

УДК 519.633

doi 10.26089/NumMet.v18r321

АНАЛИЗ И ОПТИМИЗАЦИЯ ЯВНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ВЫСОКИХ ПОРЯДКОВ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ ЭТАПА АДВЕКЦИИ МЕТОДА РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

Г. В. Кривовичев¹, Е. С. Марнопольская²

Статья посвящена анализу и оптимизации явных разностных схем для решения уравнений переноса, возникающих на этапе адвекции метода расщепления по физическим процессам. Метод может применяться как для решеточных уравнений Больцмана, так и при решении кинетических уравнений общего вида. Рассматриваются схемы второго-четвертого порядков аппроксимации. Для уменьшения эффектов численных диссипации и дисперсии используются схемы с параметром. С использованием метода фон Неймана и полиномиальной аппроксимации границ областей устойчивости получены условия устойчивости схем в виде неравенств на значении параметра Куранта. Оптимальные значения параметра для регулирования диссипативных и дисперсионных эффектов предлагается находить посредством решения задач минимизации функций максимума. Схемы с оптимальными значениями параметра применяются при решении тестовых задач — для одномерного и двумерного уравнений переноса, а также при применении метода расщепления к решению задачи о течении в каверне с подвижной крышкой.

Ключевые слова: метод решеточных уравнений Больцмана, метод расщепления, устойчивость, дисперсия, диссипация.

1. Введение. В настоящее время метод решеточных уравнений Больцмана (lattice Boltzmann method, далее метод LBM) широко применяется для численного решения задач механики жидкости и газа [1–4], особенно при параллельной реализации алгоритмов на его основе для расчетов на современных многопроцессорных системах [5–7]. Особую эффективность метод показал при решении задач с фазовыми переходами [8–10] и задач о течении в пористых средах.

Метод LBM основан на решении задач для системы кинетических уравнений, получающейся посредством дискретизации кинетического уравнения Больцмана в пространстве скоростей. При этом, как правило, вместо сложного интеграла столкновений рассматривается релаксационный член Бхатнагара–Гросса–Крука (далее БГК) [11]. Наиболее часто применяемая разностная схема (так называемое решеточное уравнение Больцмана, lattice Boltzmann equation, далее LBE) получается посредством дискретизации уравнений системы вдоль характеристик в фазовом пространстве и является явной. При этом существуют и неявные схемы, построенные аналогичным образом [12, 13]. Недостаток LBE-уравнений связан с тем, что число Куранта для них является жестко фиксированным, а это препятствует независимому варьированию значений шагов по времени и пространству [14]. Для возможности их независимого варьирования были предложены так называемые off-lattice Boltzmann schemes (схемы, не привязанные к решетке) [14, 15], примерами которых являются конечно-разностные решеточные схемы Больцмана (finite-difference-based lattice Boltzmann schemes) [16].

Одним из наиболее эффективных численных методов решения задач для кинетических уравнений является метод расщепления по физическим процессам. Метод основан на том, что при выводе таких уравнений в случае отсутствия внешних сил учитываются два процесса — взаимодействие частиц (соударение, collision) и их свободный разлет (адвекция, advection) в результате взаимодействия. В рамках вычислительного метода на каждом шаге по времени эти процессы предлагается рассматривать отдельно, разбивая метод на этом шаге на два последовательных этапа. В литературе предложено несколько вариантов метода расщепления [17, 18], содержащих указанные два этапа и больше, если рассматриваются более сложные процессы [8]. Специальные варианты метода, связанные с коррекцией функции

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, факультет прикладной математики — процессов управления, Университетский просп., д. 35, 198504, г. Санкт-Петербург; доцент, e-mail: gera1983k@bk.ru, g.krivovichev@spbu.ru

² Санкт-Петербургский государственный университет, факультет прикладной математики — процессов управления, Университетский просп., д. 35, 198504, г. Санкт-Петербург; студент, e-mail: marnlena@yandex.ru

распределения, предложены в [19–21]. В [22, 23] показано, что метод расщепления в двухэтапной форме при численной реализации имеет только первый порядок точности по времени. Порядок может быть повышен до второго за счет симметризации процесса решения на одном шаге посредством введения трех последовательно реализуемых стадий: адвекции с полупростым шагом, взаимодействия с целым шагом и опять адвекции с полупростым шагом (расщепления по Стренгу) [18, 24–26]. Обоснованию метода LBM как вычислительной схемы на основе расщепления по физическим процессам посвящены работы [27, 28]. Основным преимуществом метода расщепления, несмотря на его невысокую точность по времени, является то, что для разных его этапов можно использовать разные разностные схемы, а это позволяет влиять на устойчивость метода и порядок точности по пространственным переменным. При этом в рамках метода LBM устойчивость может быть улучшена и за счет специальной реализации этапов метода расщепления — например, с использованием итерационных процедур, как в случае уравнения Больцмана [29].

Настоящая статья, являющаяся продолжением исследований, начатых в [30], посвящена исследованию и оптимизации разностных схем, используемых на этапе адвекции метода LBM на основе расщепления по физическим процессам. Рассмотрены схемы второго-четвертого порядков аппроксимации по пространственным переменным с зависящими от параметра коэффициентами. Посредством анализа областей устойчивости схем на основе метода фон Неймана получены необходимые условия устойчивости. Поставлены и решены задачи оптимизации дисперсионных и диссипативных характеристик схем как задачи негладкой оптимизации. С использованием построенных схем решена задача о течении в квадратной камере с подвижной крышкой при разных числах Рейнольдса.

2. Система кинетических уравнений. Рассматривается следующая система дискретных по скоростям кинетических уравнений в случае отсутствия внешних сил:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{V}_i \nabla f_i = \mathcal{I}_i(\mathbf{f}). \quad (1)$$

Здесь $f_i = f_i(t, \mathbf{r})$, $i = \overline{1, n}$, — функции распределения крупных частиц со скоростями $\mathbf{V}_i = V \mathbf{e}_i$, где \mathbf{e}_i — безразмерные векторы, $V = l/\delta t$, l — модельная длина свободного пробега, δt — модельное время свободного пробега, t — время, \mathbf{r} — вектор пространственных переменных, $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)$. В качестве членов \mathcal{I}_i , описывающих взаимодействие частиц, будем рассматривать релаксационные члены $\mathcal{I}_i(\mathbf{f}) = -\frac{f_i - f_i^{(eq)}}{\lambda}$, где λ — время релаксации, $f_i^{(eq)}$ — равновесные функции распределения.

Макроскопические характеристики среды, такие как плотность ρ и скорость среды \mathbf{U} , вычисляются через функции распределения f_i по следующим формулам:

$$\rho(t, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n f_i(t, \mathbf{r}), \quad \rho(t, \mathbf{r}) \mathbf{U}(t, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n \mathbf{V}_i f_i(t, \mathbf{r}). \quad (2)$$

При этом равновесные функции распределения $f_i^{(eq)}$ нелинейно зависят от f_i через зависимость от ρ и \mathbf{U} , которые связаны с f_i зависимостями (2).

Без ограничения общности будем рассматривать двумерный случай и скоростной шаблон $D2Q9$, определяемый следующим образом: $\mathbf{e}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{e}_2 = (1, 0)$, $\mathbf{e}_3 = (0, 1)$, $\mathbf{e}_4 = (-1, 0)$, $\mathbf{e}_5 = (0, -1)$, $\mathbf{e}_6 = (1, 1)$, $\mathbf{e}_7 = (-1, 1)$, $\mathbf{e}_8 = (-1, -1)$, $\mathbf{e}_9 = (1, -1)$.

3. Метод расщепления по физическим процессам. В настоящей работе развивается метод расщепления с итерациями, физически выражающийся в наличии процессов последовательных взаимодействий [30].

Рассмотрим промежуток $[t_j, t_{j+1}]$, соответствующий шагу по времени $\Delta t = t_{j+1} - t_j$, такой, что значение $\Delta t < \delta t$ [31]. Пусть в момент $t = t_j$ известно решение $f_i = f_i(t_j, \mathbf{r})$. Расчет производится в два этапа.

Этап I. Адвекция (перенос). На этом этапе решается система линейных уравнений переноса:

$$\frac{\partial \tilde{f}_i}{\partial t} + \mathbf{V}_i \nabla \tilde{f}_i = 0, \quad t \in (t_j, t_{j+1}], \quad (3)$$

с начальным условием $\tilde{f}_i(t_j, \mathbf{r}) = f_i(t_j, \mathbf{r})$.

Этап II. Взаимодействие. Решается система вида

$$\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial t} = \mathcal{I}_i(\hat{\mathbf{f}}), \quad t \in (t_j, t_{j+1}], \quad (4)$$

с начальным условием $\widehat{f}_i(t_j, \mathbf{r}) = \widetilde{f}_i(t_{j+1}, \mathbf{r})$.

Для решения системы (4) можно использовать неявный метод Эйлера

$$\widehat{f}_i(t_{j+1}, \mathbf{r}) = \widehat{f}_i(t_j, \mathbf{r}) + \Delta t \mathcal{I}_i \left(\widehat{\mathbf{f}}(t_{j+1}, \mathbf{r}) \right). \quad (5)$$

Как известно, метод (5) аппроксимирует систему (4) только с первым порядком по времени, при этом, как отмечалось выше, метод расщепления в двухэтапной формулировке имеет только первый порядок [22, 23], но (5) является А-устойчивым, в связи с чем схему (5) можно считать оптимальной для (4).

Вообще говоря, (5) представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений относительно компонент вектора $\widehat{\mathbf{f}}(t_{j+1}, \mathbf{r})$. Для решения этой системы предлагается использовать следующий итерационный процесс, не связанный с вычислением матрицы Якоби:

$$\widehat{f}_i^{(s+1)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) = \widehat{f}_i(t_j, \mathbf{r}) + \Delta t \mathcal{I}_i \left(\widehat{\mathbf{f}}^{(s)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) \right), \quad (6)$$

где $s = 0, 1, 2, \dots$.

Помимо проблемы сходимости, при реализации метода (6) на практике возникает *проблема выбора начального приближения* $\widehat{f}_i^{(0)}(t_{j+1}, \mathbf{r})$ при каждом j . В качестве одного из возможных решений этой проблемы можно предложить следующее — вместо *одной* задачи для системы (4) решать *последовательность* задач следующего вида:

$$\frac{\partial \widehat{f}_i^{(q)}}{\partial t} = \mathcal{I}_i \left(\widehat{\mathbf{f}}^{(q)} \right), \quad t \in (t_j, t_{j+1}], \quad q = 1, 2, \dots, \quad (7)$$

с начальными условиями $\widehat{f}_i^{(q+1)}(t_j, \mathbf{r}) = \widehat{f}_i^{(q)}(t_{j+1}, \mathbf{r})$, $q = 0, 1, 2, \dots$ и $\widehat{f}_i^{(0)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) = \widetilde{f}_i(t_{j+1}, \mathbf{r})$. Решение этих задач предлагается реализовывать с помощью неявного метода Эйлера (5)–(6), но с использованием *только одной* итерации по s при каждом q . В качестве начального приближения предлагается использовать решение, полученное при предыдущем значении q : $\widehat{f}_i^{(q+1), (0)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) = \widehat{f}_i^{(q+1)}(t_j, \mathbf{r}) = \widehat{f}_i^{(q)}(t_{j+1}, \mathbf{r})$. В связи с этим имеем вычислительную процедуру по q следующего вида:

$$\widehat{f}_i^{(q+1)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) = \widehat{f}_i^{(q+1)}(t_j, \mathbf{r}) + \Delta t \mathcal{I}_i \left(\widehat{\mathbf{f}}^{(q+1), (0)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) \right) = \widehat{f}_i^{(q)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) + \Delta t \mathcal{I}_i \left(\widehat{\mathbf{f}}^{(q)}(t_{j+1}, \mathbf{r}) \right), \quad (8)$$

где $q = 0, 1, 2, \dots$. Таким образом, при каждом q фактически получаем решение задач вида (7) с помощью явного метода Эйлера.

