing Interface（以下、MPI）を使用し、計算領域を分割して各ノードに割り当てる領域分割法を用いる。

コード上では格子ボルツマン方程式（2.6）を以下の 2 式に変形して、実装した。

$$f_{\sigma i}^{temp}(\boldsymbol{x}, t+1) = f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - \frac{1}{\tau}\left[f_{\sigma i}(\boldsymbol{x}, t) - {f_{\sigma i}}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t)\right] \tag{5.2}$$

$$f_{\sigma i}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}_{\sigma i}, t+1) = f_{\sigma i}^{temp}(\boldsymbol{x}, t+1) \tag{5.3}$$

式（5.2）は粒子の衝突による分布関数の変化（衝突演算）を表し、式（5.3）は格子間の粒子の移動（並進演算）を表している。領域に隣接する格子は、衝突演算の後に格子上のデータをノード間通信により交換する必要がある。このノード間通信にかかわる部分以外では、式（5.2)、(5.3）ともに完全に並列計算が可能である。

5.1 領域分割

領域分割の方法を用い、各ノードがデータを分割された領域を分担して計算する方法を用いた。以下のことについて検討をした。

１次元領域分割と２次元領域分割

２次元の計算領域の分割を考えると、１次元領域分割と２次元領域分割が考えられる。１次元領域分割の場合、計算ノードを増やしても領域境界の長さは変化しないため、ノードあたりの通信量はノードの数には依存しない。２次元領域分割の場合、全計算領域の長さを N 、使用する計算ノードの数を P とすると、ノード間通信のデータ量は $\frac{4N}{\sqrt{P}}$ に比例する。したがってノード数が増加すると共に通信にかかるコストが削減される。

計算領域を重ならせるか

格子ボルツマン法は粒子が格子点上を移動していく（あるいは分布関数のみが格子上を伝搬していく。）方法である。格子点から格子点への粒子の移動も、計算領域を重ならせない場合のノード間通信も、同じように、単純に、直観的に理解できる。

計算領域を重ならせた場合、通信量そのものは変わりないが、重なっている分だけメモリを消費しているだけである。

1 次元領域分割の場合、縦に分割か、横に分割か

キャビティー流れの場合、左右壁、下の壁は粒子が跳ね返るだけの計算をするが、上壁では強制的に境界条件を与えるため、他の格子点より計算時間がかかる。横方向に領域分割すると上壁の部分を含むノードに計算負荷がかかり、全体のパフォーマンスに影響を与える心配がある。縦方向に分割し、負荷の分散をすることにした。

本研究では図 5.1 (左) に示すように矩形状に計算領域を分割し 1 次元的に敷き詰める方法と、図 5.2 (左) に 2 次元的に領域分割する方法で、隣合うノード間でデータを交換しながら計算することにした。交換するデータは隣のノードに移動する粒子の平衡分布関数のみ交換する。（図 5.1 右）

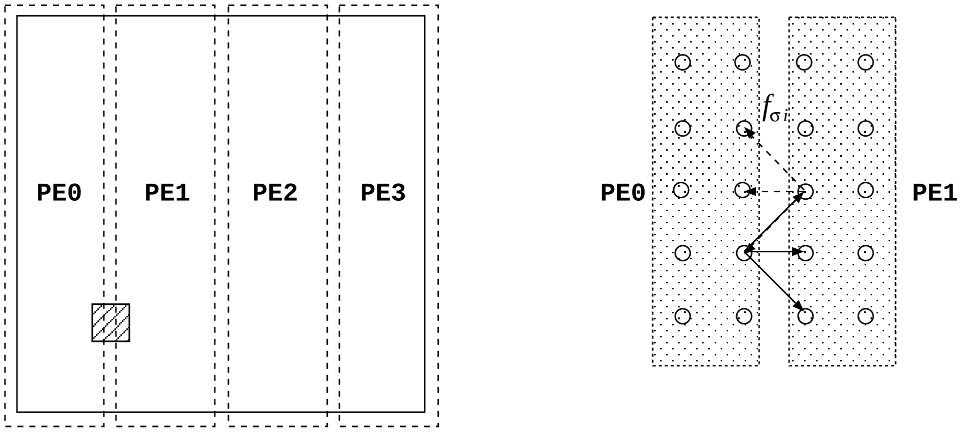
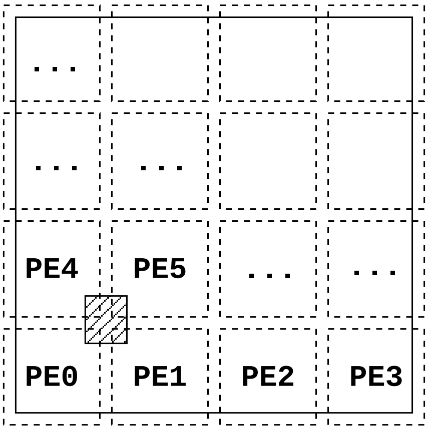


