

УДК: 519.62/64+517.958:536

Исследование устойчивости разностных схем метода решеточных уравнений Больцмана для моделирования диффузии

Г. В. Кривовичев

Санкт-Петербургский государственный университет,
факультет прикладной математики — процессов управления,
Россия, 198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский просп., д. 35

E-mail: g.krivovichev@spbu.ru

Получено 20.02.2016, после доработки — 22.03.2016.

Принято к публикации 22.03.2016.

В работе исследуется устойчивость разностных схем, применяемых в методе решеточных уравнений Больцмана для моделирования диффузии в одномерном случае для решеток $D1Q2$ и $D1Q3$. Разностные схемы строятся для системы линейных кинетических уравнений Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК) относительно одночастичных функций распределения. Проведен краткий обзор работ других авторов. С использованием мультискейлингового разложения методом Чепмена–Энскога показано, что система уравнений БГК при малых числах Кнудсена сводится к линейному уравнению диффузии. Решение уравнения диффузии находится как сумма функций распределения. С использованием метода бегущих волн показана асимптотическая устойчивость решения задачи Коши для системы кинетических уравнений типа БГК во всем диапазоне времени релаксации. С помощью метода дифференциального приближения показана устойчивость разностной схемы для случая решетки $D1Q2$. Условие устойчивости получено в виде неравенства на значения времени релаксации. Исследуется возможность сведения анализа устойчивости разностных схем для системы уравнений БГК к анализу схем специального вида для уравнения диффузии в случае решетки $D1Q3$. Численное исследование устойчивости проводилось с помощью метода фон Неймана. В ходе анализа исследовались величины модулей собственных значений матрицы перехода в пространстве параметров разностной схемы. Показано, что в широком диапазоне изменения параметров модули собственных значений не превосходят единицы, что говорит об устойчивости схемы по начальным условиям.

Ключевые слова: метод решеточных уравнений Больцмана, устойчивость

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-31-00021 мол_а.

UDC: 519.62/64+517.958:536

Stability investigation of finite-difference schemes of lattice Boltzmann method for diffusion modelling

G. V. Krivovichev

Saint-Petersburg State University,
Department of Applied Mathematics — Processes of Control,
35 University prospekt, Saint-Petersburg, Peterhof, 198504, Russia

E-mail: g.krivovichev@spbu.ru

Received 20.02.2016, after completion — 22.03.2016.

Accepted for publication 22.03.2016.

Stability of finite difference schemes of lattice Boltzmann method for modelling of 1D diffusion for cases of D1Q2 and D1Q3 lattices is investigated. Finite difference schemes are constructed for the system of linear Bhatnagar–Gross–Krook (BGK) kinetic equations on single particle distribution functions. Brief review of articles of other authors is realized. With application of multiscale expansion by Chapman–Enskog method it is demonstrated that system of BGK kinetic equations at small Knudsen number is transformed to scalar linear diffusion equation. The solution of linear diffusion equation is obtained as a sum of single particle distribution functions. The method of linear travelling wave propagation is used to show the unconditional asymptotic stability of the solution of Cauchy problem for the system of BGK equations at all values of relaxation time. Stability of the scheme for D1Q2 lattice is demonstrated by the method of differential approximation. Stability condition is written in form of the inequality on values of relaxation time. The possibility of the reduction of stability analysis of the schemes for BGK equations to the analysis of special schemes for diffusion equation for the case of D1Q3 lattice is investigated. Numerical stability investigation is realized by von Neumann method. Absolute values of the eigenvalues of the transition matrix are investigated in parameter space of the schemes. It is demonstrated that in wide range of the parameters changing the values of modulus of eigenvalues are lower than unity, so the scheme is stable with respect to initial conditions.

Keywords: lattice Boltzmann method, stability

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2016, vol. 8, no. 3, pp. 485–500 (Russian).

The reported study was funded by Russian Foundation of Basic Research according to research project No. 16-31-00021 mol_a.

Введение

Метод решеточных уравнений Больцмана (lattice Boltzmann method, далее — метод LBM) в настоящее время считается одним из наиболее эффективных методов моделирования гидро- и газодинамических процессов со сложными физическими эффектами [Евстигнеев, Магницкий, 2010; Kupershtokh, 2011; Nourgaliev и др., 2003] и процессов переноса различной природы [Gerl и др., 2013; Wolf-Gladrow, 2005]. В отличие от подходов, основанных на решении уравнений, описывающих эволюцию так называемую макровеличин — функций, характеризующих сплошную среду (плотность, скорость, температуру и др.), в методе LBM рассматриваются системы кинетических уравнений относительно функций распределения частиц, через значения которых вычисляются значения макровеличин. При этом алгоритмы LBM обладают широкими возможностями для распараллеливания и реализации на современных гибридных высокопроизводительных системах, использующих центральные и графические процессоры [Бикулов и др., 2012; Бикулов, Сенин, 2013; Бикулов, 2015; Грачев, Дмитриев, Сенин, 2011].

Настоящая работа посвящена исследованию разностных схем, используемых в методе LBM для моделирования одномерных диффузионных процессов. Показано, что системы кинетических уравнений, которые дискретизируются разностными схемами, при переходе к макроскопическому пределу сводятся к линейному уравнению диффузии. Необходимость в решении этого уравнения также возникает на одном из этапов различных вариантов метода расщепления на основе LBM [Кривовичев, 2013а; Кривовичев, 2014; Shu и др., 2006; Wang, Shu, Teo, 2014]. В работе рассматриваются случаи одномерных решеток D1Q2 и D1Q3. Показана устойчивость решений начальных задач для систем кинетических уравнений. С помощью метода дифференциального приближения удалось показать безусловную устойчивость по начальным условиям разностной схемы, предложенной в случае решетки D1Q2. Кроме того, для случая решетки D1Q3 с помощью метода фон Неймана показана безусловная устойчивость однопараметрической схемы, предложенной в работе [Suga, 2010]. Особенность проведенного анализа состоит в том, что при исследованиях не производилось перехода к уравнениям для макровеличин и к аппроксимирующим их разностным схемам, как это было сделано, к примеру, в [Suga, 2010].

