

格子ボルツマン法を用いた 2 次元移流拡散方程式の数値スキームに関する研究

Study of the numerical scheme obtained from the lattice Boltzmann method for two-dimensional advection-diffusion equations

須賀伸介*

Shinsuke SUGA

*正会員 工博 国立環境研究所 社会環境システム研究領域 (〒 305-8506 茨城県つくば市小野川 16-2)

We investigate stability and accuracy of the numerical scheme obtained from the lattice Boltzmann method (LBM) for numerical solutions of two-dimensional advection-diffusion equations. A system of explicit finite difference equations derived from the the lattice Boltzmann equation (LBE) based on the Bhatnagar, Gross and Krook (BGK) model for a 9-velocity model gives the numerical scheme. The stability regions of the scheme in various cases of the relaxation parameter ω in the LBE are found by numerically solving the eigenvalue problems of the amplification matrix of the scheme corresponding to each cases. In order to investigate the accuracy of the scheme, a benchmark problem is solved, and the explicit scheme based on the LBM is compared with traditional explicit and implicit schemes. The results of the numerical experiments show that the explicit schemes based on the LBM demonstrate comparable accuracy to the bilinear finite element scheme if the parameters appeared in the scheme are set as values in the stability region.

Key Words : Lattice Boltzmann method, advection-diffusion equation, explicit scheme, stability, accuracy

1. はじめに

本研究では、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann method, 以後 LBM と書く) を用いた 2 次元移流拡散方程式の数値解法のための陽的差分スキームについて計算精度および数値的安定性の解析を行い、LBM が伝統的な陽的差分法に比べてかなり広い範囲の離散化パラメータに対して安定条件を満たし、さらに有限要素法などの陰的スキームと同程度に精度の良い数値解を生成することを示す。

LBM は 1980 年代後半からナビエ・ストークス方程式の数値解法として利用されるようになり^{1),2)}, 近年では移流拡散方程式で支配されるさまざまな物理現象, 例えば, 反応拡散^{3),4)}, 非等方性を考慮した移流拡散⁵⁾, 浸透流体⁶⁾等の数値シミュレーションにも適用されてきている⁷⁾。

流体の数値シミュレーションにとって LBM のメリットの一つは、計算容量、計算時間の面でコストの少なくてすむ陽的スキームを導くことである。Sterling and Chen⁸⁾は 2 次元ナビエ・ストークス方程式に対する LBM スキームの安定性について、Von Neumann による線形安定性解析の手法を用いて詳細な解析を行っている。拡散、移流拡散問題に対しても LBM が安定な数値スキームを与えることが報告されている。D. Wolf-Gladrow⁹⁾は定数拡散係数の拡散方程式に対する無条件

安定な陽的数値スキームを提案した。M.G. Ancona¹⁰⁾は流量の保存則を記述する方程式を離散化するための FL/LB (Fully-Lagrangian and Lattice-Boltzmann) 法を開発し、移流拡散方程式に関する差分方程式を導き、そのスキームが 1 次元問題に関しては Dufort-Frankel スキーム¹¹⁾と同値なスキームになることを示した。

本論文では、正方格子に切られた正方形領域内において 2 次元移流拡散方程式を扱う。LBM では格子内の各格子点において、拡散量に関連する仮想的な粒子を導入する。この仮想粒子 (以後特に断らない限り “粒子” と呼ぶ) はある規則に基づいて隣接する格子点に移動することができる。この規則を与えるのが格子速度モデルである。応用上最も広く用いられているのは、正方格子内の隣接する 8 つの格子点に移動可能で、なおかつ現在の位置にとどまることも許される、すなわち静止も含めて 9 方向に移動可能な D2Q9 モデルと呼ばれる格子速度モデルである。さらに LBM では、各方向に移動する粒子に対して粒子数に関連する分布関数と平衡分布関数が導入され、これらの関係を記述する格子ボルツマン方程式 (lattice Boltzmann equation, 以後 LBE と書く) が、各格子点における分布関数の満たす差分方程式を与える。最終的に、求めるべき拡散量の数値解は粒子の分布関数をすべての移動方向に関して加え合わせることによって計算される。

数値スキームを構成するためには上述の平衡分布関数

を具体的に求める必要がある。本論文における平衡分布関数は、多くの応用において用いられている Flekkø⁶⁾ が提案した手法に従い、拡散量と媒質流体の仮想粒子に対する平衡分布関数（ナヴィエ・ストークス方程式の数値解法に対する格子ボルツマン法で採用される）との積によって構成される。従来の応用例を見ると、この流体粒子に関する平衡分布関数は与えられた移流速度場に関する 1 次または 2 次の関数が用いられている。

さて、上述したような手続きによって、様々な分野において LBM による 2 次元移流拡散問題のシミュレーションが行われてきているが、2 次元スキームの計算精度や数値的安定性の詳細な報告はきわめて少ないのが現状であるといえる。Van der Sman and Ernst¹²⁾ は 2 次元移流拡散方程式に対して、静止、東西南北の 5 種類の移動が許される粒子速度モデルを適用した。ここでは、不規則な矩形格子内の格子点における仮想粒子に対して平衡分布関数が提案され、対応する 1 次元スキームの計算精度が報告されている。Suga¹³⁾ は、正方格子に対して D2Q9 モデルも含めた 3 種類の粒子速度モデルに対応する 3 つの数値スキームの数値的安定性を、解析的および数値的に詳細に研究した。ここでは、移流速度場の流体粒子に対して 1 次の平衡分布関数が採用されるスキームについて解析が行われ、応用上広く採用されている D2Q9 速度モデルに 1 次の平衡分布関数を採用するスキームでは、ペクレ数が 100 を越えるパラメータ設定を行うと、安定で精度の良い数値解を与えるクーラン数の範囲が非常に狭くなることを数値実験を通して示した。

そこで本論文では、Suga¹³⁾ の研究結果を踏まえて、定数係数当方性 2 次元移流拡散方程式を対象とした D2Q9 速度モデルに基づく LBM による数値スキームにおいて、移流速度場に 2 次の平衡分布関数を用いることによって、1 次の平衡分布関数を用いたスキームに比べて安定領域に変化が見られるか、ペクレ数が 100 を越える問題に対してより広い範囲のクーラン数を設定した場合に精度の良い数値解を生成可能かどうかを調べることを目的とする。上述の 2 次の平衡分布関数を用いた数値シミュレーションに関してもいくつかの報告があるが^{3),4)}、スキームの安定性および計算精度は報告されていない。