図 5.1: 1 次元領域分割

5.2 並列計算の流れ

並列化にするにあたり、処理の内容と通信のタイミングを調べた。アンダーラインの５、８の部分でノード間通信を行なうことになる。

1. 初期化
2. 衝突演算：式（2.9）より局所平衡分布関数を求める。
3. 衝突演算：式（5.2）より衝突後の平衡分布関数を求める。
4. 並進演算：式（5.3）に従い、粒子の平衡分布関数を移動する。
5. ノード間の通信：領域境界の格子点から平衡分布関数を転送。
6. 境界条件：
7. 物理量の算出：式（2.7)、（2.8）（2.15)、より密度ρ、流速$\boldsymbol{u}$、圧力 p を求める。
8. 出力：出力ノードにデータを転送
9. タイムステップの更新：計算終了のタイムステップか定常に達していれば終了
10. 2. に戻り、計算を継続。



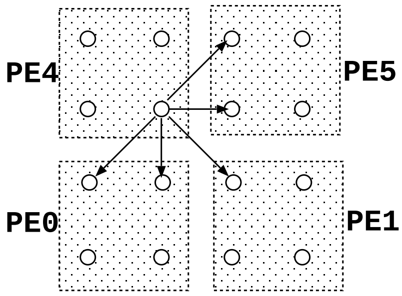


図 5.2: 2 次元領域分割

1. の初期化では、処理のノードへの分割法をした。使用するノードのうちひとつを除き計算用ノードとし、ひとつのノードを出力、制御用とした。ファイルへの出力は計算そのものとは関係のない処理であり、ディスクアクセスが速度を制限することがある。そこで各計算ノードは担当領域の密度ρ、流速$\boldsymbol{u}$、圧力 p を出力ノードに転送し、一括してファイルに出力するようにした。