Можно предложить несколько вариантов критерия останова итерационного процесса (8) по q . Один из возможных вариантов связан с использованием относительной погрешности изменения плотности на двух последовательных итерациях [30]. Другой вариант связан просто с фиксированием числа итераций. Как показала практика решения тестовых задач, например, при расчетах течений слабосжимаемых газов в случае высоких чисел Рейнольдса достаточно высокая точность достигается при использовании не более пяти итераций.

4. Разностные схемы для уравнения переноса. Необходимо отметить, что уравнения вида (3) не зависят друг от друга, в связи с чем могут решаться параллельно. При этом они являются простейшими линейными однородными уравнениями переноса с постоянными коэффициентами. Заметим, что эти уравнения описывают процесс распространения начальных распределений вдоль прямых, являющихся проекциями характеристик на координатное пространство. В одномерном и безразмерном случае имеем уравнение вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (9)$$

где t и x — время и пространственная переменная соответственно, $u = u(t, x)$ и c — постоянная скорость переноса.

Для аппроксимации производной по времени воспользуемся несимметричной разностью вида [30]

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_j, x_n) \approx \frac{1}{2\Delta t} \left(u_n^{j+1} - \frac{1}{2}(u_n^j + u_n^{j-2}) \right), \quad (10)$$

где $u_n^j \approx u(t_j, x_n)$; t_j — узел сетки по времени, построенной с шагом Δt ; x_n — узел сетки по x , построенной с шагом h . Заметим, что (10) аппроксимирует производную по t только с первым порядком.

Аппроксимируя член с производной по x каким-либо образом с использованием разностного оператора $\mathcal{L}(u_n^j) \approx c \frac{\partial u(t_j, x_n)}{\partial x}$, получим разностную схему

$$u_n^{j+1} = \frac{1}{2} (u_n^j + u_n^{j-2}) - 2\Delta t \mathcal{L}(u_n^j). \quad (11)$$

В работе [30] представлены две схемы вида (11), аппроксимирующие (9) с первым и вторым порядком по h соответственно. В качестве схемы первого порядка рассматривается схема с направленной разностью первого порядка, а в качестве схемы второго порядка — схема с центральной разностью. Для схемы второго порядка в [30] показано наличие численной дисперсии, а для схемы первого порядка — численной диссипации. Для снижения фиктивных эффектов, обусловленных этими свойствами схемы, будем аппроксимировать член с пространственной производной конечной разностью с безразмерным параметром:

$$c \frac{\partial u}{\partial x}(t_j, x_n) \approx \mathcal{L}_h(u_n^j) = \varepsilon \mathcal{L}^1(u_n^j) + (1 - \varepsilon) \mathcal{L}^2(u_n^j), \quad (12)$$

где $\varepsilon \in [0, 1]$, а \mathcal{L}^1 и \mathcal{L}^2 — различные аппроксимации члена $c \frac{\partial u}{\partial x}$ в узле (t_j, x_n) .

Рассмотрим следующие аппроксимации члена с пространственной производной:

1) разности второго порядка аппроксимации:

$$\mathcal{L}(u_n^j) = \frac{c}{2h} (u_{n+\text{sign}(c)}^j - u_{n-\text{sign}(c)}^j), \quad (13)$$

$$\mathcal{L}(u_n^j) = \frac{c}{2h} (3u_n^j - 4u_{n-\text{sign}(c)}^j + u_{n-2\text{sign}(c)}^j); \quad (14)$$

2) разность третьего порядка аппроксимации:

$$\mathcal{L}(u_n^j) = \frac{c}{6h} (2u_{n+\text{sign}(c)}^j + 3u_n^j - 6u_{n-\text{sign}(c)}^j + u_{n-2\text{sign}(c)}^j); \quad (15)$$

3) разности четвертого порядка аппроксимации:

$$\mathcal{L}(u_n^j) = \frac{c}{12h} (-u_{n+2\text{sign}(c)}^j + 8u_{n+\text{sign}(c)}^j - 8u_{n-\text{sign}(c)}^j + u_{n-2\text{sign}(c)}^j), \quad (16)$$

$$\mathcal{L}(u_n^j) = \frac{c}{12h} (3u_{n+\text{sign}(c)}^j + 10u_n^j - 18u_{n-\text{sign}(c)}^j + 6u_{n-2\text{sign}(c)}^j - u_{n-3\text{sign}(c)}^j). \quad (17)$$

Заметим, что другие аппроксимации тех же порядков, построенных на шаблонах равномерных сеток с помощью простейших формул численного дифференцирования, не рассматриваются в связи с тем, что схемы вида (11), в которых используются такие приближения, оказались неустойчивыми.

С использованием указанных аппроксимаций были построены следующие схемы вида (11)–(12): схема 1 (второго порядка) — \mathcal{L}_h^1 задается посредством (14) и \mathcal{L}_h^2 — посредством (13); схема 2 (третьего порядка) — \mathcal{L}_h^1 задается посредством (16) и \mathcal{L}_h^2 — посредством (15); схема 3 (четвертого порядка) — \mathcal{L}_h^1 задается посредством (16) и \mathcal{L}_h^2 — посредством (17).

5. Анализ устойчивости. Для получения необходимых условий устойчивости построенных схем воспользуемся методом фон Неймана. Представим решение разностного уравнения (11) в виде

$$u_n^j = \lambda^j(\varphi) \exp(in\varphi), \quad (18)$$

где $\varphi \in [0, 2\pi)$, $i^2 = -1$, $\lambda(\varphi)$ — спектральная функция. Подставив (18) в (11), получим кубическое уравнение относительно λ :

$$\lambda^3 + a\lambda^2 - \frac{1}{2} = 0, \quad (19)$$

где $a = a(\gamma, \varphi)$ — комплексный коэффициент, а $\gamma = c\Delta t/h$ — число Куранта.

5.1. Схемы без параметра. Приведем выражения для коэффициента a в случае схем вида (11) с аппроксимациями (13)–(17) без параметра ε . Для случая приближений второго порядка (13) и (14) соответственно имеем:

$$a = -\frac{1}{2} + 2i\gamma \sin(\varphi), \quad a = -\frac{1}{2} + \gamma(3 - 4e^{-i\varphi} + e^{-2i\varphi}).$$

В случае разности третьего порядка (15) коэффициент a задается в виде

$$a = -\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{3} (e^{-2i\varphi} - 6e^{-i\varphi} + 3 + 2e^{i\varphi}),$$

а для случая разностей четвертого порядка (16) и (17) соответственно получим:

$$a = -\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{3} (\sin(2\varphi) - 8\sin(\varphi)), \quad a = -\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{6} (-e^{-3i\varphi} + 6e^{-2i\varphi} - 18e^{-i\varphi} + 10 + 3e^{i\varphi}).$$

Корни уравнения (19) находились с помощью формул Кардано. С использованием спектрального критерия устойчивости $|\lambda(\varphi)| \leq 1$ для всех $\varphi \in [0, 2\pi)$ при численном анализе этих корней были получены необходимые условия устойчивости схем вида (12) с представленными выше аппроксимациями члена $c \frac{\partial u}{\partial x}$. Для схемы (11)–(13) ограничение на γ имеет вид $\gamma \leq 0.5$, для схемы (11)–(14) имеем $\gamma \leq 0.11$, для (11)–(15) — $\gamma \leq 0.25$, для (11)–(16) — $\gamma \leq 0.36$, для (11)–(17) — $\gamma \leq 0.15$.

Отметим, что несимметричная разность (10) получена просто как модификация центральной производной

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_j, x_n) \approx \frac{u_n^{j+1} - u_n^{j-1}}{2\Delta t} \tag{20}$$

посредством замены значения u_n^{j-1} средним арифметическим значений на двух ближайших слоях. Проведем сравнение полученных условий устойчивости с условиями, полученными для простейших явных схем для (9) с теми же аппроксимациями по пространству, но с другими аппроксимациями по времени — с использованием (20) и правой разностной производной:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_j, x_n) \approx \frac{u_n^{j+1} - u_n^j}{\Delta t}. \tag{21}$$

Разностные схемы, построенные с использованием (21) и (13)–(17), являются неустойчивыми [32]. В случае, когда производная по времени аппроксимируется посредством (20), неустойчивыми являются все схемы кроме схем на основе центральных разностных производных (13) и (16). Для случая схемы на основе (13) условие устойчивости имеет вид $\gamma \leq 1$, а для случая схемы с (16) — $\gamma \leq 0.75$. Таким образом, предлагаемые схемы в случае использования *несимметричных* аппроксимаций по пространству имеют больший запас устойчивости, чем другие известные простейшие схемы. При этом отметим еще раз, что схемы имеют только первый порядок аппроксимации по времени. Однако также еще раз необходимо отметить, что максимальный порядок двухэтапного метода расщепления тоже равен единице, в связи с чем использование схем с более высоким порядком аппроксимации по времени нецелесообразно.

