

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова Факультет вычислительной математики и кибернетики Кафедра вычислительных методов

Усович Алексей Игоревич

Методы решётчатых уравнений Больцмана решения уравнений параболического типа

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Научный руководитель:

ассистент

Н. А. Афанасьев

Содержание

1	Вве	едение		3
2	Пос	станов	ка задачи	4
	2.1	Одног	мерное уравнение теплопроводности	4
	2.2	Уравн	нение теплопроводности в двумерном виде	4
	2.3	Начал	тьно-краевые задачи для уравнения теплопроводности	4
3	Реп	петочн	ный метод Больцмана	5
	3.1	Кинет	гическое уравнение Больцмана	5
	3.2	Решет	гочное уравнение Больцмана	6
		3.2.1	Оператор столкновений	9
		3.2.2	Интегрирование по времени	9
	3.3	Алгор	ритм LBM	10
		3.3.1	Основной шаг алгоритма	10
		3.3.2	Функция равновесного распределения	11
		3.3.3	Анализ Чапмена-Энскога	11
		3.3.4	Неоднородное уравнение теплопроводности	13
		3.3.5	Граничные условия	13
4	Рез	ультат	ты расчетов	15
	4.1	Задач	а о статично нагретом стержне	15
	4.2	Задач	а об остывании стержня	17
	4.3	Задач	а об остывании стержня с источником тепла	18
	4.4	Задач	а об остывании несимметрично нагретого стержня	19
	4.5	Задач	а о пластине, нагретой с распределением Гаусса	20
	4.6	Задач	а об остывании пластины с источником тепла	22
5	Зак	лючен	ие	24
Cı	писо	к лите	ературы	25

1 Введение

Для описания многих современных задач математической физики используют системы дифференциальных уравнений параболического типа [1]. Эти уравнения описывают нестационарные процессы, такие как конвекция, диффузия, теплопроводность, и они широко применяются в различных областях науки.

Решение уравнений параболического типа представляет собой задачу численного моделирования. Традиционно для решения уравнений параболического типа используются методы конечных разностей [2], конечных элементов [3] или метод конечных объемов [4].

Метод Lattice Boltzmann (LBM) является численным методом, основанным на статистическом описании поведения частиц в среде [5]. Он позволяет моделировать множество физических процессов, включая перенос массы, импульса и тепла. Применение метода LBM к решению уравнений параболического типа обусловлено его особыми пре-имуществами:

Во-первых, метод Lattice Boltzmann является параллельным [6] и масштабируемым, что позволяет эффективно использовать современные вычислительные ресурсы, включая графические процессоры (GPU) [7]. Это делает метод LBM привлекательным для решения больших и сложных задач.

Во-вторых, метод Lattice Boltzmann обладает простой физической интерпретацией и легко обобщается для моделирования различных физических явлений [8], [9], [10]. Он основан на моделировании функции распределения частиц на решетке, где каждая ячейка представляет собой набор значений функции распределения. Это позволяет легко учитывать различные граничные условия и взаимодействия частиц.

В рамках данной работы будет проведен подробный анализ и моделирование уравнений параболического типа с использованием метода Lattice Boltzmann. Будут рассмотрены уравнения теплопроводности в одномерном и двумерном случае и проведены численные эксперименты для различных граничных и начальных условий. Будет проведено сравнение результатов, полученных с помощью метода Lattice Boltzmann, с аналитическими решениями, чтобы оценить преимущества и эффективность метода при решении уравнений параболического типа. Будут проанализированы точность и устойчивость метода, а также его возможности для моделирования различных физических процессов.

В следующих разделах нашей работы будут представлены более подробное описание метода Lattice Boltzmann, алгоритмические особенности его применения для решения уравнений параболического типа, а также результаты численных экспериментов и их анализ.

2 Постановка задачи

В качестве уравнений параболического типа будем рассматривать уравнения теплопроводности.

2.1 Одномерное уравнение теплопроводности

В одномерном случае уравнение теплопроводности в однородной среде без внешних источников тепла имеет следующий вид [1]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{1}$$

где α - коэффициент температуропроводности, искомая функция u=u(x,t) определяет температуру в точке с координатой x в момент времени t.

2.2 Уравнение теплопроводности в двумерном виде

В двумерном случае уравнение теплопроводности в однородной среде без внешних источников тепла имеет следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),\tag{2}$$

где α - коэффициент температуропроводности, искомая функция u=u(x,y,t) определяет температуру в точке с координатой (x,y) в момент времени t.

2.3 Начально-краевые задачи для уравнения теплопроводности

В рамках работы будем использовать метод Lattice Boltzmann для решения следующей начально-краевой задачи для уравнения теплопроводности в одномерном случае, описывающей распространение тепла по однородному стержню длины l:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in [0, l], \quad t \in [0, T],
 u(x, 0) = \phi(x), \quad x \in [0, l],$$
(3)

где $u(x,0) = \phi(x)$ - функция начального распределения температуры по стержню. Будем рассматривать граничные условия следующих типов:

• 1 рода - на концах стержня задана температура:

$$u(0,t) = \mu_1(t), \ t \in [0,T],$$

 $u(l,t) = \mu_2(t), \ t \in [0,T];$

$$(4)$$

• 2 рода - на концах стержня задан поток тепла:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \psi_1(t), \quad t \in [0,T],
\frac{\partial u}{\partial x}(l,t) = \psi_2(t), \quad t \in [0,T].$$
(5)