5.3 評価基準について

プログラムの実行効率を評価するために、以下のパラメータを定義する。Pを計算に用いたノード数、Tp をノード P 個用いた計算の実行時間とする。

スピードアップ

$$S_p = \frac{T_1}{T_p} \tag{5.4}$$

ノード数を増加させたとき、何倍速く計算できたかの見安。理想的な場合には P（ノード数に比例して速度が増加）になる。

並列化効率

$$E_p = \frac{S_p}{P} = \frac{t_1}{PT_p} \tag{5.5}$$

スピードアップをプロセッサ数で規格化したもの。理想的な場合は 1 になる。

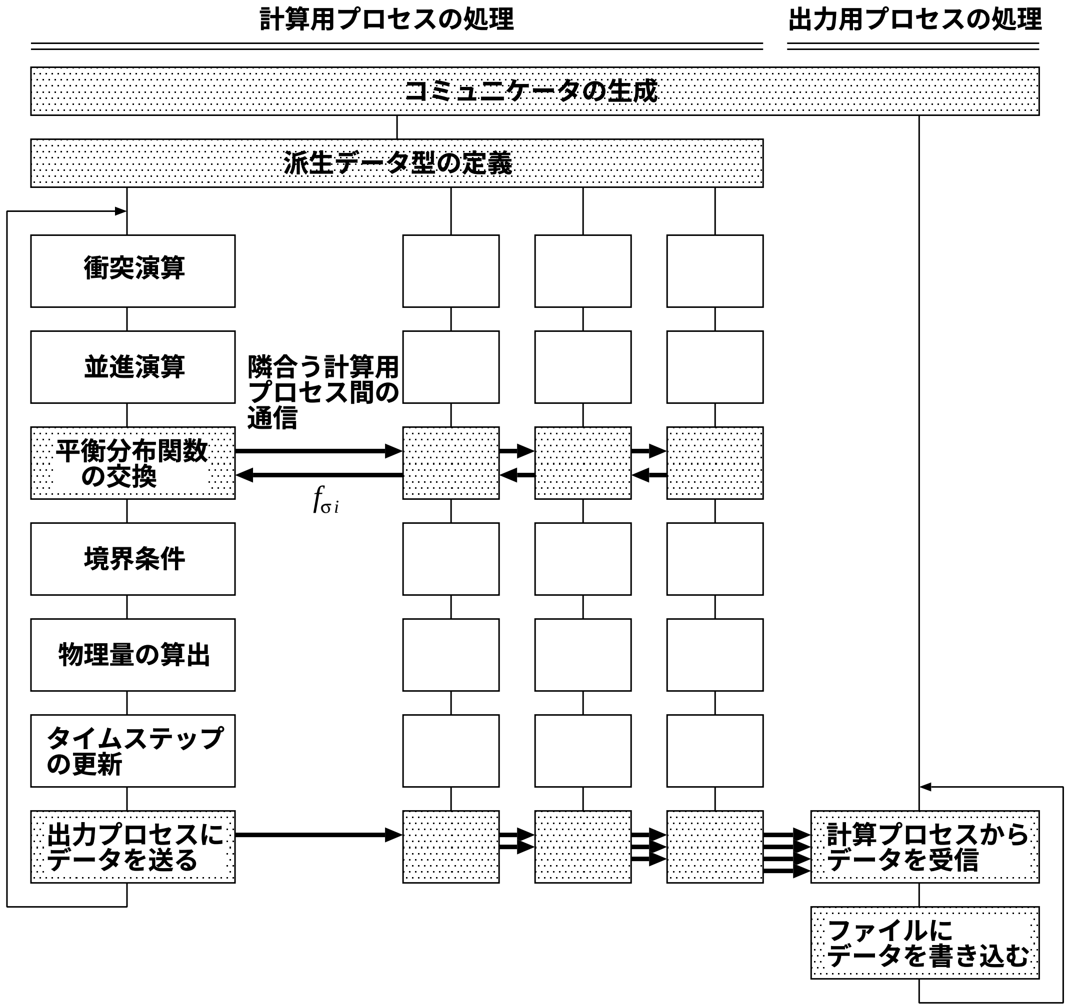


図 5.3: 並列計算の処理の流れ

5.4 パフォーマンスモデル

測定結果を考えるために、パフォーマンスモデルをたてた。

5.4.1 1 次元領域分割

グリッドを $N \times N$ とする。計算の全実行時間は主要計算部分 T_calc と各ノード間のメッセージパッシングの部分 T_comm の和と考えることができる。P 個のノードで領域分割を

実行したとすると、計算部分は $N \times \frac{N}{P}$ に比例する。よって、

$$T_{calc} \propto N \times \frac{N}{P} = \frac{N^2}{P} \tag{5.6}$$

となる。メッセージパッシングの部分は通信データ量に比例する部分と、データに依存しないオーバーヘッドの時間を考えて、

$$T_{comm} \propto \alpha + \beta N. \tag{5.7}$$

よって全実行時間は以下のようになる。

$$T_p = \left(\gamma \frac{P^2}{N} + \alpha + \beta N\right) \times (\text{時間ステップ数}) \tag{5.8}$$

5.4.2　2 次元領域分割

グリッドを $N \times N$ とする。P 個のノードで領域分割を実行したとすると、計算部分は $\frac{N}{\sqrt{P}}$ に比例する。よって、

$$T_{calc} \propto \frac{N}{\sqrt{P}} \times \frac{N}{\sqrt{P}} = \frac{N^2}{P} \tag{5.9}$$

となる。メッセージパッシングの部分は通信データ量に比例する部分と、データに依存しないオーバーヘッドの時間を考えて、

$$T_{comm} \propto \alpha + \beta \frac{N}{\sqrt{P}}. \tag{5.10}$$

よって全実行時間は以下のようになる。

$$T_p = \left(\gamma \frac{P^2}{N} + \alpha + \beta \frac{N}{\sqrt{P}}\right) \times (\text{時間ステップ数}) \tag{5.11}$$

第 6 章

実験及び考察

6.1　正方キャビティー流れ

計算体系として、2 次元正方キャビティー流れを取り上げる。上壁が横方向に移動しキャビティー内に流れが発生する。この正方キャビティ流れは解析解は存在しないが、標準的な検定問題として精密な計算が行なわれている。

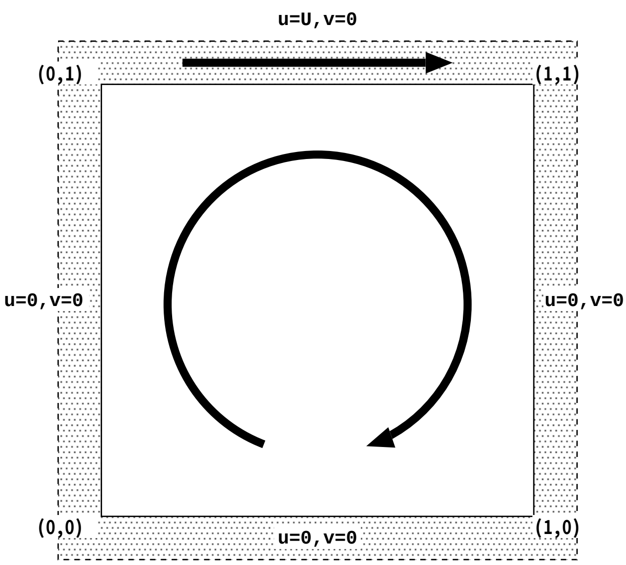


図 6.1: 2 次元正方キャビティー流れ

この計算では上壁の速さを$\boldsymbol{u} = (0.1, 0)$とし、左右下の壁を滑べりなしの固定壁とした。

6.2　計算結果

以下の条件で計算した速度プロファイルの様子を図 6.2、6.3、6.4に示す。

- $Re = 100, \quad \nu = 0.256, \quad \tau = 1.268$
- $Re = 400, \quad \nu = 0.0064, \quad \tau = 0.692$
- $Re = 100, \quad \nu = 0.0256, \quad \tau = 0.576$

格子数はすべてグリッド 256×256 のものである。計算タイムステップはそれぞれ定常な状態になるまでで、$10000step, \quad 80000step, \quad 300000step$ である。
比較したデータは GHIA[2] らの計算結果である。どの計算でも良い結果が得られている。

6.3　並列計算の結果

2D9V モデルの 1 次元領域分割と 2 次元領域分割による並列化の計算結果を示す。1 ノードから６４ノードまでの計算を行なった。格子数は 384×384 と 768×768 の場合である。レイノルズ数は 100 とし、$10000step$ まで計算を行なった。
計算結果を表 6.1、6.2、6.3、6.4と図 6.5、??に示す。1 次元領域分割の場合、64 ノードを使用し、並列化効率は $0.77, \quad 0.86$ と値を得ることができた。また 2 次元領域分割の場合、64 ノードを使用し、並列化効率は $0.88, \quad 0.93$ と高い値を得ることができた。
また 2 次元領域分割による並列化にはあまり速度向上の飽和が見られず、2 次元領域分割の特性が現れている。