5.2. Схемы с параметром. Выражения для коэффициента a в случае схем 1–3 соответственно имеют вид

$$\begin{aligned} a &= -\frac{1}{2} + 2i(1 - \varepsilon)\gamma \sin(\varphi) + \varepsilon\gamma (3 - 4e^{-i\varphi} + e^{-2i\varphi}), \\ a &= -\frac{1}{2} + \frac{\gamma\varepsilon}{3} (e^{-2i\varphi} - 6e^{-i\varphi} + 3 + 2e^{i\varphi}) + \frac{\gamma(1 - \varepsilon)}{6} (-e^{2i\varphi} + 8e^{i\varphi} - 8e^{-i\varphi} + e^{-2i\varphi}), \\ a &= -\frac{1}{2} + \frac{\gamma(1 - \varepsilon)}{6} (e^{-2i\varphi} - 8e^{-i\varphi} + 8e^{i\varphi} - e^{2i\varphi}) + \frac{\gamma\varepsilon}{6} (3e^{i\varphi} + 10 - 18e^{-i\varphi} + 6e^{-2i\varphi} - e^{-3i\varphi}). \end{aligned}$$

Условия устойчивости, полученные на основе метода фон Неймана, дадут неравенства на параметры γ и ε вида $\gamma \leq \tilde{\gamma}(\varepsilon)$, где графики функций $\tilde{\gamma}$ аппроксимируют границы областей устойчивости схем 1–3. На рис. 1 представлены графики границ областей устойчивости схем 1–3. В качестве функций $\tilde{\gamma}(\varepsilon)$ выбирались алгебраические полиномы низких степеней. Для определения коэффициентов полиномов использовался метод наименьших квадратов и его реализация в функции `polyfit()` пакета Matlab. Полученные зависимости для схем 1–3 соответственно имеют следующий вид:

$$\tilde{\gamma}(\varepsilon) = -0.47\varepsilon^3 + 1.15\varepsilon^2 - 1.05\varepsilon + 0.49, \quad \tilde{\gamma}(\varepsilon) = -0.10\varepsilon + 0.36, \quad \tilde{\gamma}(\varepsilon) = 0.1\varepsilon^2 - 0.31\varepsilon + 0.35.$$

6. Оптимизация дисперсионных и диссипативных характеристик. При решении задачи о распространении прямоугольного импульса, по аналогии со схемой первого порядка [30], было обнаружено, что построенные схемы обладают численной дисперсией и диссипацией. В связи с этим, как и в [30],

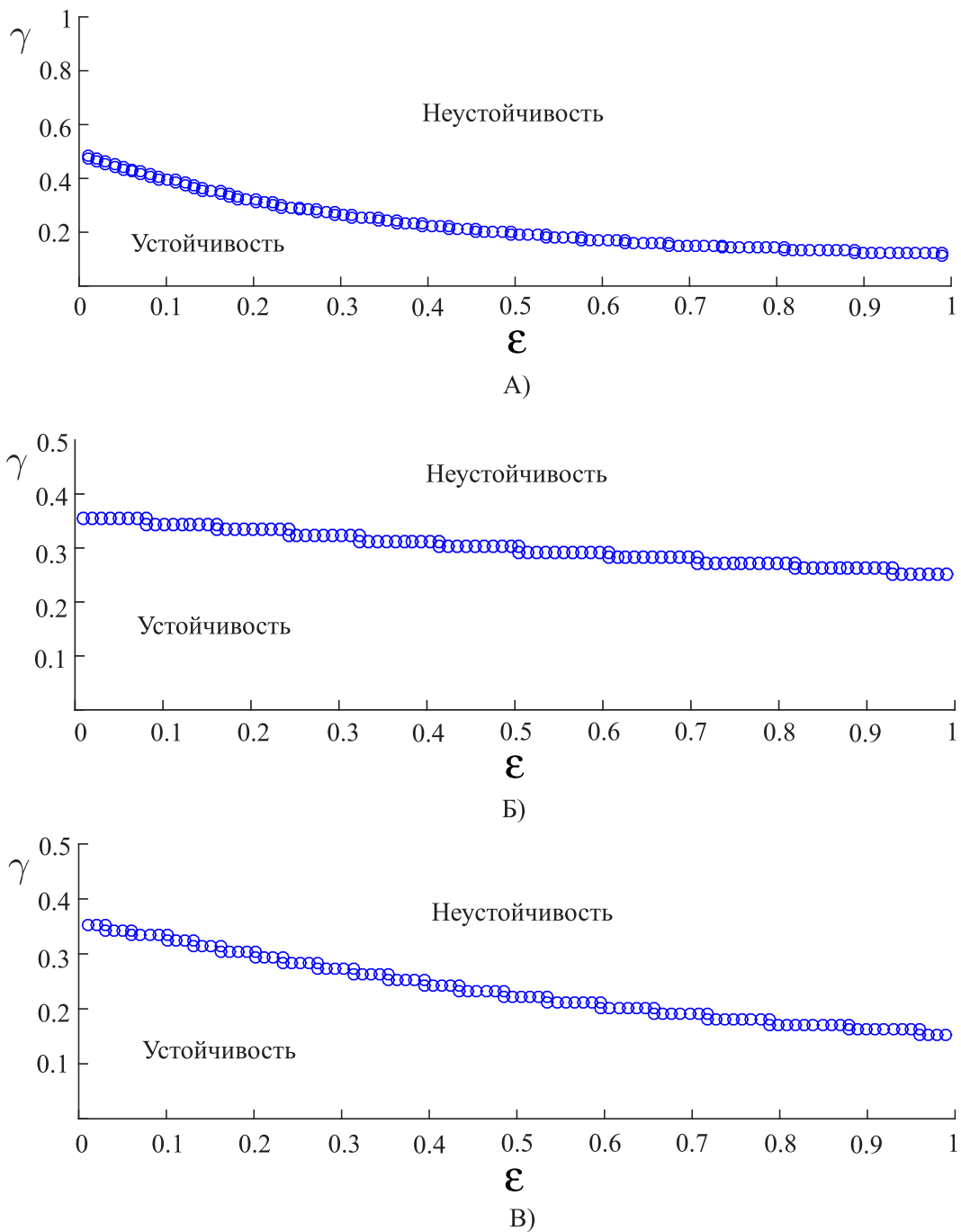


Рис. 1. Графики границ областей устойчивости на плоскости (ε, γ) :
 А) случай схемы 1; Б) случай схемы 2; В) случай схемы 3

рассмотрим задачу об уменьшении эффектов численной дисперсии и диссипации как задачу минимизации негладких функций определенного вида. Представим решение задачи (11)–(12) в виде бегущей волны

$$u_n^j = e^{i(\omega \Delta t j - k n h)}, \quad (22)$$

где ω — круговая частота, k — волновое число. Подставляя (22) в (11), получим уравнение третьего порядка относительно $q = e^{i\omega \Delta t}$:

$$q^3 + b(\gamma, \xi, \varepsilon)q^2 - \frac{1}{2} = 0,$$

где $\xi = kh$, а коэффициент b для схем 1–3 соответственно задается в виде

$$\begin{aligned} b &= -\frac{1}{2} - (1 - \varepsilon)\gamma 2i \sin(\xi) + \varepsilon\gamma (3 - 4e^i + e^{2i\xi}), \\ b &= -\frac{1}{2} + \frac{\gamma\varepsilon}{3} (e^{2i\xi} - 6e^{i\xi} + 3 + 2e^{-i\xi}) + \frac{\gamma(1 - \varepsilon)}{6} (-e^{-2i\xi} + 8e^{-i\xi} - 8e^{i\xi} + e^{2i\xi}), \\ b &= -\frac{1}{2} + \frac{\gamma(1 - \varepsilon)}{6} (e^{2i\xi} - 8e^{i\xi} + 8e^{-i\xi} - e^{-2i\xi}) + \frac{\gamma\varepsilon}{6} (3e^{-i\xi} + 10 - 18e^{i\xi} + 6e^{2i\xi} - e^{3i\xi}). \end{aligned}$$

Как известно [33], основное влияние на дисперсионные свойства оказывают вещественные части частот ω_i , представимые через q_i следующим образом:

$$\operatorname{Re}(\omega_i) = \psi_i(\gamma, \xi, \varepsilon) = \frac{\arctan\left(\frac{\operatorname{Im}(q_i)}{\operatorname{Re}(q_i)}\right)}{\Delta t}.$$

Дисперсионное соотношение для линейного уравнения переноса (9) имеет вид $\omega = ck$ и может быть переписано в следующей форме:

$$\omega(\gamma, \xi) = \frac{\gamma\xi}{\Delta t}. \tag{23}$$

В связи с тем, что ψ_i и ω зависят именно от числа Куранта γ , связывающего шаги сеток по времени и пространству, при проведении дальнейших исследований достаточно положить Δt равным единице.

Параметр схем ε предлагается определять таким образом, чтобы наибольшие отклонения величин ψ_i от зависимости (23) для уравнения переноса на областях изменения переменных γ и ξ были наименьшими. Таким образом, возникает задача о минимизации негладкой функции вида

$$I(\varepsilon) = \sup_{s=1,2,3} \left(\sup_{(\gamma,\xi)} |\psi_s(\gamma, \xi, \varepsilon) - \omega(\gamma, \xi)| \right),$$

в которой модули разностей рассматриваются на множестве $\{(\gamma, \xi) | \gamma \in [0, \tilde{\gamma}(\varepsilon)], \xi \in [-\pi, \pi]\}$. В дальнейшем функцию $I(\varepsilon)$ будем называть дисперсионной характеристикой.

Диссипативные эффекты можно охарактеризовать величиной вида $\eta = |q|$, поскольку (22) можно переписать в форме $u_n^j = |q|^j e^{i \operatorname{Arg}(e^{i\Delta t j})} e^{-iknh}$. Для определения значений параметра ε , снижающих эффекты численной диссипации, будем минимизировать отклонения величин $\eta_i(\gamma, \xi, \varepsilon)$, отвечающих частотам ω_i , от их постоянных значений C_i , при которых диссипативные эффекты минимальны (в идеале это единичные значения), в качестве которых можно выбирать значения η_i при малых значениях Δt . Таким образом, ставится задача о минимизации функции

$$F(\varepsilon) = \sup_{s=1,2,3} \left(\sup_{(\gamma,\xi)} |\eta_s(\gamma, \xi, \varepsilon) - C_s| \right),$$

в которой разности под модулем определены на том же множестве, что и у функции I .

Вообще говоря, при оптимизации схемы имеем задачу многокритериальной оптимизации — об одновременной минимизации функций $I(\varepsilon)$ и $F(\varepsilon)$. Задача может быть упрощена и сведена к минимизации одной из этих функций посредством определения наиболее значимого критерия. Для этого рассмотрим следующую связку этих функций с весами:

$$W(\varepsilon, \sigma) = \sigma F(\varepsilon) + (1 - \sigma)I(\varepsilon),$$

где $\sigma \in [0, 1]$. В выражении для W коэффициенты σ и $(1 - \sigma)$ играют роль весов.

На рис. 2 представлены графики линий уровня функции $W(\varepsilon, \sigma)$ для каждой из схем. Как можно видеть, их наименьшие значения достигаются на границе $\sigma = 1$, что соответствует диссипативной характеристике $F(\varepsilon)$. В связи с этим, главным критерием для определения оптимального значения этого параметра можно считать именно эту функцию. Само оптимальное значение будет представлять собой аргумент ее минимума. На рис. 3 и 4 представлены графики $F(\varepsilon)$ и $I(\varepsilon)$ соответственно. Отдельно отметим случай схемы 2, аппроксимирующей с третьим порядком (рис. 3Б). Как можно видеть, несмотря на немонотонное поведение значения функции слабо меняются относительно некоторого постоянного значения,