Также будут рассматриваться начально-краевые задачи для двумерного уравнения теплопроводности, описывающие распространение тепла по прямоугольной однородной пластинке размеров $l_1 \times l_2$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad x \in [0, l_1], \quad y \in [0, l_2], \quad t \in [0, T],$$

$$u(x, y, 0) = \phi(x, y), \quad x \in [0, l_1], \quad y \in [0, l_2],$$
(6)

где $u(x,y,0)=\phi(x,y)$ - функция начального распределения температуры по пластинке. Граничные условия будем задавать следующих типов:

• 1 рода - на границе пластинки задана температура $\mu(t)$:

$$u(x, y, t) = \mu(t), t \in [0, T], (x, y) \in \partial G,$$
 (7)

• 2 рода - на границе пластинки задан поток тепла $\psi(t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x, y, t) = \psi(t), \quad t \in [0, T], \quad (x, y) \in \partial G, \tag{8}$$

где ∂G - граница рассматриваемой области $G=\{x\in [0,l_1],y\in [0,l_2]\},\ n$ - внешняя нормаль к этой границе.

3 Решеточный метод Больцмана

3.1 Кинетическое уравнение Больцмана

Рассмотрим некоторую сплошную среду, состоящую из подвижных частиц, на которую не влияют внешние силы. Закон движения частиц данной среды описывается кинетическим уравнением Больцмана [11]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{c}, \nabla f) = \Omega(f, f^{eq}), \tag{9}$$

где $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ — функция распределения частиц, зависящая от пространственных координат \mathbf{x} , вектора скорости частиц \mathbf{c} и времени t, Ω — так называемый оператор столкновений, зависящий как от функции распределения f, так и от функции равновесного

распределения f^{eq} , задаваемой следующим выражением:

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT}\right)^{3/2} e^{-|\mathbf{c}|^2/(2RT)}.$$
(10)

Здесь ρ — плотность среды, T — температура, R — универсальная газовая постоянная. Уравнение (9) можно интерпретировать как уравнение переноса [1]: левая часть характеризуют перенос функции распределения частиц со скоростью \mathbf{c} , правая — вносит некоторую вязкость в силу столкновения частиц.

Если известна функция распределения $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$, то основные параметры среды могут быть получены из нее путем интегрирования по пространству скоростей:

$$\rho(\mathbf{x},t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d^3 c,$$

$$\rho(\mathbf{x},t)\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = \int \mathbf{c}f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d^3 c,$$

$$\rho(\mathbf{x},t)E(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2} \int |\mathbf{c}|^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d^3 c,$$
(11)

где ${\bf u}$ – скорость среды, E – полная энергия.

Кинетическое уравнение Больцмана (9) в общем случае является семимерным, и даже его численное решение представляет собой крайне вычислительно затратную задачу. Таким образом, уравнение Больцмана требует некоторых упрощений. Одним из таких упрощений является переход к решеточному уравнению Больцмана.

3.2 Решеточное уравнение Больцмана

Дискретизуем сначала пространство (в общем случае трехмерное) в уравнении Больцмана (9). Для этого введем равномерную ортогональную сетку с узлами (x_i, y_j, z_k) , $x_{i+1} - x_i = y_{j+1} - y_j = z_{k+1} - z_k = \Delta x = const$.

Вместо целого трехмерного пространства всевозможных скоростей \mathbf{c} в каждом узле введенной сетки рассмотрим дискретный набор скоростей $\{\mathbf{c}_i, i=\overline{1,q}\}$, соединяющих узел с q окружающих его узлами. Каждому такому вектору скорости сопоставим некоторый вес w_i . Веса выбираются неслучайно, а таким образом, чтобы выполнялись разностные аналоги уравнений (11). Интегралы в (11) заменяются квадратурными фор-

мулами с весами w_i , что приводит к следующей системе уравнений на веса:

$$\sum_{i} w_{i} = 1,$$

$$\sum_{i} w_{i}c_{i\alpha} = 0,$$

$$\sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta} = c_{s}^{2}\delta_{\alpha\beta},$$

$$\sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma} = 0,$$

$$\sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\mu} = c_{s}^{4}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\gamma}),$$

$$\sum_{i} w_{i}c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\mu}c_{i\nu} = 0.$$
(12)

Так, задав набор скоростей $\{\mathbf{c}_i\}$, с помощью уравнений (12) находятся значения весов w_i и так называемая скорость звука решеточной модели c_s . В совокупности набор скоростей и весов (\mathbf{c}_i, w_i) образует решеточную модель DdQq, где d – размерность пространства, q – количество векторов скорости \mathbf{c}_i .

Для уравнения теплопроводности мы будем рассматривать модели D1Q3, D2Q5, D2Q9. Наборы скоростей и весов (\mathbf{c}_i, w_i) для них указаны в таблицах 1, 2 и 3, соответственно (считается, что $\Delta x = 1.0$).

Векторы скорости \mathbf{c}_i	Beca w_i
(0)	2/3
(1)	1/6
(-1)	1/6

Таблица 1: Наборы скоростей и весов (\mathbf{c}_i, w_i) для модели $D1Q3, c_s = 1/\sqrt{3}$.

Векторы скорости \mathbf{c}_i	Beca w_i
(0,0)	0
(1,0)	1/4
(0,1)	1/4
(-1,0)	1/4
(0, -1)	1/4

Таблица 2: Наборы скоростей и весов (\mathbf{c}_i, w_i) для модели $D2Q5, c_s = 1/\sqrt{2}$.