Система кинетических уравнений для моделирования диффузионных процессов

Система кинетических уравнений Бхатнагара–Гросса–Крука [Bhatnagar, Gross, Krook, 1954] для моделирования диффузионных процессов в одномерном случае имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial f_i}{\partial x} = -\frac{1}{\lambda} (f_i - f_i^{(eq)}), \quad (1)$$

где $t > 0$ — время, $x \in \mathbf{R}$ — пространственная переменная, $f_i = f_i(t, x)$ — функции распределения частиц, движущихся со скоростями $V_i = Ve_i$, где $V = l/\delta t$, l — длина свободного пробега, δt — время свободного пробега, $e_i, i = \overline{1, n}$, — числа, определяющие решетку D1Qn, λ — время релаксации, $f_i^{(eq)}$ — равновесные функции распределения.

Макровеличина, характеризующая процесс на макроуровне, имеет физический смысл концентрации вещества и вычисляется через функции распределения следующим образом:

$$c(t, x) = \sum_{i=1}^n f_i(t, x). \quad (2)$$

В свою очередь, равновесные функции распределения вычисляются через $c(t, x)$ таким образом [Wolf-Gladrow, 1995]:

$$f_i^{(eq)} = \frac{c(t, x)}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(t, x). \quad (3)$$

Как можно видеть, выбираемые таким образом $f_i^{(eq)}$ удовлетворяют требованию, предъявляемому к равновесным функциям распределения в теории метода LBM [Sofonea, Sekerka, 2003; Wolf-Gladrow, 2005]:

$$\sum_{i=1}^n f_i^{(eq)}(t, x) = \sum_{i=1}^n f_i(t, x) = c(t, x). \quad (4)$$

Заметим, что система (1) может использоваться для моделирования процессов переноса в более широком диапазоне изменения числа Кнудсена, чем скалярное уравнение диффузии относительно концентрации. Число Кнудсена определяется как $\varepsilon = l/L$, где L есть характерный линейный размер области, в которой происходит процесс. Уравнение диффузии будет справедливо только в случае макроскопического предела, характеризуемом $\varepsilon \rightarrow 0$, когда допустимо использовать приближение сплошной среды.

По аналогии с работой [Sofonea, Sekerka, 2003], в которой метод Чепмена–Энскога использовался для системы кинетических уравнений, описывающей динамику слабосжимаемого газа, покажем, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ система (1) может быть сведена к линейному уравнению диффузии относительно концентрации $c(t, x)$.

Выпишем асимптотическое представление для $f_i(t, x)$, справедливое при $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$f_i \approx f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)}, \quad (5)$$

где в качестве нулевых приближений выступают равновесные функции распределения: $f_i^{(0)} = f_i^{(eq)}$, а первые и вторые приближения удовлетворяют свойству [Sofonea, Sekerka, 2003; Wolf-Gladrow, 2005], непосредственно следующему из (4):

$$\sum_{i=1}^n f_i^{(1)} = \sum_{i=1}^n f_i^{(2)} = 0. \quad (6)$$

Используя характерные для метода Чепмена–Энскога мультискейлинговые представления для производных по независимым переменным [Wolf-Gladrow, 2005]

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_1}, \quad (7)$$

получим

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2} + o(\varepsilon^2), \quad \frac{\partial f_i}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial x_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial x_1} + o(\varepsilon^2). \quad (8)$$

Подставляя (5) и (8) в (1), получим с точностью до членов второго порядка малости по ε

$$\varepsilon^2 \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2} + \varepsilon V_i \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial x_1} + \varepsilon^2 V_i \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial x_1} = -\frac{1}{\lambda} (\varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)});$$

приравнивая члены при одинаковых степенях ε , получим для первых и вторых приближений

$$f_i^{(1)} = -\lambda V_i \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial x_1}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2} + V_i \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial x_1} = -\frac{1}{\lambda} f_i^{(2)}; \quad (10)$$

подставляя (9) в (10), будем иметь

$$\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2} - \lambda V_i^2 \frac{\partial^2 f_i^{(0)}}{\partial x_1^2} = -\frac{1}{\lambda} f_i^{(2)}. \quad (11)$$

Умножая (11) на ε^2 и суммируя по i , получим с учетом (3), (4), (6) и (7):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \lambda V^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (12)$$

Как можно видеть, (12) представляет собой линейное уравнение диффузии со следующим выражением для коэффициента диффузии:

$$D = \lambda V^2. \quad (13)$$

Таким образом, справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Пусть $\varepsilon \rightarrow 0$. Тогда система кинетических уравнений (1) с точностью до членов второго порядка малости по ε может быть сведена к однородному линейному уравнению диффузии с постоянным коэффициентом диффузии D , определяемым соотношением (13).

Анализ устойчивости решения задачи Коши для системы кинетических уравнений

Исследуем устойчивость решений задачи Коши для системы (1). Введем безразмерные переменные

$$\tilde{t} = \frac{t}{\delta t}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{l}, \quad \tilde{f}_i = \frac{f_i}{\Phi},$$

где Φ есть характерное значение функций распределения. При дальнейших выкладках знак тильды в обозначениях безразмерных переменных будем опускать.

Система (1) в безразмерных переменных примет следующий вид:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + e_i \frac{\partial f_i}{\partial x} = -\frac{1}{\tau} \left(f_i - \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n f_s \right), \quad (14)$$

где $\tau = \lambda/\delta t$ есть безразмерное время релаксации.

Заметим, что в силу линейности и однородности (14) вид ее системы в отклонениях будет аналогичен (14), в связи с чем исследование устойчивости решений задачи Коши для (14) можно проводить непосредственно без перехода к системе в отклонениях от невозмущенного решения.

Поставим для (14) начальные условия:

$$f_i(0, x) = f_i^0 \exp(-jkx), \quad i = 1, \dots, n, \quad (15)$$

где $j^2 = -1$, $k \in \mathbf{R}$, $f_i^0 \in \mathbf{R}$.

Будем искать решение задачи Коши (14)–(15) в виде бегущей волны:

$$f_i(t, x) = f_i^0 \exp(j(\omega t - kx)), \quad (16)$$

где ω есть частота.

