



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 99 за 2021 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Г.С. Чащин

Метод решёточных
уравнений Больцмана:
моделирование
изотермических
низкоскоростных течений

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Чащин Г.С. Метод решёточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 99. 31 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-99>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-99>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

Г.С. Чащин

**Метод решёточных уравнений
Больцмана: моделирование
изотермических низкоскоростных
течений**

Москва — 2021

Чащин Г.С.

Метод решёточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений

В данной работе метод решёточных уравнений Больцмана был описан как один из современных методов вычислительной механики сплошной среды. Статья содержит основные теоремы, которые доказывают вычислительный алгоритм, различные типы граничных условий и нарушение галилеевой инвариантности. Кроме того, публикация содержит некоторое теоретическое сопровождение в части физической кинетической теории, полиномов Эрмита и численного интегрирования. Здесь нет никаких новых научных достижений, но приведено объяснение базовой теории решёточных уравнений Больцмана.

Ключевые слова: вычислительная механика сплошной среды, метод решёточных уравнений Больцмана, второй порядок аппроксимации, криволинейная граница, регуляризация Деллара

Georgy Sergeevich Chashchin

Lattice Boltzmann Method: simulation of isothermal low-speed flows

In this work, lattice Boltzmann method on standard lattices was described as one of the modern methods of computation fluid dynamics. The article has main theorems, which prove computational algorithm, different type's boundary conditions and defect in Galilean invariance. Moreover, the paper has some theoretical background about physical kinetic theory, Hermite polynomials and numeric integration. Here has not any new scientist discoveries, but has explanation of basic lattice Boltzmann theory.

Key words: computation fluid dynamics, second-order accuracy, curved boundary, Dellar's regularization

Оглавление

Введение	3
Используемые обозначения.....	4
Некоторые сведения из кинетической теории.....	5
Многомерные полиномы Эрмита	7
Введение.....	7
Определение и основные свойства	7
Дискретизация уравнения БГК	12
Безразмерный вид.....	12
Дискретизация равновесного распределения	13
Решёточное уравнение Больцмана	17
Метод трапеций	17
Метод характеристик	18
Переход к гидродинамике	20
КГД в решёточных переменных	20
КГД в физических переменных.....	24
Граничные условия	25
Модель «прямоугольной ломаной»	25
Модель «гладкой ломаной».....	27
Регуляризация	30
Частичная регуляризация	30
Полная регуляризация.....	31
Список литературы.....	39

Введение

С 90-х годов XX века начал набирать популярность и новый метод вычислительной гидродинамики, названный методом решёточных уравнений Больцмана.

Основу метода составляет решение методом расщепления уравнения Бхатнагара-Гросса-Крука, в котором предварительно совершён переход от континуального пространства молекулярных скоростей к дискретному, состоящему из небольшого числа скоростей. Это породило несколько важных особенностей схемы. Во-первых, для учёта столкновений получается конечно-разностная схема с шаблоном из двух, а не трёх узлов. Во-вторых, процедура разлёта частиц свелась к присвоению значений функции распределения на

новом временном слое значений со старого слоя, взятых с соседних узлов. В-третьих, алгоритм решения уравнения легко распараллеливается. Кроме того, граничные условия в кинетической теории определяются интегралом от выражения, зависящим от функции распределения, по подпространству молекулярных скоростей, чего самого по себе бывает недостаточно, и для постановки граничных условий требуется добавление модели взаимодействия газа со стенкой. Для решёточных уравнений Больцмана определение граничных условий сводится к вычислению функции распределения молекул, вылетающих от стенки, из несложных алгебраических выражений. Однако имеется и существенный недостаток – граничные условия реализуются с ошибкой, зависящей от шага по времени.

Используемые обозначения

ρ – плотность среды

u – скорость течения

T – температура

E – внутренняя энергия

R – универсальная газовая постоянная

f – функция распределения

f^{eq} – равновесная функция распределения

Ω – ядро столкновений

τ – время релаксации

t – время

x – точка геометрического пространства

ξ – скорость частицы сплошной среды

d – размерность геометрического пространства

\bar{a} – вектор a

a_α – тензор a (для обозначения тензоров других рангов также используются греческие буквы)

q_α – тепловой поток

$\bar{a}\bar{b}$ – скалярное произведение векторов a и b

$a_\alpha b_\alpha$ – свёртка тензоров a и b (для любых тензоров используется соглашение Эйнштейна, когда парой одинаковых индексов обозначается суммирование)

$\frac{\partial}{\partial t}$ – производная по времени

$\frac{\partial}{\partial \bar{x}}$ – градиент как вектор

$\frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ – градиент как тензор

$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{\xi} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} = \frac{\partial}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ – производная вдоль траектории частицы

$\int A d^d \bar{\xi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} A d\xi_1 \dots d\xi_d$ – интеграл от функции A по скоростям частиц среды

$M_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}$ – момент от n -го порядка от функции распределения

$\sigma_{\alpha\beta}$ – тензор напряжений

$H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x})$ – полином Эрмита n -го порядка

Δh – шаг сетки

Δt – шаг по времени

c_s – скорость звука

γ – адиабатическая постоянная

Некоторые сведения из кинетической теории

В кинетической теории состояние сплошной среды описывается уравнением Больцмана, которое является настолько сложным, что часто для этой цели используется приближённые модельные уравнения. Одним из них является уравнение Бхатнагара-Гросса-Крука (БГК):

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\xi} \frac{\partial f}{\partial \bar{x}} = \Omega(f) = \frac{f^{eq} - f}{\tau}, \quad \partial_{\partial t} f = f(t, \bar{x}, \bar{\xi}), \quad (1)$$

$$f^{eq} = f^{eq}(t, \bar{x}, \bar{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} e^{-\frac{(\bar{\xi} - \bar{u})^2}{2RT}}. \quad (2)$$

Стоит упомянуть интересное свойство распределения Максвелла – свойство сепарабельности: $f^{eq}(\bar{\xi} - \bar{u}) = f_1^{eq}(\xi_1 - u_1) \dots f_d^{eq}(\xi_d - u_d)$,

причём под индексом 1 следует понимать одномерное распределение Максвелла.

