誤差解析による多緩和時間格子ボルツマン法の緩和行列の最適化

Optimization of relaxation factors in the multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method based on truncation error analysis

○ 杉山琢哉，理科大, 千葉県野田市山崎 2641, E-mail：7517636@ed.tus.ac.jp
桑田祐丞，阪府大, 大阪府堺市中区学園町 1-1, E-mail：kuwata@me.osakafu-u.ac.jp
川口靖夫，理科大, 千葉県野田市山崎 2641, E-mail：yasuo@rs.noda.tus.ac.jp
Takuya Sugiyama, Tokyo University of science, 2641 Yamazaki, Noda-si, Chiba
Yusuke Kuwata, Osaka Prefecture University, 1-1 Gakuenchou, Naka-ku, Sakai-si, Osaka
Yasuo Kawaguchi, Tokyo University of science, 2641 Yamazaki, Noda-si, Chiba

To analytically optimize the relaxation matrix for the multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method, truncation error terms are mathematically derived. It is found that the truncation error terms in the continuity and momentum equations consists of the third or fourth derivative of macroscopic quantities and the polynomial of the relaxation factors. This analysis implies the possibility to reduce the influence of the truncation error terms by choosing the optimal relaxation factors.

1. 序論

1.1 研究背景

有限体積法や有限差分法などの Navier-Stokes（NS）ソルバーによる流体解析手法に代わる手法として格子ボルツマン法 (LBM：Lattice Boltzmann method) が知られている．LBM は NS ソルバーとは異なり，圧力のポアソン方程式を解く必要がなく，完全な陽解法である．さらに，その計算密度の高さと，シンプルなアルゴリズムさゆえに，並列計算によく適合することが知られている．また，複雑形状周りの流れにおいても，跳ね返り条件を使用することで，高精度な解析を容易に行うことが可能である [1]．格子ボルツマン法は，衝突演算・並進計算の繰り返しによって行われるが，最も基本的な衝突演算モデルとして，衝突演算を単一の緩和係数で行う単緩和時間 (SRT : Single relaxation time) モデルがある．しかし，SRT-LBM は高レイノルズ数解析では安定に解を求めるられないことが知られている．この問題に対して d'Humiére[2] によって衝突演算を複数の緩和係数で行う，多緩和時間 (MRT : Multiple relaxation time) モデルが提案され，高レイノルズ数の乱流解析を安定に行うことが可能となった．多緩和時間モデルは，それぞれのモーメントに対して異なる緩和係数が与えられるが，緩和係数の組み合わせの数は膨大であるため，これらの最適な値を経験的に決定するのは現実的ではない．本研究では MRT-LBM について誤差解析を行い，複数の緩和係数と誤差項の関係性を数学的に明らかにした．これにより，誤差項を最小化する最適な緩和係数の組み合わせを容易に求めることが可能となり，MRT-LBM の数値安定性がさらに向上することが期待できる．

1.2 多緩和時間格子ボルツマン法

LBM は流体の挙動を仮想的な粒子の集合体としてとらえ，その粒子の確率密度である密度分布関数の時間発展を解く手法である．なお，格子ボルツマン方程式は連続の式と NS 式に Chapman-Enskog 展開 [3] で時間一次，空間二次精度で数学的に漸近することが知られている．

立方体格子を用いる格子ボルツマン法には，二次元では粒子速度を 9 方向に離散化した二次元 9 方向速度 (D2Q9) モデル，三次元では D3Q15 や D3Q19,D3Q27 モデルなどがある．三次元乱流解析においては D3Q27 モデルが D3Q15,D3Q19 モデルと比較して NS 式からの誤差項の影響が小さく，ガリレイ不変性を破ることもないことが知られている [4]．そこで，本研究では D3Q27 モデルを対象とする．離散化された粒子の速度の種類を $\alpha\,(\alpha = 0, 1, \cdots, Q-1)$ と表現して，粒子速度を $c\boldsymbol{w}_\alpha$，分布関数を f_α として表現すると MRT-LBM の時間発展方程式は以下のように示される．ただし $c = \Delta x/\Delta t$ で Δx と Δt は計算格子幅と時間刻み幅を示し，$\boldsymbol{w}_\alpha$ は粒子速度の方向のみを示す無次元のベクトルである．