6.4　格子ボルツマン法のパフォーマンス

前章で考えたパフォーマンスモデルをもとに、計算結果を解析してみた。パラメーター（α, β, γ）は、グリッド 384×384 と 769×769 のキャビティー流れの計算の実測値から最小二乗法により表 6.5 のように決定できた。各計算ごとにパラメーターを求めたが、良い一致を得ている。
図 6.7、6.8 は実測された実行時間とパフォーマンスモデルによる予測の比較である。パラメーターを各計算ごとに求めたため、モデルと実測値は良く一致しているが、領域分割法ごとにパラメーターを一致させようとするとうまくいかなかった。これは計算時間

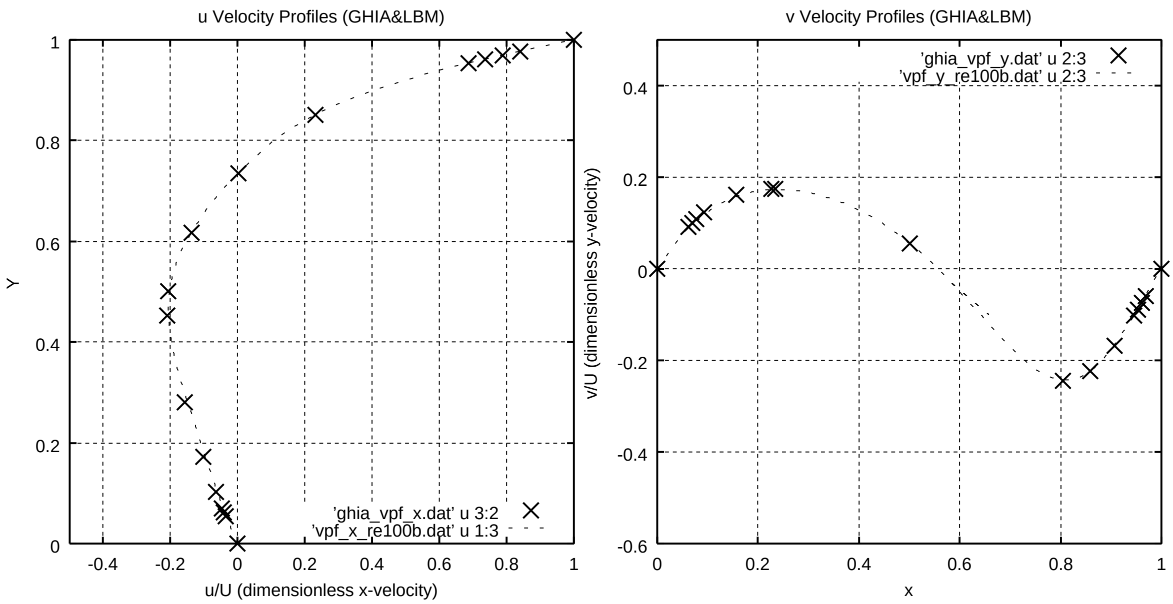


図 6.2: $Re = 100$ のキャビティー流れの速度プロファイル

表 6.1: 1 次元領域分割による結果（384x384）

PE	Times	Speedup	Efficiency
1	6663.44	1	-
2	3389.33	1.97	0.98
4	1730.09	3.85	0.96
8	873.09	7.63	0.95
16	450.67	14.78	0.90
32	239.26	27.85	0.88
64	138.79	48.01	0.77

