

Lattice Boltzmann Methodによる分散性波動方程式の数値計算

九州大学・応用力学研究所 辻 英一

Hidekazu Tsuji

Research Institute for Applied Mechanics,
Kyushu University

1 はじめに

多くの物理系における非線形波動現象に関して、近年の計算機資源の発展により、様々な大規模数値計算が可能となり、多くの研究が行われている。例えば、海洋中の内部波については、物質の輸送・混合など様々な面から近年重要視されている。著者はこれまでに、二層流体を対象として、Kadomtsev-Pevianshili (KP) 方程式、2次元 Benjamin-Ono 方程式や2次元 intermediate long wave 方程式など、水平二次元での長波長モデル方程式を調べてきた。その結果、一次元での相互作用の理論では予想できない孤立波同士の二次元相互作用を数値的に明らかにしてきた。

さらに種々の水平二次元的な波動現象を調べるにあたり、深刻な数値計算上の問題がある。まず、水平二次元の計算は多くの計算機資源を必要である。さらに基本的に孤立波などの非線形波動の精密な数値計算は高精度のスキームを使う必要があり、これまでのモデル方程式の計算には擬スペクトル法を用いてきたが、この方法は境界条件の制約が強い。

この問題を解決する一つの方法として考えられるのが、Lattice Boltzmann Method(LBM)の適用である [1]。この方法には、境界条件の設定を柔軟に行うことができる点や、近年のGPUなどを使う並列化がしやすい点などメリットが多い。これまで、Navier-Stokes 方程式系を始め浅水方程式など、多くの物理系で実績がある。理論的研究を背景とする非線形モデ

ル方程式の計算についても多くの例がある一方で、高次の分散項を含む方程式や非粘性の方程式について、安定に長時間の計算ができるスキームはまだ十分なものが開発されていない。例えばKdV方程式について研究報告の例 [2, 3, 4] があるものの、相互作用を含む高精度の数値計算にはまだ課題が残されている。著者は、非粘性に近い系での数値計算法の確立を目的とし、Burgers方程式を Entropic Method[5] を用いて数値計算し、既存の計算 [6] より精度の良い数値結果を得ている [7]。

本研究では、上述の研究で有効性が示された Entropic Method を用いて KdV-Burgers 方程式

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \zeta \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \theta \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^3 \zeta}{\partial x^3} + O(\epsilon^4) = 0 \quad (1)$$

の新しい数値スキームを定式化する。高次の分散項の存在により、必要となる速度分布関数の数が増えることから、Burgers方程式と同様の定式化は難しいため、ここでは近似を用いた定式化を提案する。このスキームは、残念ながら現段階で精度的な改善はされていないものの、高次の分散項を含む他の方程式でも汎用的に使えるというメリットがある。この定式化によって得られたスキームによる数値計算を行い、既存のスキーム [8] と比較する。

2 KdV-Burgers 方程式の速度分布関数による定式化

ここでの KdV-Burgers 方程式の定式化の方針は、Zhang ら [8] の論文に沿った標準的な手法のものである。

空間 1 次元の格子を考え、その上で速度 $e_i = \{0, c, -c, 2c, -2c\}$ ($i = 0, 1, \dots, 4$) を持つ粒子の存在確率を表す速度分布関数 $f_i(x, t)$ を定義する。その時間

発展は以下のボルツマン方程式に従うものとする。

$$f_i(x + \epsilon e_i, t + \epsilon) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (2)$$

ここで、右辺は衝突項を表し、ここではBGKモデルを採用する。 τ は緩和係数、 $f_i^{eq}(x, t)$ は系の局所平衡を表す。

以降で、数密度

$$\zeta = \sum_i f_i(x, t) \quad (3)$$

がKdV-Burgers方程式を満たす様に定式化を行う。

まず、格子間隔としての微小量 ϵ を導入して、式(2)を以下のように書く。

$$f_i(x + \epsilon e_i, t + \epsilon) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (4)$$

式(4)の左辺を ϵ を用いて展開する。

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\epsilon^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial t} + e_i \frac{\partial}{\partial x} \right)^n f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (5)$$

t, x についても以下のように微小量 ϵ を用いてスケールリングする。

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \epsilon^3 \frac{\partial}{\partial t_3} + \dots, \quad \frac{\partial}{\partial x} \simeq \epsilon \frac{\partial}{\partial x} \quad (6)$$