本論文は以下のように構成される。2 章では移流拡散問題への LBM の適用と本論文で考える 2 次元スキームについて述べる。3 章では数値スキームに対して離散フーリエ変換¹⁴⁾ による安定性解析を行い、スキームの増幅行列の固有値を数値的に求めることによって、安定条件を求め、1 次の平衡分布関数に対するスキームの条件¹³⁾ と比較を行う。4 章では数値解と解析解の比較を行うことによってスキームの精度を調べる。3 章、4 章では、伝統的に用いられている陽的解法との間で安定条件、計算精度の比較も行い、特に 4 章では双線

形要素を用いた有限要素法による陰的解法と LBM による陽的解法の比較を通して、LBM によるスキームの有効性を明らかにする。最後に 5 章ではまとめと結論を述べる。

2. LBM による数値スキーム

この章では、正方格子内の格子点における定数拡散係数 2 次元移流拡散方程式に対する LBM の適用について述べる。今、 $\mathbf{x}$ を (jd, kd) , $(j, k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots)$ を座標値とする格子内の格子点とする。このとき $T(\mathbf{x}, t)$ を時刻 t 、位置 $\mathbf{x}$ において、与えられた速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u_x, u_y)$ で移流される媒質中の拡散量（例えば物質の濃度など）とすると、LBM では、 $\mathbf{x}$ における T の近似解 $\bar{T}$ を以下の式によって計算する。

$$\bar{T}(\mathbf{x}, t) = \sum_m T_m(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

ここで T_m は $\mathbf{x}$ から隣接する格子点に速度 $\mathbf{c}_m$ で移動する仮想粒子の分布関数である。本論文では、粒子は以下のような速度モデル $\mathbf{c}_m$ にしたがって隣接する格子点に移動可能とし、静止も許される。

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_0 &= (0, 0), \\ \mathbf{c}_1 &= (c, 0), \mathbf{c}_2 = (0, c), \\ \mathbf{c}_3 &= (-c, 0), \mathbf{c}_4 = (0, -c), \\ \mathbf{c}_5 &= (c, c), \mathbf{c}_6 = (-c, c), \\ \mathbf{c}_7 &= (-c, -c), \mathbf{c}_8 = (c, -c). \end{aligned}$$

ここで、 $c = d/\Delta t$ である。上記の速度モデルは応用上広く採用されており、D2Q9 モデルと呼ばれる。 $T_m(\mathbf{x}, t)$ の時間発展は BGK (Bhatnagar, Gross and Krook) モデルに基づく以下の LBE^{5),15)} で与えられる。

$$\begin{aligned} T_m(\mathbf{x} + \mathbf{c}_m \Delta t, t + \Delta t) \\ = T_m(\mathbf{x}, t) - \omega(T_m(\mathbf{x}, t) - T_m^{eq}(\mathbf{x}, t)), \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 $T_m^{eq}(\mathbf{x}, t)$ は速度 $\mathbf{c}_m = (c_{m1}, c_{m2})$ で移動する粒子に関する平衡分布関数である。粒子の衝突によって生成される分布関数は式 (2) の右辺第 2 項で近似され、 ω は緩和パラメータ (relaxation parameter) と呼ばれ、 $0 < \omega < 2$ を満たす。式 (2) における平衡分布関数 T_m^{eq} は移流拡散問題に対して Flekkø⁶⁾ によって提案された以下の形で与えられる。

$$T_m^{eq}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{T}{\rho}\right) F_m^{eq}(\mathbf{u}(\mathbf{x}), t). \quad (3)$$

ここで、 F_m^{eq} は LBM によるナヴィエ・ストークス方程式の数値解法で用いられる流体粒子の平衡分布関数、 ρ は媒質の密度である。本研究では、1 章で述べたように移流速度 $\mathbf{u}$ について 2 次の項までを含んだ F_m^{eq} を採用する数値スキームを考える。このとき、 F_m^{eq} は以下

のように与えられる¹⁵⁾.

$$F_m^{eq}(x, t) = \rho w_m \left(1 + 3 \frac{c_m \cdot u}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(c_m \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{|u|^2}{c^2} \right) \quad (4)$$

ここで, $w_0 = 4/9$, $w_m = 1/9$ ($m = 1, 2, 3, 4$), $w_m = 1/36$ ($m = 5, 6, 7, 8$) である. 式 (2) で与えられる各移動方向 m に関する LBE に対して Chapman - Enskog 展開を適用し, m について和をとることにより以下の移流拡散方程式が近似的に成り立つことが示される⁶⁾.

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(Tu) &= \Delta t \sum_m \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) w_m \partial_{x_\alpha} \partial_{x_\beta} c_{m\alpha} c_{m\beta} T \\ &= \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

ここで, 添字 α, β は座標成分を表し, α, β について総和をとる. また, κ は拡散係数で, 以下のような関係を満足する.

$$\kappa = \Delta t \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \sum_m w_m c_{m\alpha} c_{m\beta}. \quad (6)$$

式 (2) から格子点 x における T_m に関する陽的差分スキームを得ることができる. 今 $T_m(jd, kd, n\Delta t)$ を $U_m^n(j, k)$ で表す. 式 (3) を式 (2) に代入し, T を式 (1) の左辺の $\bar{T}$ で置き換え, さらに式 (4) を用いることによって, 分布関数 T_m についての次の連立差分方程式を得る.

$$\begin{aligned} U_m^{n+1}(j, k) &= (1 - \omega) U_m^n(j - c_{m1}, k - c_{m2}) \\ &\quad + \omega \sum_l U_l^n(j - c_{m1}, k - c_{m2}) D_m^n(j, k). \end{aligned} \quad (7)$$

$(m = 0, 1, \dots, 8).$

ここで, $D_m^n(j, k) = F_m^{eq}(j\Delta x, k\Delta y, n\Delta t)/\rho$ である. 上述した Chapman - Enskog 展開による議論によって, 連立差分方程式 (7) が 2 次元移流拡散方程式のひとつの数値スキームを与えることになる.