Важное место в кинетической теории занимают выражения, называемые моментами:

$$M_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} = \int f \xi_{\alpha_1} \dots \xi_{\alpha_n} d^d \bar{\xi}. \quad (3)$$

Причём основную роль играют первые несколько моментов:

$$\begin{aligned} M^{(0)} &= \int f d^d \bar{\xi} = \rho; \\ M_{\alpha}^{(1)} &= \int \xi_{\alpha} f d^d \bar{\xi} = \rho u_{\alpha}; \\ M_{\alpha\beta}^{(2)} &= \int \xi_{\alpha} \xi_{\beta} f d^d \bar{\xi} = \rho u_{\alpha} u_{\beta} - \sigma_{\alpha\beta}; \\ M_{\alpha\beta\beta}^{(3)} &= \int \xi_{\alpha} \xi_{\beta} \xi_{\beta} f d^d \bar{\xi} = \rho |\bar{u}|^2 u_{\alpha} + \frac{d}{2} \rho RT + 2\sigma_{\alpha\beta} u_{\beta} + q_{\alpha}. \end{aligned} \quad (4)$$

Функции $1, \xi_{\alpha}, \frac{\xi^2}{2}$ называются сумматорными инвариантами. Они связаны с ядром столкновений:

$$\int \Omega d^2 \xi = 0, \int \Omega \xi_{\alpha} d^2 \xi = 0, \int \Omega \frac{\xi^2}{2} d^2 \xi = 0. \quad (5)$$

Это показывает свойство квазизамкнутости (в квазизамкнутой системе масса, импульс и энергия сохраняются). Также после интегрирования произведения уравнения БГК и сумматорных инвариантов по скоростям частиц получаются уравнения динамики сплошной среды. Они приведены ниже в моментном виде и гидродинамических обозначениях.

$$\begin{aligned} \frac{\partial M^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial M_{\gamma}^{(1)}}{\partial x_{\gamma}} &= 0 \text{ или } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_{\gamma})}{\partial x_{\gamma}} = 0; \\ \frac{\partial M_{\alpha}^{(1)}}{\partial t} + \frac{\partial M_{\alpha\gamma}^{(2)}}{\partial x_{\gamma}} &= 0 \text{ или } \rho \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial t} + \rho u_{\beta} \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\gamma}}{\partial x_{\gamma}}; \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial M_{\alpha\alpha\gamma}^{(3)}}{\partial x_{\gamma}} &= 0 \text{ или } \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E u_{\beta})}{\partial x_{\beta}} = \frac{\partial (u_{\alpha} \sigma_{\alpha\beta})}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial q_{\beta}}{\partial x_{\beta}}; \\ E &= \frac{d}{2} RT. \end{aligned} \quad (6)$$

В дальнейшем будем работать только с первыми двумя уравнениями из (6). Первое – уравнение неразрывности. Второе будет либо уравнением Эйлера, либо Навье-Стокса, но когда станет ясен вид тензора напряжений.

Рассмотрим уравнение БГК в безразмерном виде: $\frac{df'}{dt'} = \frac{f'^{eq} - f'}{Kn}$, здесь Kn – число Кнудсена, характеризующее разреженность среды. Для сплошной среды оно много меньше единицы. Тогда для функции распределения можно выписать разложение Чепмена-Энскога: $f' = f'^{eq} - Kn \frac{df'^{eq}}{dt'} + Kn^2 \frac{d^2 f'^{eq}}{dt'^2} - \dots$. Если в этом разложении ограничиться первым слагаемым, то второе уравнение из (6) будет уравнением Эйлера, если первыми двумя, то Навье – Стокса.

Многомерные полиномы Эрмита

Введение

Из курса функционального анализа хорошо известны полиномы Эрмита как функции одной переменной, которые ортогональны с весом $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$, связаны друг с другом рекуррентным соотношением и производная от которых выражается через полиномы Эрмита более низкого порядка, а функции Эрмита образуют базис в пространстве функций, интегрируемых с весом $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$. Менее известно преобразование Гаусса, которое, применённое к полиномам Эрмита, также даёт полиномы Эрмита. В данном разделе дано обобщение этих математических конструкций на пространства большей размерности. Здесь эти формулы не приводятся, так как в дальнейшем все выражения проверяются для случая $d = 1$.

Также заметим, что общей стройной теории ортогональных многочленов многомерных пространств не существует, и не для всех одномерных многочленов есть многомерные аналоги. Однако в данной работе такие вопросы не рассматриваются, кроме того для упрощения понимания многомерных полиномов Эрмита они рассматриваются только в декартовой системе координат, чтобы не поднимать вопросы, связанные с линейной алгеброй и дифференциальной геометрией.

В заключение вводной части напомним несколько сведений из анализа:

$$\frac{\partial x_\alpha}{\partial x_\beta} = \delta_{\alpha\beta} \text{ и } \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = 2x_\alpha f', \text{ где } f = f(|\vec{x}|) \text{ и } f' = \frac{df}{d|\vec{x}|}.$$

Определение и основные свойства

Рассмотрим пространство интегрируемых с квадратом функций с весом

$\omega(\bar{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\frac{|\bar{x}|^2}{2}}$. Оно является Эвклидовым со скалярным произведением $(f, g) = \int f(\bar{x})g(\bar{x})\omega(\bar{x})d^d\bar{x}$.

Определим многомерные полиномы Эрмита (МПЭ) через **формулу Родрига**:

$$H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) = \frac{(-1)^n}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega. \quad (7)$$

Данное определение корректно, так как для каждого фиксированного набора α получаем: $H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) = \prod_{i=1}^d \frac{(-1)^{n_i}}{e^{-\frac{x_i^2}{2}}} \frac{\partial^{n_i}}{\partial x_i^{n_i}} \left(e^{-\frac{x_i^2}{2}} \right) = \prod_{i=1}^d H^{n_i}(x_i)$, то есть МПЭ является произведением полиномов Эрмита от каждой координаты, заданных по формуле Родрига (по теореме Трикоми задание формулы Родрига для ортогонального полинома достаточно для его определения).