Векторы скорости \mathbf{c}_i	Beca w_i
(0,0)	4/9
(1,0)	1/9
(0,1)	1/9
(-1,0)	1/9
(0,-1)	1/9
(1,1)	1/36
(-1,1)	1/36
(-1, -1)	1/36
(1, -1)	1/36

Таблица 3: Наборы скоростей и весов (\mathbf{c}_i, w_i) для модели $D2Q9, c_s = 1/\sqrt{3}$.

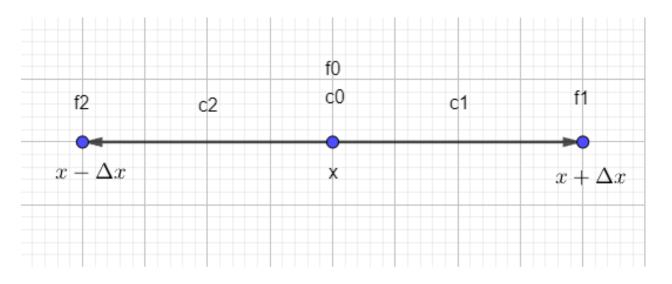


Рис. 1: Шаблон модели D1Q3

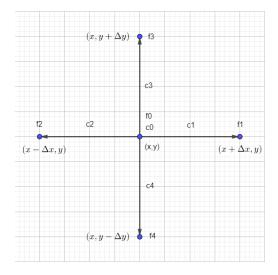


Рис. 2: Шаблон модели D2Q5

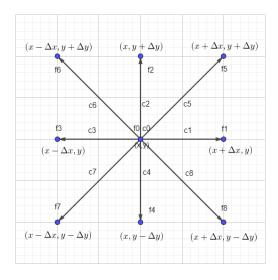


Рис. 3: Шаблон модели D2Q9

С помощью выбранного набора скоростей \mathbf{c}_i уравнение Больцмана (9) заменяется

набором уравнений для $f_i(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t)$:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + (\mathbf{c}_i, \nabla f) = \Omega(f_i, f_i^{eq}), \quad i = \overline{1, q}.$$
(13)

Отметим, что левую часть можно представить в виде субстанциональной производной по траектории $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{c}_i$, тогда уравнения (13) принимают вид:

$$\frac{df_i}{dt} = \Omega(f_i, f_i^{eq}), \quad i = \overline{1, q}. \tag{14}$$

Проинтегрируем каждое из уравнений (14) по временному отрезку $[t, t + \Delta t]$, и получим уравнения решеточного метода Больцмана в общем виде:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \int_t^{t + \Delta t} \Omega(f_i, f_i^{eq}) dt, \quad i = \overline{1, q}.$$
 (15)

Существует множество вариантов LBM (15), которые отличаются видом оператора столкновения $\Omega(f_i, f_i^{eq})$ и способом дискретизации интеграла от него.

3.2.1 Оператор столкновений

В качестве оператора столкновений, используемого в LBM (15), рассмотрим оператор BGK (Bhatnagar, Gross, Krook) [12], который так же называется SRT-оператор (Single Relaxation Time). Он имеет следующий вид:

$$\Omega_i(f, f^{eq}) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}),$$
(16)

где τ – параметр, называющийся временем релаксации. Простейшая модель (16) предполагает, что функция распределения f становится равной равновесному распределению f^{eq} за характерное время релаксации τ .

Помимо простейшего SRT-оператора (16) есть и другие модели для оператора столкновений, например, TRT-оператор (Two Relaxation Time) [13]. Рассмотрение более сложных операторов столкновений выходит за рамки данной работы.

3.2.2 Интегрирование по времени

Для аппроксимации интеграла по времени в (15) используем простейшую явную схему Эйлера [14]:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \Omega(f_i, f_i^{eq}) dt \approx \Delta t \Omega(f_i(t), f_i^{eq}(t)). \tag{17}$$

Таким образом, в силу свойств явной схемы Эйлера, получающаяся схема будет аппроксимировать уравнение (15) с первым порядком по времени и бесконечным порядком по пространству. На самом же деле, при сочетании аппроксимации (17) с SRT-оператором (16), порядок аппроксимации по времени будет вторым, что не совсем очевидно. Данный факт будет показан в следующих разделах.

3.3 Алгоритм LBM

3.3.1 Основной шаг алгоритма

Подставляя SRT-оператор (16) и метод Эйлера (17) в (15), получим следующие уравнения:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)), \quad i = \overline{1, q}.$$
(18)

Уравнения (18) записываются для каждого внутреннего узла рассматриваемой сетки. Далее будем считать, что $\Delta t = 1$ (это всегда можно сделать путем замены переменной t). Отметим, что за счет того, что векторы скорости \mathbf{c}_i подобраны так, что они соединяют узлы сетки, в левой части (18) стоят значения функции распределения в некоторых узлах сетки, но на разных слоях по времени. Так, рассмотрим уравнение (18) для узла с координатой \mathbf{x}_j и пусть $\mathbf{x}_j + \mathbf{c}_i = \mathbf{x}_k$. Тогда уравнение (18) можно разбить на две части:

1. Фаза столкновений (collision):

$$f_i^*(\mathbf{x}_j, t) = f_i(\mathbf{x}_j, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\mathbf{x}_j, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}_j, t)),$$

или в другом виде:

$$f_i^*(\mathbf{x}_j, t) = (1 - \omega) f_i(\mathbf{x}_j, t) + \omega f_i^{eq}(\mathbf{x}_j, t), \quad \omega = \frac{\Delta t}{\tau}.$$
 (19)

2. Перенос (streaming):

$$f_i(\mathbf{x}_k, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}_i, t). \tag{20}$$

Таким образом, весь LBM можно реализовать с помощью двух процедур: фазы столкновений (19) и переноса (20). Фаза столкновений крайне проста в силу своей явности и локальности. Действительно, для ее вычисления используются только значения из текущего узла \mathbf{x}_j , то есть при реализации алгоритма на системах с распределенной памятью процессу не требуется обращаться к другим процессам за дополнительной информацией. Фаза переноса (20) так же достаточно проста и может быть реализована в виде сдвигов определенных массивов.