3. スキームの安定性解析

ここでは, 連立差分方程式 (7) で与えられるスキームの安定性を離散フーリエ変換¹⁴⁾を用いて解析する. 式 (7) の離散フーリエ変換をとると,

$$\begin{aligned} \hat{U}_{m,j,k}^{n+1}(\xi, \eta) &= \sum_l \{ (1 - \omega) \delta_{ml} + \omega D_m^n(j, k) \} \\ &\quad \cdot e^{-i(c_{m1}\xi + c_{m2}\eta)} \hat{U}_{l,j,k}^n(\xi, \eta). \end{aligned} \quad (8)$$

ここで, $\hat{U}_{m,j,k}^n(\xi, \eta)$ ($-\pi \leq \xi, \eta \leq \pi$) は $U_m^{n+1}(j, k)$ の離散フーリエ変換である. 式 (8) は次の行列方程式を与える.

$$\hat{U}_{j,k}^{n+1} = G(\xi, \eta) \hat{U}_{j,k}^n, \quad (9)$$

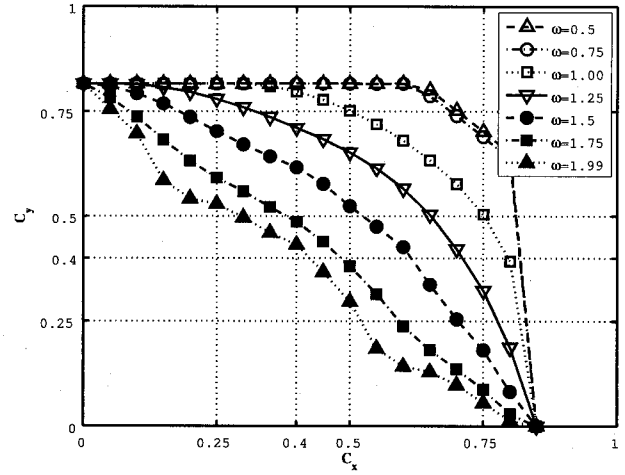


図-1 種々の緩和パラメータ ω に対して数値的な固有値解析から得られる安定領域の境界.

ここで, ベクトル $\hat{U}_{j,k}^n$ は $\hat{U}_{m,j,k}^n$ から成り, $G(\xi, \eta)$ は式 (7) で与えられる差分スキームの増幅行列と呼ばれる.

さて, $\sigma(A)$ を行列 A のスペクトル半径とすると, 連立差分方程式 (7) で与えられるスキームが安定な数値解を生成するための一つの十分条件は, $-\pi \leq \xi, \eta \leq \pi$ なるすべての ξ, η に対して次の 2 条件を同時に満たすことである¹⁶⁾.

- 1) $\sigma(G(\xi, \eta)) \leq 1$.
- 2) G の固有値 λ で $|\lambda| = 1$ を満たす固有値の数は重複度を含めてたかだか一つである.

そこで, 増幅行列の要素に現れるパラメータがこの十分条件を満足する範囲 (以下, 安定領域または安定条件と呼ぶ) を求めて行く. 本研究で考えているスキームの安定領域は緩和パラメータ ω とクーラン数 $C_x = u_x \Delta t / d$, $C_y = u_y \Delta t / d$ に依存している. スキームの安定領域を考察するためにこれらのパラメータを変化させながら増幅行列の固有値問題を数値的に解く. なお, 以下の解析においては, 移流速度は場所によらず一様で, $u_x = u_y$ とした. また, $0 < \omega < 0.5$ の場合には LBM による拡散方程式の数値スキームの精度が悪くなることが報告されているので¹⁷⁾, $0.5 \leq \omega < 2$ の範囲で固有値解析を行った.

なお, 本論文における数値計算では PC 上で MATLAB を利用した.

図-1 には (C_x, C_y) 平面において, 安定領域の境界がいくつかの緩和パラメータ ω の値に関して示されている. 数値スキームの境界上および境界内部 ($C_x = C_y = 0$ を含むほうの領域) が各 ω が設定されたときのスキームに対する安定領域である. 安定領域は座標軸に関して対称であるから, 図は第一象限においてのみ示した.

図-1 からわかるように, 緩和パラメータが $\omega = 0.5, 0.75$ の場合の安定領域はほぼ一致し, ω の値が増

表-1 数値実験におけるペクレ数 Pe , クーラン数 C_x , 緩和パラメータ ω の対応関係

Pe	緩和パラメータ ω				
	$C_x = 0.5$	$C_x = 0.4$	$C_x = 0.3$	$C_x = 0.2$	$C_x = 0.1$
1	0.5	0.588	0.714	0.909	1.25
10	1.539	1.613	1.695	1.786	1.887
100	1.942	1.953	1.965	1.976	1.988
1000	1.994	1.995	1.996	1.998	1.999

表-2 時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の ℓ_2 誤差

Pe	スキーム	ℓ_2 誤差				
		$C_x = 0.5$	$C_x = 0.4$	$C_x = 0.3$	$C_x = 0.2$	$C_x = 0.1$
1	LBM	0.090	0.034	0.011	0.002	0.002
1	D.F.	1.231	0.420	0.179	0.069	0.022
1	FTCS	発散	発散	発散	0.089	0.042
10	LBM	0.022	0.017	0.012	0.008	0.008
10	D.F.	0.333	0.250	0.219	0.208	0.202
10	FTCS	発散	発散	発散	発散	0.397
100	LBM	発散	0.100	0.054	0.030	0.020
100	D.F.	0.344	0.377	0.401	0.416	0.420
100	FTCS	発散	発散	発散	発散	発散
1000	LBM	発散	0.103	0.062	0.034	0.021
1000	D.F.	0.377	0.411	0.437	0.454	0.459
1000	FTCS	発散	発散	発散	発散	発散

加するに従って安定領域は狭くなって行く。

クーラン数が $C_x = 0$ の時の C_y の安定条件に着目すると, 緩和パラメータ ω の値によらず C_y の安定領域の上限値は一致しているように見える. $C_y = 0$ の場合の C_x に関する上限値についても同様である. 数値実験の結果ではこれらのクーラン数の上限値の値はほぼ 0.8165 であった. 一方付録に示すように, 緩和パラメータが $\omega = 1$ の場合には, クーラン数が $C_x = 0$ または $C_y = 0$ に対する安定条件はそれぞれ $C_x^2 \leq 2/3$ または $C_y^2 \leq 2/3$ であることを解析的に示すことができる. $\sqrt{2/3} \approx 0.8165$ であるから, このスキームの $C_x = 0$ または $C_y = 0$ の場合の安定条件はそれぞれ $|C_y| \leq \sqrt{2/3}$ または $|C_x| \leq \sqrt{2/3}$ と表現できる.

ところで, 移流速度場に流体粒子の 1 次の平衡分布関数を採用するスキームの安定境界は, $\omega = 1$ に関して $C_x^2 + C_y^2 = 1/3$, $\omega = 1.99$ に関してはほぼ $|C_x| + |C_y| = 1/3$ に一致し, $0.5 \leq \omega < 1$ では $\omega = 1$ の場合にほぼ一致することが報告されている¹³⁾. 図-1 に示した結果は 2 次の平衡分布関数を移流速度場に適用することによって, スキームの安定領域がかなり広くなることを示している.