$$|\boldsymbol{f}\,(t+\Delta t, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x)\rangle - |\boldsymbol{f}\,(t, \boldsymbol{x})\rangle = -\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{S}}\mathbf{M}\left(|\boldsymbol{f}\,(t, \boldsymbol{x})\rangle - |\boldsymbol{f}^{eq}\,(t, \boldsymbol{x})\rangle\right) \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{x}$ と t は格子点の位置ベクトルと時間を示し，分布関数 $|\boldsymbol{f}\rangle$ はブラ・ケット表記を用いて列行列として以下のように定義した．

$$|\boldsymbol{f}\,(t, \boldsymbol{x})\rangle \equiv \left(f_0\,(t, \boldsymbol{x}), f_1\,(t, \boldsymbol{x}), \cdots, f_{Q-1}\,(t, \boldsymbol{x})\right)^T \tag{2}$$

$f_\alpha^{eq}\,(t, \boldsymbol{x})$ は平衡分布関数を示し，以下のように表現される．

$$f_\alpha^{eq} = \rho_0 \omega_\alpha \left[\frac{\rho}{\rho_0} + \frac{c\boldsymbol{w}_\alpha \cdot \boldsymbol{u}}{c_s^2} + \frac{(c\boldsymbol{w}_\alpha \cdot \boldsymbol{u})^2}{2c_s^4} - \frac{|\boldsymbol{u}|}{2c_s^2}\right] \tag{3}$$

ここで，ρ は流体の密度を示し，一定値 ρ_0 と変動値 $\delta\rho$ で $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ で示され，$\boldsymbol{u}$ は流体の速度ベクトルを示す．また，c_s は LBM での音速を示し，無次元音速は $\frac{c_s}{c} = \sqrt{\frac{1}{3}}$ の定数となる．また，ω_α は速度方向によって変わる重み係数を示す．分布関数と平衡分布関数は粒子速度に対して零次と一次のモーメントをとることにより，巨視的な物理量である流体の速度と圧力，密度と以下のような関係を持つ．

零次モーメント

$$\sum_\alpha f_\alpha = \rho = \frac{P}{c_s^2}, \qquad \sum_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho = \frac{P}{c_s^2} \tag{4}$$

一次モーメント

$$\sum_\alpha c\boldsymbol{w}_\alpha f_\alpha = \rho_0 \boldsymbol{u}, \quad \sum_\alpha c\boldsymbol{w}_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho_0 \boldsymbol{u} \tag{5}$$

ここで，P は圧力を示す．MRT-LBM は分布関数に $Q \times Q$ の変換マトリックス $\mathbf{M}$ を乗ずることで，モーメント $|m\rangle = \mathbf{M}\,|f\rangle$ と平衡モーメント $|m^{eq}\rangle = \mathbf{M}\,|f^{eq}\rangle$ に変換し，対角行列である緩和行列 $\hat{\mathbf{S}} = diag\,(s_0, s_1, \ldots, s_{Q-1})$ を乗ずることで各モーメントに適切な緩和係数を与えることができる手法である．D3Q27 モデルにおける経験的に最適な緩和係数は Suga et al.[5] によって求められており，緩和行列は以下のように示される．

$$\hat{\mathbf{S}} = diag\,(s_0, s_1, s_1, s_1, s_4, s_5, s_5, s_7, s_7, s_7, s_{10}, s_{10}, s_{10}, s_{13}, s_{13}, s_{13}, s_{16}, s_{17}, s_{18}, s_{18}, s_{20}, s_{20}, s_{20}, s_{23}, s_{23}, s_{23}, s_{26}) \tag{6}$$

ここで，緩和係数 s_5, s_7 は動粘性係数 ν と以下のような関係を持つ

$$\nu = c_s^2 \left(\frac{1}{s_5} - \frac{1}{2}\right)\Delta t = c_s^2 \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2}\right)\Delta t \tag{7}$$

s_5, s_7 以外の緩和係数は

$$\begin{aligned} &s_0 = s_1 = 0, s_4 = 1.54, s_{10} = 1.5, s_{13} = 1.83, s_{16} = 1.4,\\ &s_{17} = 1.61, s_{18} = s_{20} = 1.98, s_{23} = s_{26} = 1.74 \end{aligned} \tag{8}$$

と求められている．s_5, s_7 は格子ボルツマン方程式を NS 式に帰着させる過程で，粘性項と関連付ける必要があるが，それ以外の緩和係数は自由に定めることができる．