МПЭ являются **симметричными тензорами** для любой пары индексов, как следствие, возможности изменения порядка дифференцирования для бесконечно дифференцируемой функции. К тому выполняется свойство **чётности**:

$$H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(-\bar{x}) = (-1)^n H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}). \quad (8)$$

МПЭ являются **ортогональными**:

$$\left(H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}, H_{\beta_1 \dots \beta_m}^{(m)} \right) = \int H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) H_{\beta_1 \dots \beta_m}^{(m)}(\bar{x}) \omega(\bar{x}) d^d \bar{x} = n! \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}. \quad (9)$$

В (9) под вторым символом Кронекера следует понимать 1, если существует такая перестановка индексов из β , что $\alpha_1 = \beta_1, \dots, \alpha_n = \beta_n$, и 0 в остальных случаях. Данное свойство следует из ортогональности одномерных полиномов Эрмита.

По правилам дифференцирования упростим (n+1)-й МПЭ:

$$\begin{aligned}
H_{\alpha_1 \dots \alpha_n \alpha_{n+1}}^{(n+1)}(\bar{x}) &= \frac{(-1)^{n+1}}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_{n+1}}} \omega \\
&= \frac{(-1)^{n+1}}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} (-x_{\alpha_{n+1}} \omega) \\
&= \frac{(-1)^{n+1}}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_{n-1}}} \left(-\delta_{\alpha_{n+1} \alpha_n} \omega - x_{\alpha_{n+1}} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega \right) \\
&= \dots \\
&= - \sum_{k=1}^n \delta_{\alpha_{n+1} \alpha_k} \frac{(-1)^{n-1}}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_{k'} \neq k}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega \\
&\quad + \frac{(-1)^n}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega \\
&= - \sum_{k=1}^n \delta_{\alpha_{n+1} \alpha_k} H_{\alpha_1 \dots \alpha_{k'} \neq k \dots \alpha_n}^{(n-1)}(\bar{x}) + x_{\alpha_{n+1}} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}).
\end{aligned}$$

То есть получаем **рекуррентное соотношение**:

$$H_{\alpha_1 \dots \alpha_n \alpha_{n+1}}^{(n+1)}(\bar{x}) - x_{\alpha_{n+1}} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) + \sum_{k=1}^n \delta_{\alpha_{n+1} \alpha_k} H_{\alpha_1 \dots \alpha_{k'} \neq k \dots \alpha_n}^{(n-1)}(\bar{x}) = 0. \quad (10)$$

По правилам дифференцирования упростим градиент МПЭ:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) &= \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\frac{(-1)^n}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega \right) \\
&= x_\beta \frac{(-1)^n}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega + \frac{(-1)^n}{\omega} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega \\
&= x_\beta H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) - H_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{(n+1)}(\bar{x}).
\end{aligned}$$

Используя рекуррентное соотношение, получаем **правило дифференцирования**:

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) = \sum_{k=1}^n \delta_{\beta \alpha_k} H_{\alpha_1 \dots \alpha_{k'} \neq k \dots \alpha_n}^{(n-1)}(\bar{x}). \quad (11)$$

По свойствам (10) и (11) можно преобразовать лапласиан МПЭ:

$$\begin{aligned}
\Delta H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) &= \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) \\
&= \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\sum_{k=1}^n \delta_{\beta \alpha_k} H_{\alpha_1 \dots \alpha_{k'} \neq k \dots \alpha_n}^{(n-1)}(\bar{x}) \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(x_\beta H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) - H_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{(n+1)}(\bar{x}) \right) \\
&= dH_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) + x_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) - \frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{(n+1)}(\bar{x}) \\
&= dH_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) + x_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) \\
&\quad - \sum_{k=1}^n \delta_{\beta \alpha_k} H_{\alpha_1 \dots \alpha_{k'} \neq k \dots \alpha_n \beta}^{(n)}(\bar{x}) - \delta_{\beta \beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) \\
&= dH_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) + x_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) - dH_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) \\
&\quad - \sum_{k=1}^n H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) = x_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) - nH_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}).
\end{aligned}$$

Таким образом, любой МПЭ является решением **дифференциального уравнения**:

$$\Delta u - x_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} u + nu = 0. \quad (12)$$

Для полиномов Эрмита производящей функцией является $e^{xz - \frac{z^2}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H^{(n)}(x) z^n$, используя это, разложим в ряд Маклорена функцию:

$$\begin{aligned}
e^{x_\beta z_\beta - \frac{|z|^2}{2}} &= \prod_{i=1}^d e^{x_i z_i - \frac{|z_i|^2}{2}} = \prod_{i=1}^d \sum_{n_i=0}^{\infty} \frac{1}{n_i!} H^{(n_i)}(x_i) z_i^{n_i} \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{n_1} \dots \sum_{n_{d-1}=0}^{n_{d-2}} \prod_{i=1}^d \frac{1}{n_i!} H^{(n_i)}(x_i) z_i^{n_i} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) z_{\alpha_1} \dots z_{\alpha_n}.
\end{aligned}$$

Преобразование произведения рядов допустимо, так как каждый ряд сходится равномерно на всей числовой оси, и осуществлено так, чтобы общим членом ряда был полином n_1 -ой степени от z . Полученный общий член является свёрткой по всем индексам от МПЭ и многочлена z . Произведение факториалов уходит в один факториал, так как в свёртке стоят всевозможные парные перестановки индексов. В итоге приходим к **производящей функции МПЭ**:

$$e^{x\beta z\beta - \frac{|z|^2}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) z_{\alpha_1} \dots z_{\alpha_n}. \quad (13)$$

Многомерное преобразование Вейерштрасса-Гаусса определяется как:

$$G_{\bar{x}}^u[F(\bar{y})] = \frac{1}{(2\pi u)^{d/2}} \int F(\bar{y}) e^{-\frac{(\bar{y}-\bar{x})^2}{2u}} d^d \bar{y}. \quad (14)$$