次に図-1 の結果を陽的差分スキームである FTCS スキーム (空間的には中心差分, 時間的には前進差分を

用いる), *Dufort - Frankel* スキーム (時間に関して 3 ステップの値を用いて差分近似を行う, 以後 DF スキームと書く) と比較しよう. 本論文では正方格子上で当方性の拡散を考えているので, FTCS スキームの安定条件は

$$s \leq \frac{1}{4} \quad \text{かつ} \quad C_x^2 + C_y^2 \leq 2s \quad (10)$$

である¹⁷⁾. ただし, $s = \kappa \Delta t / d^2$ である. また, DF スキームについては

$$C_x^2 + C_y^2 \leq \frac{1}{2} \quad (11)$$

である¹⁸⁾. パラメータ s と ω の関係は式 (6) から,

$$\omega = \frac{1}{3s + 0.5} \quad (12)$$

と表すことができる. FTCS スキームのパラメータ s に関する安定条件, $s \leq 1/4$, は $0.8 \leq \omega < 2$ に対応する. また, FTCS スキームのクーラン数に関する安定領域は LBM によるスキーム (以後 LBM スキームと書く) に比べてかなり狭くなっていることがわかる. 実際, $s = 1/4$ のとき, FTCS スキームの安定条件 $C_x^2 + C_y^2 \leq 1/2$ は, 対応する緩和パラメータ $\omega = 0.8$ の場合の LBM スキームの安定領域に完全に含まれる. パラメータ s が 0 に近づくに従って FTCS スキームの

クーラン数に関する安定領域は狭くなり、LBMスキームの $\omega = 1.99$ に対応する領域に完全に含まれる。

一方、DFスキームのクーラン数に関する安定領域の特徴は離散化パラメータ s の値に依存していないことである。LBMスキームと比較すると、緩和パラメータが $\omega \leq 1.5$ に関するLBMスキームの安定領域は、DFスキームのそれ(半径 $\sqrt{1/2}$ の円周および内部)を含んでいる。緩和パラメータが $\omega \geq 1.75$ の場合には、クーラン数 C_x (C_y)の値がゼロに近いときには、 C_y (C_x)の安定領域はLBMスキームの方が広がっている。

最後に以下の点に注意しておこう。すなわち、図-1はクーラン数が $C_x = C_y = 0$ の場合、すなわち純粹の拡散問題に対するLBMスキームは緩和パラメータ ω が $0 < \omega < 2$ について安定である。

4. 計算精度

ここでは、本論文で考えているLBMスキームによる数値解と解析解を比較することによって、スキームの計算精度を調べる。また、移流拡散方程式の数値解法として従来から伝統的に用いられている陽解法およびクランク・ニコルソン法に基づく陰解法との比較を行う。2次元のベンチマーク問題として以下の初期条件のもとでの2次元移流拡散方程式を用いる。

$$T(x, 0) = \mu_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma_0^2}\right). \quad (13)$$

この問題の解析解は以下のように与えられる。

$$T(x, t) = \frac{\mu_0 \sigma_0^2}{\sigma_0 + 2\kappa t} \exp\left(-\frac{(x - u_x t)^2 + (y - u_y t)^2}{2(\sigma_0^2 + 2\kappa t)}\right). \quad (14)$$

数値解 $\bar{T}(jd, kd, n\Delta t)$ は格子点 (jd, kd) 、 $-20 \leq j, k \leq 80$ 、において $d = 1$ として計算される。境界値は解析解の値が与えられる。本論文におけるLBMスキームの境界条件はInamuro et al^[20]によって提案された手法によって与えた。移流速度 u は場所によらずに一律で $u_x = u_y$ とする。時間ステップは $\Delta t = 1$ 、初期条件に関して $\mu_0 = 100$ 、 $\sigma_0^2 = 8$ とする。

数値実験ではペクレ数 $Pe = u_x d / \kappa$ とスキームの精度との関係を調べる。ペクレ数は $Pe = 1, 10, 100, 1000$ とする。各ペクレ数に対して、いくつかのクーラン数の値を設定する。前の章で議論したLBMスキームの安定領域を考慮して $C_x = 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1$ を採用する。表-1には、以下の数値計算で採用するペクレ数、クーラン数、緩和パラメータ ω の間の関係を示す。計算精度を考察するために以下の式で与えられる相対的な ℓ_2 誤差(以後 ℓ_2 誤差と呼ぶ)を用いる。

$$\ell_2 = \sqrt{\frac{\sum_{j,k} (T(jd, kd, n\Delta t) - \bar{T}(jd, kd, n\Delta t))^2}{\sum_{j,k} T(jd, kd, n\Delta t)^2}}. \quad (15)$$

4.1 陽解法との比較

表-2には、LBM、2種類の陽解法FTCS、DFの各スキームによって計算された時刻 $t = 40/C_x$ における数値解の ℓ_2 誤差を示す。まず、ペクレ数が $Pe = 1, 10$ の場合に着目しよう。このとき、表-1に示したパラメータの対応関係から、5種類のクーラン数と対応する緩和パラメータ ω は図-1が示す安定条件を満たしている。DFスキームにおいてもこれらのクーラン数は安定条件を満足するが、FTCSスキームにおいては、安定な数値解を与えるクーラン数の範囲が狭くなっていることが表-2からもわかる。なお、表-2および表-3における「発散」は数値解がオーバーフローしていることを示す。また ℓ_2 誤差を比較すると、LBMスキームは各場合においてDFスキームよりも一桁($Pe = 10, C_x = 0.1, 0.2$ の場合には二桁)良い精度の数値解を生成していることがわかる。FTCSスキームによる安定な数値解との比較においても同様である。図-2および図-3には、時刻 $t = 40/C_x$ に計算領域内の直線 $y = x$ 上の格子点において得られる3つのスキームによる数値解の表示例を示す。図において、実線は解析解を点線は初期関数を示し、数値解はスキーム毎に別々のマーカで示した。ペクレ数が $Pe = 1$ 、クーラン数が $C_x = 0.1$ の場合(図-2)は3つのスキームとも安定な数値解を生成しているが、LBMスキームの数値解が解析解と最も良く一致していることを確認することができる。なお、図-2では数値解を見やすくするために縦軸を調整した。また、図-3に示したペクレ数と緩和パラメータがそれぞれ $Pe = 10, C_x = 0.1$ の場合において、LBM、DF両スキームの数値解と解析解との一致を見ると、LBMスキームの方がはるかによい一致を示していることがわかる。

次に、ペクレ数が $Pe = 100, 1000$ の場合を見ると、クーラン数が $C_x = 0.5$ においてはLBMスキームの数値解はオーバーフローする。実際、図-1から $C_x = 0.5$ と対応する緩和パラメータ ω は安定条件を満たしていないことがわかる。そのほかのクーラン数に対する ℓ_2 誤差を比較すると、LBMスキームの数値解はDFスキームよりも良い精度の数値解を生成し、特に $C_x = 0.4$ 以外のクーラン数の場合ではLBMスキームの方が一桁良い精度を示している。これは、図-4に示したLBM、DFの各スキームによる数値解の表示例($Pe = 1000, C_x = 0.3$)からもわかる。LBMスキームはDFスキームの数値解に見られるような振動解を含まない、解析解と良く一致する数値解を生成している。