2. 多緩和時間格子ボルツマン方程式の誤差解析

2.1 非平衡分布関数の級数展開

本研究では Holdych et al.[(6)] による SRT-LBM の誤差解析にならい，MRT-LBM へ発展させ誤差解析を行った．誤差解析をするにあたり，利便上，多緩和時間モデルを適用した格子ボルツマン方程式 [式 (1)] を総和規約に従って表記する．ここで，ギリシャ文字の添え字は行列の成分を示す．

$$\begin{aligned} &f_\alpha\left(t+\Delta t, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x\right) - f_\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right) =\\ &\qquad - m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma} m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) \end{aligned} \tag{9}$$

ここで，$m_{\alpha\beta} \equiv \mathbf{M}$ を変換行列，$\hat{s}_{\alpha\beta} \equiv \hat{\mathbf{S}}$ を緩和行列と定義する．肩つきの (-1) はその行列の逆行列を示す．また，f_α^{neq} は非平衡分布関数を示し，$f_\alpha^{neq} \equiv f_\alpha - f_\alpha^{eq}$ と定義される．まず，緩和行列を動粘性係数と関係を持つ緩和係数 $\tau = 1/s_5$ とその残余成分 $\hat{s}_{\alpha\beta}^d$ に分解する．

$$\hat{s}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\tau}\delta_{\alpha\beta} + \hat{s}_{\alpha\beta}^d \tag{10}$$

ここで $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーデルタを示す．式 (9) を式 (10) を用いて，$f_\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right)$ について解くと

$$\begin{aligned} &f_\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right) =\\ &\left(1-\frac{1}{\tau}\right) f_\alpha\left(t-\Delta t, \boldsymbol{x}-\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x\right) + \frac{1}{\tau} f_\alpha^{eq}\left(t-\Delta t, \boldsymbol{x}-\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x\right)\\ &\qquad - m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t-\Delta t, \boldsymbol{x}-\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x\right) \end{aligned} \tag{11}$$

となる．この方程式を右辺の分布関数に再帰的に代入することで，分布関数は平衡分布関数と非平衡分布関数からなる無限級数として以下のように表現できる．

$$\begin{aligned} &f_\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{\tau}\left(1-\frac{1}{\tau}\right)^{n-1} f_\alpha^{eq}\left(t-n\Delta t, \boldsymbol{x}-n\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x\right)\right]\\ &- m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty}\left[\left(1-\frac{1}{\tau}\right)^{n-1} f_\varepsilon^{neq}\left(t-n\Delta t, \boldsymbol{x}-n\boldsymbol{w}_\alpha \Delta x\right)\right] \end{aligned} \tag{12}$$

式 (12) の平衡分布関数と非平衡分布関数を $(t, \boldsymbol{x})$ 周りでテイラー展開を行うと以下のように示される．

$$\begin{aligned} &f_\alpha^{eq}\left(t-n\Delta t, \boldsymbol{x}-n\boldsymbol{w}_\beta \Delta x\right) =\\ &f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{(-n)^m}{m!}\left(\Delta t\frac{\partial}{\partial t} + \Delta x \boldsymbol{w}_\beta \cdot \nabla\right)^m\right] f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) \end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{aligned} &f_\alpha^{neq}\left(t-n\Delta t, \boldsymbol{x}-n\boldsymbol{w}_\beta \Delta x\right) =\\ &f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{(-n)^m}{m!}\left(\Delta t\frac{\partial}{\partial t} + \Delta x \boldsymbol{w}_\beta \cdot \nabla\right)^m\right] f_\alpha^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) \end{aligned} \tag{14}$$

式 (13) と (14) を式 (12) に代入すると以下のように表現できる．

$$\begin{aligned} &f_\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right) =\\ &\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{\tau}\left(1-\frac{1}{\tau}\right)^{n-1}\right]\left[f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) - \tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right)\right]\\ &+ \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{\tau}\left(1-\frac{1}{\tau}\right)^{n-1}\frac{(-n)^m}{m!}\left(\Delta t\frac{\partial}{\partial t} + \Delta x \boldsymbol{w}_\alpha \cdot \nabla\right)^m\right] \times\\ &\qquad \left[f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) - \tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right)\right] \end{aligned} \tag{15}$$

ここで，添え字の α については総和をとらない．また，緩和係数 τ は $0 < 1/\tau < 2$ の範囲であり，

$$\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{\tau}\left(1-\frac{1}{\tau}\right)^{n-1}\right] = 1 \tag{16}$$