また f_i を以下のように展開する。

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \epsilon^3 f_i^{(3)} + \epsilon^4 f_i^{(4)} + \dots \quad (7)$$

ここで、 $f_i^{(0)} = f_i^{eq}$ とする。上二つの展開については、より高階の導関数で表される分散項を導くために、Burgers方程式の場合[7]より高次の展開となっている。

各オーダーで成り立つ方程式が以下のように得られる（より低次の式を使って左辺を $f_i^{(0)}$ のみの式に変形している）。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x} \right) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (8)$$

$$\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_1} - \tau \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \quad (9)$$

$$(1 - 2\tau) \frac{\partial}{\partial t_1} \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right) f_i^{(0)} + \left(\tau^2 - \tau + \frac{1}{6}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^3 f_i^{(0)} + \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(3)} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \left(3\tau^2 - 3\tau + \frac{1}{2}\right) \frac{\partial}{\partial t_1} \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f_i^{(0)} \\ & + \left(-\tau^3 + \frac{5}{2}\tau^2 - \frac{7}{12}\tau + \frac{1}{24}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^4 f_i^{(0)} \\ & + (1 - 2\tau) \frac{\partial}{\partial t_2} \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right) f_i^{(0)} + \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_3} + \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \frac{\partial^2 f_i^{(0)}}{\partial t_1^2} \\ & = -\frac{1}{\tau} f_i^{(4)} \end{aligned} \quad (11)$$

各式で速度空間について和を取り、足し合わせると、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \sum_i e_i \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial x} \\ & + \epsilon \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f_i^{(0)} \\ & + \epsilon^2 C_1 \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^3 f_i^{(0)} \\ & + \epsilon^3 \left(2\tau^2 - 2\tau + \frac{1}{4}\right) \sum_i \frac{\partial}{\partial t_1} \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f_i^{(0)} \\ & + \epsilon^3 C_2 \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + e_i \frac{\partial}{\partial x}\right)^4 f_i^{(0)} = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

ただし、 $C_1 \equiv \tau^2 - \tau + \frac{1}{6}$, $C_2 \equiv -\tau^3 + \frac{3}{2}\tau^2 - \frac{7}{12}\tau + \frac{1}{24}$ である。

ここで KdV-Burgers 方程式を導出するために以下のような条件を課す。

$$P_1 \equiv \sum_i e_i f_i^{(0)} \equiv \frac{1}{2} \zeta^2 \quad (13)$$

$$P_2 \equiv \sum_i e_i^2 f_i^{(0)} \equiv \frac{1}{3} \zeta^3 + \hat{\lambda} \zeta \quad (14)$$

$$P_3 \equiv \sum_i e_i^3 f_i^{(0)} \equiv \frac{1}{4}\zeta^4 + \frac{3}{2}\hat{\lambda}\zeta^2 + \lambda'\zeta \quad (15)$$

$$P_4 \equiv \sum_i e_i^4 f_i^{(0)} \equiv \frac{1}{5}\zeta^5 + 2\hat{\lambda}\zeta^3 + 2\lambda'\zeta^2 + \beta\hat{\lambda}^2\zeta \quad (16)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \theta &\equiv \epsilon \left(\frac{1}{2} - \tau \right) \hat{\lambda}, \quad \lambda' \equiv \frac{\delta}{\epsilon^2 C_1}, \\ \beta &\equiv -\frac{1}{C_2} \left(2\tau^2 - 2\tau + \frac{1}{4} \right) \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

とする。

これにより、式(12)はKdV-Burgers方程式

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \zeta \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \theta \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \delta \frac{\partial^3 \zeta}{\partial x^3} = 0 \quad (18)$$

となる。なお、 ϵ^3 の項は0となるため、誤差は $O(\epsilon^4)$ となる。

3 平衡分布関数の決定

数値スキームの実現には、上述の定式化に加えて平衡分布関数の決定が必要である。ここでは、二通りの平衡分布関数の与え方を示す。一つはモーメントの関係式を用いた従来の方法であり、もう一つが「近似」Entropic Methodを用いた新しい方法である。

3.1 モーメントの関係式を用いた従来の方法による平衡分布関数

まず、従来の方法として、モーメントの関係式を平衡分布関数の連立方程式と見立てて計算した場合の平衡分布関数を示す。すなわち、5つの平衡分布関数 $f_i^{eq}(x, t)$, ($i = 0, \dots, 4$) について、式(3)、(13)、(14)、(15)、(16)の5式を連立させることによって得ることができる¹。