ところで、表-2では時刻 $t = 40/C_x$ における ℓ_2 誤差を示したが、LBMスキームによる時刻 $t = 80/C_x$ における結果について簡単に述べておこう。表-2に示したパラメータの組みの多くの場合、上記の2つの時刻における ℓ_2 誤差はほぼ一致したが、時刻 $t = 80/C_x$ のときの方が大きな誤差を生ずる場合は以下の通りである。す

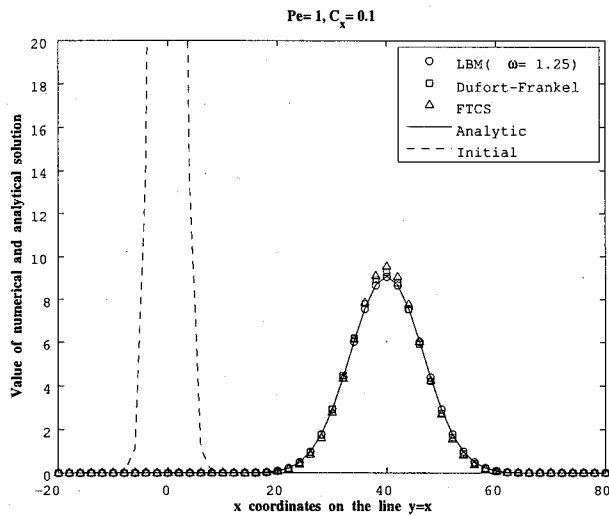


図-2 直線 $y = x$ 上の格子点で時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の表示 ($Pe = 1, C_x = 0.1$)。実線は解析解、点線は初期関数を示す。

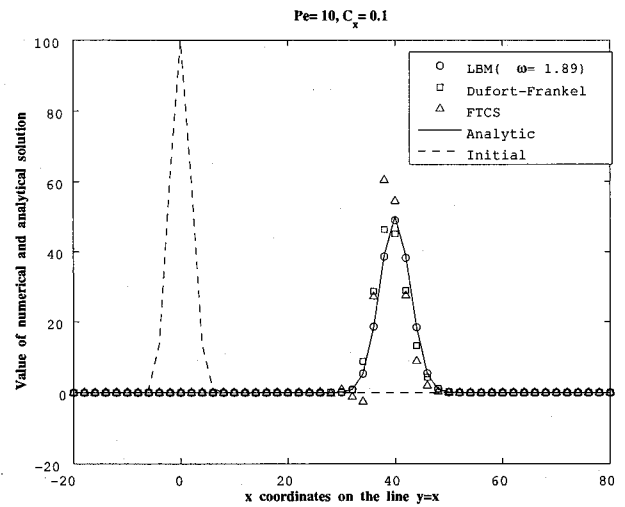


図-3 直線 $y = x$ 上の格子点で時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の表示 ($Pe = 10, C_x = 0.1$)。実線は解析解、点線は初期関数を示す。

なわち、ペクレ数とクーラン数が $Pe = 100, C_x = 0.4$ の場合の l_2 誤差は 0.148, $Pe = 1000, C_x = 0.4$ の場合は 0.187, $Pe = 1000, C_x = 0.3$ の場合が 0.115 であった。

最後に、 $t = 40/C_x$ における計算精度について、流体粒子に関して 1 次の平衡分布関数を採用した D2Q9 モデルに基づく LBM スキーム (以後 1 次スキームと呼ぶ) と今回の 2 次の平衡分布関数によるスキーム (以後 2 次スキームと呼ぶ) とを比較しておこう。まず、前にも述べたように 1 次スキームは 2 次スキームよりも安定領域が狭く、1 次スキームは $C_x = 0.1$ の場合においてのみ 4 種類のペクレ数に対して安定で、 $C_x = 0.1, Pe = 1$ の場合の l_2 誤差は 0.022 (2 次スキームの場合より一桁大きい)、 $C_x = 0.1$ と他のペクレ数の組み合わせでは 2 次スキームと等しいオーダーの l_2 誤差を示した。 $C_x = 0.2$ のときには、ペクレ数が $Pe = 1, Pe = 10$ に対して 1 次スキームの l_2 誤差はそれぞれ 0.115, 0.051 であり、2 次スキームの方が 1 桁以上良い精度を示している。またこのとき $Pe = 100, 1000$ に対して 1 次スキームは発散する。 $C_x \geq 0.3$ では $Pe = 10$ の場合も 1 次スキームは発散し、1 次スキームの安定条件を満たす $Pe = 1$ の場合の l_2 誤差は 2 次スキームと比べて 2 桁以上大きな値を示す。したがって、ここで述べた数値実験からは、クーラン数が $C_x \geq 0.2$ の場合には 2 次スキームの方が 1 スキームよりも計算精度が良く有効な手法であると言える。

以上の数値実験結果から、2 次元移流拡散方程式に対する LBM に基づく陽的 2 次スキームは安定領域内のパラメータが設定されれば、FTCS スキーム、離散パラメータに依存しない安定領域を有する DF スキームよりも計算精度の良い数値解を生成していることが示された。

4.2 陰解法との比較

ここでは、時間に関して後退差分、空間に関して中心差分を用いる差分スキーム、双線形要素による有限要素法²¹⁾に基づくスキームに、それぞれクランク・ニコルソン法による近似的陰解法 (以後前者を FDM-CN、後者を FEM と書く) と LBM に基づく陽的スキームとの比較を行う。表-3 には、各スキームによって計算された時刻 $t = 40/C_x$ における数値解の l_2 誤差を示す。まず、ペクレ数が $Pe = 1$ の場合を見て行こう。表-3 からわかるようにクーラン数が $C_x = 0.4, 0.5$ の時には、LBM スキームの l_2 誤差は 2 つの陰解法の l_2 誤差より大きな値を示す。また、図-5 の表示例に示すように、クーラン数が $C_x = 0.5$ の結果では、2 つの陰解法による数値解の方が LBM スキームよりも解析解に良く一致している。なお、図-5 では数値解を見やすくするために縦軸を調整した。しかしながら、クーラン数が小さくなるに連れて LBM スキームの精度は向上し、 $C_x = 0.2, 0.1$ の場合では、FDM-CN スキームの精度を上回り、FEM スキームと同程度の計算精度の数値解を生成していることがわかる。