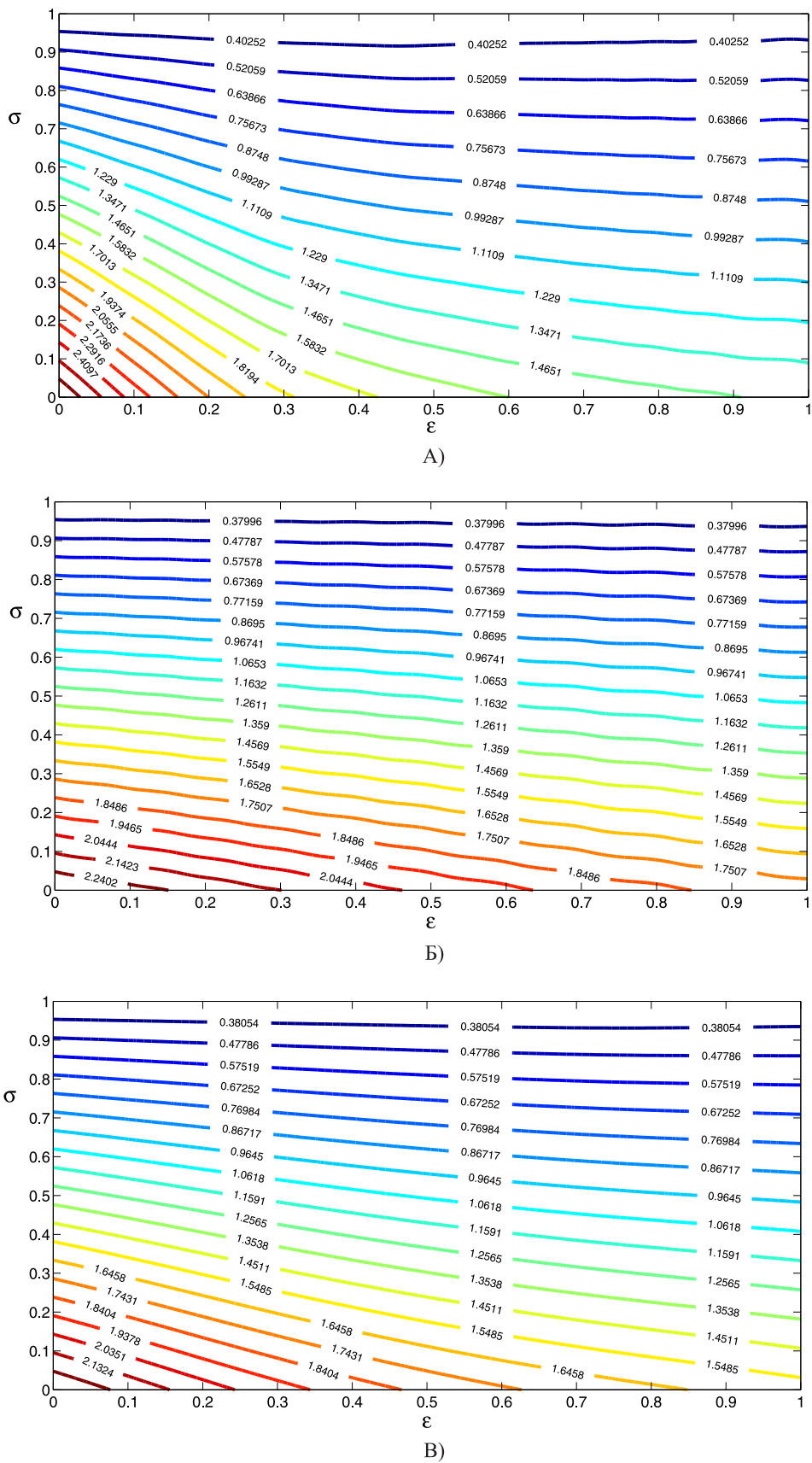


Рис. 2. Линии уровня функции $W(\varepsilon, \sigma)$: А) случай схемы 1; Б) случай схемы 2; В) случай схемы 3

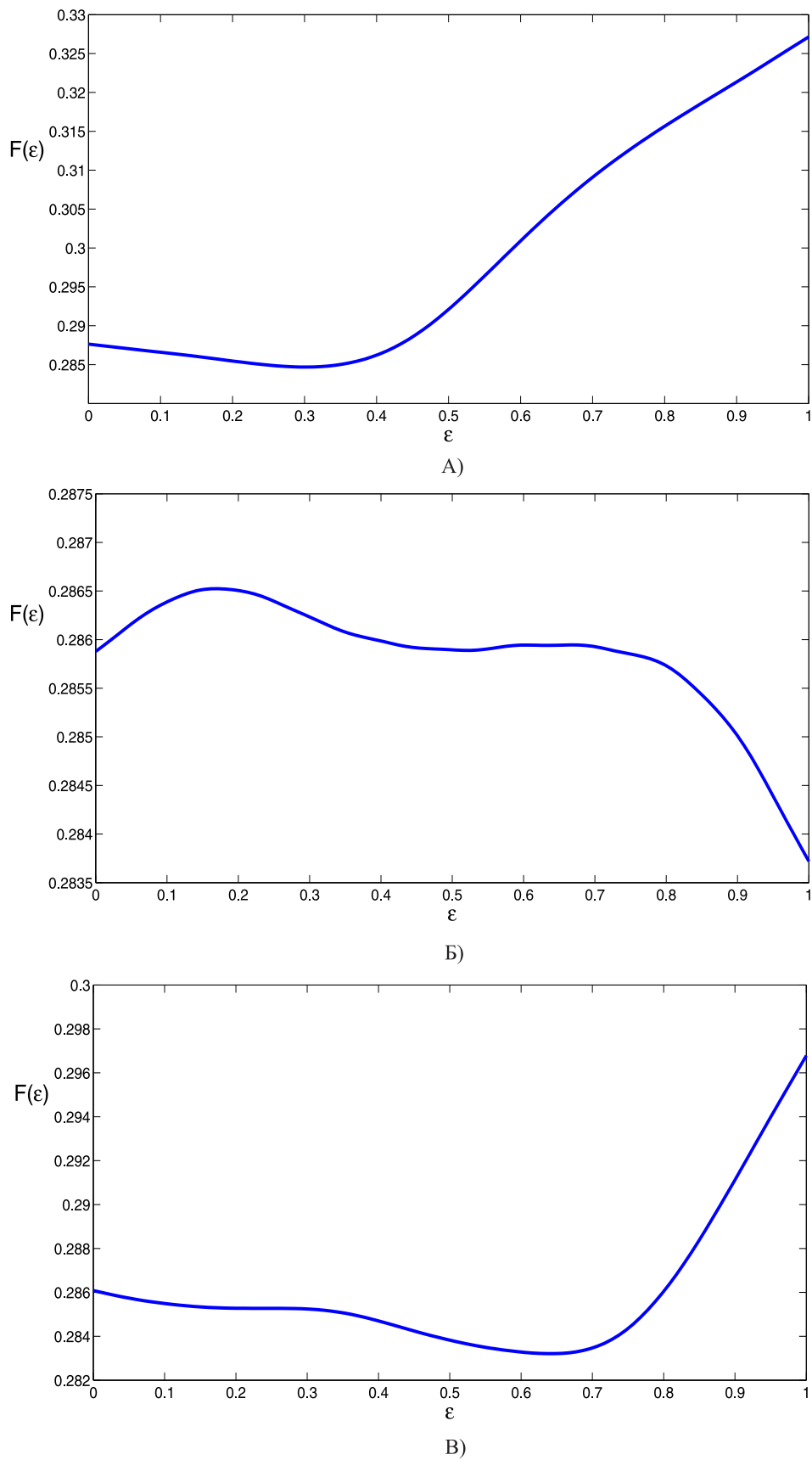


Рис. 3. Графики функции $F(\epsilon)$: А) случай схемы 1; Б) случай схемы 2; В) случай схемы 3

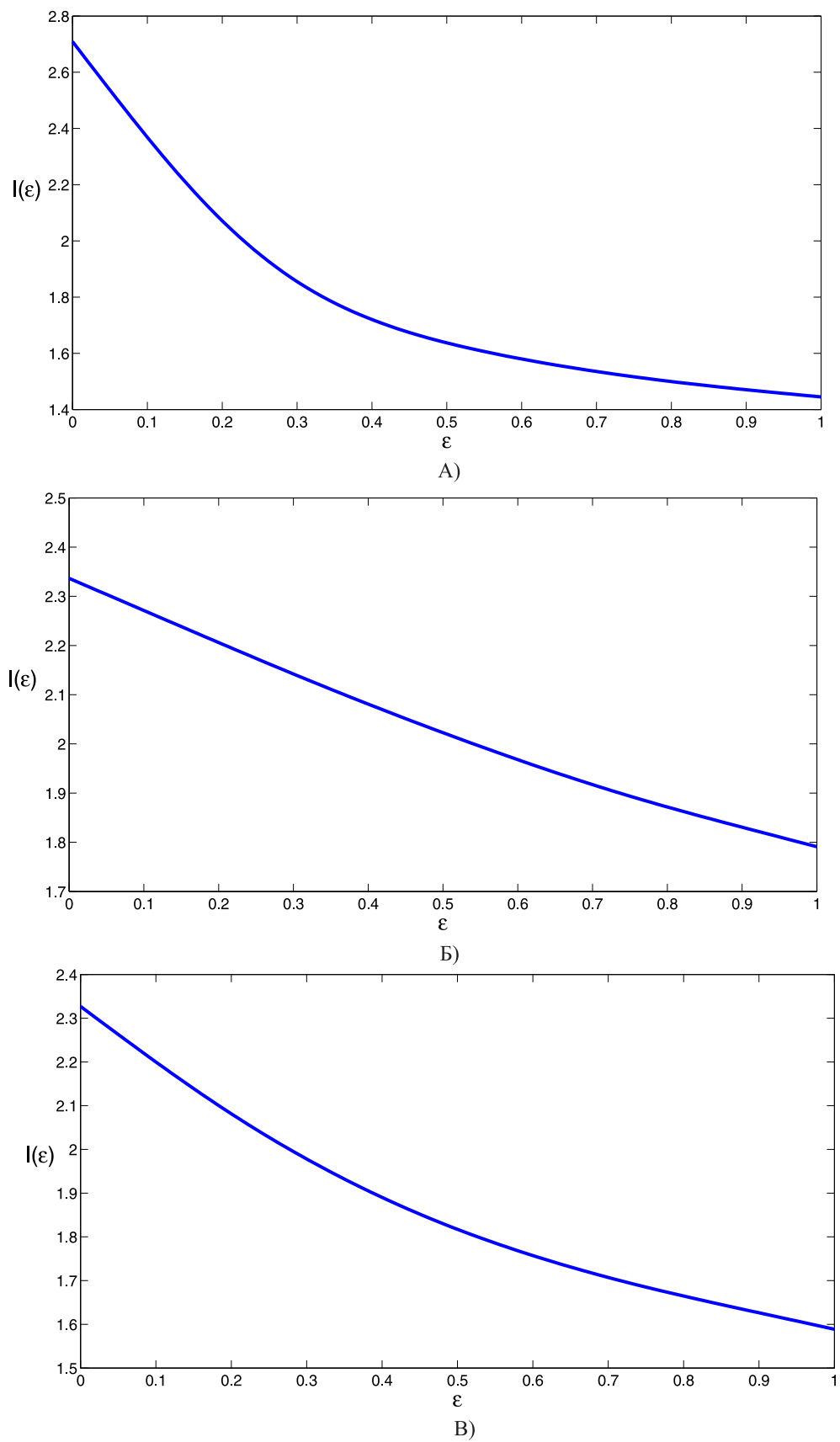


Рис. 4. Графики функции $I(\varepsilon)$: А) случай схемы 1; Б) случай схемы 2; В) случай схемы 3