¹Zhangら[8]の結果とここで示したものは一致しない。モーメントを逆に計算した結果などをみると、彼らの論文での記述のいくつかの符号に関して疑問点がある。

$$f_0^{eq} = \zeta - f_1^{eq} - f_2^{eq} - f_3^{eq} - f_4^{eq} \quad (19)$$

$$f_1^{eq} = \frac{1}{6c^4} (-P_4 - cP_3 + 4c^2P_2 + 4c^3P_1) \quad (20)$$

$$f_2^{eq} = \frac{1}{6c^4} (-P_4 + cP_3 + 4c^2P_2 - 4c^3P_1) \quad (21)$$

$$f_3^{eq} = \frac{1}{24c^4} (P_4 + 2cP_3 - c^2P_2 - 2c^3P_1) \quad (22)$$

$$f_4^{eq} = \frac{1}{24c^4} (P_4 - 2cP_3 - c^2P_2 + 2c^3P_1) \quad (23)$$

3.2 「近似」 Entropic Method による平衡分布関数の決定

Entropic Method は、従来の方法と同様、モーメントの式から導出を始める。しかし本研究での定式化においては、適用する前に式変形と近似を行う。すなわち、モーメントの式から、 f_3^{eq}, f_4^{eq} を消去した式を得る。

$$f_0^{eq} + f_1^{eq} + f_2^{eq} = \zeta - \frac{1}{60c^4}\zeta^5 - \frac{1}{6c^4}\hat{\lambda}\zeta^3 - \frac{1}{6c^4}\lambda'\zeta^2 - \frac{1}{12c^4}\beta\hat{\lambda}^2\zeta + \frac{1}{36c^2}\zeta^3 + \frac{1}{12c^2}\hat{\lambda}\zeta \quad (24)$$

$$cf_1^{eq} - cf_2^{eq} = \frac{1}{2}\zeta^2 - \frac{1}{12c^2}\zeta^4 - \frac{1}{2c^2}\hat{\lambda}\zeta^2 - \frac{1}{3c^2}\lambda'\zeta + \frac{1}{6}\zeta^2 \quad (25)$$

$$c^2f_1^{eq} + c^2f_2^{eq} = \frac{1}{3}\zeta^3 + \hat{\lambda}\zeta - \frac{1}{15c^2}\zeta^5 - \frac{2}{3c^2}\hat{\lambda}\zeta^3 - \frac{2}{3c^2}\lambda'\zeta^2 - \frac{1}{3c^2}\beta\hat{\lambda}^2\zeta + \frac{1}{9}\zeta^3 + \frac{1}{3}\hat{\lambda}\zeta \quad (26)$$

ここで c が大きいとし、右辺のうち $O(1/c^2)$ を無視する。

$$f_0^{eq} + f_1^{eq} + f_2^{eq} = \zeta \quad (27)$$

$$cf_1^{eq} - cf_2^{eq} = \frac{1}{2}\zeta^2 + \frac{1}{6}\zeta^2 = \frac{2}{3}\zeta^2 \quad (28)$$

$$c^2f_1^{eq} + c^2f_2^{eq} = \frac{1}{3}\zeta^3 + \hat{\lambda}\zeta + \frac{1}{9}\zeta^3 + \frac{1}{3}\hat{\lambda}\zeta = \frac{4}{9}\zeta^3 + \frac{4}{3}\hat{\lambda}\zeta \quad (29)$$

この式から、Entropy Method を適用する。その手順は Burgers 方程式の場合 [7] と概ね同様であり、最終的に、平衡分布関数 $f_0^{eq}, f_1^{eq}, f_2^{eq}$ が求まる。最

後に、元のモーメントの式を用いて f_3^{eq}, f_4^{eq} を求め、以下のような平衡分布関数が求まる。

$$f_0^{eq} = \frac{4\zeta}{3} \left(1 - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4}{3} M^2} \right), \quad M \equiv \zeta/c \quad (30)$$

$$f_1^{eq} = \frac{\zeta}{2} \left(1 + \frac{2M}{3} \right) - \frac{1}{2} f_0^{eq}, \quad f_2^{eq} = \frac{\zeta}{2} \left(1 - \frac{2M}{3} \right) - \frac{1}{2} f_0^{eq} \quad (31)$$

$$f_3^{eq} = \frac{1}{4c} (2cR_1 + R_2), \quad f_4^{eq} = \frac{1}{4c} (2cR_1 - R_2) \quad (32)$$

$$R_1 \equiv \zeta - f_0^{eq} - f_1^{eq} - f_2^{eq}, \quad R_2 \equiv \frac{1}{2} \zeta^2 - (c f_1^{eq} - c f_2^{eq}) \quad (33)$$