ペクレ数が $Pe = 10$ の場合では、数値実験で採用したすべてのクーラン数に関して、LBM スキームの精度は FDM-CN スキームを一桁上回り、FEM スキームと同程度である。

最後に、ペクレ数が $Pe = 100, 1000$ で、クーラン数が $C_x = 0.5$ ののぞく値の場合に着目しよう。表-3 からわかるようにクーラン数が $C_x = 0.1, 0.2, 0.3$ の場合には、ペクレ数が $Pe = 10$ の時と同様に LBM, FEM 両スキームの精度は FDM-CN スキームを一桁上回り、ほぼ一致している。クーラン数が $C_x = 0.4$ の場合には LBM スキームの l_2 誤差は前の 3 つのクーラン数の場合よりも 1 桁大きくなるが、クーラン数の

表-3 時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の ℓ_2 誤差

Pe	スキーム	ℓ_2 誤差				
		$C_x = 0.5$	$C_x = 0.4$	$C_x = 0.3$	$C_x = 0.2$	$C_x = 0.1$
1	LBM	0.090	0.034	0.011	0.002	0.002
1	FDM-CN	0.019	0.018	0.017	0.016	0.016
1	FEM	0.004	0.003	0.002	0.002	0.002
10	LBM	0.041	0.030	0.021	0.015	0.014
10	FDM-CN	0.231	0.217	0.207	0.200	0.196
10	FEM	0.051	0.033	0.019	0.010	0.006
100	LBM	発散	0.100	0.054	0.030	0.020
100	FDM-CN	0.470	0.451	0.435	0.424	0.417
100	FEM	0.122	0.082	0.049	0.025	0.012
1000	LBM	発散	0.103	0.062	0.034	0.021
1000	FDM-CN	0.511	0.492	0.475	0.464	0.457
1000	FEM	0.138	0.093	0.056	0.029	0.014

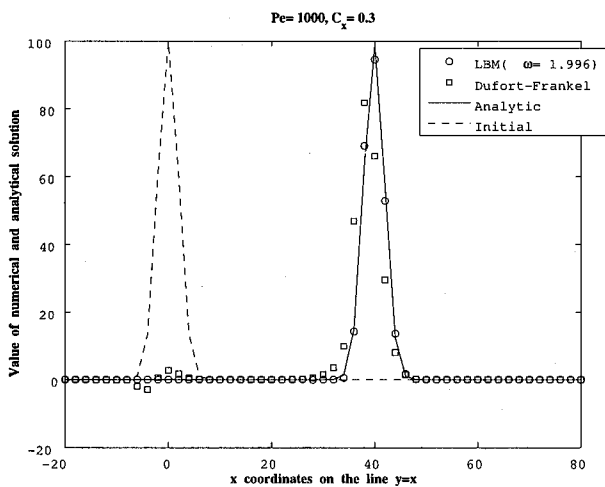


図-4 直線 $y = x$ 上の格子点で時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の表示 ($Pe = 1000$, $C_x = 0.3$)。実線は解析解，点線は初期関数を示す。

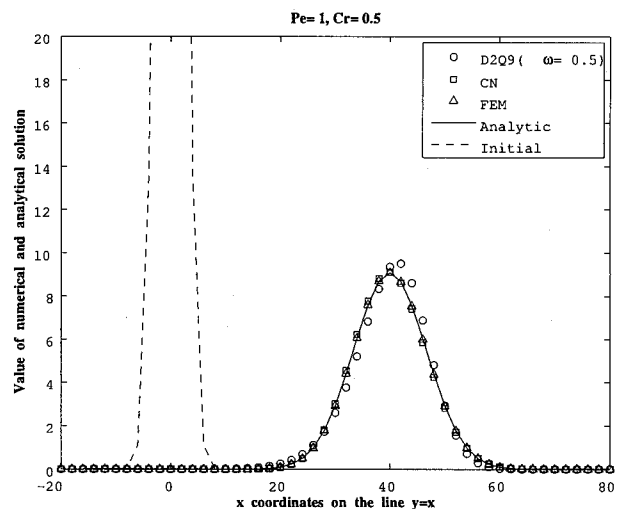


図-5 直線 $y = x$ 上の格子点で時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の表示 ($Pe = 1$, $C_x = 0.5$)。実線は解析解，点線は初期関数を示す。

増加に伴って ℓ_2 誤差が増大する傾向は FEM スキームの場合と一致している。図-6 および図-7 にそれぞれ、ペクレ数とクーラン数が $Pe = 100$, $C_x = 0.4$ および $Pe = 1000$, $C_x = 0.4$ の場合の数値解を示す。これらの図から、LBM スキームの数値解は最大値の近傍で FEM スキームの数値解よりも精度が劣っていることが見て取れる。しかしながら LBM スキームは FDM-CN スキームの数値解に含まれるような振動解を生成せず、最大値の近傍を除いては、解析解と良く一致する数値解を生成していることがわかる。

4.3 考察

移流拡散方程式に対する陽的数値スキームは、非常に厳しい制約の下でパラメータが設定されたときにの

み精度の良い安定な数値解を生成するために、実用的観点からは、連立一次方程式を直接解法あるいは反復解法で解くための係数行列の記憶容量、および計算時間の増大にもかかわらず、陰的スキームが広く用いられてきているのが現状といえよう。DF スキームは FTCS スキームに比べるとクーラン数に関する安定領域が広く、しかも離散化パラメータ s に依存しない安定領域を有するという利点があるが、今回の数値実験が示しているとおり、ペクレ数が 10 以上の場合では ℓ_2 誤差が大きく解析解との一致も良くない。一方今回の数値実験が示すとおり、LBM スキームは陽的スキームながら、安定領域内のパラメータが設定されれば、陰解法である FEM スキームと同程度の精度の数値解を生成することを示している。しかも、ペクレ数が $Pe = 100, 1000$

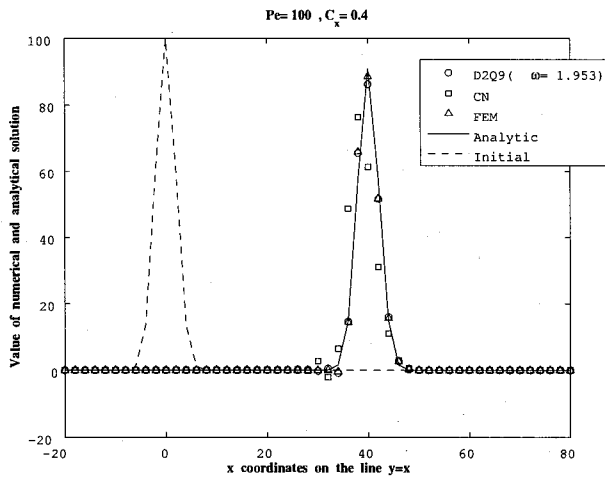


図-6 直線 $y = x$ 上の格子点で時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の表示 ($Pe = 100, C_x = 0.4$)。実線は解析解、点線は初期関数を示す。