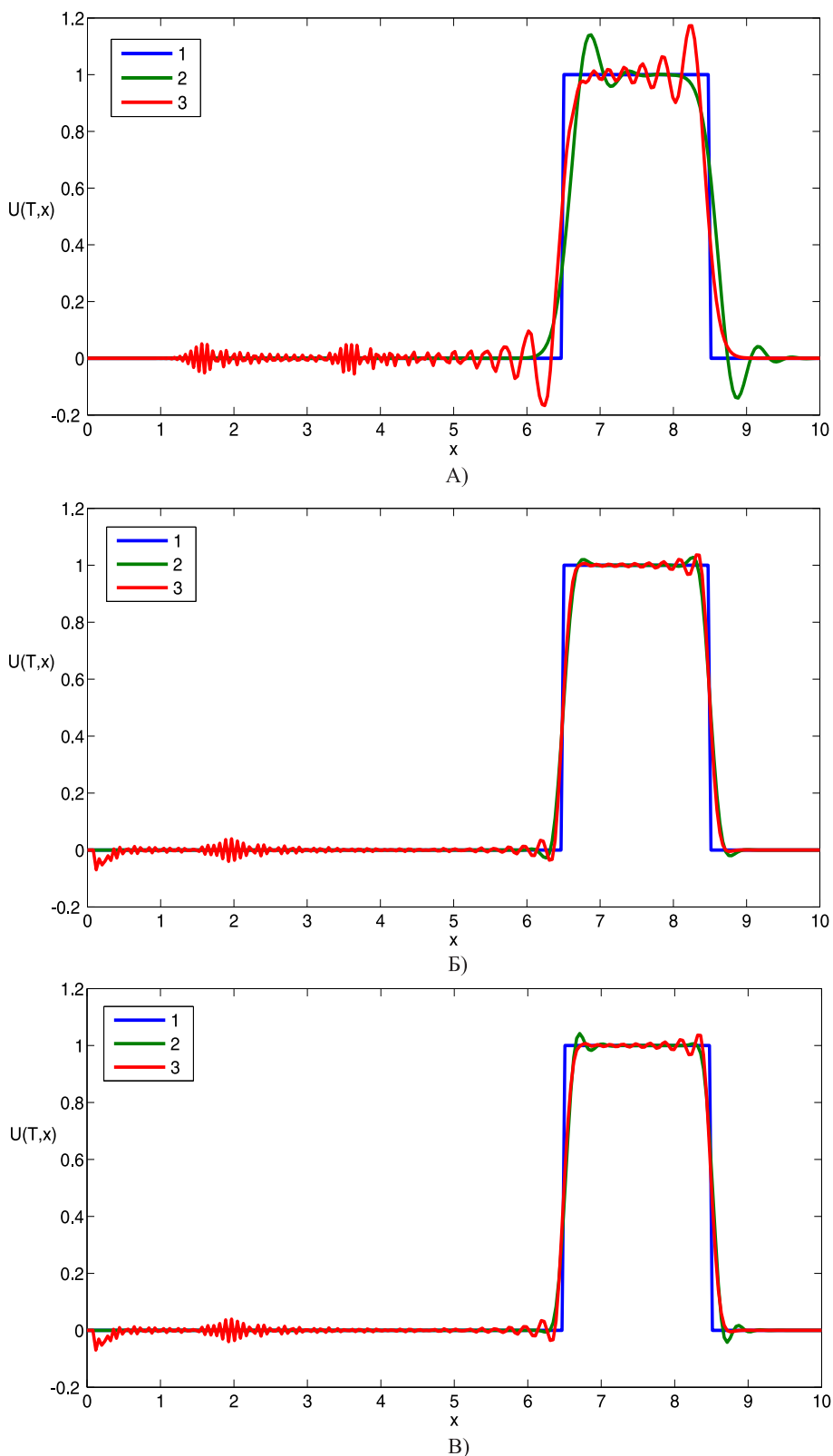


Рис. 5. Численные решения задачи для одномерного уравнения переноса на сетке из 250 узлов при $\gamma = 0.1$. На всех графиках кривая 1 соответствует точному решению задачи. А) 2 — решение, полученное по схеме с аппроксимацией (14), 3 — решение, полученное по схеме с аппроксимацией (13); Б) 2 — решение, полученное по схеме с аппроксимацией (15), 3 — решение, полученное по схеме с аппроксимацией (16); В) 2 — решение, полученное по схеме с аппроксимацией (17), 3 — решение, полученное по схеме с аппроксимацией (16)

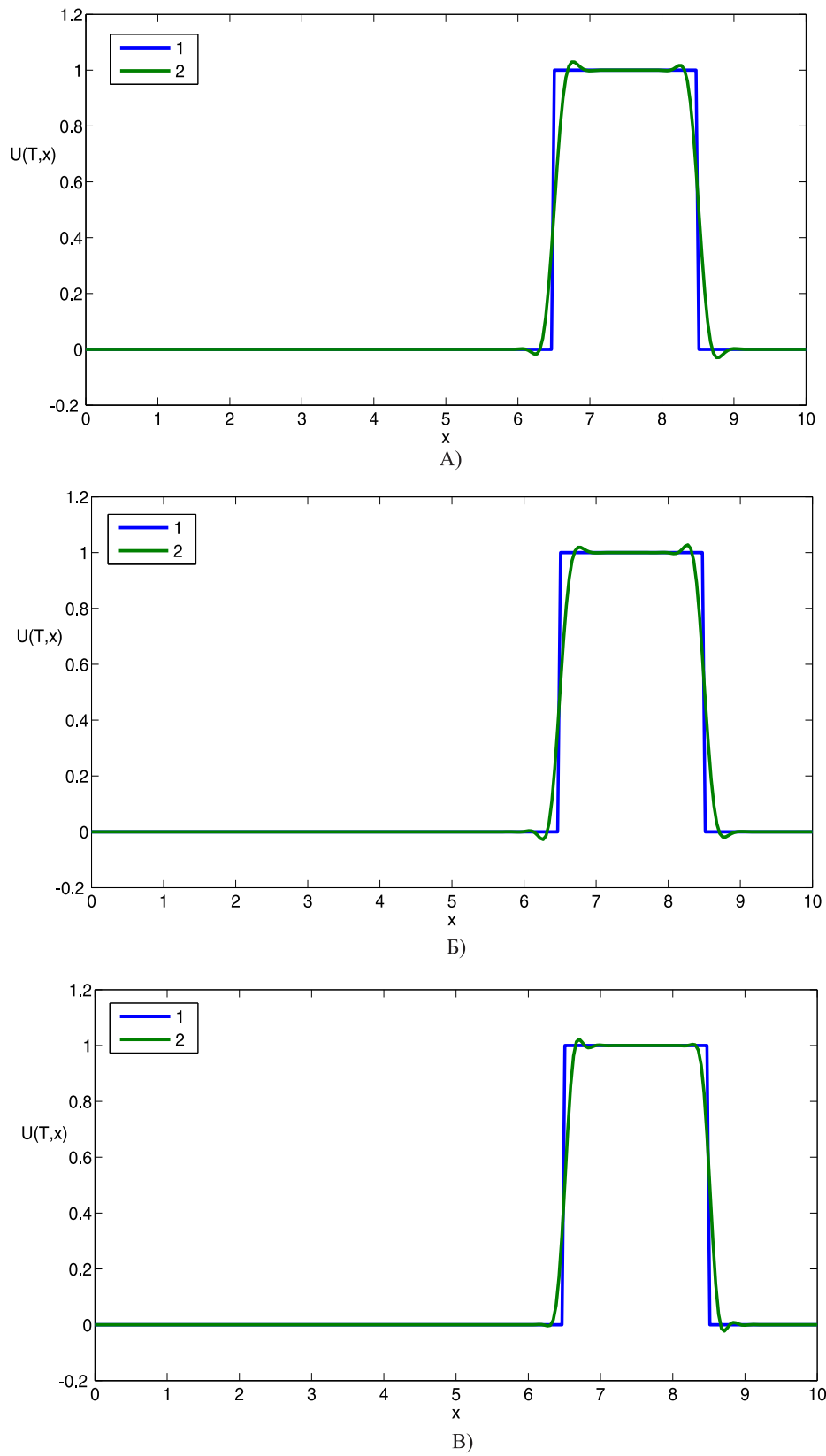


Рис. 6. Численное решение задачи для одномерного уравнения переноса, полученное по схеме с оптимальным параметром. На всех графиках кривая 1 соответствует точному решению задачи.

А) случай схемы 1; Б) случай схемы 2; В) случай схемы 3

особенно по сравнению со значениями функции $I(\varepsilon)$ (рис. 4Б), и их приближенно можно считать одинаковыми. В случае этой схемы при расчетах авторами бралось значение $\varepsilon \approx 0.9$. Для схемы 1 минимум $F(\varepsilon)$ достигается при $\varepsilon \approx 0.37$, для схемы 3 — при $\varepsilon \approx 0.64$.

7. Решение тестовых задач. Разностные схемы с оптимальными значениями ε применялись к решению двух тестовых задач для линейного уравнения переноса в одномерном и двумерном случаях, а также с их использованием производилось численное решение задачи о течении в каверне с подвижной верхней крышкой описанным выше методом расщепления по физическим процессам.

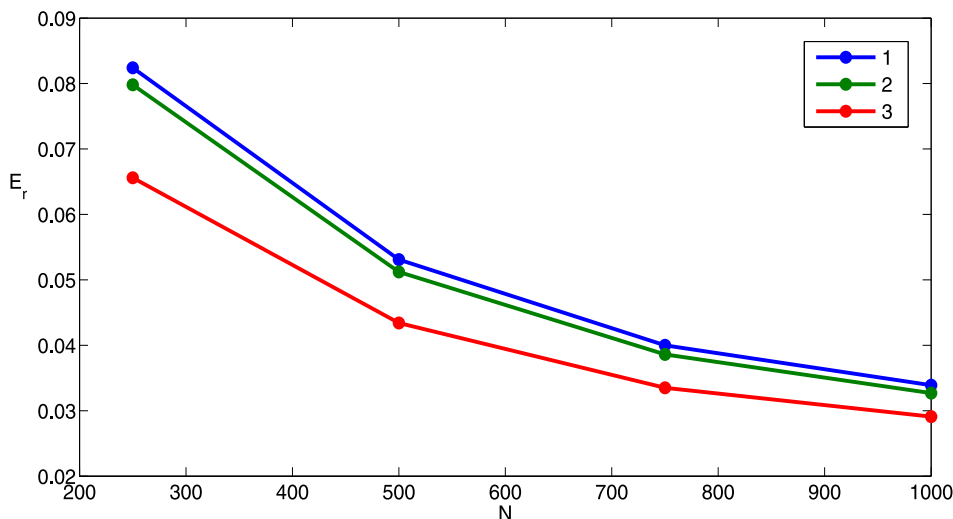


Рис. 7. Зависимость относительной погрешности численного решения задачи для уравнения переноса от разбиения сетки: 1) случай схемы 1; 2) случай схемы 2; 3) случай схемы 3

7.1. Задача для одномерного уравнения переноса. Рассмотрим начально-краевую задачу для уравнения (9) при $c > 0$ с начальным и граничным условиями следующего вида:

$$u(0, x) = \varphi(x) = \begin{cases} C, & x \in (a, b), \\ 0, & x \in [0, a] \cup [b, +\infty), \end{cases} \quad u(t, 0) = 0, \quad t \geq 0,$$

где $C = \text{const}$. Точное (обобщенное) решение поставленной задачи представимо в виде бегущей волны: $u(t, x) = \varphi(x - ct)$.