Заметим, что:

$$\begin{aligned} G_{\bar{x}}^u [H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{y})] &= \frac{1}{(2\pi u)^{d/2}} \int H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{y}) e^{-\frac{(\bar{y}-\bar{x})^2}{2u}} d^d \bar{y} \\ &= \frac{1}{(2\pi u)^{d/2}} \int \prod_{i=1}^d H^{(n_i)}(y_i) \prod_{i=1}^d e^{-\frac{(y_i-x_i)^2}{2u}} d^d \bar{y} \\ &= \prod_{i=1}^d \frac{1}{\sqrt{2\pi u}} \int H^{(n_i)}(y_i) e^{-\frac{(y_i-x_i)^2}{2u}} dy_i \\ &= \prod_{i=1}^d G_{x_i}^u [H^{(n_i)}(y_i)] \\ &= \prod_{i=1}^d (\sqrt{1-u})^{n_i} H^{(n_i)}\left(\frac{x_i}{\sqrt{1-u}}\right) \\ &= (\sqrt{1-u})^n H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}\left(\frac{\bar{x}}{\sqrt{1-u}}\right). \end{aligned}$$

Также справедлив предельный случай:

$$G_{\bar{x}}^1 [H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{y})] = \prod_{i=1}^d G_{x_i}^1 [H^{(n_i)}(y_i)] = \prod_{i=1}^d x_i^{n_i} = x_{\alpha_1} \dots x_{\alpha_n}.$$

То есть справедливы свойства:

$$\begin{aligned} G_{\bar{x}}^u [H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{y})] &= (\sqrt{1-u})^n H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}\left(\frac{\bar{x}}{\sqrt{1-u}}\right) \text{ и } G_{\bar{x}}^1 [H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{y})] \\ &= x_{\alpha_1} \dots x_{\alpha_n}. \end{aligned} \quad (15)$$

Из свойств МПЭ следует, что любая функция $f(\bar{x})$, интегрируемая с квадратом с весом $\omega(\bar{x})$, может быть представлена рядом МПЭ:

$$\begin{aligned} f(\bar{x}) &= \omega(\bar{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}), \text{ где } a_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} \\ &= \int f(\bar{x}) H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x}) d^d \bar{x} \quad (16) \end{aligned}$$

В заключение описания МПЭ приводится вид первых шести полиномов:

Явный вид многомерных полиномов Эрмита

n	$H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{x})$
0	1
1	x_α
2	$x_\alpha x_\beta - \delta_{\alpha\beta}$
3	$x_\alpha x_\beta x_\gamma - (\delta_{\alpha\beta} x_\gamma + \delta_{\beta\gamma} x_\alpha + \delta_{\alpha\gamma} x_\beta)$
4	$x_\alpha x_\beta x_\gamma x_\delta - (\delta_{\alpha\beta} x_\gamma x_\delta + \delta_{\beta\gamma} x_\alpha x_\delta + \delta_{\alpha\gamma} x_\beta x_\delta + \delta_{\alpha\delta} x_\gamma x_\beta + \delta_{\delta\beta} x_\gamma x_\alpha + \delta_{\delta\gamma} x_\alpha x_\beta) + (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\delta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\delta\beta} + \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\delta})$
5	$x_\alpha x_\beta x_\gamma x_\delta x_\varepsilon - (\delta_{\alpha\beta} x_\gamma x_\delta x_\varepsilon + \delta_{\beta\gamma} x_\alpha x_\delta x_\varepsilon + \delta_{\alpha\gamma} x_\beta x_\delta x_\varepsilon + \delta_{\alpha\delta} x_\gamma x_\beta x_\varepsilon + \delta_{\delta\beta} x_\gamma x_\alpha x_\varepsilon + \delta_{\delta\gamma} x_\alpha x_\beta x_\varepsilon + \delta_{\alpha\varepsilon} x_\gamma x_\delta x_\beta + \delta_{\beta\varepsilon} x_\gamma x_\delta x_\alpha + \delta_{\gamma\varepsilon} x_\alpha x_\delta x_\beta + \delta_{\delta\varepsilon} x_\gamma x_\alpha x_\beta) + (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\delta\gamma} x_\varepsilon + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\delta\beta} x_\varepsilon + \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\delta} x_\varepsilon + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\varepsilon\gamma} x_\delta + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\varepsilon\beta} x_\delta + \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\varepsilon} x_\delta + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\delta\varepsilon} x_\gamma + \delta_{\alpha\varepsilon} \delta_{\delta\beta} x_\gamma + \delta_{\beta\varepsilon} \delta_{\alpha\delta} x_\gamma + \delta_{\alpha\varepsilon} \delta_{\delta\gamma} x_\beta + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\delta\varepsilon} x_\beta + \delta_{\varepsilon\gamma} \delta_{\alpha\delta} x_\beta + \delta_{\varepsilon\beta} \delta_{\delta\gamma} x_\alpha + \delta_{\varepsilon\gamma} \delta_{\delta\beta} x_\alpha + \delta_{\beta\gamma} \delta_{\varepsilon\delta} x_\alpha)$

Дискретизация уравнения БГК

Безразмерный вид

Пусть даны характерный масштаб длины l_0 , скорости v_0 и плотности ρ_0 , характерный масштаб времени тогда будет $t_0 = \frac{l_0}{v_0}$. Тогда можно ввести безразмерные операторы дифференцирования:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = t_0 \frac{\partial}{\partial t}, \quad \frac{\partial}{\partial x_\alpha^*} = l_0 \frac{\partial}{\partial x_\alpha}, \quad \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha^*} = v_0 \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha}. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (1), получим безразмерный вид уравнения БГК:

$$\frac{df^*}{dt^*} = \frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \bar{\xi}^* \frac{\partial f^*}{\partial x^*} = \Omega^*(f^*) = \frac{f^{eq*} - f^*}{\tau^*}. \quad (18)$$

Безразмерные параметры в уравнении (18):

$$\tau^* = \frac{\tau}{t_0}, \quad f^* = f \frac{v_0^d}{\rho_0}, \quad \Omega^* = \Omega \frac{l_0 v_0^2}{\rho_0}. \quad (19)$$

Безразмерная равновесная функция будет после преобразования (2):

$$f^{eq*} = \frac{\rho^*}{(2\pi T^*)^{d/2}} e^{-\frac{(\bar{u}^* - \bar{\xi}^*)^2}{2T^*}}. \quad (20)$$

Безразмерные параметры имеют следующий вид:

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \bar{u}^* = \frac{\bar{u}}{v_0}, \quad \bar{\xi}^* = \frac{\bar{\xi}}{v_0}, \quad T^* = \frac{RT}{v_0^2} = \frac{c_s^2}{\gamma v_0^2}. \quad (21)$$

В классическом решёточном Больцмане за масштабы длины и времени принимаются пространственный и временной шаги сетки, ($l_0 = \Delta x$ и $t_0 = \Delta t$). Тогда масштаб скорости $v_0 = \frac{\Delta x}{\Delta t}$. В изотермических течениях ставится $T^* = 1$. Также шаг по времени должен быть выбран так, чтобы при переходе на новый временной слой решёточная «частица» попадала в соседний узел сетки, поэтому $\Delta t = \frac{\sqrt{\gamma}\Delta x}{\sqrt{3}c_s}$ (появление множителя $\sqrt{3}$ будет пояснено далее).