Уравнения (19) и переноса (20) оставляют два незакрытых вопроса: как вычислять $f_i^{eq}(\mathbf{x}_i,t)$) и как выбирать ω (то есть время релаксации τ)?

3.3.2 Функция равновесного распределения

Определим, как находить функцию равновесного распределения f_i^{eq} . Начнем с того, что функция равновесного распределения должна удовлетворять закону сохранения массы и импульса (первым двум уравнениям из (11)), где температура T играет роль плотности ρ , отсюда получаем:

$$\sum_{i} f_{i}^{eq} = \sum_{i} f_{i} = T,$$

$$\sum_{i} f_{i}^{eq} \mathbf{c}_{i} = \sum_{i} f_{i} \mathbf{c}_{i} = 0.$$
(21)

Воспользуемся первыми двумя уравнениями на веса (12):

$$\sum_{i} w_{i} = 1,$$

$$\sum_{i} w_{i} \mathbf{c}_{i} = 0.$$
(22)

Из уравнений (21) и (22) можно получить связь между температурой и равновесным распределением:

$$f_i^{eq} = w_i T, \quad T = \sum_i f_i \tag{23}$$

3.3.3 Анализ Чапмена-Энскога

Выведем уравнение на параметр ω в фазе столкновений (19). Для этого покажем, при каких условиях решеточное уравнение Больцмана (18) аппроксимирует изначальное уравнение теплопроводности (1) (на примере одномерного уравнения). Воспользуемся так называемым анализом Чапмена-Энскога [15], при котором функция распределения f_i раскладывается в окрестности равновесного распределения f_i^{eq} в ряд по малому параметру ϵ :

$$f_i = f_i^{eq} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \dots$$
 (24)

Отметим, что в силу (21) получим, что:

$$\sum_{i} f_i^{(k)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$
 (25)

Кроме того, разложим операторы дифференцирования по пространству и времени в ограниченные ряды по тому же параметру ϵ :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial^{(1)}}{\partial x},
\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + \epsilon^2 \frac{\partial^{(2)}}{\partial t}, \tag{26}$$

где $\frac{\partial^{(1)}}{\partial x}$ и подобные ему следует трактовать как некоторые операторы.

Разложим решеточное уравнение Больцмана (18) в ряд Тейлора в окрестности точки (x,t):

$$\Delta t(\frac{\partial}{\partial t} + c_i \frac{\partial}{\partial x}) f_i + \frac{\Delta t^2}{2} (\frac{\partial}{\partial t} + c_i \frac{\partial}{\partial x})^2 f_i + O(\Delta t^3) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i - f_i^{eq}). \tag{27}$$

Подставим в разложение (27) ряды (24) и (26) и сократим на Δt :

$$(\epsilon \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + \epsilon^{2} \frac{\partial^{(2)}}{\partial t} + \epsilon c_{i} \frac{\partial^{(1)}}{\partial x}) (f_{i}^{eq} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)} + \dots) + \frac{\Delta t}{2} (\epsilon \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + \epsilon^{2} \frac{\partial^{(2)}}{\partial t} + \epsilon c_{i} \frac{\partial^{(1)}}{\partial x})^{2} (f_{i}^{eq} + \epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)} + \dots) =$$

$$= -\frac{1}{\tau} (\epsilon f_{i}^{(1)} + \epsilon^{2} f_{i}^{(2)} + \dots) + O(\Delta t^{2}).$$
(28)

Приравнивая в левой и правой части (28) члены при ϵ , получим следующее уравнение:

$$\left(\frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + c_i \frac{\partial^{(1)}}{\partial x}\right) f_i^{eq} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}. \tag{29}$$

Аналогично приравнивая в левой и правой части (28) члены при ϵ^2 , получим:

$$\frac{\partial^{(2)}}{\partial t} f_i^{eq} + (\frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + c_i \frac{\partial^{(1)}}{\partial x}) f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} (\frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + c_i \frac{\partial^{(1)}}{\partial x})^2 f_i^{eq} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)},$$

где второе слагаемое слева можно упростить с помощью (29), что приведет к:

$$\frac{\partial^{(2)}}{\partial t} f_i^{eq} + (\frac{\Delta t}{2} - \tau) (\frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + c_i \frac{\partial^{(1)}}{\partial x})^2 f_i^{eq} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \tag{30}$$

Просуммировав уравнения (29) и 30 по всем i (т.е. взяв от этих уравнений первые моменты) и воспользовавшись (21) и (25), получим следующие уравнения:

$$\frac{\partial^{(1)} \sum f_i^{eq}}{\partial t} = \frac{\partial^{(1)} T}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial^{(2)} \sum f_i^{eq}}{\partial t} + (\frac{\Delta t}{2} - \tau)(\frac{(\partial^2)^{(1)} \sum f_i^{eq}}{\partial t^2} + 2\frac{\partial^{(1)}}{\partial t}\frac{\partial^{(1)}}{\partial x}\sum c_i f_i^{eq} + \frac{(\partial^2)^{(1)} \sum c_i^2 f_i^{eq}}{\partial x^2}) = (31)$$

$$= \frac{\partial^{(2)} T}{\partial t} + c_s^2 (\frac{\Delta t}{2} - \tau)\frac{(\partial^2)^{(1)} T}{\partial x^2} = 0.$$