При численных расчетах пространственный $[0, L]$ и временной $[0, T]$ промежутки разбивались равномерными сетками из N и M узлов, построенных с шагами h и Δt соответственно. Для проведения вычислений выбиралось $c = 0.25$, $L = 10$, $T = 10$, $a = 4$, $b = 6$, $C = 1$. Число Куранта γ принималось равным 0.1. На рис. 5 для сравнения представлены результаты расчетов, полученные по схемам без параметра на пространственной сетке из 250 узлов. Как можно видеть, для полученных численных решений характерно наличие численной дисперсии, наиболее явно проявляющееся у схем с центральными разностями. На рис. 6 представлены численные решения, полученные по схемам с оптимальными параметрами на той же сетке. Как можно видеть, фиктивные колебания оказались снижены по сравнению со случаями схем без параметра.

Погрешности получаемого численного решения вычислялись в сеточной норме пространства $L_{1h}[0, L]$:

$$E_a = \sum_{i=1}^N |u_i^M - u(T, x_i)|h.$$

На рис. 7 представлены графики относительных погрешностей $E_r = \frac{E_a}{\| [u(T, x)]_h \|_{L_{1h}[0, L]}}$, где $[u(T, x)]_h$ —

сужение $u(T, x)$ на сетку по пространственной переменной. Как можно видеть, для всех представленных схем имеет место сходимость численных решений к точному, при этом максимальные погрешности не превосходят 8%.

7.2. Задача для двумерного уравнения переноса. Рассмотрим задачу для двумерного уравнения

переноса, выписанного в размерном виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{c}\nabla u = 0, \quad (24)$$

в области $\Omega = \{(x, y) | x \in [0, L_x], y \in [0, L_y]\}$ и на промежутке времени $[0, T]$. Вектор \mathbf{c} будем задавать следующим образом: $\mathbf{c} = c\mathbf{e}$, где $c > 0$ — скорость переноса, а безразмерный вектор \mathbf{e} представляет собой вектор из шаблона D2Q9 и является таким, что через его длину при домножении на h можно получить расстояние между узлами равномерной прямоугольной сетки, построенной с этим шагом (т.е. $|\mathbf{e}| = 1$ или $\sqrt{2}$). Без ограничения общности будем считать, что $c_x = c_y = c$, что соответствует $\mathbf{e}_6 = (1, 1)$ из шаблона D2Q9. В рамках метода LBM такой выбор \mathbf{e} отвечает диагональному направлению решетки. Тогда граничные условия ставятся на границах $x = 0$ и $y = 0$. Будем считать, что они имеют следующий вид:

$$u(t, 0, y) = u(t, x, 0) = 0, \quad x \in [0, L_x], \quad y \in [0, L_y].$$

В качестве начального условия рассмотрим кусочно-непрерывную функцию

$$u(0, x, y) = \varphi(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{R^2} \left(-((x - A)^2 + (y - B)^2) + R^2 \right), & (x, y) \in \omega, \\ 0, & (x, y) \in \Omega/\omega, \end{cases}$$

где в качестве ω будем рассматривать круг радиуса R : $\omega = \{(x, y) | (x - A)^2 + (y - B)^2 \leq R^2\}$.

При проведении расчетов рассматривался случай $c = 1$, $L_x = L_y = 5$, $T = 2$, $R = 1/2$, $A = 1$, $B = 1$. При дискретизации уравнения (24) рассматривались схемы, аналогичные (11). При этом члены $\mathbf{c}\nabla u$ аппроксимировались с использованием характеристического подхода [16], широко используемого при построении конечно-разностных решеточных схем Больцмана, позволяющих варьировать значение параметра Куранта. В рамках этого подхода производные в скалярных произведениях $\mathbf{c}\nabla u$ аппроксимируются не отдельно, а само произведение аппроксимируется *одной* конечной разностью, при этом используются только те узлы сетки, которые лежат на прямых, являющихся проекциями характеристик уравнения типа (24) на физическое пространство. Рассмотрим размерные аналоги одномерных аппроксимаций (13)–(17) этого типа:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}\nabla u(t_j, \mathbf{r}_{kl}) &\approx \frac{c}{2h} \left(\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} + \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) - \tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) \right), \\ \mathbf{c}\nabla u(t_j, \mathbf{r}_{kl}) &\approx \frac{c}{2h} \left(3\tilde{u}(t_j, \mathbf{r}_{kl}) - 4\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + \tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - 2\frac{h}{c} \mathbf{c} \right) \right), \\ \mathbf{c}\nabla u(t_j, \mathbf{r}_{kl}) &\approx \frac{c}{6h} \left(2\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} + \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + 3\tilde{u}(t_j, \mathbf{r}_{kl}) - 6\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + \tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - 2\frac{h}{c} \mathbf{c} \right) \right), \\ \mathbf{c}\nabla u(t_j, \mathbf{r}_{kl}) &\approx \frac{c}{12h} \left(-\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} + 2\frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + 8\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} + \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) - 8\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + \tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - 2\frac{h}{c} \mathbf{c} \right) \right), \\ \mathbf{c}\nabla u(t_j, \mathbf{r}_{kl}) &\approx \frac{c}{12h} \left(3\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} + \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + 10\tilde{u}(t_j, \mathbf{r}_{kl}) - 18\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - \frac{h}{c} \mathbf{c} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 6\tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - 2\frac{h}{c} \mathbf{c} \right) - \tilde{u} \left(t_j, \mathbf{r}_{kl} - 3\frac{h}{c} \mathbf{c} \right) \right), \end{aligned}$$

где $\mathbf{r}_{kl} = (x_k, y_l)$ — узел пространственной сетки, а через \tilde{u} обозначается сеточная функция, значения которой получаются в результате численного решения поставленной задачи. Расчеты, как и в одномерном случае, производились при $\gamma = 0.1$.

На рис. 8 для сравнения представлены графики относительных погрешностей, вычисленных с использованием сеточной нормы пространства $L_{1h}(\Omega)$, для случаев схем с параметром и без параметра одинакового порядка аппроксимации по пространственным переменным. На рис. 9 для сравнения представлены аналогичные графики для параметрических схем разного порядка аппроксимации. Как можно видеть, для случая схемы с параметром относительные погрешности меньше, но для случаев схем третьего и четвертого порядка ощутимых отличий практически нет. По результатам, представленным на рис. 9,

можно заключить, что значения погрешностей уменьшаются при увеличении порядка аппроксимации для случаев всех сеток.

7.3. Задача о течении в каверне с подвижной крышкой. Рассмотрим применение описанного ранее метода расщепления на основе построенных схем к решению одной из известных тестовых нелинейных задач вычислительной гидродинамики — задачи о течении в каверне с подвижной крышкой [34].

Рассматривается область в форме квадрата со сторонами длины L . На трех границах компоненты вектора скорости \mathbf{U} полагаются равными нулю. На верхней границе ненулевой полагается продольная компонента вектора скорости:

$$U_x(t, 0, y) = U_y(t, 0, y) = U_x(t, x, 0) = U_y(t, x, 0) = U_x(t, L, y) = U_y(t, L, y) = 0, \\ U_x(t, x, L) = U_0 = \text{const}, \quad U_y(t, x, L) = 0, \quad x \in [0, L], \quad y \in [0, L].$$

В начальный момент времени жидкость считается покоящейся, ее плотность полагается равной единице. Задача для системы (1) решалась с использованием шаблона D2Q9. Равновесные функции распределения Максвелла, как это принято в методе LBM, аппроксимировались полиномиальными формами от ρ и \mathbf{U} [8]. Расчеты проводились при различных значениях числа Рейнольдса Re , которое вычислялось по формуле

$$Re = \frac{U_0 L}{\nu}, \tag{25}$$

где ν — кинематическая вязкость. В случае шаблона D2Q9 имеет место следующая связь ν и времени релаксации λ [16]:

$$\nu = \frac{\lambda V^2}{3}. \tag{26}$$

При проведении расчетов по заданному значению Re значение ν определялось с использованием формулы (25), а значение λ — из (26) по найденному значению ν . Вычисления проводились на сетке из 150×150 узлов при числе Куранта $\gamma \approx 0.0354$. Рассматривались следующие значения параметров: $L = 1$ м, $U_0 = 0.1$ м/с и временной промежуток от 0 до 500 с. Расчеты проводились при Re равном 1000, 2500 и 5000. Функции распределения в начальный момент времени полагались равновесными. При задании условий для функций распределения на границах использовался подход, предложенный в [35].

На рис. 10 приведены результаты расчетов на основе метода расщепления при $Re = 1000$ с использованием схем 1–3 с оптимальными параметрами в сравнении с результатами, представленными в [34].

В таблице приведены значения относительных погрешностей расчетов по методу расщепления в случае разных Re , полученных при расчетах с использованием схем 1–3 при оптимальных значениях параметра. Эти погрешности вычисляются как отношения модуля разности минимальных значений функции тока, полученных в результате расчетов, и минимальных значений, представленных в [36], к модулям этих значений. Как можно видеть, относительные погрешности на представленной сетке не превосходят 10%, при этом при увеличении порядка схемы они уменьшаются.

8. Заключение. Работа посвящена анализу и оптимизации явных разностных схем для решения уравнений переноса, возникающих на этапе адвекции метода расщепления по физическим процессам. Метод может применяться как для решеточных уравнений Больцмана, так и при решении кинетических уравнений общего вида. Рассматриваются схемы второго-четвертого порядков аппроксимации по пространственным переменным. Для уменьшения эффектов численных диссипации и дисперсии используются схемы с параметром. С помощью метода фон Неймана и аппроксимации границ области устойчивости получены условия устойчивости схем в виде неравенств на значения параметра Куранта. Оптимальные значения параметра для регулирования диссипативных и дисперсионных эффектов предлагается находить посредством решения задач минимизации функций максимума. Схемы с оптимальными значениями параметра применяются при решении тестовых задач — для одномерного и двумерного уравнений переноса, а также при применении метода расщепления к решению задачи о течении в каверне с подвижной крышкой.

Предложенный подход к нахождению значений параметра схем, основанный на решении многокритериальной задачи негладкой оптимизации, может применяться при построении разностных схем для различных уравнений гиперболического типа.