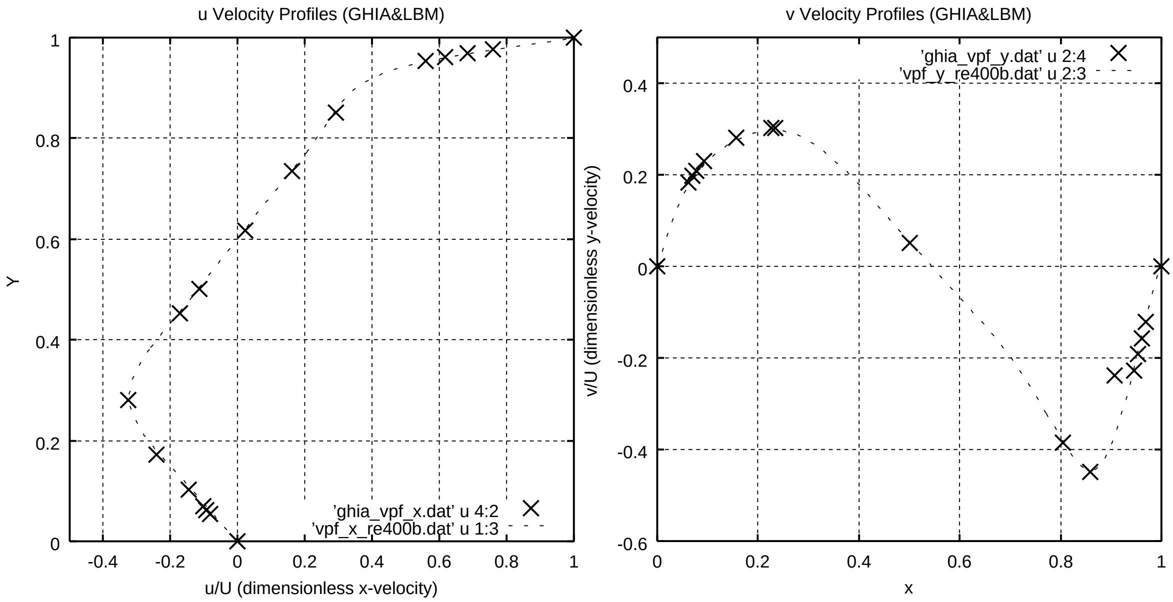


図 6.3: $Re = 400$ のキャビティー流れの速度プロファイル

T_{calc} と通信時間 T_{comm} の値の間に桁数の違いがあることや、このモデルに考慮されていないオーバーヘッドがあると考えられる。

実装の関係上、すべてのノードを使うことはできないが、仮に求められたパラメーターから考えると、表 6.6 、図 6.9 のようになると考えられる。グリッド 384×384、1 次元領域分割の場合以外は、64 ノード以上でもスピードの低下はあまり見られない。グリッド 384×384、1 次元領域分割の場合は計算時間に占める通信時間の割合が多くなったためだと考えられる。

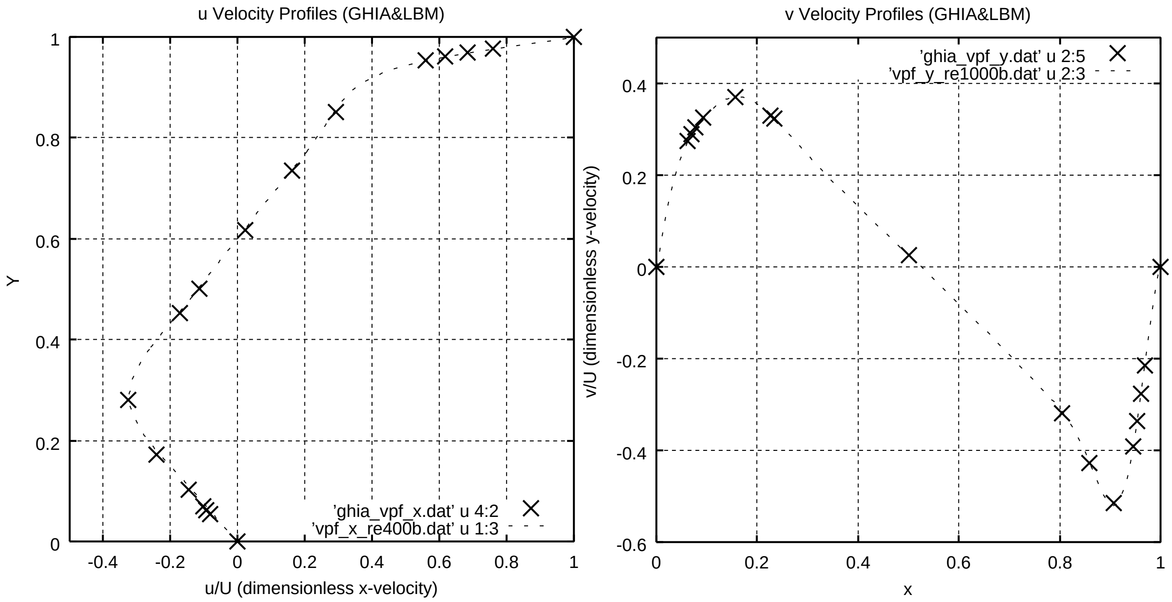


図 6.4: $Re = 1000$ のキャビティー流れの速度プロファイル

表 6.2: 1 次元領域分割による結果（768x768）

PE	Times	Speedup	Efficiency
1	30412.1	1.0	1.0
2	15295.5	1.99	0.99
4	7686.02	3.96	0.98
8	3879.72	7.84	0.97
16	2003.35	15.18	0.94
32	1052.57	28.89	0.90
64	553.37	54.96	0.85

表 6.3: 2 次元領域分割による結果（384x384）

PE	Times	Speedup	Efficiency
1	6663.44	1.0	1.0
4	1692.51	3.94	0.98
16	429.35	15.52	0.97
36	195.01	34.17	0.94
64	118.29	56.33	0.88

表 6.4: 2 次元領域分割による結果（768x768）

PE	Times	Speedup	Efficiency
1	30412.10	1.0	1.0
4	7634.52	3.98	0.99
16	1936.01	15.71	0.98
36	874.59	34.77	0.96
64	508.09	59.86	0.93

表 6.5: 各計算から導かれたパラメーター

計算	α	β	γ
1 次元領域分割（384x384）	4.38×10^{-3}	2.94×10^{-6}	4.50×10^{-6}
1 次元領域分割（768x784）	5.57×10^{-3}	5.79×10^{-6}	5.14×10^{-6}
2 次元領域分割（384x384）	4.81×10^{-4}	5.88×10^{-6}	4.51×10^{-6}
2 次元領域分割（768x784）	3.28×10^{-4}	4.00×10^{-6}	5.19×10^{-6}