Умножая первое уравнение (31) на ϵ , а второе – на ϵ^2 и суммируя их с помощью (26), получим:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + O(\Delta t^2), \quad D = c_s^2 (\tau - \frac{\Delta t}{2}). \tag{32}$$

Таким образом, получаем, что метод (18) аппроксимирует исходное уравнение теплопроводности (1) со вторым порядком по времени, если время релаксации τ подобрано таким образом, что $D = \alpha^2$. Аналогично проводятся выкладки и для двумерного случае, где формула для D получается точно такая же.

3.3.4 Неоднородное уравнение теплопроводности

Рассмотрим неоднородное уравнение теплопроводности [1] в одномерном:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = q(x, t) \tag{33}$$

и двумерном виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = q(x, y, t) \tag{34}$$

где q - функция тепловых источников.

Для учета функции q в алгоритме LBM аналогично с функциями распределения частиц f_i введем функции распределения источника тепла $Q_i(x,t)$. Уравнение (18) примет следующий вид:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t) + Q_i(x, t) \quad i = \overline{1, q}.$$
 (35)

Выполняя анализ Чапмена-Энскога с дополнительными членами Q_i , мы обнаруживаем, что уравнения (32) будут:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + q - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial q}{\partial t} + O(\Delta t^2), \quad D = c_s^2 (\tau - \frac{\Delta t}{2}). \tag{36}$$

Получаем ненужный член $(\frac{\Delta t}{2})\frac{\partial q}{\partial t}$. Для его учета необходимо переопределить:

$$T = \sum_{i} f_i + \frac{Q_i \Delta t}{2}, \ Q_i = (1 - \frac{1}{2\tau} w_i q)$$
 (37)

3.3.5 Граничные условия

Задание граничных условий в алгоритме LBM подразумевает определение функций f_i в граничных узлах сетки, которые не могут быть заданы посредством фазы переноса (20). В качестве наиболее простого примера, можно разобрать схему D1Q3. После переноса (20) в крайнем левом узле будут заданы только функции f_0 и f_2 , функция f_1 не будет задана, так как левее узлов нет. С другой стороны в крайнем правом узле будут заданы только функции f_0 и f_1 .

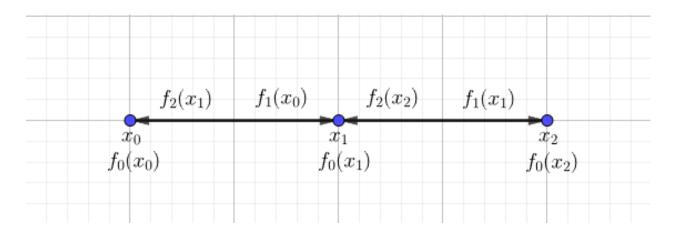


Рис. 4: Перенос функций распределения f_i в левом граничном узле

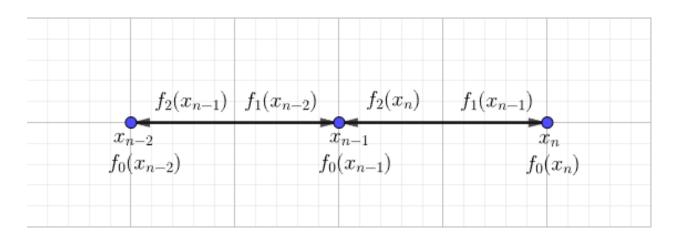


Рис. 5: Перенос функций распределения f_i в правом граничном узле

Таким образом граничные условия первого рода вида $u(0,t)=\mu_1(t)$ и $u(l,t)=\mu_2(t)$ будут задаваться как:

$$f_1(0,t) = \mu_1(t) - f_2(0,t) - f_0(0,t)$$

$$f_2(l,t) = \mu_2(t) - f_1(l,t) - f_0(l,t)$$
(38)

А граничные условия второго рода вида $\frac{\partial u}{\partial x}(0,t)=\psi_1(t)$ и $\frac{\partial u}{\partial x}(l,t)=\psi_2(t)$ как:

$$f_1(0,t) = f_1(\Delta x, t) + \Delta x \psi_1(t) f_2(l,t) = f_2(\Delta x, t) + \Delta x \psi_2(t)$$
(39)

4 Результаты расчетов

В данном разделе будем проводить серии расчетов с использованием LBM на сгущающихся сетках для различных вариаций уравнения теплопроводности. Для этих расчетов будем считать сеточные L2-нормы ошибки и порядки точности (OOA – order of accuracy) по методу Рунге [14]. На равномерной пространственной сетке из N узлов с шагом h сеточная L2-норма ошибки вычисляется по формуле [16]:

$$\|\Delta\|_{L_{2,h}} = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^{N} (u_{i} - y_{i})^{2} h\right)}$$
(40)

где u_i, y_i - значения аналитического и численного решения в i-ом узле соответственно.