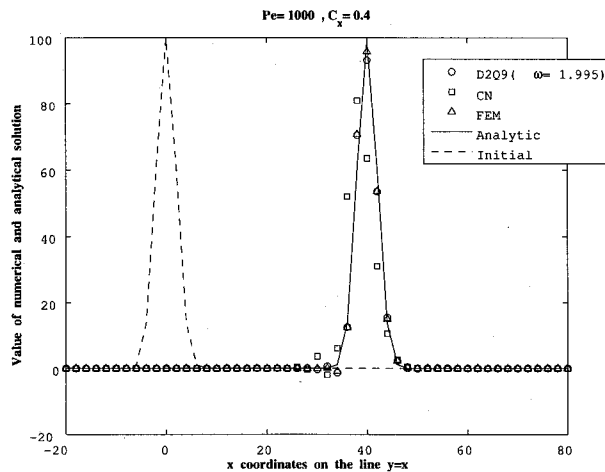


図-7 直線 $y = x$ 上の格子点で時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の表示 ($Pe = 1000, C_x = 0.4$)。実線は解析解、点線は初期関数を示す。

の場合に陰解法である FDM-CN スキームの解に見られるような振動解は LBM スキームの数値解の中には見いだされていない。

これまでの、移流速度について $u_x = u_y$ の場合を調べてきたが、表-4 には $u_x \neq u_y$ の計算例に対する l_2 誤差を示す。この例では、 x 方向の移流速度を $u_x = 0.1$ 、すなわち x 方向のクーラン数を $C_x = 0.1$ に固定し、さらに x 方向に関するペクレ数を $u_x d / \kappa = 1000$ に設定して、 y 方向のクーラン数 C_y を安定領域の中で変化させている。なお、 l_2 誤差は時刻 $t = 40/C_y$ における値である。表-4 からわかるように、 $u_x \neq u_y$ の場合においても LBM スキームは l_2 誤差に関して FEM スキームとほぼ同程度の数値解を生成している。

以上から、移流拡散方程式の数値シミュレーションにおいて伝統的な陽的差分スキームが実用上適用でき

ず、陰的スキームが用いられていたような問題に対して、陽的な LBM スキームが実用上適用可能な問題が多く存在するものと考えられる。

LBM スキームと FTCS スキームに関して 1 回の時間ステップの計算で数値解を記憶するために必要な計算容量を比較すると、LBM スキームでは、計算領域内の K 個の格子点に関して 9 方向の平衡分布関数の数値解を記憶するための 9 本の K 次元ベクトル、および最終的な数値解を記憶する 1 本、合計 10 本の K 次元ベクトルが必要である。一方 FTCS スキームでは、数値解を記憶するベクトルは 1 本あれば良い。このように LBM スキームの計算容量は他の陽的スキームと比べて計算容量が増大する。一方、LBM スキームと本論文で用いた有限要素法による陰解法 (連立方程式は LU 分解法による直接解法を採用) との計算時間を比較すると、LBM スキームが 1 回の時間ステップに要する計算時間を 1 (本研究で用いた PC で約 0.03 秒) としたときに、有限要素法では行列の LU 分解に要する時間が約 480、1 回の時間ステップに要する時間は約 6 であった。ただし、本論文の計算例では未知数が 9801 であり、有限要素法では半バンド幅 100 の行列に対して LU 分解を行っている。未知数の数が増え、計算の時間ステップが増えれば LBM スキームと有限要素法との計算時間の違いは非常に大きくなるであろう (陰解法の計算にスパー行列を導入し、連立一次方程式に反復解法を採用しても LBM スキームの計算時間の方がはるかに少なくすむと考えられる)。したがって、LBM スキームは膨大な格子点で数値解の計算が必要な大規模問題に関しては、陰的スキームよりもはるかに効率的に精度の良い解を生成するものと考えられる。

5. おわりに

本論文では、格子ボルツマン法 (LBM) から導かれる 2 次元移流拡散方程式の数値解法のための陽的スキームについて安定性と計算精度を述べた。一様な移流速度場を仮定し、正方格子に切られた正方形領域内の各格子点で粒子速度モデル D2Q9 から導かれる数値スキームの増幅行列に対して固有値解析を数値的にを行い、緩和パラメータ ω を変化させながら、クーラン数に関する LBM スキームの安定条件を求めた。その結果、本研究で対象とした移流速度場に対して 2 次の平衡分布関数を採用する LBM スキームのクーラン数の安定領域は 1 次の平衡分布関数を採用する LBM スキームの場合よりもかなり広がることがわかった。

次に、ベンチマーク問題を解くことによって、伝統的に用いられている陽的および陰的スキームの結果と比較を行いながら LBM スキームの計算精度について調べた。ペクレ数が $Pe = 1, 10, 100, 1000$ の場合について数値実験を行った結果、安定条件を満たすパラメー

表-4 時刻 $t = 40/C_x$ において各スキームによって計算される数値解の ℓ_2 誤差

スキーム	ℓ_2 誤差					
	$C_y = 0.7$	$C_y = 0.6$	$C_y = 0.5$	$C_y = 0.4$	$C_y = 0.3$	$C_y = 0.2$
LBM	0.107	0.081	0.060	0.042	0.030	0.023
FDM-CN	0.380	0.371	0.361	0.357	0.358	0.377
FEM	0.101	0.078	0.057	0.040	0.027	0.018

タが設定されていれば、LBM スキームは陽的な FTCS および *Dufort - Franlet* 両スキームよりも多くの場合に 2 桁程度計算精度の良い数値解を生成することがわかった。また、LBM スキームは安定条件を満たすパラメータに関して、ペクレ数の大きさに依存せずに陰的解法である双線形有限要素スキームと同程度の計算精度の解を生成することがわかった。以上から、移流拡散方程式の数値解法において、従来は陰的スキームを用いないと安定で精度の良い解を得ることが困難であったような問題に対して、本論文で対象とした陽的な LBM スキームが実用上適用可能な問題が多く存在するものと考えられる。