В случае решетки D1Q2 имеем $e_1 = -1, e_2 = 1$. Подставляя (16) в (14), получим систему из двух линейных однородных уравнений относительно f_1^0 и f_2^0 . Из условия равенства нулю определителя ее матрицы получим дисперсионное соотношение для системы (14):

$$\omega^2 - \frac{j}{\tau}\omega - k^2 = 0. \quad (17)$$

Корни (17) имеют вид

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\frac{j}{\tau} \pm \sqrt{4k^2 - \frac{1}{\tau^2}} \right). \quad (18)$$

Рассмотрим три случая значений дискриминанта $\mu = 4k^2 - 1/\tau^2$: $\mu > 0, \mu = 0, \mu < 0$. При $\mu > 0$ решения вида (16) записываются таким образом:

$$f_i^\pm(t, x) = f_i^{0,\pm} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \exp\left(j\left(\pm \frac{\sqrt{\mu}}{2}t - kx\right)\right);$$

при $\mu = 0$ получим решение вида

$$f_i(t, x) = f_i^0 \exp\left(-\frac{t}{2\tau}\right) \exp(-jkx).$$

Как можно видеть, при условии $\tau > 0$, то есть при всех физически допустимых значениях этого параметра, при $\mu \geq 0$ имеем решения, асимптотически стремящиеся к нулю при $t \rightarrow +\infty$, что говорит об асимптотической устойчивости решений задачи Коши (14)–(15).

В случае $\mu < 0$ корни (18) будут являться чисто мнимыми, а соответствующие им решения примут вид

$$f_i^\pm(t, x) = f_i^{0,\pm} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tau} \pm \sqrt{|\mu|}\right)t\right) \exp(-jkx).$$

Очевидно, что при $1/\tau + \sqrt{|\mu|} \geq 0$ решения будут асимптотически устойчивыми. Неустойчивость возможна только в случае, когда

$$\frac{1}{\tau} - \sqrt{|\mu|} < 0;$$

рассматривая это неравенство совместно с $\mu < 0$, получим условия неустойчивости:

$$4k^2\tau^2 - 1 < 0, \quad \sqrt{1 - 4k^2\tau^2} - 1 > 0;$$

очевидно, что эти условия противоречат друг другу. Таким образом, решение (14) в случае решетки D1Q2 будет устойчиво при всех $\tau > 0$.

В случае решетки D1Q3 имеем $e_1 = -1, e_2 = 0, e_3 = 1$. После подстановки (16) в (14) получим дисперсионное соотношение

$$a\omega^3 + b\omega^2 + c\omega + d = 0, \quad (19)$$

где $a = -j, b = -2/\tau, c = j(1/\tau^2 + k^2), d = k^2/\tau^2$.

Корни (19) имеют следующий вид:

$$\omega_1 = \frac{j}{\tau}, \quad \omega_{2,3} = \frac{1}{2} \left(\frac{j}{\tau} \pm \sqrt{4k^2 - \frac{1}{\tau^2}} \right).$$

Как можно заметить, $\omega_{2,3}$ такие же, как и для случая шаблона D1Q2; следовательно, соответствующие им решения асимптотически устойчивы при $\tau > 0$. Корню ω_1 соответствует решение

$$f_i(t, x) = f_i^0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \exp(-jkx),$$

которое является асимптотически устойчивым при $\tau > 0$.

Таким образом, можно сформулировать следующую теорему.

Теорема 2. Пусть в (14) параметр $\tau > 0$. Тогда для случаев решеток D1Q2 и D1Q3 решение задачи Коши (14)–(15) будет являться асимптотически устойчивым по Ляпунову.

Решеточные уравнения Больцмана для моделирования одномерных диффузионных процессов

Явные двухслойные разностные схемы, применяемые в методе LBM, можно выписать в следующем виде:

$$f_i(t + \delta t, x + V_i \delta t) - f_i(t, x) = -\frac{1}{\tau} (f_i(t, x) - f_i^{(eq)}), \quad (20)$$

где (t, x) есть узел пространственно-временной сетки, построенной с шагом δt по времени и шагом l по пространству. В литературе систему разностных уравнений (20) называют системой решеточных уравнений Больцмана (lattice Boltzmann equations, далее — LBE-уравнения).

Разностная схема вида (20), по всей видимости, впервые была предложена в [Wolf-Gladrow, 1995] для случая решетки D1Q2. В этой работе с использованием метода Чепмена–Энскога было получено следующее выражение для коэффициента схемной диффузии:

$$D = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{l^2}{\delta t}. \quad (21)$$

Если переписать выражение для истинного коэффициента диффузии (13) через безразмерное время релаксации τ , получим $D = \tau l^2 / \delta t$. Как можно заметить, (21) будет отличаться от этого выражения наличием фиктивной добавки $-l^2/2\delta t$. В связи с этим схема (20) при $\tau \in (0, \frac{1}{2})$ будет соответствовать уравнению диффузии с отрицательным коэффициентом диффузии. Задача Коши для такого уравнения эквивалентна задаче с обратным временем, которая, как известно [Самарский, Вабищевич, 2004], является некорректно поставленной по Адамару, потому основным условием устойчивости схемы (20) является ограничение

$$\tau > \frac{1}{2}. \quad (22)$$

Исследованию устойчивости схемы (20) и ее аналогов для случая процесса конвекции-диффузии посвящено немало работ. Основных подходов к исследованию устойчивости — два: первый основан на исследовании непосредственно разностной схемы (20) и использует известные методы анализа устойчивости (преимущественно метод фон Неймана); второй основан на переходе от (20) к специальным разностным схемам для уравнения диффузии.

В работе [Rheinlander, 2008] показана безусловная устойчивость схемы в случае решетки D1Q2 с использованием метода фон Неймана: авторами исследовались собственные значения матрицы перехода. В статье [Servan-Camas, Tsai, 2009] исследуется устойчивость аналогичной (20) разностной схемы для расчета конвекции и диффузии в случае решетки D1Q3 с помощью анализа устойчивости линейного приближения на основе метода фон Неймана. После линеаризации равновесных функций распределения авторами было показано, что достаточным условием устойчивости является их неотрицательность для всех возможных значений входных параметров и макроскопических переменных. В [Junk, Yang, 2015] исследуются схемы вида (20) для расчета конвективно-диффузионных процессов с помощью подхода, близкого к методу фон Неймана: авторы исследуют спектр оператора перехода в норме пространства L_2 . В работе [Dellacherie, 2014] устойчивость (20) по граничным условиям различного типа показана с помощью дискретного принципа максимума. Случай модифицированной разностной схемы в случае решетки D1Q2 для расчета процессов, моделируемых уравнением конвекции-диффузии с источником рассмотрен в [Mohamad, Kuzmin, 2012], где показано, что соответствующая разностная схема будет допускать численную дисперсию.