4.1 Задача о статично нагретом стержне

Рассмотрим одномерную начально-краевую задачу (3). Коэффициент α примем равным 1, на левой границе стержня длины 1 температура поддерживается равная 1, на правой границе - 0, в начальный момент времени температуру в стержне описывает функция $\phi(x) = -x + 1$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, x \in [0, 1]$$
$$u(x, 0) = -x + 1$$
$$u(0, t) = 1, u(1, t) = 0$$

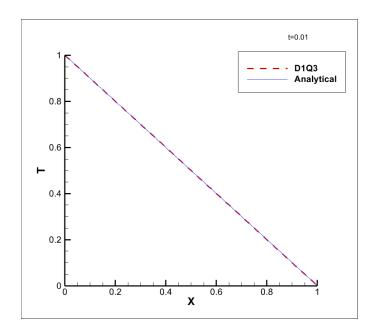


Рис. 6: Сравнение численного решения с аналитическим для задачи (4.1) в момент времени t=0.01

Погрешность вычислений				
Количество узлов решет-	L2 норма	Порядок сходимости		
КИ				
101	0.0000000000	-		
201	0.0000000000	-		
401	0.0000000000	-		
801	0.0000000000	-		
1601	0.0000000000	-		

Таблица 4: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.1) со схемой D1Q3

Данный эксперимент показывает, что для класса статичных задач LBM показывает точное решение без какой-либо погрешности. Причем данный результат не зависит от выбора рассматриваемой схемы (D1Q2 или D1Q3).

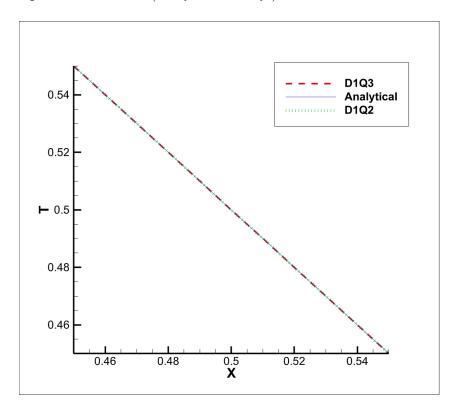


Рис. 7: Сравнение численного решения, полученного с помощью схем D1Q2 и D1Q3, с аналитическим для задачи (4.1)

4.2 Задача об остывании стержня

Рассмотрим одномерную начально-краевую задачу (3). Коэффициент α примем равным 2, на обеих границах стержня длины π температура поддерживается равная 0, в начальный момент времени температуру в стержне описывает функция $\phi(x) = sin(x)$.

$$\begin{split} \frac{\partial u}{\partial t} &= 4 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, x \in [0, \pi] \\ u(x, 0) &= \sin(x) \\ u(0, t) &= u(\pi, t) = 0 \end{split}$$

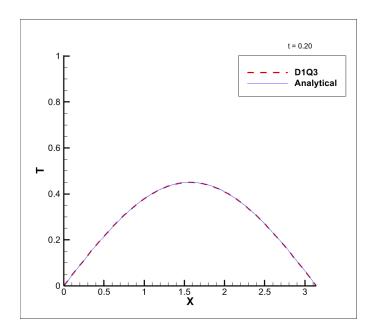


Рис. 8: Сравнение численного решения с аналитическим для задачи (4.2) в момент времени $t{=}0.2$

Погрешность вычислений				
Количество ячеек решет-	L2 норма	Порядок сходимости		
КИ				
100	0.0002432056	2.00		
200	0.0000607925	2.00		
400	0.0000151970	2.00		
800	0.0000037984	2.00		
1600	0.0000009488	2.00		

Таблица 5: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.2) со схемой D1Q3

4.3 Задача об остывании стержня с источником тепла

Рассмотрим случай неоднородного уравнения теплопроводности (33). Коэффициент α примем равным 2, на обеих границах стержня длины π температура поддерживается равная 0, в начальный момент времени температуру в стержне описывает функция $\phi(x) = \sin(x)$, функция источников тепла $q(x,t) = 3\sin(x)e^{-t}$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - 4 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 3sin(x)e^{-t}, x \in [0, \pi]$$
$$u(x, 0) = sin(x)$$
$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0$$

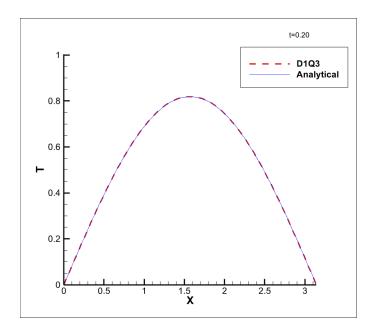


Рис. 9: Сравнение численного решения с аналитическим для задачи (4.3) в момент времени t=0.2

Погрешность вычислений				
Количество ячеек решет-	L2 норма	Порядок сходимости		
КИ				
100	0.0002557992	2.00		
200	0.0000639490	2.00		
400	0.0000159863	2.00		
800	0.0000039955	2.00		
1600	0.0000009978	2.00		

Таблица 6: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.3) со схемой D1Q3

4.4 Задача об остывании несимметрично нагретого стержня

Рассмотрим случай неоднородного уравнения теплопроводности (33). Коэффициент α примем равным 1, на обеих границах стержня длины 1 температура поддерживается равная 0, в начальный момент времени температуру в стержне описывает функция $\phi(x) = x(1-x)\cosh(x)$, функция источников тепла $q(x,t) = 2e^{-t}(\cosh(x)(x^2-x+1) - \sinh(x)(1-2x))$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 2e^{-t}(\cosh(x)(x^2 - x + 1) - \sinh(x)(1 - 2x)), x \in [0, 1]$$

$$u(x, 0) = x(1 - x)\cosh(x)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0$$