В дальнейшем речь будет идти только о безразмерных переменных, поэтому индекс «звезда» не используется для удобства записи.

Дискретизация равновесного распределения

Задача дискретизации равновесного распределения – заменить для вычисления моментов (3) от распределения Максвелла из (2) на суммирование небольшого и конечного числа чего-то более простого. Общая теория по реализации такой идеи для различного типа функций указана в работе [5], здесь же будут приведены без доказательств некоторые результаты данной монографии.

Разложим равновесное распределение по молекулярным скоростям в ряд по МПЭ. Согласно (16) коэффициенты разложения будут:

$$\begin{aligned} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} &= \int f^{eq} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{\xi}) d^d \bar{\xi} \\ &= \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} \int H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{\xi}) e^{-\frac{(\bar{\xi} - \bar{u})^2}{2T}} d^d \bar{\xi} \\ &= \rho G_{\bar{u}}^T \left[H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{\xi}) \right] = \rho (\sqrt{1-T})^n H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} \left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} &= \rho u_{\alpha_1} \dots u_{\alpha_n}; \\ f^{eq} &= \rho \omega(\bar{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} (\sqrt{1-T})^n H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} \left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}} \right) H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{\xi}) \\ &= \rho \omega(\bar{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} u_{\alpha_1} \dots u_{\alpha_n} H_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}(\bar{\xi}). \end{aligned} \quad (23)$$

В формуле (23) ограничимся только несколькими первыми слагаемыми, используя явный вид МПЭ:

$$\begin{aligned}
f^{eq} = \rho\omega(\bar{\xi}) & \left[1 + (u_\alpha \xi_\alpha) + \frac{1}{2}((u_\alpha \xi_\alpha)^2 - (u_\alpha u_\alpha)) \right. \\
& + \frac{1}{6}((u_\alpha \xi_\alpha)^3 - 3(u_\alpha \xi_\alpha)(u_\alpha u_\alpha)) + \frac{1}{24}((u_\alpha \xi_\alpha)^4 \\
& - 6(u_\alpha \xi_\alpha)^2(u_\alpha u_\alpha) + 3(u_\alpha u_\alpha)^2) + \frac{1}{120}((u_\alpha \xi_\alpha)^5 \\
& \left. - 10(u_\alpha \xi_\alpha)^3(u_\alpha u_\alpha) + 15(u_\alpha \xi_\alpha)(u_\alpha u_\alpha)^2) \right]. \tag{24}
\end{aligned}$$

Формула (24) имеет вид $f^{eq} = \rho\omega(\bar{\xi})P^N(\bar{\xi})$, где P обозначен полином от молекулярных скоростей, составленный из МПЭ, коэффициенты перед которыми выражаются через скорость потока. Теперь надо аппроксимировать равновесную функцию так, чтобы $\rho = \int f^{eq} d^d \bar{\xi} = \rho \sum_{i=0}^{K-1} w_i P^N(\bar{\xi}_i)$. Такие формулы замены интеграла к конечным суммам называются интерполяционными кубатурными (в одномерном случае – интерполяционными квадратурными), где w_i – весовые коэффициенты (веса) и $\bar{\xi}_i$ – узловые точки (узлы). Построим такие формулы для основных вычислительных шаблонов, представленных на Рис.1-3.

Заметим, что решёточные скорости уже заранее выбраны для вычислительных шаблонов так, чтобы за один временной шаг частицы разлетались по соседним ячейкам. Узлы кубатурной формулы вовсе не обязаны быть равными решёточным скоростям, поэтому введём решёточную скорость звука c_s , произведя замену в (24) $\bar{u} \rightarrow \frac{\bar{u}}{c_s}$ и $\bar{\xi}_i \rightarrow \frac{\bar{c}_i}{c_s}$. Теперь задача определения узлов является задачей определения c_s .

Двумерная и трёхмерная решётки получаются из одномерной путём декартового произведения на себя. Для такого случая в теории интерполяционных кубатурных формул есть метод повторного применения квадратурных формул. Согласно ему веса кубатурной формула являются произведениями весов квадратурных формул. Данное утверждение интуитивно объяснимо теоремой о сведении кратного интеграла к повторному.

Для квадратурной формулы для ортогональных многочленов в полных Гильбертовых пространствах есть эффективный метод воспроизводящего ядра. Согласно нему для шаблона, обладающего центральной симметрией, для K узлов полином P должен быть степени не ниже $N = K - 1$, при этом узлы следует выбрать нулями ортогонального многочлена порядка K . Сами веса задаются формулой

$$w_i = \frac{K!}{(K \cdot H^{(K-1)}(\xi_i))^2}. \tag{25}$$

В формуле (25) уже учтено, что в решёточном Больцмане речь идёт про полиномы Эрмита.

Для $K = 3$ в (25) узлами являются точки $0, \pm\sqrt{3}$, поэтому получается $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Также вводится по аналогии с физической решёточная температура $T_L = c_s^2 = \frac{1}{3}$.

Кроме того, кратко приведём ещё один способ получения квадратурных формул, основанный на симметрии вычислительного шаблона и нечётности числа выбранных узлов.