Анализ устойчивости схемы вида (20) посредством перехода к схеме для расчета $c(t, x)$, по всей видимости, впервые был произведен в работе [Ancona, 1994]. В случае решетки D1Q2 автор показал возможность приведения к явной трехслойной разностной схеме второго порядка аппроксимации типа Дюфорта–Франкела для численного решения задач для уравнения диффузии. Как известно [Du Fort, Frankel, 1953], эта разностная схема является, безусловно, устойчивой по начальным условиям, хотя в [Taylor, 1970] показано, что по некоторым типам граничных условий схема является неустойчивой.

В работе [Suga, 2010] для случая шаблона D1Q3 была предложена однопараметрическая схема со следующим представлением равновесных функций распределения:

$$f_i^{(eq)} = W_i \sum_{s=1}^3 f_s(t, x), \quad (23)$$

где $W_1 = W_3 = (1 - \sigma)/2$, $W_2 = \sigma$, где $\sigma \in (0, 1]$. С использованием метода Чепмена–Энскога было получено следующее выражение для коэффициента схемной диффузии:

$$D = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{(1 - \sigma)l^2}{\delta t}.$$

Используя схему вида (20), автором была построена явная четырехслойная разностная схема для уравнения диффузии и было получено условие на параметры σ и τ , обеспечивающее четвертый порядок аппроксимации. С использованием метода фон Неймана автором показана безусловная устойчивость этой схемы при $\tau > 1/2$ и любых значений $\sigma \in (0, 1]$.

Вообще говоря, утверждения авторов [Ancona, 1994] и [Suga, 2010] о распространении результатов анализа устойчивости разностной схемы для расчета макровеличины $c(t, x)$ на общий случай разностной схемы вида (20) являются гипотезами, поскольку само макроскопическое уравнение будет справедливо только в случае $\varepsilon \rightarrow 0$ (на практике $\varepsilon \ll 1$), тогда как система (1), вообще говоря, описывает процессы переноса в более широком диапазоне изменения числа Кнудсена ε . Преимущество при анализе устойчивости схемы для $c(t, x)$ состоит в том, что рассматривается скалярное разностное уравнение, в отличие от случая системы (20), при этом возможно сведение к уже исследованным ранее схемам. В связи с этим одна из задач настоящей работы состоит в том, чтобы показать справедливость подобной гипотезы для случая схемы из [Suga, 2010].

В настоящей работе устойчивость схем вида (20) в случае решетки D1Q2, по всей видимости, впервые исследуется с помощью метода дифференциального приближения [Самарский, Попов, 2009], с помощью которого условия устойчивости легко получить аналитически. Для случая решетки D1Q3 устойчивость однопараметрической схемы из [Suga, 2010] исследуется с помощью метода фон Неймана без перехода к разностной схеме для расчета макровеличины $c(t, x)$. В результате численного анализа устойчивости удалось подтвердить результаты автора [Suga, 2010] и справедливость гипотезы о возможности распространения результатов анализа устойчивости схемы для уравнения диффузии относительно $c(t, x)$ на общий случай схемы вида (20).

Исследование устойчивости для случая решетки D1Q2

Для исследования устойчивости в случае решетки D1Q2 успешно может быть применен метод дифференциального приближения, хотя в случае решетки D1Q3 его применение приводит к громоздким выкладкам.

Подставляя в (20) при $n = 2$ достаточно гладкие функции $f_i(t, x)$ и представляя по формуле Тейлора их значения в окрестности узла (t, x) , получим с точностью до членов второго порядка по δt включительно систему, являющуюся дифференциальным приближением (20):

$$\delta t \frac{\partial f_i}{\partial t} + \delta t V_i \frac{\partial f_i}{\partial x} + \frac{\delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} + \frac{\delta t^2}{2} V_i^2 \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} + \delta t^2 V_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial x \partial t} = -\frac{1}{\tau} \left(f_i - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 f_m \right). \quad (24)$$

Разделив (24) на δt и продифференцировав по t и по x , получим выражения для вторых частных производных:

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} = -V_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial t \partial x} - \frac{\delta t}{2} \frac{\partial^3 f_i}{\partial t^3} - \frac{\delta t}{2} V_i^2 \frac{\partial^3 f_i}{\partial t \partial x^2} - \delta t V_i \frac{\partial^3 f_i}{\partial t^2 \partial x} - \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial t} \right), \quad (25)$$

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial t \partial x} = -V_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} - \frac{\delta t}{2} \frac{\partial^3 f_i}{\partial x \partial t^2} - \frac{\delta t}{2} V_i^2 \frac{\partial^3 f_i}{\partial x^3} - \delta t V_i \frac{\partial^3 f_i}{\partial x^2 \partial t} - \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x} - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial x} \right), \quad (26)$$

где учтено, что $\lambda = \tau \delta t$. Подставляя (25) в (24), деля на δt , получим с точностью до членов первого порядка по δt включительно

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial f_i}{\partial x} + \frac{\delta t}{2} V_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial t \partial x} + \frac{\delta t}{2} V_i^2 \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} - \frac{1}{2\tau} \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial t} \right) = \\ = -\frac{1}{\lambda} \left(f_i - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 f_m \right). \end{aligned} \quad (27)$$

Подставляя (26) в (27), получим следующую запись дифференциального приближения:

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial f_i}{\partial x} \right) + \frac{V_i}{4\tau} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial x} + \frac{1}{4\tau} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial t} = -\frac{1}{\lambda} \left(f_i - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 f_m \right). \quad (28)$$

Дифференциальное приближение в виде (28) удобно исследовать, поскольку при такой записи отсутствуют старшие производные. Система (28) в введенных ранее безразмерных переменных имеет вид