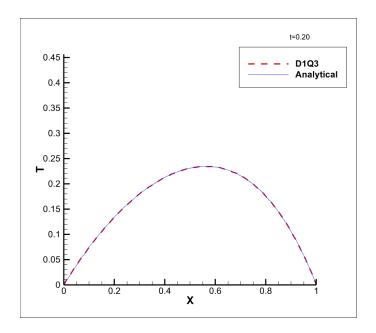


Рис. 10: Сравнение численного решения с аналитическим для задачи (4.4) в момент времени t=0.2

Погрешность вычислений				
Количество ячеек решет-	L2 норма	Порядок сходимости		
КИ				
100	0.0000244608	1.98		
200	0.0000061589	1.99		
400	0.0000015452	2.00		
800	0.0000003870	2.00		
1600	0.0000000968	2.00		

Таблица 7: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.4) со схемой D1Q3

4.5 Задача о пластине, нагретой с распределением Гаусса

Рассмотрим двумерную начально-краевую задачу (6). Коэффициент α примем равным 1, в начальный момент времени температуру в стержне описывает функция $\phi(x,y)=e^{-(\frac{(x-0.5)^2+(y-0.5)^2}{2*\sigma_0^2})}$, где σ_0^2 отвечает за толщину распределения Гаусса.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, x \in [0, 1], y \in [0, 1]$$
$$u(x, y, 0) = e^{-(\frac{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2}{2 * \sigma_0^2})}$$

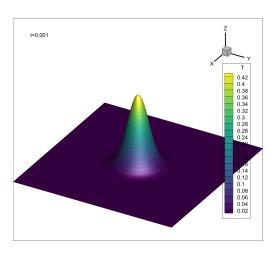


Рис. 11: Численное решение D2Q9 задачи (4.5) в момент времени t=0.001

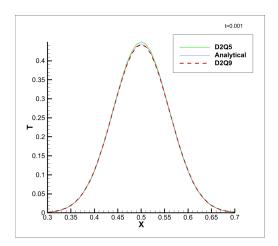


Рис. 13: Сравнение численного (D2Q5, D2Q9) и аналитического решения по сечению Y для задачи (4.5)

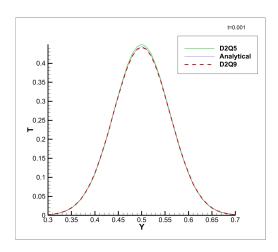


Рис. 12: Сравнение численного (D2Q5, D2Q9) и аналитического решения по сечению X для задачи (4.5)

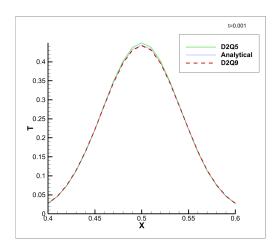


Рис. 14: Сравнение численного (D2Q5, D2Q9) и аналитического решения по диагональному сечению для задачи (4.5)

Погрешность вычислений				
Количество узлов ре-	Количество узлов ре-	L2 норма	Порядок сходи-	
шетки по х	шетки по у		мости	
100	100	0.0003640780	1.97	
200	200	0.0000914896	1.99	
400	400	0.0000229023	2.00	

Таблица 8: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.5) со схемой D2Q5

Погрешность вычислений				
Количество узлов ре-	Количество узлов ре-	L2 норма	Порядок сходи-	
шетки по х	шетки по у		мости	
100	100	0.0001156639	2.04	
200	200	0.0000287398	2.01	
400	400	0.0000071741	2.00	

Таблица 9: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.5) со схемой D2Q9

Можно заметить, что для задачи (4.5) схема D2Q9 показала более точные результаты относительно схемы D2Q5. Причем видно, что на диагональном сечении D2Q5 показывает себя хуже, чем на сечении по X или Y.

4.6 Задача об остывании пластины с источником тепла

Рассмотрим случай неоднородного уравнения теплопроводности (34). Коэффициент α примем равным 1, на границах пластины размера π на π температура поддерживается равной 0, в начальный момент времени температуру в стержне описывает функция $\phi(x,y)=\sin(x)\sin(y)$, источники тепла описывает функция $q(x,y,t)=\sin(x)\sin(y)e^{-t}$

$$\begin{split} &\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \sin(x)\sin(y)e^{-t}, x \in [0,\pi], y \in [0,\pi] \\ &u(x,y,0) = \sin(x)\sin(y) \\ &u(0,y,t) = u(\pi,y,t) = u(x,0,t) = u(x,\pi,t) = 0 \end{split}$$

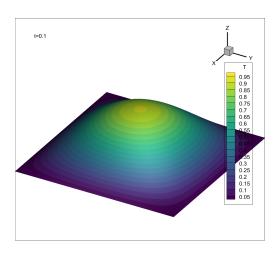


Рис. 15: Численное решение D2Q9 задачи (4.6) в момент времени $t{=}0.1$

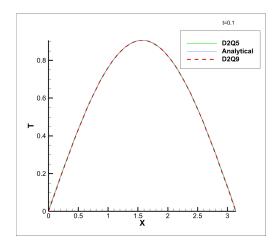


Рис. 17: Сравнение численного (D2Q5, D2Q9) и аналитического решения по сечению Y для задачи (4.6)

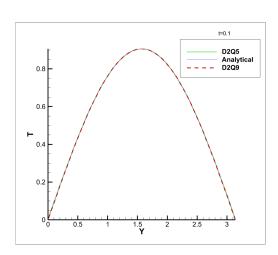


Рис. 16: Сравнение численного (D2Q5, D2Q9) и аналитического решения по сечению X для задачи (4.6)