4 数値計算の結果

以後に数値計算の結果を示す。初期条件は定常進行波解 [9]

$$\zeta = \frac{3\theta^2}{25\delta} \left(\operatorname{sech} \left(\frac{\xi}{2} \right) + 2 \tanh \left(\frac{\xi}{2} \right) + 2 \right), \quad \xi = -\frac{\theta}{5\delta} \left(x - \frac{6\theta^2}{25\delta} t \right) \quad (34)$$

を与える。

図1に、従来の方法により求めた平衡分布関数を採用した場合の数値計算の結果の結果を示す。時間発展後の波形を厳密解と比較すると、概ね合っているものの、衝撃波の位置がわずかにずれている。

図2は、近似 Entropic Method で得られた平衡分布関数を採用した場合の数値計算の結果である。時間発展後の波形は、従来の方法の結果と比較すると、厳密解とのずれが大きい。また、従来の方法が波面の形状を概ね保っているのに対し、この結果では、波面の前面（値が小さく、立ち上がる場所）が前に、後面が後方にずれている。この非対称なずれを示す原因として、分散性を上手く捉えていない可能性が考えられる。

この結果の考察として、図3(a)に従来の方法および近似 entropic method のいくつかの平衡分布関数の違いを示す。また、図3(b)は entropic method が有効な場合である Burgers 方程式での平衡分布関数の違いを示している。

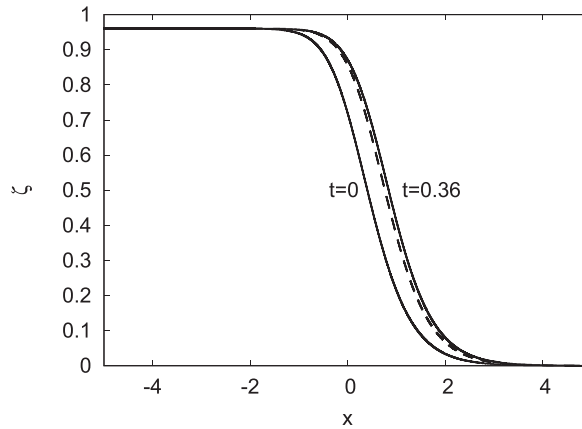


図 1: 従来の方法により求めた平衡分布関数を採用した場合の数値計算の結果 (実線)。破線は厳密解。 $\theta = 0.2$, $\delta = 0.02$, $\epsilon = 0.00005$, $\tau = 200.5$, ($\hat{\lambda} = 2.0$, $c = 2.828$)

Burgers 方程式での平衡分布関数の違いとしては、(1) 分布関数の違いは ζ が小さい時にはほとんど見られず、 ζ が大きくなるにつれて徐々にずれが生じる (2) この傾向は 3 つの分布関数に同様に見られ、ずれが生じ始める ζ も概ね一致している。

一方、KdV-Burgers 方程式の場合、(1) 分布関数の違いは ζ が比較的小さい値でも認められる (2) この傾向は主に f_0 と f_1 で顕著である一方、 f_2 はほぼ違いがない。これらの特徴は、今回用いた entropic method での近似に原因がある可能性があり、今後スキームを考える上で注意すべき点である。

5 まとめ

分散項を持つ KdV-Burgers 方程式を Lattice Boltzmann method で解くためのスキームを entropic method を用いて定式化し、計算結果について

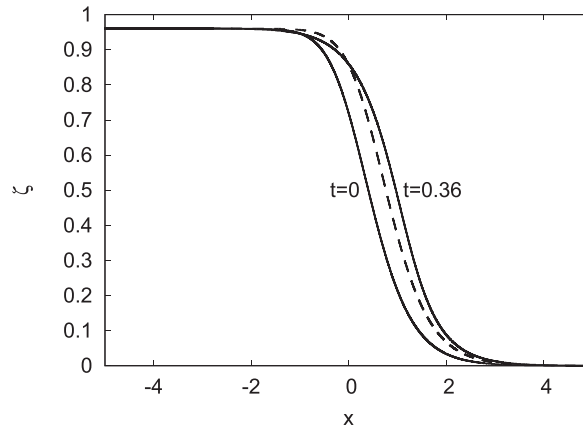
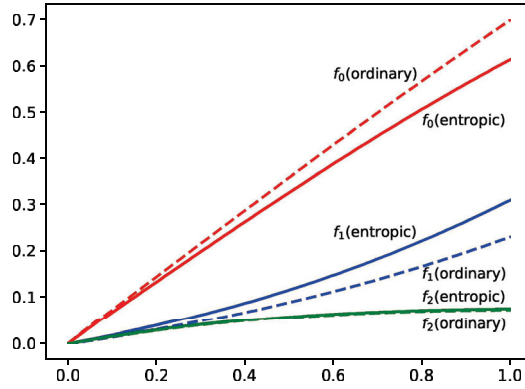