ところで、本論文では当方性の移流拡散方程式を対象とした、LBM の有効性をより広い範囲の問題に対して示すためには、非当方性の問題に対する有効性を検証する必要があるが、D2Q9 速度モデルを適用する LBM スキームを移流拡散問題に適用した報告例の多くはやはり当方性の問題を対象としている。軸方向によって拡散係数が異なるような問題に LBM を適用する場合には、長方形格子を採用し、緩和パラメータ ω は粒子の速度方向に依存して決定されなければならない。非当方性の移流拡散問題に関して、移流速度場に 1 次の平衡分布関数を採用し D2Q9 速度モデルを適用した LBM スキームの数値計算例が報告されているが⁵⁾、数値的安定性や計算精度に関しては報告されていない。しかしながら、本論文の結果によって、2 次の平衡分布関数と D2Q9 速度モデルを採用する LBM は非当方性の移流拡散問題に対しても実用的なスキームを与えることが期待できる。

付録 この付録では、 $\omega = 1$, $C_x = 0$ のとき、 $C_y \leq \sqrt{2/3}$ ならば LBM スキームは安定であること、すなわち、 $\sigma(G(\xi, \eta)) \leq 1$ を示す。

緩和パラメータとクーラン数がそれぞれ $\omega = 1$, $C_x = 0$ のとき増幅行列 G の固有値方程式は 8 重根ゼロと非ゼロ根 $\lambda = \mu + \nu i$ をもつ。 μ , ν は以下のように書くことができる。

$$\mu = M \left(\frac{4}{9} + \frac{2}{9} \cos \xi \right) + \left(\frac{2}{9} + \frac{2}{3} C_y^2 \right) \cos \eta$$

$$+ \left(\frac{1}{18} + \frac{C_y^2}{6} \right) (\cos(\xi + \eta) + \cos(\xi - \eta)).$$

$$\nu = \frac{2}{3} C_y \sin \eta + \frac{C_y}{6} (\sin(\xi + \eta) + \sin(\xi - \eta)).$$

ここで、 $M = 1 - 3C_y^2/2$ である。 $C_y \leq \sqrt{2/3}$ であるから、 μ , ν は *Schwarz* の不等式を用いて以下のように評価できる。

$$\mu^2 \leq M \left(\frac{4}{9} + \frac{2}{9} \cos^2 \xi \right) + \left(\frac{2}{9} + \frac{2}{3} C_y^2 \right) \cos^2 \eta + \left(\frac{1}{18} + \frac{C_y^2}{6} \right) (\cos^2(\xi + \eta) + \cos^2(\xi - \eta)).$$

$$\nu^2 \leq \frac{2}{3} C_y^2 \sin^2 \eta + \frac{C_y^2}{6} (\sin^2(\xi + \eta) + \sin^2(\xi - \eta)).$$

よって、 $|\lambda|^2$ を以下のように評価することができる。

$$|\lambda|^2 \leq M \left(\frac{4}{9} + \frac{2}{9} \cos^2 \xi \right) + \frac{2}{9} \cos^2 \eta + \frac{1}{18} (\cos^2 \xi + \cos^2 \eta) + C_y^2 \leq 1.$$

したがって、 $C_y \leq \sqrt{2/3}$ ならば安定条件を満足する。

参考文献

- 1) Succi, S.: *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*, Oxford, New York 2001.
- 2) 葛原道久・高田尚樹・片岡武：格子気体法・格子ボルツマン法，コロナ社，1999.
- 3) Blaak, R. and Slood, P.: Lattice dependence of reaction-diffusion in lattice Boltzmann modeling, *Comp. Phys. Comm.*, Vol.129, pp.256-266, 2000.
- 4) Xiaoye, H., Ning, L. and Byron, G.: Lattice Boltzmann Simulation of Diffusion-Convection Systems with Surface Chemical Reaction, *Molecular Simulation*, Vol.25, pp.145-156, 1999.
- 5) Zhang, X., Bengough, A., Crawford, J. and Young, I.: A Lattice BGK model for Advection-Diffusion and anisotropic Dispersion Equations, *Adv. Water Resour.*, Vol.25, pp.1-8, 2002.
- 6) Flekkøy, E.: Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids, *Phys. Rev. E*, Vol.47(6), pp.4247-4257, 1993.
- 7) Sukop, M. and Thorne, D.: *Lattice Boltzmann Modeling*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006.
- 8) Sterling, D. and Chen, S.: Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods, *J. Comput. Phys.*, Vol. 123, pp.196-206 1994.
- 9) Wolf-Gladrow, D.: A lattice Boltzmann equation for diffusion, *J. Stat. Phys.*, Vol.79(5/6), pp.1023-1032, 1995.

- 10) Ancona, M.G.: Fully-Lagrangian and lattice-Boltzmann methods for solving systems of conservation equations, *J. Comput. Phys.*, Vol. 115, pp.107–120 1994.
- 11) Du fort, E.G. and Frankel, S.P.: Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations, *Math. Tables Other Aids Comput.*, Vol.7 135–152, 1953.
- 12) van der Sman, R. and Ernst, M.: Convection-diffusion lattice Boltzmann scheme for irregular lattices, *J. Comp. Phys.*, Vo.160, pp.766–782 2000.
- 13) Suga, S.: Numerical Schemes Obtained from Lattice Boltzmann Equations for Advection Diffusion Equations, *Int. J. Mod. Phys. C*, Vol.17(11) pp. 1563–1577 2006.
- 14) Thomas, J.W.: *Numerical Partial Difference Equations: Finite Difference Methods*, Springer-Verlag, New York, 1995.
- 15) Qian, Y.H., d’Humières, D. and Lallemand, P.: Lattice BGK models for Navier Stokes equation, *Europhys. Lett.*, Vol.17(6), pp.479–484 1992.
- 16) Richtmyer, R. and Morton, K.: *Difference Methods for Initial-Value Problems*, Interscience Publishers, New York, 1967.
- 17) van der Sman, R. and Ernst, M.: Diffusion Lattice Boltzmann Schemes on a Orthorhombic Lattice, *J. Stat. Phys.*, Vol.94(1/2), pp.203–217 1999.
- 18) Hindmarsh, A., Gresho, P. and Griffiths, D.: The Stability of Explicit Euler Time-Integration for Certain Finite Difference Approximations of the Multi-Dimensional Advection-Diffusion Equation, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.4, pp.853–897 1984.
- 19) Cushman-Roisin, B.; Analytical Linear Stability Criteria for the Leap-Frog, Dufort-Frankel Method, *J. Comp. Phys.*, Vol.53, pp.227–239 1984.
- 20) Inamuro, T., Masato, Y., Inoue, H., Mizuno, R. and Ogino, F.; A Lattice Boltzmann Method for a Binary Miscible Fluid Mixture and Its Application to a Heat-Transfer Problem, *J. Comp. Phys.*, Vol.179, pp.201–215 2002.
- 21) Fletcher, J.: *Computational Techniques for Fluid Dynamics Vol. 1*, Springer-Verlag, 1988.

(2007 年 4 月 12 日 受付)