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + e_i \frac{\partial f_i}{\partial x} \right) + \frac{e_i}{4\tau} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial x} + \frac{1}{4\tau} \sum_{m=1}^2 \frac{\partial f_m}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} \left(f_i - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 f_m \right). \quad (29)$$

Поставим для (29) начальное условие в виде (15) и будем искать решение соответствующей задачи Коши в виде бегущей волны (16). Дисперсионное соотношение является квадратным уравнением:

$$a\omega^2 + b\omega + c = 0, \quad (30)$$

где

$$a = -\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right), \quad b = \frac{j}{\tau}, \quad c = -k^2\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right).$$

Дискриминант (30) имеет вид

$$\gamma = \frac{k^2(2\tau - 1)^2 - 1}{\tau^2}.$$

В случае $\gamma = 0$ уравнение (30) имеет чисто мнимый кратный корень $\omega = j/(2\tau - 1)$, которому соответствует решение

$$f_i(t, x) = f_i^0 \exp\left(-\frac{1}{2\tau - 1}t\right) \exp(-jkx),$$

которое будет асимптотически устойчивым при выполнении условия (22).

В случае $\gamma > 0$ (30) имеет корни

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{2\tau - 1} (j \mp \tau \sqrt{\gamma}),$$

которым соответствуют решения

$$f_i^\mp(t, x) = f_i^{0,\mp} \exp\left(-\frac{1}{2\tau - 1}t\right) \exp\left(j\left(\mp \frac{\tau}{2\tau - 1} \sqrt{\gamma}t - kx\right)\right),$$

которые, очевидно, тоже будут асимптотически устойчивы при выполнении (22).

При $\gamma < 0$ корни (30) являются чисто мнимыми:

$$\omega_{1,2} = \frac{j}{2\tau - 1} (1 \mp \tau \sqrt{|\gamma|}),$$

отвечающие им решения имеют вид

$$f_i^\mp(t, x) = f_i^{0,\mp} \exp\left(-\frac{1 \mp \tau \sqrt{|\gamma|}}{2\tau - 1}t\right) \exp(-jkx). \quad (31)$$

Как можно заметить, при выполнении (22) решения вида (31) могут быть неустойчивыми, только если выполняется соотношение $1 - \tau \sqrt{|\gamma|} < 0$. Таким образом, условия неустойчивости имеют вид

$$\gamma < 0, \quad 1 - \tau \sqrt{|\gamma|} < 0,$$

которые в виде неравенств на значения τ и k запишутся в виде

$$k^2(2\tau - 1)^2 < 1, \quad 1 - \sqrt{1 - k^2(2\tau - 1)^2} < 0.$$

Несложно увидеть, что эти условия противоречат друг другу, и можно сформулировать следующую теорему.

Теорема 3. Пусть выполняется условие (22). Тогда решение задачи Коши (20), (15) при $n = 2$ является асимптотически устойчивым по Ляпунову.

Численное исследование устойчивости однопараметрической схемы в случае решетки D1Q3

Все разностные схемы вида (20) в случае решетки D1Q3 могут рассматриваться как частные случаи однопараметрической схемы, предложенной в [Suga, 2010]. Как уже отмечалось выше, в этом случае для анализа устойчивости будет применяться метод фон Неймана.

Представим решение разностной схемы (20) при $n = 3$ в следующем виде:

$$f_i(t, x) = F_i(t) \exp(j\theta x), \quad (32)$$

где $\theta \in [-\pi, \pi]$.

Подставляя (32) в безразмерный вариант (20) для случая разностной схемы из [Suga, 2010] (см. (23)):

$$f_i(t+1, x+e_i) = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) f_i(t, x) + W_i \sum_{s=1}^3 f_s(t, x),$$

получим систему разностных уравнений относительно $F_i(t)$:

$$F_i(t+1) = \sum_{s=1}^3 A_{is} F_s(t), \quad (33)$$

где A_{is} образуют матрицу размерности 3×3 и вычисляются следующим образом:

$$A_{is} = \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{\tau} + \frac{W_i}{\tau}\right) \exp(-j\theta e_i), & s = i, \\ \frac{W_i}{\tau} \exp(-j\theta e_i), & s \neq i. \end{cases}$$

Как известно [Леонов, Шумафов, 2005], нулевое решение (33) будет асимптотически устойчивым, если все собственные значения ее матрицы будут лежать в единичном круге. Собственные значения матрицы из A_{is} являются функциями параметров θ , τ , σ , причем τ и σ являются входными параметрами. Собственные значения рассматриваемой матрицы легко получить в современных системах символьных вычислений. Выражения для них не приводятся в силу их громозкости. В приложении приведен листинг мини-программы на языке системы Maple для получения собственных значений.

В случае $\sigma \in (0, 1]$ в пространстве параметров (τ, σ) исследование устойчивости производилось, по аналогии с [Кривовичев, 2013b; Кривовичев, Михеев, 2014; Кривовичев, Михеев, 2015; Krivovichev, 2015], посредством построения и анализа областей устойчивости. Промежутки изменения τ и σ разбивались равномерными сетками и для каждого узла (τ_k, σ_k) вычислялось значение следующей величины:

$$\Lambda(\tau_k, \sigma_k) = \max_{i=1,3} \left(\max_{\theta \in [-\pi, \pi]} |\lambda_i(\theta, \tau_k, \sigma_k)| \right),$$

при этом промежуток изменения θ тоже разбивался равномерной сеткой. Узел (τ_k, σ_k) считался входящим в область устойчивости, если оказалось, что $\Lambda(\tau_k, \sigma_k) \leq 1$.