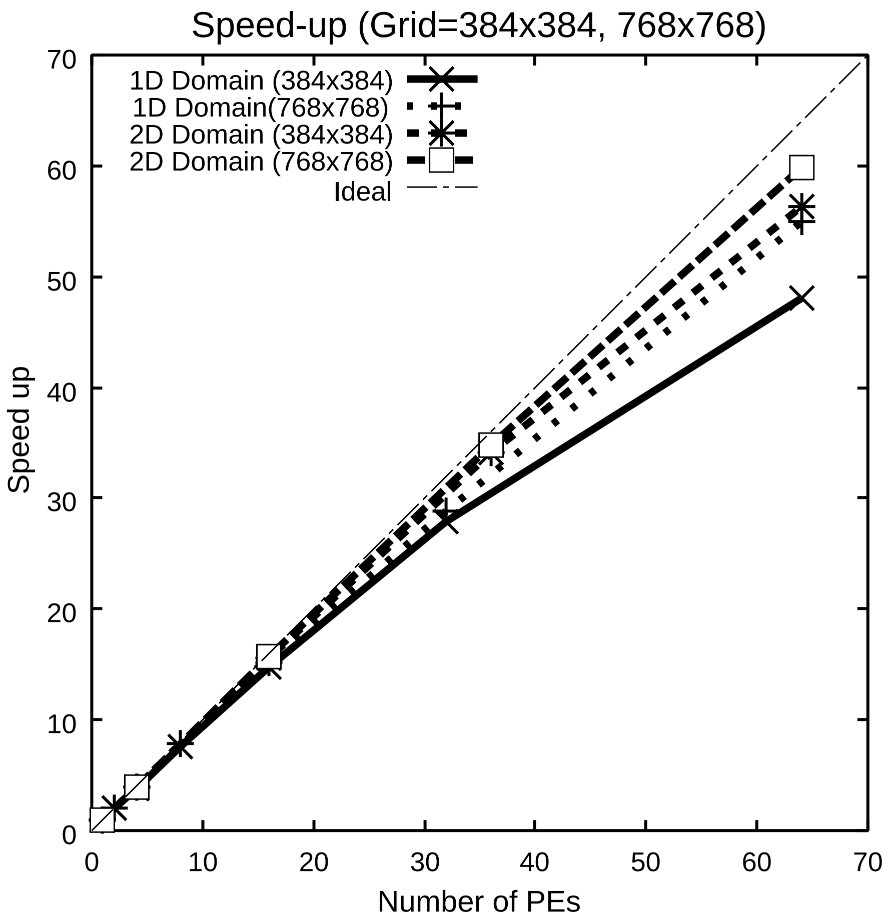


図 6.5: 格子点 256x256 と 512x512 でのスピードアップ

表 6.6: 実験結果からの予測

計算	Speed-up	Parallel Efficiency
1 次元領域分割（384x384, 128PEs）	68.78	0.54
1 次元領域分割（768x784, 128PEs）	90.20	0.70
2 次元領域分割（384x384, 121PEs(=11x11)）	93.48	0.77
2 次元領域分割（768x784, 121PEs）	98.75	0.82