Значения относительных погрешностей результатов расчетов по методу расщепления в случае разных Re

Re	Схема 1	Схема 2	Схема 3
1000	0.0678537	0.0498957	0.0444436
2500	0.0853655	0.0608553	0.0504215
5000	0.0902478	0.0642436	0.0533778

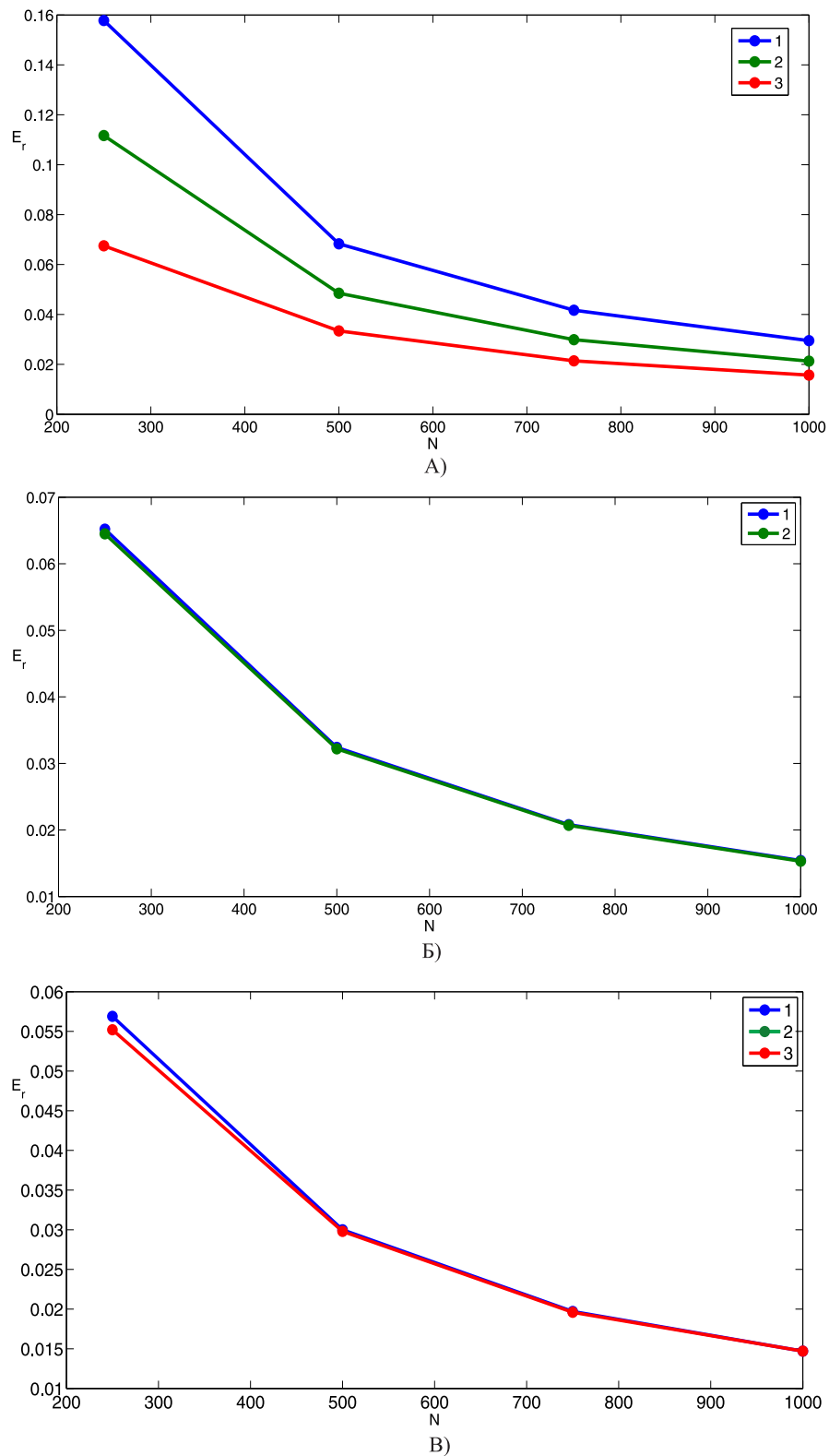


Рис. 8. Графики зависимости относительной погрешности численного решения задачи для двумерного уравнения переноса от разбиения сетки: А) случай схем второго порядка аппроксимации: 1 — схема с направленной разностью, 2 — схема с центральной разностью, 3 — схема 1; Б) случай схем третьего порядка аппроксимации: 1 — схема с направленной разностью, 2 — схема 2; В) случай схем четвертого порядка аппроксимации: 1 — схема с направленной разностью, 2 — схема с центральной разностью, 3 — схема 3

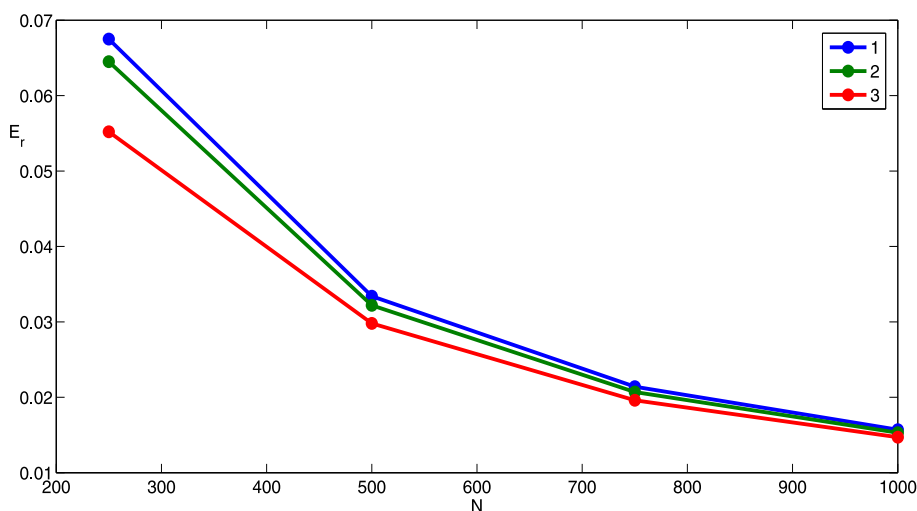


Рис. 9. Графики зависимости относительной погрешности численного решения задачи для двумерного уравнения переноса от разбиения сетки в случае схем с оптимальными значениями параметра: 1 — случай схемы 1; 2 — случай схемы 2; 3 — случай схемы 3

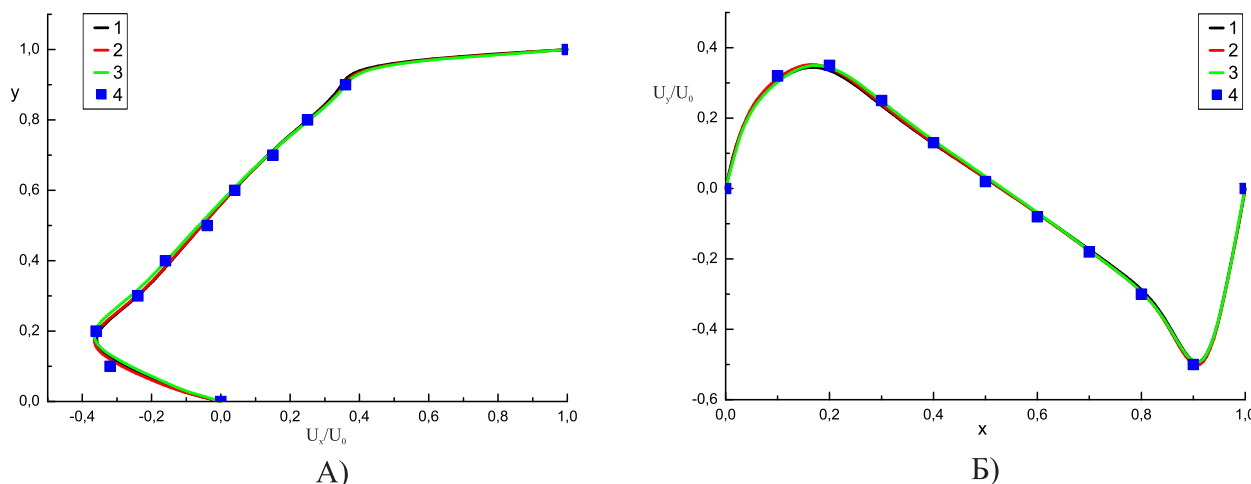


Рис. 10. Результаты численного решения задачи о течении в каверне при $Re = 1000$: 1 — с использованием схемы 1; 2 — с использованием схемы 2; 3 — с использованием схемы 3; 4 — результаты Ghia с соавторами [34]

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грачев Н.Е., Дмитриев А.В., Сенин Д.С. Моделирование динамики газа при помощи решеточного метода Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011. **12**. 227–231.
2. Захаров А.М., Сенин Д.С., Грачев Е.А. Моделирование течений методом решеточных уравнений Больцмана со многими временами релаксации // Вычислительные методы и программирование. 2014. **15**. 644–657.
3. Евстигнеев Н.М., Магницкий Н.А. Нелинейная динамика в начально-краевой задаче течения жидкости с уступа для гидродинамического приближения уравнений Больцмана // Дифференциальные уравнения. 2010. **46**, № 12. 1794–1798.
4. Владимирова Н.А., Простомолотов А.И., Верезуб Н.А. Компьютерное моделирование задач аэрогидродинамики на основе численного решения кинетического уравнения методом решеточных уравнений Больцмана в программном комплексе XFlow // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. **16**, № 1. 1–14.
5. Бикюлов 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. **13**. 13–19.
6. Бикюлов Д.А., Сенин Д.С. Реализация метода решеточных уравнений Больцмана без хранимых значений функций распределения для GPU // Вычислительные методы и программирование. 2013. **14**. 370–374.
7. Бикюлов Д.А. Эффективная реализация метода решеточных уравнений Больцмана для гибридных суперкомпьютерных систем // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 205–214.