На рис. 1 представлены графики функций

$$\chi_i(\tau, \sigma) = \max_{\theta \in [-\pi, \pi]} |\lambda_i(\theta, \tau, \sigma)|,$$

построенных для случая $\tau \in (1/2, 5]$, который соответствует практически интересному случаю, когда коэффициент диффузии является малым. Рассматривалось разбиение промежутка

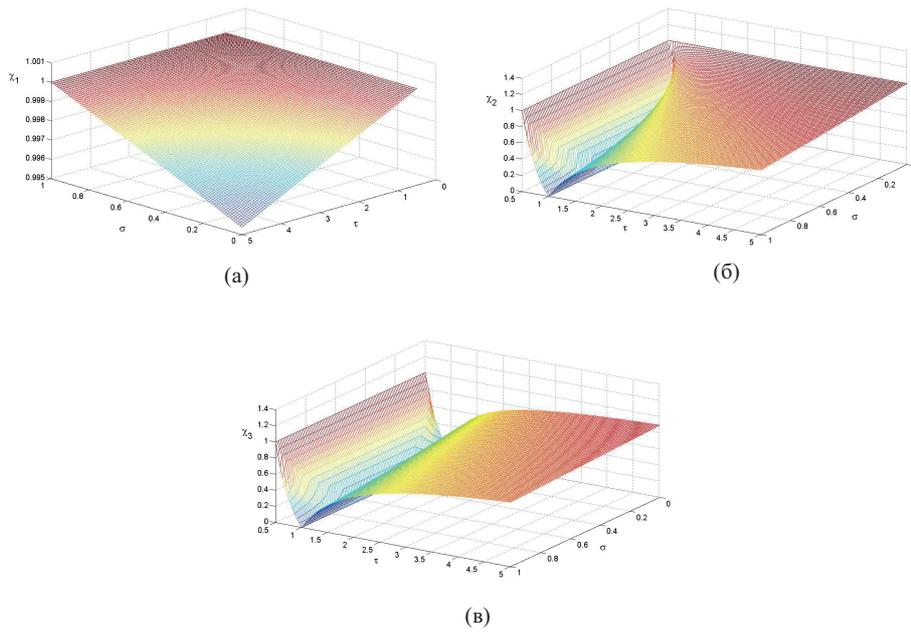


Рис. 1. Графики функций $\chi_i(\tau, \sigma)$ при $\tau \in (0.5, 5]$: а) $\chi_1(\tau, \sigma)$; б) $\chi_2(\tau, \sigma)$; в) $\chi_3(\tau, \sigma)$

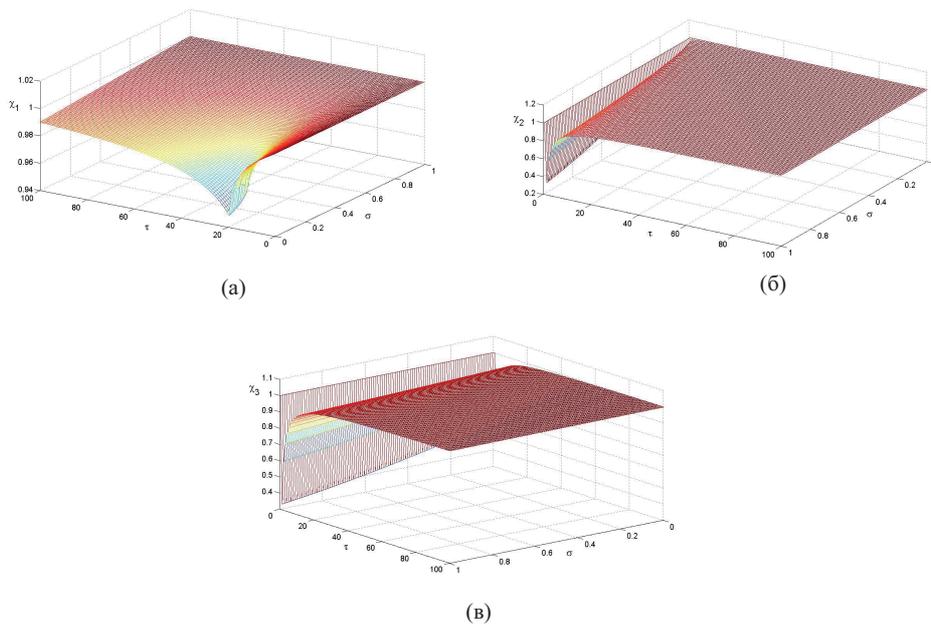


Рис. 2. Графики функций $\chi_i(\tau, \sigma)$ при $\tau \in (0.5, 100]$: а) $\chi_1(\tau, \sigma)$; б) $\chi_2(\tau, \sigma)$; в) $\chi_3(\tau, \sigma)$

$\theta \in [-\pi, \pi]$ сеткой из 100 узлов, промежутки изменения τ и σ разбивались сетками из 400 узлов. Численные расчеты производились в среде MatLab. Как можно видеть, значения функций χ_i , характеризующие максимально возможные значения модулей собственных чисел λ_i , не превосходят единицы, что говорит о выполнении спектрального признака устойчивости. Область устойчивости оказалась совпадающей со всем множеством изменения параметров τ и σ , что говорит о безусловной устойчивости разностной схемы $\forall \sigma$ при выполнении (22).

На рис. 2 представлены графики χ_i при $\tau \in (1/2, 100]$. Как можно видеть, и для этого случая модули собственных значений не превосходят единицы, причем значения χ_i асимптотически стремятся к единице при увеличении τ . Ситуация с областью устойчивости является аналогичной предыдущему случаю.

Таким образом, проведенный анализ показал справедливость гипотезы автора [Suga, 2010] о возможности распространения результатов анализа устойчивости выведенных из (20) схем для расчета макровеличины $c(t, x)$ на случай схем вида (20). Представляет интерес применение этой гипотезы к анализу устойчивости так называемых конечно-разностных решеточных схем Больцмана (finite-difference-based lattice Boltzmann schemes) [Кривовичев, 2014; Кривовичев, Михеев, 2015] для расчета процессов диффузии и конвекции-диффузии.

Заключение

В работе проведено исследование устойчивости разностных схем метода LBM, предложенных для численного решения задач, описывающих одномерные диффузионные процессы переноса. Показана асимптотическая устойчивость решения начальной задачи для системы уравнений Бхатнагара–Гросса–Крука. Рассмотрены случаи разностных схем для решеток D1Q2 и D1Q3. С помощью метода дифференциального приближения аналитически показана устойчивость разностной схемы в случае решетки D1Q2 при выполнении условия (22). Для случая решетки D1Q3 с использованием метода фон Неймана проведено численное исследование устойчивости однопараметрической схемы из [Suga, 2010], установлена ее устойчивость при всех значениях параметра в случае выполнения условия (22). Показана справедливость гипотезы о распространении результатов анализа устойчивости схем для расчета концентрации на случай схем вида (20).