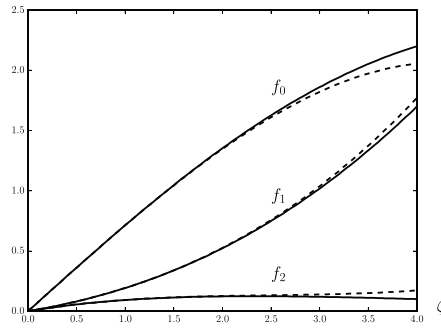
図 2: 近似 Entropic Method で得られた平衡分布関数を採用した場合の数値計算の結果 (実線)。破線は厳密解。 $\theta = 0.2$, $\delta = 0.02$, $\epsilon = 0.00005$, $\tau = 200.5$, ($\hat{\lambda} = 2.0$, $c = 2.828$)

既存のスキームとの違いに着目しながら考察した。新しいスキームは従来のスキームに比較して良い結果を与えなかった一方で、従来のスキームにも精度の面で十分な結果を実現しているとは言えない。またどちらの方法でも、時間発展を安定的に計算するにはパラメーターをかなり調整する必要がある。

KdV-Burgers 方程式に限らず、分散性を持つ重要な非線形モデル方程式は多数提案されている。それらの数値的研究の改善も目的としつつ、本研究の改良を進めることは有望であると考えられる。



(a)



(b)

図 3: (a)KdV-Burgers 方程式に関する従来の方法および近似 entropic method それぞれの平衡分布関数の比較。横軸は ζ 。実線が近似 entropic method で得られた分布関数。破線が従来の方法で得られた分布関数。 $\theta = 0.2$, $\delta = 0.02$, $\epsilon = 0.00005$, $\tau = 200.5$, ($\hat{\lambda} = 2.0$, $c = 2.828$)。 (b)Burgers 方程式に関する従来の方法および entropic method それぞれの平衡分布関数の比較。実線: entropic method で得られた分布関数。破線: 従来の方法で得られた分布関数。

参考文献

- [1] S. Succi, "The Lattice Boltzmann Equation", Clarendon press, 2001.
- [2] G. Yan, Y.Chen and S. Hu, "A Lattice Boltzmann Method for KdV Equation", ACTA Mech. Sinica(English Series) vol.14 No.1(1998) pp. 18-26.
- [3] G. Yan and J. Zhang, "A higher-order moment method of the lattice Boltzmann model for the Korteweg-de Vries equation", Math. Comp. Simul. vol.79(2009) pp.1554-1565.
- [4] H. Wang, "Solitary wave of the Korteweg-de Vries equation based on lattice Boltzmann model with three conservation laws", Advances in Space Research 59 (2017) 283-292.
- [5] I. V. Karlin, A. Ferrante and H. C. Oettinger, "Perfect entropy functions of the Lattice Boltzmann method", Europhy. lett. vol.47(1999) pp. 182-188.
- [6] Yun Gao, Li-Hua Le and Bao-Chang Shi, "Numerical solution of Burgers' equation by lattice Boltzmann method", Appl. Math. Comp. vol. 219 (2013) pp. 7685-7692.
- [7] 辻英一, "格子ボルツマン法を用いた非線形波動方程式の数値解析", 京都大学数理解析研究所研究集会講究録 1 9 8 9 (2016), pp78-84.
- [8] Zhang Chao-Ying, Tan Hui-Li, Liu Mu-Ren and Kong Ling-Jiang, "A Lattice Boltzmann Model and Simulation of KdV-Burgers Equation", Commun. Theor. Physics (Beijing, China) 42 (2004) pp. 281-284.

- [9] A. Jeffery and M.N.B. Mohamad "Exact solutions to the KdV-Burgers' equation", Wave Motion vol.14 (1991) pp.369-375.