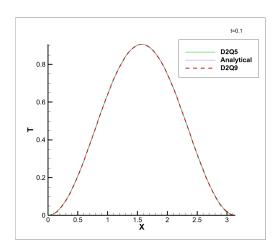


Рис. 18: Сравнение численного (D2Q5, D2Q9) и аналитического решения по диагональному сечению для задачи (4.6)

Погрешность вычислений				
Количество узлов ре-	Количество узлов ре-	L2 норма	Порядок сходи-	
шетки по х	шетки по у		мости	
100	100	0.0018557307	1.97	
200	200	0,0004662639	1.99	
400	400	0,0001165713	2.00	

Таблица 10: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.6) со схемой D2Q5

Погрешность вычислений				
Количество узлов ре-	Количество узлов ре-	L2 норма	Порядок сходи-	
шетки по х	шетки по у		мости	
100	100	0.0005648835	2.00	
200	200	0.0001411882	2.00	
400	400	0.0000352982	2.00	

Таблица 11: Ошибки по L2-норме и порядки точности для задачи (4.6) со схемой D2Q9

Аналогично с примером (4.5) для задачи (4.6) схема D2Q5 также показала более плохие результаты, чем D2Q9. Разница становится еще более заметной на диагональном сечении. Это связано с тем, что в D2Q5 не учитываются направления функций распределения в диагональные узлы.

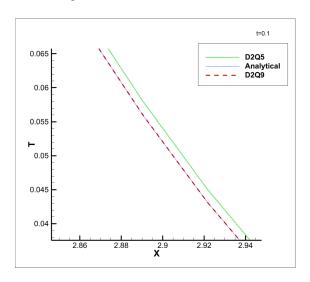


Рис. 19: Сравнение D2Q5 и D2Q9 на диагональном сечении

Однако эта разница компенсируется более высокой скоростью расчетов. Таким образом для достижения наибольшей точности рекомендуется использовать схемы с большим количеством направлений распределения частиц. Однако для ускорения расчетов, особенно с малым шагом по времени Δt , можно прибегнуть к применению меньших схем без сильной потери точности вычислений.

5 Заключение

В рамках данной работы было исследовано применение метода Lattice Boltzmann для решения уравнений параболического типа, с фокусом на уравнении теплопроводности в одномерном и двумерном случае. Также были проведены численные эксперименты на задачах с различными начальными и граничными условиями, а результаты, полученные с помощью LBM, были сопоставлены с результатами, полученными аналитически.

В результате исследования были получены следующие выводы:

- Благодаря простой физической интерпретации и легкой адаптации к различным граничным условиям, LBM представляет собой мощный инструмент для численного моделирования уравнений параболического типа.
- Результаты численных экспериментов показали хорошую согласованность с результатами, полученными аналитически. Экспериментально был показан 2 порядок сходимости метода, что подтверждает его надежность и высокую точность при решении систем дифференциальных уравнений.
- Преимущества метода Lattice Boltzmann включают его параллельную и масштабируемую природу, что позволяет использовать вычислительные ресурсы эффективно.

В рамках дальнейшей работы планируется разработка новых методов интегрирования решеточного уравнения Больцмана по времени, численные эксперименты с ними и сравнение с классическим методом Lattice Boltzmann.

Список литературы

- [1] Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики: Учебное пособие 6-е издание // Издательство МГУ 1999.
- [2] Тихонов Н.А., Токмачев М.Г. Основы математического моделирования: Учебное пособие. // Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова - 2012.
- [3] Андреев В.Б. Лекции по методу конечных элементов: Учебное пособие, Издание второе, исправленное и дополненное // Факультет ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова 2010.
- [4] Смирнов Е.М., Зайцев Д.К. Метод конечных объемов // Научно технические ведомости СПбГПУ 2004.
- [5] Kruger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Magnus Viggen E. The Lattice Boltzmann Method Principles and Practice // Springer International Publishing - 2017.
- [6] Nagar P., Song F., Zhu L., Lin L. LBM-IB: A Parallel Library to Solve 3D Fluid-Structure Interaction Problems on Manycore Systems // Department of Computer Science Indiana University-Purdue University, Indianapolis, Indiana, USA - 2015.
- [7] Lehmann M. High Performance Free Surface LBM on GPUs // M.Sc. Physics 2019.
- [8] Guangwu Y., Lattice Boltzmann equation for waves. // J Comput Phys;161:61–9 2000.
- [9] Wolf-Gladrow D. Lattice Boltzmann equation for diffusion. // J Stat Phys;79:1023–32. -
- [10] Mohamad A., Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes // Springer-Verlag London Limited - 2011.
- [11] Cercignani C. The Boltzmann Equation and Its Applications // New York: Springer -1988.
- [12] Bhatnagar P., Gross E., Krook M. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. // Physical Review. 94 (3) - 1954.
- [13] Wang L., Guo Z., Zheng C. Multi-relaxation-time lattice Boltzmann model for axisymmetric flows. // Computers and Fluids 39(9):1542-1548 2010.
- [14] Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные Методы 8-е издание //БИНОМ. Лаборатория знаний 2015.

- [15] Chapman S., Cowling T. The Mathematical Theory of Non-uniform Gases, 2nd edn. // Cambridge University Press 1952.
- [16] Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем // Главная редакция физикоматематической литературы изд-ва «Наука» 1971.