В работе рассматривались схемы только с одним временем релаксации. Подробному анализу устойчивости схем со многими временами релаксации посвящены работы [Ginzburg, d’Humières, Kuzmin, 2010; Kuzmin, Ginzburg, Mohamad, 2011].

Приложение. Листинг-программы для получения собственных значений матрицы с компонентами A_{is}

```
> A:=array(1..3,1..3,[]);

>A[1,1]:=exp(I*theta)*(1-1/tau+(1-sigma)/(2*tau))-lambda;

> A[1,2]:=exp(I*theta)*(1-sigma)/(2*tau);

> A[2,1]:=(sigma)/(tau);

> A[2,2]:=(1-1/tau+(sigma)/(tau))-lambda;

> A[3,1]:=(exp(-I*theta))*(1-sigma)/(2*tau);

> A[3,3]:=exp(-I*theta)*(1-1/tau+(1-sigma)/(2*tau))-lambda;

> A[1,3]:=A[1,2]; A[2,3]:=A[2,1]; A[3,2]:=A[3,1];

>P:=simplify(det(A));

> solve(P, lambda);
```

Список литературы (References)

- Бикулов Д. А., Сенин Д. С., Демин Д. С., Дмитриев А. В., Грачев Н. Е.* Реализация метода решеточных уравнений Больцмана для расчетов на GPU-кластере // Вычислительные методы и программирование. — 2012. — Т. 13, № 1. — С. 221–228.
Bikulov D. A., Senin D. S., Demin D. S., Dmitriev A. V., Grachev N. E. Realizatsiia metoda reshetochnykh uravnenii Boltzmana dlia raschetov na GPU-clastere [Implementation of the lattice Boltzmann method on GPU clusters] // Numerical Methods and Programming. — 2012. — Vol. 13, No. 1. — P. 221–228 (in Russian).
- Бикулов Д. А., Сенин Д. С.* Реализация метода решеточных уравнений Больцмана без хранимых значений функций распределения для GPU // Вычислительные методы и программирование. — 2013. — Т. 14. — С. 370–374.
Bikulov D. A., Senin D. S. Realizatsiia metoda reshetochnykh uravnenii Boltzmana bez hranimyh znachenii functsyy raspredeleniia dlia GPU [Implementation of the lattice Boltzmann method without stored distribution functions on GPU] // Numerical Methods and Programming. — 2013. — Vol. 14. — P. 370–374 (in Russian).
- Бикулов Д. А.* Эффективная реализация метода решеточных уравнений Больцмана для гибридных суперкомпьютерных систем // Вычислительные методы и программирование. — 2015. — Т. 16, № 2. — С. 205–214.
Bikulov D. A. Effectivnaya realizatsiia metoda reshetochnykh uravnenii Boltzmana dlia gibridnykh superkomp'uternykh sistem [An efficient implementation of the lattice Boltzmann method for hybrid supercomputers] // Numerical Methods and Programming. — 2015. — Vol. 16, No. 2. — P. 205–214 (in Russian).
- Грачев Н. Е., Дмитриев А. В., Сенин Д. С.* Моделирование динамики газа при помощи решеточного метода Больцмана // Вычислительные методы и программирование. — 2011. — Т. 12, № 1. — С. 227–231.
Grachev N. E., Dmitriev A. V., Senin D. S. Modelirovaniie dinamiki gaza pri pomoschi reshetochnogo metoda Boltzmana [Simulation of gas dynamics with the lattice Boltzmann method] // Numerical Methods and Programming. — 2011. — Vol. 12, No. 1. — P. 227–231 (in Russian).
- Евстигнеев Н. М., Магницкий Н. А.* Нелинейная динамика в начально-краевой задаче течения жидкости с уступа для гидродинамического приближения уравнений Больцмана // Дифференциальные уравнения. — 2010. — Т. 46, № 12. — С. 1794–1798.
Evstigneev N. M., Magnitskii N. A. Nonlinear dynamics in the initial-boundary value problem on the fluid flow from a ledge for the hydrodynamic approximation to the boltzmann equations // Differential equations. — 2010. — Vol. 19, No. 12. — P. 1794–1798. (Original Russian paper: Evstigneev N. M., Magnitskii N. A. Nelineinaya dinamika v nachal'no-kraevoi zadache techeniia zhidkosti s ustupa dlia gidrodinamicheskogo priblizheniia uravnenii Boltzmana).
- Кривовичев Г. В.* О расчете течений вязкой жидкости методом решеточных уравнений Больцмана // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013а. — Т. 5, № 2. — С. 165–178.
Krivovichev G. V. O reschete techenii vyazkoi zhidkosti metodom reshetochnykh uravnenii Boltzmana [On the computation of viscous fluid flows by the lattice Boltzmann method] // Computer Research and Modeling. — 2013. — Vol. 5, No. 2. — P. 165–178 (in Russian).
- Кривовичев Г. В.* Анализ устойчивости решеточных схем Больцмана для решения уравнения диффузии // Вычислительные методы и программирование. — 2013б. — Т. 14. — С. 175–182.
Krivovichev G. V. Analiz ustoichivosti reshetochnykh shem Boltzmana dlia resheniia uravneniia diffuzii [Stability analysis of the lattice Boltzmann schemes for solving the diffusion equation] // Numerical Methods and Programming. — 2013. — Vol. 14. — P. 175–182 (in Russian).
- Кривовичев Г. В.* Модифицированный вариант метода решеточных уравнений Больцмана для расчета течений вязкой несжимаемой жидкости // Компьютерные исследования и моделирование. — 2014. — Т. 6, № 3. — С. 365–381.
Krivovichev G. V. Modifitsirovannyi variant metoda reshetochnykh uravnenii Boltzmana dlia rascheta techenii vyazkoi neszhimaemoi zhidkosti [Modification of the lattice Boltzmann method for the computationsof viscid incompressible fluid flows] // Computer Research and Modeling. — 2014. — Vol. 6, No. 3. — P. 365–381 (in Russian).
- Кривовичев Г. В., Михеев С. А.* Исследование устойчивости трехслойных конечно-разностных решеточных схем Больцмана // Вычислительные методы и программирование. — 2014. — Т. 15, № 4. — С. 211–221.
Krivovichev G. V., Mikheev S. A. Issledovaniie ustoichivosti trehsloinykh konechno-raznostnykh reshetochnykh shem Boltzmana [Stability of three-layer finite difference-based lattice Boltzmann schemes] // Numerical Methods and Programming. — 2014. — Vol. 15, No. 4. — P. 211–221 (in Russian).
- Кривовичев Г. В., Михеев С. А.* Исследование устойчивости конечно-разностных решеточных схем Больцмана с направленными разностями повышенного порядка аппроксимации // Вычислительные методы и программирование. — 2015. — Т. 16. — С. 196–204.
Krivovichev G. V., Mikheev S. A. Issledovaniie ustoichivosti konechno-raznostnykh reshetochnykh shem Boltzmana s