であるため，式 (15) の左辺と右辺第一項は非平衡分布関数の定義を用いて以下のように変形できる．

$$\begin{aligned} f_\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right) &= f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) - \tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \cdots\\ f_\alpha^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) &= -\tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \cdots \end{aligned} \tag{17}$$

また，式 (10) の関係を用いて，$\hat{s}_{\alpha\beta}^d$ に $\hat{s}_{\alpha\beta} - \frac{1}{\tau}\delta_{\alpha\beta}$ を代入し，整理すると

$$\begin{aligned} f_\alpha^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) &= -\tau m_{\alpha\beta}^{(-1)}\left(\hat{s}_{\beta\gamma} - \frac{1}{\tau}\delta_{\beta\gamma}\right) m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \cdots\\ f_\alpha^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) &= -\tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma} m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + f_\alpha^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \cdots \end{aligned} \tag{18}$$

となる．式 (18) の右辺の f_α^{neq} を左辺に移項すると以下のように書ける．

$$0 = -\tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma} m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) + \cdots \tag{19}$$

ここで $p\left[\tau; m\right]$ を以下のように

$$p\left[\tau; m\right] \equiv \frac{1}{\tau^2}\sum_{n=1}^{\infty}\left(1-\frac{1}{\tau}\right)^{n-1}(-n)^m \tag{20}$$

と定義して，式 (15) を式 (19) を用いて整理する．

$$\begin{aligned} &\tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma} m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) =\\ &\qquad + \tau \sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{p\left[\tau; m\right]}{m!}\left(\Delta t\frac{\partial}{\partial t} + \Delta x \boldsymbol{w}_\alpha \cdot \nabla\right)^m\right] \times\\ &\qquad \left[f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) - \tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right)\right] \end{aligned} \tag{21}$$

また，$p\left[\tau; m\right]$ の値は $m = 1 \sim 4$ の値で以下のように求められている．

$$\begin{aligned} &p\left[\tau; 1\right] = -1, \quad p\left[\tau; 2\right] = 2\tau - 1,\\ &p\left[\tau; 3\right] = -6\tau^2 + 6\tau - 1, \quad p\left[\tau; 4\right] = 24\tau^3 - 36\tau^2 + 14\tau - 1 \end{aligned} \tag{22}$$

ここで，

$$F_\alpha^{eq} \equiv \sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{p\left[\tau; m\right]}{m!}\left(\Delta t\frac{\partial}{\partial t} + \Delta x \boldsymbol{w}_\alpha \cdot \nabla\right)^m\right] f_\alpha^{eq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) \tag{23}$$

$$L_{\alpha\beta} \equiv \sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{p\left[\tau; m\right]}{m!}\left(\Delta t\frac{\partial}{\partial t} + \Delta x \boldsymbol{w}_\alpha \cdot \nabla\right)^m\right] m_{\alpha\beta}^{(-1)} \tag{24}$$

と定義することで，式 (21) は以下のようにまとめられる．

$$\begin{aligned} &\tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma} m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) =\\ &\qquad \tau F_\alpha^{eq} - \tau^2 L_{\alpha\beta} \hat{s}_{\beta\gamma}^d m_{\gamma\varepsilon} f_\varepsilon^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) \end{aligned} \tag{25}$$

上記の式の両辺に対して左から，行列 $\frac{1}{\tau} m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^{(-1)} m_{\gamma\delta}$ を作用させると，非平衡成分について解くことができ，以下のように表すことができる．

$$\begin{aligned} f_\alpha^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) &= m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^{(-1)} m_{\gamma\varepsilon} F_\varepsilon^{eq}\\ &\qquad - \tau m_{\alpha\beta}^{(-1)} \hat{s}_{\beta\gamma}^{(-1)} m_{\gamma\varepsilon} L_{\varepsilon\zeta} \hat{s}_{\zeta\eta}^d m_{\eta\theta} f_\theta^{neq}\left(t, \boldsymbol{x}\right) \end{aligned} \tag{26}$$