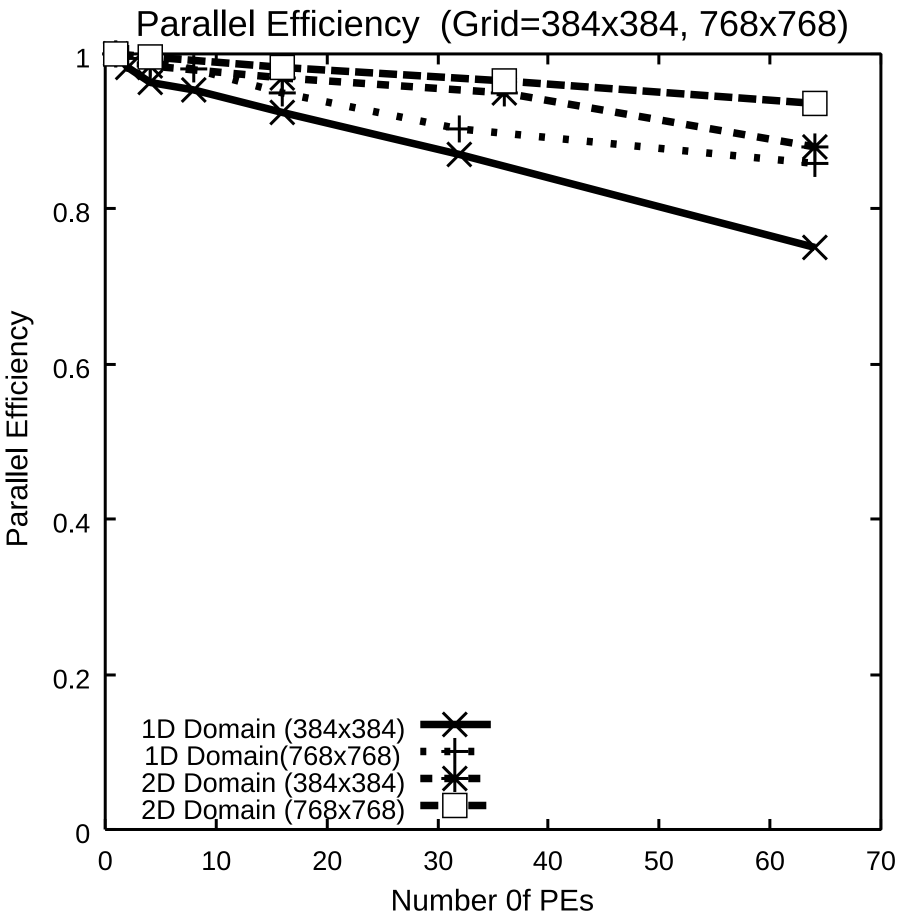


図 6.6: 格子点 256x256 と 512x512 での並列化効率

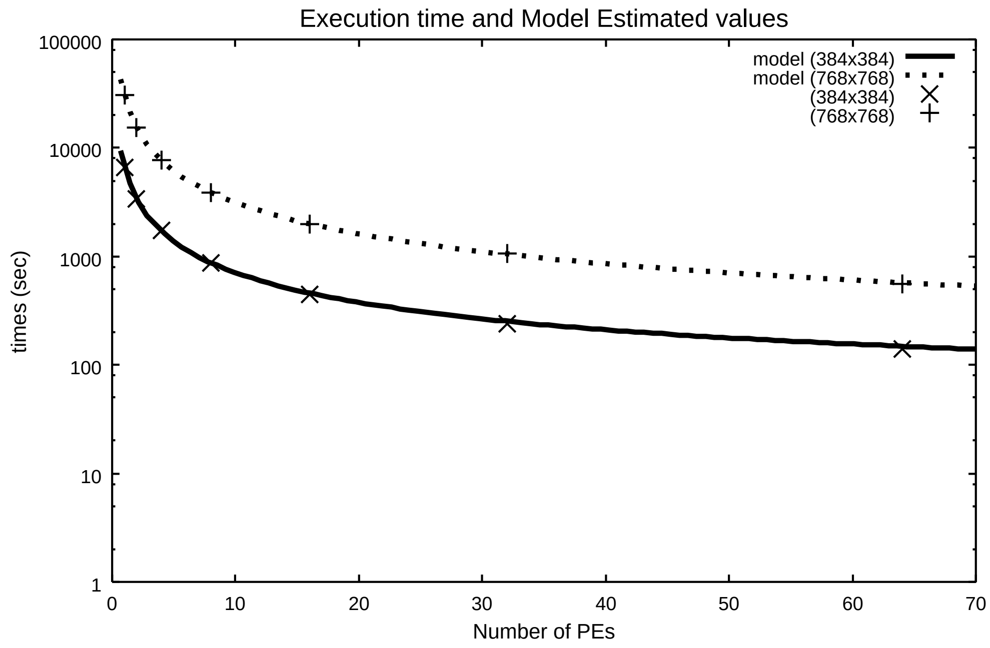


図 6.7: 実行時間とモデルによる見積もり（1 次元領域分割）

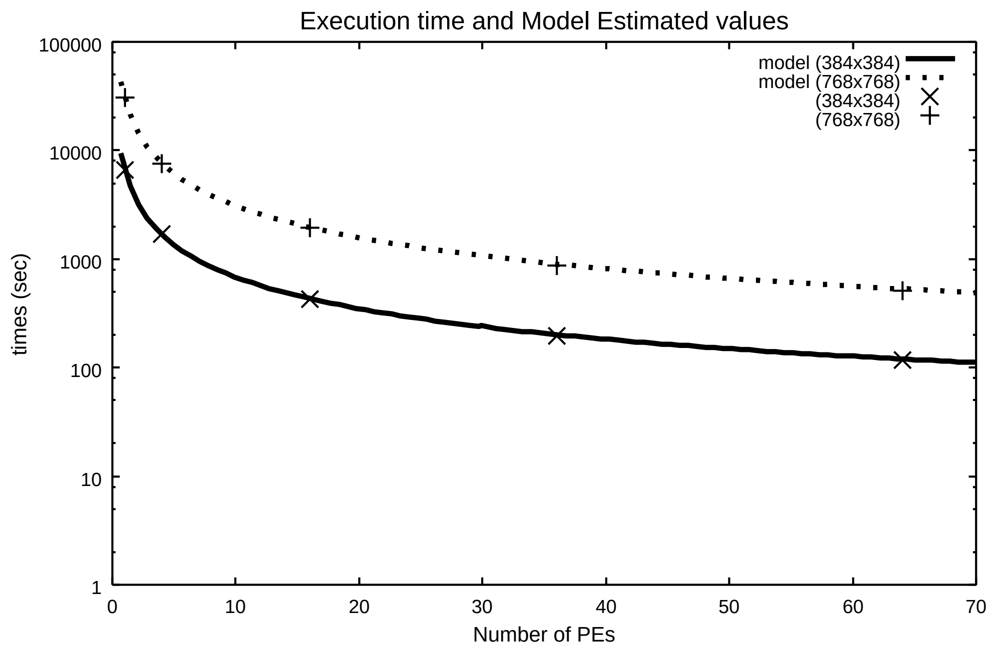


図 6.8: 実行時間とモデルによる見積もり（2 次元領域分割）

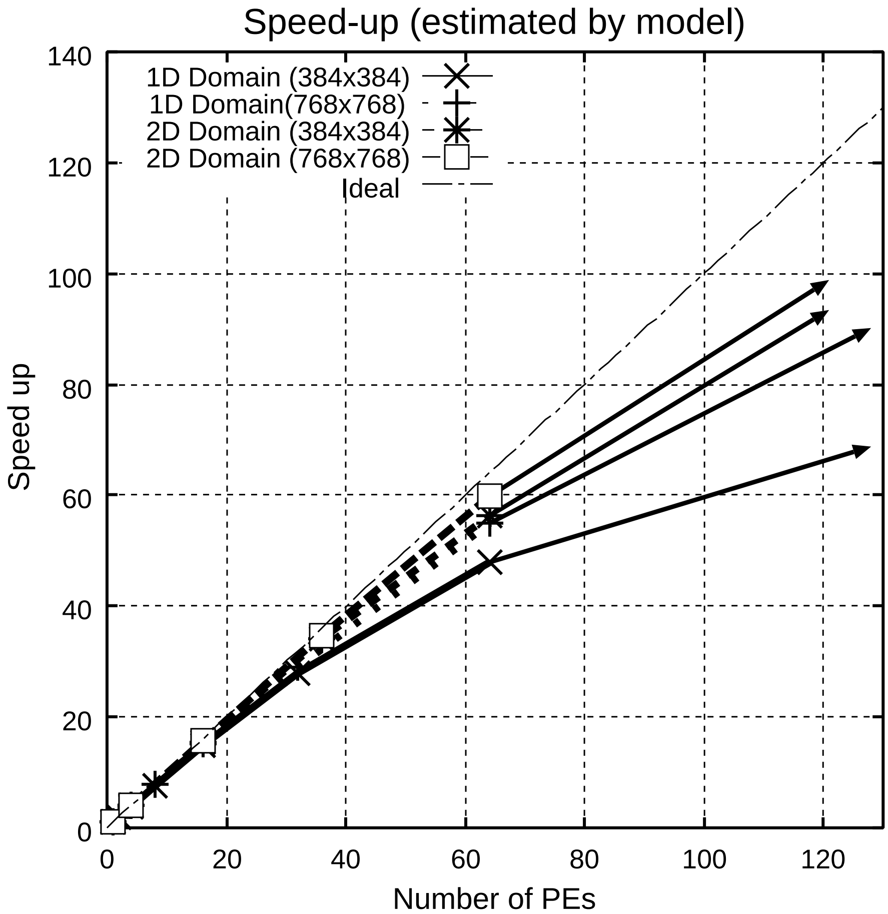


図 6.9: モデルによる速度加速の予想

第 7 章

まとめ

- 格子ボルツマン法の並列化をする時に生じる問題について検討した。並列化された格子ボルツマン法で計算を行ない数値力学的に正しい結果を得ることができた。

- 格子ボルツマン法を用いた 2 次元キャビティ流れのコードを並列計算機 SGI Cray T3E 上で開発した。計算領域を 1 次元に領域分割し並列化した計算では、グリッド 384×384、64 プロセッサで並列化効率 75.0%、グリッド 768×768 では、85.9% と、高い効率が得られた。また 2 次元に領域分割した計算では、64 プロセッサを使いそれぞれの大きさのグリッドに対して、88.0%、93.5%の効率を得ることができた。

- パフォーマンスモデルを用いた解析の結果、2 次元領域分割による並列化にはあまり速度向上の飽和が見られず、2 次元領域分割の特性を生かして計算できることが確認できた。

本研究では、格子ボルツマン法によるキャビティー流れの並列化を行なったが、並列化についてまだ十分な議論をしていない。今後さらに詳細に調査をする必要がある。

謝辞

本研究を進めるにあたり、貴重な御助言、御指導を賜わりました松澤照男教授に深く感謝致します。そして、お世話になった研究室の皆様に深く感謝致します。

参考文献

[1] U.Ghia, K.N.Ghia, C.T.Shin High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method Journal of Computational Physics 48, 387-411 (1982)

[2] Shuling Hou, Qisu Zou, Shiyi Chen, Gary Doolen, Allen C. Cogley Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method Journal of Computational Physics 118, 329-347 (1985)

[3] David R.Noble, John G. Georiadis, Richard O. Buckius, COMPARISON OF ACCRACY AND PERFORMANCE FOR LATTICE BOLTZMANN AND FINITE DIFFERENCE SIMULATIONS OF STEADY VISCOUS FLOW International Journal for numerical Methods in Fluids, 1-18 (1996)

[4] 中村和彦, 格子ボルツマン法に基づく概念を利用した熱流動解析アルゴリズムの研究開発 北陸先端科学技術大学院大学修士論文 (1998)

[5] 加藤恭義, 光成友孝, 築山洋, セルオートマトン法 森北出版 (1998)