- napravlenymi raznostiami povyshennogo poriadka approksimatsii [Stability study of finite-difference-based lattice Boltzmann schemes with upwind differences of high order approximation] // Numerical Methods and Programming. — 2015. — Vol. 16. — P. 196–204 (in Russian).
- Леонов Г. А., Шумафов М. М. Методы стабилизации линейных управляемых систем. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2005. — 421 с.
- Leonov G. A., Shumafov M. M. Metody stabilizatsii lineinykh upravliaemykh sistem [Stabilization methods for linear control systems]. — Saint-Petersburg: SPbSU Publishing House, 2005. — 421 p. (in Russian).
- Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. — М.: Едиториал УРСС, 2004. — 480 с.
- Samarskii A. A., Vabitshevich P. N. Chislennye metody resheniia obratnykh zadach [Numerical methods of the solution of inverse problems]. Moscow: Editorial URSS, 2004. — 480 p. (in Russian).
- Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики. — М.: Либ-роком, 2009. — 424 с.
- Samarskii A. A., Popov Yu. P. Raznostnye metody resheniia zadach gazovoi dinamiki [Difference methods for the gas dynamics problems solution]. — Moscow: Librocom Publishing, 2009. — 424 p.
- Ancona T. G. Fully-Lagrangian and lattice-Boltzmann methods for solving systems of conservation equations // Journal of Computational Physics. — 1994. — Vol. 115. — P. 107–120.
- Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // Physical Review. — 1954. — Vol. 94, No. 3. — P. 511–525.
- Dellacherie S. Construction and analysis of lattice Boltzmann methods applied to 1D convection-diffusion equation // Acta Applied Mathematics. — 2014. — Vol. 131. — P. 69–140.
- Du Fort E. C., Frankel S. P. Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations // Mathematical Tables and Other Aids to Computation. — 1953. — Vol. 7. — P. 135–152.
- Geri P., El Yacoubi S., Goyet C., Marcon O. A 1D lattice Boltzmann model for ocean acidification // Procedia Computer Science. — 2013. — Vol. 18. — P. 2444–2453.
- Ginzburg I., d'Humieres D., Kuzmin A. Optimal stability of advection-diffusion lattice Boltzmann models with two relaxation times for positive/negative equilibrium // Journal of Statistical Physics. — 2010. — Vol. 139. — P. 1090–1143.
- Junk M., Yang Z. L_2 convergence of the lattice Boltzmann method for one-dimensional convection-diffusion-reaction equations // Communications in Computational Physics. — 2015. — Vol. 17, No. 5. — P. 1225–1245.
- Krivovichev G. V. Numerical stability analysis of lattice Boltzmann equations for linear diffusion // Applied Mathematics and Information Sciences. — 2015. — Vol. 9, No. 4. — P. 1687–1692.
- Kupershtokh A. L. A lattice Boltzmann equation method for real fluids with the equation of state known in tabular form only in regions of liquid and vapor phases // Computers and Mathematics with Applications. — 2011. — Vol. 61. — P. 3537–3548.
- Kuzmin A., Ginzburg I., Mohamad A. A. The role of kinetic parameter in the stability of two-relaxation-time advection-diffusion lattice Boltzmann schemes // Computers and Mathematics with Applications. — 2011. — Vol. 61. — P. 3417–3442.
- Mohamad A. A., Kuzmin A. The Soret effect with the D1Q2 and D2Q4 lattice Boltzmann model // International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulations. — 2012. — Vol. 13, No. 3. — P. 289–294.
- Nourgaliev R. R., Dinh T. N., Theofanous T. G., Joseph D. The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications // International Journal of Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29. — P. 117–169.
- Rheinlander M. Stability and multiscale analysis of an advective lattice Boltzmann scheme // Progress in Computational Fluid Dynamics. — 2008. — Vol. 8, No. 1–4. — P. 56–68.
- Servan-Camas B., Tsai F. T. C. Non-negativity and stability analyses of lattice Boltzmann method for advection – diffusion equation // Journal of Computational Physics. — 2009. — Vol. 228. — P. 236–256.

- Shu C., Niu X.D., Chew Y.T., Cai Q.D.* A fractional step lattice Boltzmann method for simulating high Reynolds number flows // *Mathematics and Computers in Simulation*. — 2006. — Vol. 72. — P. 201–205.
- Sofonea V., Sekerka R.F.* Viscosity of finite difference lattice Boltzmann models // *Journal of Computational Physics*. — 2003. — Vol. 184. — P. 422–434.
- Suga S.* An accurate multi-level finite difference scheme for 1D diffusion equations derived from the lattice Boltzmann method // *Journal of Statistical Physics*. — 2010. — Vol. 140. — P. 494–503.
- Taylor P.J.* The stability of Du Fort – Frankel method for the diffusion equation with boundary conditions involving space derivatives // *The Computer Journal*. — 1970. — Vol. 13, No. 1. — P. 92–97.
- Wang Y., Shu C., Teo C.J.* A fractional step axisymmetric lattice Boltzmann flux solver for incompressible swirling and rotating flows // *Computers and Fluids*. — 2014. — Vol. 96. — P. 204–214.
- Wolf-Gladrow D.A.* A lattice Boltzmann equation for diffusion // *Journal of Statistical Physics*. — 1995. — Vol. 79, No. 5–6. — P. 1023–1032.
- Wolf-Gladrow D.A.* Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models — an introduction. — Berlin: Springer-Verlag, 2005. — 311 p.