そして，式 (26) を非平衡分布関数の漸化式としてとらえ，再帰的に代入して級数展開する．それにより，非平衡分布関数を近似的に平衡分布関数（マクロな物理量）の関数として以下のように表される．

$$|f^{neq}(t,\boldsymbol{x})\rangle = \sum_{l=1}^{\infty}\left[\left(-\tau\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{S}}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{L}\hat{\mathbf{S}}^{d}\mathbf{M}\right)^{l-1}\right]\left(\mathbf{M}^{-1}\hat{\mathbf{S}}^{-1}\mathbf{M}\right)|F^{eq}(t,\boldsymbol{x})\rangle \tag{27}$$

ここで，$\mathbf{L}\equiv L_{\alpha\beta}$ である．

2.2 連続の式と Navier-Stokes 方程式の導出

ここでは簡単のため，式 (27) 内の $|F^{eq}\rangle$[式 (23)] と $\mathbf{L}$[式 (24)] の時間微分項を落として議論を行う．式 (4) と (5) から分かる様に非平衡分布関数の零次と一次のモーメントは零になる．そこで，式 (27) で示される非平衡分布関数を用いて各モーメントを計算する．非平衡分布関数の零次のモーメントは

$$0=\sum_{\alpha} f_{\alpha}^{neq}=[C.1.]+[C.2.]+\cdots \tag{28}$$

となる．ここで，$[C.N.]$ は式 (27) の l と式 (23)，(24) の m の積が N となる項より算出された零次のモーメントを示す．$[C.1.]$ は

$$[C.1.]=-\frac{\Delta t}{s_0}\frac{\partial\rho_0 u_i}{\partial x_i} \tag{29}$$

と変形することができ，運動量の発散で表される．また，その他の項を計算すると格子幅の四乗に比例する項となるため，非平衡分布関数の零次のモーメントは

$$\frac{\partial\rho_0 u_i}{\partial x_i}=0+O\left(\Delta x^4\right) \tag{30}$$

と整理され，多緩和時間モデルを適用する格子ボルツマン方程式が空間四次精度で連続の式に帰着すると証明できる．次に非平衡分布関数の一次モーメントを求めると

$$0=\sum_{\alpha} c w_{\alpha} f_{\alpha}^{neq}=[Mo.1.]+[Mo.2.]+\cdots \tag{31}$$

となる．ここで $[Mo.N.]$ は連続の式と同様に l と m の積が N となる項より算出された一次のモーメントを示す．$[Mo.1.]$ と $[Mo.2.]$ は

$$[Mo.1.]=-\frac{\Delta t}{s_1}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(P\delta_{ij}+\rho_0 u_i u_j\right) \tag{32}$$

$$[Mo.2.]=\frac{\Delta t}{s_1}\nu\frac{\partial^2\rho_0 u_i}{\partial x_j\partial x_j} \tag{33}$$

となり，$[Mo.1.]$ からは NS 式の圧力勾配項と対流項に対応する項が現れ，$[Mo.2.]$ は粘性項が現れる．そのため，非平衡分布関数の一次モーメントは

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(P\delta_{ij}+\rho_0 u_i u_j\right)=\nu\frac{\partial^2\rho_0 u_i}{\partial x_j\partial x_j} + \Delta x^2\left([TR.3.]+[TR.4.]\right)+O\left(\Delta x^4\right) \tag{34}$$

と整理され，式 (31) の高次項 $([Mo.3.],[Mo.4.]\cdots)$ からは格子幅の二乗以上に比例する項が現れるため，二次精度で NS 式に帰着すると言える．ここで，$[TR.3.]$ と $[TR.4.]$ はそれぞれ格子幅二乗の誤差項の三階微分項と四階微分項を示す．以下に NS 式に生じる誤差項 $[TR.3.],[TR.4.]$ を具体的に示す．ただし，NS 式の誤差項は x,y,z 方向に依存するベクトルであるが，ここでは x 方向の NS 式に生じる誤差項のみを記載する．三階微分項は

$$\begin{aligned}
[TR.3.]=\ & C_{3,1}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\left(P+\rho_0 u^2\right)\\
&+C_{3,2}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\left(\rho_0 v^2+\rho_0 w^2\right)\\
&+C_{3,3}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial\rho_0 uv}{\partial y}+\frac{\partial\rho_0 wu}{\partial z}\right)\\
&+C_{3,4}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)P\\
&+C_{3,5}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2\rho_0 v^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\rho_0 w^2}{\partial z^2}\right)\\
&+C_{3,6}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\rho_0 u^2\\
&+C_{3,7}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^2\rho_0 w^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\rho_0 v^2}{\partial z^2}\right)\\
&+C_{3,8}\left(\frac{\partial^3\rho_0 uv}{\partial y^3}+\frac{\partial^3\rho_0 wu}{\partial z^3}\right)\\
&+C_{3,9}\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}\left(\frac{\partial\rho_0 uv}{\partial z}+\frac{\partial\rho_0 wu}{\partial y}\right)\\
&+C_{3,10}\frac{\partial^3\rho_0 vw}{\partial x\partial y\partial z}
\end{aligned} \tag{35}$$