8. *Куперштох А.Л.* Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // Вычислительные методы и программирование. 2012. **13**. 130–138.
9. *Куперштох А.Л.* Трехмерное моделирование методом LBE на гибридных GPU-кластерах распада бинарной смеси жидкого диэлектрика с растворенным газом на систему парогазовых каналов // Вычислительные методы и программирование. 2012. **13**. 384–390.
10. *Куперштох А.Л., Медведев Д.А., Грибанов И.И.* Моделирование тепломассопереноса в среде с фазовыми переходами методом решеточных уравнений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2014. **15**. 317–328.
11. *He X., Luo L.-S.* A priori derivation of the lattice Boltzmann equation // Physical Review E. 1997. **55**, N 6. R6333–R6336.
12. *Кривовичев Г.В.* О применении интегро-интерполяционного метода к построению одношаговых решеточных кинетических схем Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2012. **13**. 19–27.
13. *Кривовичев Г.В., Прохорова Е.А.* Об аппроксимационной вязкости однопараметрических семейств решеточных схем Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2017. **18**. 41–52.
14. *Rao P.R., Schaefer L.A.* Numerical stability of explicit off-lattice Boltzmann schemes: a comparative study // Journal of Computational Physics. 2015. **285**. 251–264.
15. *Кривовичев Г.В.* О решеточной схеме Больцмана для расчетов на неструктурированных сетках // Вычислительные методы и программирование. 2013. **14**. 524–532.
16. *Sofonea V., Sekerka R.F.* Viscosity of finite difference lattice Boltzmann models // Journal of Computational Physics. 2003. **184**, N 2. 422–434.
17. *Аристов В.В., Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1980. **20**, № 1. 191–207.
18. *Dimarco G., Pareschi L.* Numerical methods for kinetic equations // Acta Numerica. 2014. **23**. 369–520.
19. *Аристов В.В., Забелок С.А.* Детерминистический метод решения уравнения Больцмана с параллельными вычислениями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2002. **42**, № 3. 425–437.
20. *Богомолов С.В.* Повышение точности метода расщепления для уравнения Больцмана // Математическое моделирование. 1999. **11**, № 10. 100–105.
21. *Dimarco G., Loubere R.* Towards an ultra efficient kinetic scheme. Part I: Basics on the BGK equation // Journal of Computational Physics. 2013. **255**. 680–698.
22. *Богомолов С.В.* Сходимость метода суммарной аппроксимации для уравнения Больцмана // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1988. **28**, № 1. 119–126.
23. *Ohwada T.* Higher order approximation methods for the Boltzmann equation // Journal of Computational Physics. 1998. **139**, N 1. 1–14.
24. *Anikin Yu.A., Dodulad O.I., Kloss Yu.Yu., Martynov D.V., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G.* Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // Vacuum. 2012. **86**, N 11. 1770–1777.
25. *Anikin Yu.A., Dodulad O.I., Kloss Yu.Yu., Tcheremissine F.G.* Method of calculating of the collision integral and solution of Boltzmann kinetic equation for simple gases, gas mixtures and gases with rotational degrees of freedom // International Journal of Computer Mathematics. 2015. **92**, N 9. 1775–1789.
26. *Kloss Yu.Yu., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G.* Solving Boltzmann equation on GPU // Procedia Computer Science. 2010. **1**, N 1. 1083–1091.
27. *Dellar P.J.* An interpretation and derivation of the lattice Boltzmann method using Strang splitting // Computers and Mathematics with Applications. 2013. **65**, N 2. 129–141.
28. *Schiller U.D.* A unified operator splitting approach for multi-scale fluid-particle coupling in the lattice Boltzmann method // Computer Physics Communications. 2014. **185**, N 10. 2586–2597.
29. *Аристов В.В.* Решение уравнения Больцмана при малых числах Кнудсена // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2004. **44**, № 6. 1127–1140.
30. *Кривовичев Г.В., Марнопольская Е.С.* Исследование свойств разностной схемы для реализации этапа адвекции метода решеточных уравнений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2016. **17**. 212–223.
31. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
32. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. СПб: БХВ-Петербург, 2011.
33. *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику. М.: Интеллект, 2008.
34. *Ghia U., Ghia K.N., Shin C.T.* High-Re solutions for incompressible flow using the Navier–Stokes equations and a multigrid method // Journal of Computational Physics. 1982. **48**. 387–411.
35. *Zou Q., He X.* On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model // Physics of Fluids. 1997. **9**, N 6. 1591–1598.
36. *Erturk E.* Discussions on driven cavity flow // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2009. **60**, N 3. 275–294.

Analysis and Optimization of Higher Order Explicit Finite-Difference Schemes for the Advection Stage Implementation in the Lattice Boltzmann Method

G. V. Krivovichev¹ and E. S. Marnopolskaya²

¹ *Saint Petersburg State University, Faculty of Applied Mathematics and Control Processes; prospekt Universitetskii 35, Saint Petersburg, 198504, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: g.krivovichev@spbu.ru*

² *Saint Petersburg State University, Faculty of Applied Mathematics and Control Processes; prospekt Universitetskii 35, Saint Petersburg, 198504, Russia; Student, e-mail: marnlena@yandex.ru*

Received June 13, 2017

Abstract: This paper is devoted to the analysis and optimization of explicit finite-difference schemes for solving the transport equations arising at the advection stage in the method of splitting into physical processes. The method can be applied to the lattice Boltzmann equations and to the kinetic equations of general type. The second-to-fourth order schemes are considered. In order to minimize the effect of numerical dispersion and dissipation, the parametric schemes are used. The Neumann method and the polynomial approximation of the boundaries of stability domains are employed to obtain the stability conditions in the form of inequalities imposed on the Courant parameter. The optimal values of the parameter used to control the dissipation and dispersion effects are found by minimizing the maximum function. The schemes with optimal parameters are applied for the numerical solution of 1D and 2D advection equations and for the problem of lid-driven cavity flow.

Keywords: lattice Boltzmann method, splitting method, stability, dispersion, dissipation.

References

1. N. E. Grachev, A. V. Dmitriev, and D. S. Senin, "Simulation of Gas Dynamics with the Lattice Boltzmann Method," *Vychisl. Metody Programm.* **12**, 227–231 (2011).
2. A. M. Zakharov, D. S. Senin, and E. A. Grachev, "Flow Simulation by the Lattice Boltzmann Method with Multiple-Relaxation Times," *Vychisl. Metody Programm.* **15**, 644–657 (2014).
3. N. M. Evstigneev and N. A. Magnitskii, "Nonlinear Dynamics in the Initial-Boundary Value Problem on the Fluid Flow from a Ledge for the Hydrodynamic Approximation to the Boltzmann Equations," *Differ. Uravn.* **46** (12), 1794–1798 (2010) [*Differ. Equ.* **46** (12), 1794–1798 (2010)].
4. N. A. Vladimirova, A. I. Prostomolotov, and N. A. Verezub, "Computer Simulation of Aerohydrodynamics Problems on the Base of Numerical Solution of Kinetic Equation by Lattice Boltzmann Method in the XFlow Software Package," *Fiz. Khim. Kinetika Gaz. Dinamika* **16** (1), 1–14 (2015).
5. D. A. Bikulov, D. S. Senin, D. S. Demin, et al., "Implementation of the Lattice Boltzmann Method on GPU Clusters," *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 13–19 (2012).
6. D. A. Bikulov and D. S. Senin, "Implementation of the Lattice Boltzmann Method without Stored Distribution Functions on GPU," *Vychisl. Metody Programm.* **14**, 370–374 (2013).
7. D. A. Bikulov, "An Efficient Implementation of the Lattice Boltzmann Method for Hybrid Supercomputers," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 205–214 (2015).
8. A. L. Kupershtokh, "Three-Dimensional Simulations of Two-Phase Liquid–Vapor Systems on GPU Using the Lattice Boltzmann Method," *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 130–138 (2012).
9. A. L. Kupershtokh, "Three-Dimensional LBE Simulations on Hybrid GPU-Clusters for the Decay of a Binary Mixture of Liquid Dielectrics with a Solute Gas to a System of Gas–Vapor Channels," *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 384–390 (2012).
10. A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev, and I. I. Gribanov, "Modeling of Thermal Flows in a Medium with Phase Transitions Using the Lattice Boltzmann Method," *Vychisl. Metody Programm.* **15** (2), 317–328 (2014).
11. X. He and L.-S. Luo, "A Priori Derivation of the Lattice Boltzmann Equation," *Phys. Rev. E* **55** (6), R6333–R6336 (1997).
12. G. V. Krivovichev, "Application of the Integro-Interpolation Method to the Construction of Single-Step Lattice Boltzmann Schemes," *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 19–27 (2012).
13. G. V. Krivovichev and E. A. Prokhorova, "Approximation Viscosity of One-Parameter Families of Lattice Boltzmann Equations," *Vychisl. Metody Programm.* **18**, 41–52 (2017).

14. P. R. Rao and L. A. Schaefer, “Numerical Stability of Explicit Off-Lattice Boltzmann Schemes: A Comparative Study,” *J. Comput. Phys.* **285**, 251–264 (2015).
15. G. V. Krivovichev, “A Lattice Boltzmann Scheme for Computing on Unstructured Meshes,” *Vychisl. Metody Programm.* **14**, 524–532 (2013).
16. V. Sofonea and R. F. Seckerka, “Viscosity of Finite Difference Lattice Boltzmann Models,” *J. Comput. Phys.* **184** (2), 422–434 (2003).
17. V. V. Aristov and F. G. Cheremisin, “The Conservative Splitting Method for Solving Boltzmann’s Equation,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **20** (1), 191–207 (1980) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **20** (1), 208–225 (1980)].
18. G. Dimarco and L. Pareschi, “Numerical Methods for Kinetic Equations,” *Acta Numerica* **23**, 369–520 (2014).
19. V. V. Aristov and S. A. Zabelok, “A Deterministic Method for Solving the Boltzmann Equation with Parallel Computations,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **42** (3), 425–437 (2002) [*Comput. Math. Math. Phys.* **42** (3), 406–418 (2002)].
20. S. V. Bogomolov, “Accuracy Increasing of the Splitting Method for Boltzmann Equation,” *Mat. Model.* **11** (10), 100–105 (1999).
21. G. Dimarco and R. Loubere, “Towards an Ultra Efficient Kinetic Scheme. Part I: Basics on the BGK Equation,” *J. Comput. Phys.* **255**, 680–698 (2013).
22. S. V. Bogomolov, “Convergence of the Total-Approximation Method for the Boltzmann Equation,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **28** (1), 119–126 (1988) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **28** (1), 79–84 (1988)].
23. T. Ohwada, “Higher Order Approximation Methods for the Boltzmann Equation,” *J. Comput. Phys.* **139** (1), 1–14 (1998).
24. Yu. A. Anikin, O. I. Dodulad, Yu. Yu. Kloss, et al., “Development of Applied Software for Analysis of Gas Flows in Vacuum Devices,” *Vacuum* **86** (11), 1770–1777 (2012).
25. Yu. A. Anikin, O. I. Dodulad, Yu. Yu. Kloss, and F. G. Tcheremissine, “Method of Calculating the Collision Integral and Solution of the Boltzmann Kinetic Equation for Simple Gases, Gas Mixtures and Gases with Rotational Degrees of Freedom,” *Int. J. Comput. Math.* **92** (9), 1775–1789 (2015).
26. Yu. Yu. Kloss, P. V. Shuvalov, and F. G. Tcheremissine, “Solving Boltzmann Equation on GPU,” *Procedia Comput. Sci.* **1** (1), 1083–1091 (2010).
27. P. J. Dellar, “An Interpretation and Derivation of the Lattice Boltzmann Method Using Strang Splitting,” *Comput. Math. Appl.* **65** (2), 129–141 (2013).
28. U. D. Schiller, “A Unified Operator Splitting Approach for Multi-Scale Fluid-Particle Coupling in the Lattice Boltzmann Method,” *Comput. Phys. Commun.* **185** (10), 2586–2597 (2014).
29. V. V. Aristov, “The Solution of the Boltzmann Equation at Small Knudsen Numbers,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **44** (6), 1127–1140 (2004) [*Comput. Math. Math. Phys.* **44** (6), 1069–1081 (2004)].
30. G. V. Krivovichev and E. S. Marnopolskaya, “Study of Properties of a Finite-Difference Scheme for the Advection Stage Implementation in the Lattice Boltzmann Method,” *Vychisl. Metody Programm.* **17**, 212–223 (2016).
31. T. G. Elizarova, *Quasi-Gas Dynamic Equations and Methods for the Computation of Viscous Flow* (Nauchnyi Mir, Moscow, 2007) [in Russian].
32. N. N. Kalitkin, *Numerical Methods* (BKHV Petersburg, St. Petersburg, 2011) [in Russian].
33. R. P. Fedorenko, *Introduction to Computational Physics* (Intellekt, Dolgoprudnyi, 2008) [in Russian].
34. U. Ghia, K. N. Ghia, and C. T. Shin, “High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier–Stokes Equations and a Multigrid Method,” *J. Comput. Phys.* **48**, 387–411 (1982).
35. Q. Zou and X. He, “On Pressure and Velocity Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model,” *Phys. Fluids* **9** (6), 1591–1598 (1997).
36. E. Erturk, “Discussions on Driven Cavity Flow,” *Int. J. Numer. Methods Fluids* **60** (3), 275–294 (2009).