と表され，四階微分項は

$$\begin{aligned}
[TR.4.]=\ & C_{4,1}\frac{\partial^4\rho_0 u}{\partial x^4}\\
&+C_{4,2}\left(\frac{\partial^4}{\partial y^4}+\frac{\partial^4}{\partial z^4}\right)\rho_0 u\\
&+C_{4,3}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\left(\frac{\partial\rho_0 v}{\partial y}+\frac{\partial\rho_0 w}{\partial z}\right)\\
&+C_{4,4}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\rho_0 u\\
&+C_{4,5}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial^3\rho_0 v}{\partial y^3}+\frac{\partial^3\rho_0 w}{\partial z^3}\right)\\
&+C_{4,6}\frac{\partial^3}{\partial x\partial y\partial z}\left(\frac{\partial\rho_0 w}{\partial y}+\frac{\partial\rho_0 v}{\partial z}\right)\\
&+C_{4,7}\frac{\partial^4\rho_0 u}{\partial y^2\partial z^2}\\
&+C_{4,8}\frac{\partial^3}{\partial y^3}\left(\frac{\partial\rho_0 v}{\partial y}+\frac{\partial\rho_0 w}{\partial z}\right)
\end{aligned} \tag{36}$$

と表される．ここで，$C_{3,1}\sim C_{3,10}$ と $C_{4,1}\sim C_{4,8}$ は $[TR.3.]$ と $[TR.4.]$ の各項の係数を示しており，緩和係数の多項式で表される．一例として，$C_{3,1}$ を以下に示す．

$$\begin{aligned}
C_{3,1}=\ &\frac{8}{81s_5^2s_{10}}-\frac{4}{81s_4s_5s_{10}}-\frac{4}{81s_4s_{10}s_{18}}+\frac{4}{81s_5s_{10}s_{18}}\\
&+\frac{1}{81s_4s_5}+\frac{1}{9s_4s_{10}}-\frac{1}{9s_5s_{10}}+\frac{2}{81s_4s_{18}}-\frac{2}{81s_5s_{18}}-\frac{8}{81s_5^2}\\
&-\frac{1}{27s_4}+\frac{8}{9s_5}-\frac{1}{24}
\end{aligned} \tag{37}$$

以上のことから，これらの係数を最小化するように緩和係数を選ぶことで，誤差項を最小化する最適な緩和係数を数学的に導出することが可能となった．

3. 結論

D3Q27 モデルを適用した多緩和時間モデル格子ボルツマン方程式の誤差解析を行うことで，連続の式と NS 式に生じる誤差項と緩和行列の関係を数学的に導出した．また，各誤差項は流体の圧力や速度の微分項で表される．そのため，各誤差項の影響を考慮して誤差を最小化する

最適な緩和行列を数学的に導出することが可能となり，MRT-LBM の数値安定性，計算精度のさらなる向上が期待できる．

参考文献

(1) Bouzidi, M. H., Firdaouss, M. and Lallemand, P., “Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries”, Physics of fluids, 13 (2001), pp.3452-3459.

(2) d’Humiéres, D., “Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions”, Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 360 (2002), pp.437-451.

(3) Chen, S. and Doolen, G. D., “Lattice Boltzmann method for fluid flows”, Annual review of fluid mechanics, 30 (1998), pp.329-364.

(4) Kang, S. K., and Hassan, Y. A., “The effect of lattice models within the lattice Boltzmann method in the simulation of wall-bounded turbulent flows”, Journal of Computational Physics, 232 (2013), pp.100-117.

(5) Suga, K., Kuwata, Y., Takashima, K. and Chikasue, R., “A D3Q27 multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method for turbulent flows”, Computers & Mathematics with Applications, 69 (2015), pp.518-529.

(6) Holdych, D. J., Noble, D. R., Georgiadis, J. G., and Buckius, R. O., “Truncation error analysis of lattice Boltzmann methods”, Journal of Computational Physics, 193 (2004), pp.595-619.