Потребуем, чтобы в одномерном случае квадратурный момент был равен свободному члену ортогонального полинома того же порядка, что и момент. То есть:

$$\begin{aligned}
 \sum_i w_i &= 1; \\
 \sum_i \frac{c_i}{c_s} w_i &= 0; \\
 \sum_i \left(\frac{c_i}{c_s}\right)^2 w_i &= 1; \\
 \sum_i \left(\frac{c_i}{c_s}\right)^3 w_i &= 0; \\
 \sum_i \left(\frac{c_i}{c_s}\right)^4 w_i &= 3; \\
 \sum_i \left(\frac{c_i}{c_s}\right)^5 w_i &= 0.
 \end{aligned} \tag{26}$$

Учитывая, что используется шаблон из Рис. 1, для которого $c_0 = 0$, $c_1 = 1$, $c_2 = -1$ и $w_1 = w_2$, приходим к системе:

$$w_0 + w_1 + w_2 = 1, w_1 + w_2 = c_s^2, w_1 + w_2 = 3c_s^4. \tag{27}$$

Решение системы (27) даёт уже полученную ранее другим методом формулу. Число уравнений в системе (26) определено тем, что при большем числе уравнений система перестанет иметь единственное решение. Также получилось, что для трёх узлов возможна только одна квадратичная формула, однако это становится не так уже для пяти узлов.



Рис. 1. D1Q3 – одномерный шаблон, чёрным показана нулевая скорость (неподвижные решёточные частицы), красным – модуль которых равен 1 (1 – частицы, уходящие вправо, 2 – влево).

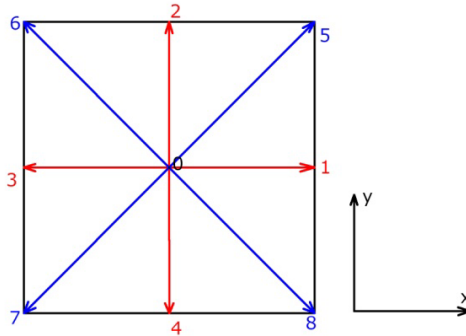


Рис. 2. D2Q9 – двумерный шаблон, чёрным цветом обозначены неподвижные частицы (номер 0), красным – с модулем скорости 1, синим – с модулем скорости $\sqrt{2}$

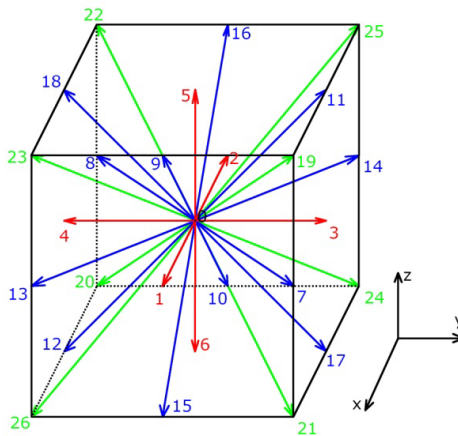


Рис. 3. D3Q27 – трёхмерный шаблон, черным – неподвижные частицы под номером 0, красным, синим и зелёным – частицы с модулями скорости равными 1, $\sqrt{2}$ и $\sqrt{3}$ соответственно.

Таким образом, приходим к окончательному виду равновесного распределения:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{u_\alpha c_{i\alpha}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{(u_\alpha c_{i\alpha})^2}{c_s^4} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{c_s^2} \right) \right]. \quad (28)$$

Для всех весовых коэффициентов справедливы равенства:

$$\begin{aligned}
\sum_i w_i &= 1; \\
\sum_i c_{i\alpha} w_i &= 0; \\
\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta}; \\
\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} w_i &= 0; \\
\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} w_i &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\delta}); \\
\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} c_{i\epsilon} w_i &= 0.
\end{aligned} \tag{29}$$

Выполнение равенств (29) обеспечивается тем, что, если в каждом из них зафиксировать определённый набор компонент и выделить многочлены по каждой переменной, получится произведение сумм из системы (26), так как рассматриваемые вычислительные шаблоны являются декартовыми произведениями одномерных шаблонов. Это позволяет «перенести» на конечное суммирование теорему о сведении кратного к повторному, однако такие кубатурные формулы имеют серьёзный недостаток – они являются формулами с максимальным числом узлов, нужных для достижения данной точности. На практике кроме модели D3Q27, есть также модели D3Q19 и D3Q15 с меньшим числом узлов, однако работа на них часто связана с меньшей устойчивостью.

В заключение к формуле (28) также добавим вывод, что решёточная функция равновесного распределения не является аппроксимацией распределения Максвелла в узлах сетки расчётной области (как может показаться из названия), а есть значения в специальных точках интерполяционных полиномов для разложения распределения Максвелла по МПЭ. Поэтому сравнивать в узлах сетки решёточную функцию равновесного распределения с распределением Максвелла для тех же значений скоростей некорректно, а для верификации необходимо сравнивать значения плотности и скорости потока.

Решёточное уравнение Больцмана

Метод трапеций

Рассмотрим дискретизированное уравнение БГК:

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{\partial f_i}{\partial t} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \Omega(f_i) = - \frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau}. \tag{30}$$

Проинтегрируем его по формуле трапеций на одном временном шаге:

$$\begin{aligned}
& f_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) - f_i(\bar{x}, t) \\
&= -\frac{1}{2} \left(\frac{f_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) - f_i^{eq}(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1)}{\tau} \right. \\
&\quad \left. + \frac{f_i(\bar{x}, t) - f_i^{eq}(\bar{x}, t)}{\tau} \right) \\
&\quad + \frac{1}{8\tau} \max_{t' \in [t, t+1]} \left| \frac{d^2 f_i(\bar{x} + \bar{c}_i(t' - t), t')}{dt^2} \right|
\end{aligned} \tag{31}$$

После раскрытия скобок выходит:

$$\begin{aligned}
& f_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) + \frac{1}{2\tau} f_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) \\
&= f_i(\bar{x}, t) - \frac{1}{2\tau} f_i(\bar{x}, t) + \frac{1}{2\tau} f_i^{eq}(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) \\
&\quad + \frac{1}{2\tau} f_i^{eq}(\bar{x}, t) + \frac{1}{8\tau} \max_{t' \in [t, t+1]} \left| \frac{d^2 f_i(\bar{x} + \bar{c}_i(t' - t), t')}{dt^2} \right|
\end{aligned} \tag{32}$$

Произведём замену:

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_i &= f_i - \frac{1}{2} \Omega(f_i), \text{ то есть } f_i + \frac{1}{2\tau} f_i = \tilde{f}_i + \frac{1}{2\tau} f_i^{eq} \text{ или} \\
f_i &= \frac{2\tau}{2\tau + 1} \tilde{f}_i + \frac{1}{2\tau + 1} f_i^{eq}.
\end{aligned} \tag{33}$$

После подстановки (33) в (32) выходит следующее выражение:

$$\begin{aligned}
& \tilde{f}_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) \\
&= \tilde{f}_i(\bar{x}, t) + \frac{2}{2\tau + 1} \left(f_i^{eq}(\bar{x}, t) - \tilde{f}_i(\bar{x}, t) \right) \\
&\quad + \frac{1}{8\tau} \max_{t' \in [t, t+1]} \left| \frac{2\tau}{2\tau + 1} \frac{d^2 \tilde{f}_i(\bar{x} + \bar{c}_i(t' - t), t')}{dt^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2\tau + 1} \frac{d^2 f_i^{eq}(\bar{x} + \bar{c}_i(t' - t), t')}{dt^2} \right|.
\end{aligned} \tag{34}$$

Формула (33) выписана в безразмерном виде. В размерном виде остаточный член должен ещё быть умножен на квадрат шага по времени. Таким образом, данная формула является конечно-разностной второго порядка, реализованной на вычислительном шаблоне для схемы первого порядка.

Метод характеристик

Рассмотрим в произвольный момент времени t_0 произвольную точку сетки \bar{x}_0 . Введем переменную z для промежутка времени $t \in [t_0, t_0 + 1]$ следующим образом:

$$t = t_0 + z, \quad \bar{x} = \bar{x}_0 + \bar{c}_i z, \quad \frac{\partial z}{\partial t} = 1, \quad \frac{\partial z}{\partial x_\alpha} = c_{i\alpha} \frac{d}{dt} = \frac{d}{dz}. \tag{35}$$

Выполнив подстановку (35) в уравнение (30), придём к следующему обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$\frac{df_i}{dz} = -\frac{1}{\tau}f_i(z) + \frac{1}{\tau}f_i^{eq}(z). \quad (36)$$

Решением последнего уравнения будет:

$$f_i(z) = e^{-\frac{z}{\tau}} \left(f_i(0) + \frac{1}{\tau} \int_0^z e^{\frac{z'}{\tau}} f_i^{eq}(z') dz' \right). \quad (37)$$

Теперь вернём исходные переменные:

$$\begin{aligned} f_i(\bar{x}_0 + \bar{c}_i(t - t_0), t) &= e^{-\frac{1}{\tau}(f_i(\bar{x}_0, t_0) - f_i(\bar{x}_0 + \bar{c}_i(t - t_0), t))} \\ &= e^{-\frac{1}{\tau}(f_i(\bar{x}_0, t_0) - f_i(\bar{x}_0 + \bar{c}_i(t - t_0), t))} \\ &+ \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^t e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} f_i^{eq}(\bar{x}_0 + \bar{c}_i(t' - t_0), t') dt'. \end{aligned} \quad (38)$$

В решении на новом временном слое вычислим интеграл по формуле трапеции и разложим экспоненту в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} f_i(\bar{x}_0 + \bar{c}_i, t_0 + 1) &= \left(1 - \frac{1}{\tau} + \frac{1}{2\tau^2} \right) f_i(\bar{x}_0, t_0) \\ &+ \frac{1}{2\tau} \left(f_i^{eq}(\bar{x}_0 + \bar{c}_i, t_0 + 1) + \left(1 - \frac{1}{\tau} \right) f_i^{eq}(\bar{x}_0, t_0) \right) \\ &+ \frac{1}{8\tau} \max_{t' \in [t_0, t_0+1]} \left| \frac{d^2 f_i^{eq}(\bar{x}_0 + \bar{c}_i(t' - t_0), t')}{dt^2} \right|. \end{aligned} \quad (39)$$

В (39) произведём замену (35), тогда будет:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_i(\bar{x}_0 + \bar{c}_i, t_0 + 1) &= \tilde{f}_i(\bar{x}_0, t_0) + \frac{2}{2\tau + 1} (f_i^{eq}(\bar{x}_0, t_0) - \tilde{f}_i(\bar{x}_0, t_0)) \\ &+ \frac{1}{2\tau^2} \tilde{f}_i(\bar{x}_0, t_0) \\ &+ \frac{1}{8\tau} \max_{t' \in [t_0, t_0+1]} \left| \frac{d^2 f_i^{eq}(\bar{x}_0 + \bar{c}_i(t' - t_0), t')}{dt^2} \right|. \end{aligned} \quad (40)$$

Результаты обоих подходов отличаются только представлением погрешностей. Кроме того, так как моменты от ядра столкновений дают ноль, то суммирование исходной функции распределения и функции с тильдой дают гидродинамические параметры, поэтому в дальнейших рассуждениях знак тильды не используется, но подразумевается именно эта функция. Итоговый вид вычислительной схемы:

$$f_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) = f_i(\bar{x}, t) + \frac{2}{2\tau + 1} (f_i^{eq}(\bar{x}, t) - f_i(\bar{x}, t)). \quad (41)$$

Сам вычислительный алгоритм состоит из двух этапов:

1. Реализуется процесс столкновения частиц:

$$f_i^*(\bar{x}, t) = f_i(\bar{x}, t) + \frac{2}{2\tau + 1} (f_i^{eq}(\bar{x}, t) - f_i(\bar{x}, t)). \quad (42)$$

2. Производится разлёт частиц:

$$f_i(\bar{x}, t + 1) = f_i^*(\bar{x} - \bar{c}_i, t). \quad (43)$$

Переход к гидродинамике

КГД в решёточных переменных

Перед выводом квазигазодинамического уравнения (КГД), используя свойство (29), найдём первые несколько моментов от равновесной функции распределения:

$ \begin{aligned} M^{eq(0)} &= \sum_i f_i^{eq} = \sum_i (\rho w_i (1 + \frac{u_\alpha c_{i\alpha}}{c_s^2} + \frac{u_\alpha c_{i\alpha} u_\beta c_{i\beta}}{2c_s^4} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{2c_s^2})) \\ &= \rho \sum_i w_i + \rho u_\alpha \frac{1}{c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} w_i + \rho u_\alpha u_\beta \frac{1}{2c_s^4} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i \\ &\quad - \rho u_\alpha u_\alpha \frac{1}{2c_s^2} \sum_i w_i = \rho. \end{aligned} $	
$ \begin{aligned} M_\alpha^{eq(1)} &= \sum_i c_{i\alpha} f_i^{eq} = \sum_i (\rho c_{i\alpha} w_i (1 + \frac{u_\beta c_{i\beta}}{c_s^2} + \frac{u_\beta c_{i\beta} u_\gamma c_{i\gamma}}{2c_s^4} - \frac{u_\beta u_\beta}{2c_s^2})) \\ &= \rho \sum_i c_{i\alpha} w_i + \rho u_\beta \frac{1}{c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i \\ &\quad + \rho u_\beta u_\gamma \frac{1}{2c_s^4} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} w_i - \rho u_\beta u_\beta \frac{1}{2c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} w_i \\ &= \rho u_\alpha. \end{aligned} $	

	$ \begin{aligned} M_{\alpha\beta}^{eq(2)} &= \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{eq} \\ &= \sum_i (\rho c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i (1 + \frac{u_\gamma c_{i\gamma}}{c_s^2} + \frac{u_\gamma c_{i\gamma} u_\delta c_{i\delta}}{2c_s^4} - \frac{u_\gamma u_\gamma}{2c_s^2})) \\ &= \rho \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i + \rho u_\gamma \frac{1}{c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} w_i \\ &\quad + \rho u_\gamma u_\delta \frac{1}{2c_s^4} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} w_i \\ &\quad - \rho u_\gamma u_\gamma \frac{1}{2c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} w_i = \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta. \end{aligned} $	(44)
	$ \begin{aligned} M_{\alpha\beta\gamma}^{eq(3)} &= \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{eq} \\ &= \sum_i (\rho w_i (1 + \frac{u_\delta c_{i\delta}}{c_s^2} + \frac{u_\delta c_{i\delta} u_\epsilon c_{i\epsilon}}{2c_s^4} - \frac{u_\delta u_\delta}{2c_s^2})) \\ &= \rho \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} w_i + \rho u_\delta \frac{1}{c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} w_i \\ &\quad + \rho u_\delta u_\epsilon \frac{1}{2c_s^4} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} c_{i\epsilon} w_i \\ &\quad - \rho u_\delta u_\delta \frac{1}{2c_s^2} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} w_i \\ &= \rho c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha + \delta_{\alpha\gamma} u_\beta). \end{aligned} $	

В равенстве (41) разложим левую часть по формуле Тейлора:

$$\frac{df_i(\bar{x}, t)}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d^2 f_i(\bar{x}, t)}{dt^2} = \frac{2}{2\tau + 1} (f_i^{eq}(\bar{x}, t) - f_i(\bar{x}, t)) \quad (45)$$

Теперь применим к (45) разложение Чепмена–Энскога $f_i = f_i^{eq} + \varepsilon f_i^{(1)}$, где ε – число Кнудсена, которое является малым параметром:

$$\begin{aligned}
\frac{df_i^{eq}(\bar{x}, t)}{dt} + \varepsilon \frac{df_i^{(1)}(\bar{x}, t)}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d^2 f_i^{eq}(\bar{x}, t)}{dt^2} + \varepsilon \frac{1}{2} \frac{d^2 f_i^{(1)}(\bar{x}, t)}{dt^2} \\
= -\frac{\varepsilon}{\tau + 1/2} f_i^{(1)}(\bar{x}, t).
\end{aligned} \quad (46)$$

Поскольку в физической кинетической теории число Кнудсена вводится, чтобы исключить из уравнения время релаксации, то и в (46) примем $\varepsilon = \tau + \frac{1}{2}$ (хотя такое число Кнудсена и близко к $\frac{1}{2}$, разложение можно считать обоснованным, так как в физической кинетической теории разложение считается приемлемым до чисел Кнудсена немногим меньше единицы). Тогда в первом приближении уравнение (46) будет выглядеть так:

$$\frac{df_i^{eq}}{dt} = \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial x_\alpha} = -f_i^{(1)}. \quad (47)$$

Из свойств ядра столкновений следует, что $\sum_i f_i^{(1)} = 0$ и $\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(1)} = 0$. С помощью этих сумм получаем КГД в первом приближении в виде моментов:

$$\frac{\partial M^{eq(0)}}{\partial t} + \frac{\partial M_\alpha^{eq(1)}}{\partial x_\alpha} = 0 \text{ и } \frac{\partial M_\alpha^{eq(1)}}{\partial t} + \frac{\partial M_{\alpha\beta}^{eq(2)}}{\partial x_\beta} = 0. \quad (48)$$

Подставляя в (48) найденные в (44) значения моментов и обозначая давление $p = \rho c_s^2$, получим КГД в первом приближении в гидродинамических параметрах:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0 \text{ и } \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha}. \quad (49)$$

Уравнения (49) являются уравнениями Эйлера. Теперь выпишем уравнение (49) во втором приближении, сразу заменяя вторую производную от равновесной функции производной от неравновесной составляющей:

$$\frac{df_i^{eq}(\bar{x}, t)}{dt} + \tau \frac{df_i^{(1)}(\bar{x}, t)}{dt} = -f_i^{(1)}. \quad (50)$$

Умножая уравнение (50) на $c_{i\alpha}$ и суммируя по решёточным скоростям, придём к КГД во втором приближении:

$$\frac{\partial M_\alpha^{eq(1)}}{\partial t} + \frac{\partial M_{\alpha\beta}^{eq(2)}}{\partial x_\beta} = -\tau \frac{\partial M_{\alpha\beta}^{1(2)}}{\partial x_\beta}. \quad (51)$$

Из (47) найдём момент от неравновесной составляющей:

$$\begin{aligned}
M_{\alpha\beta}^{1(2)} &= -\frac{\partial M_{\alpha\beta}^{eq(1)}}{\partial t} - \frac{\partial M_{\alpha\beta\gamma}^{eq(2)}}{\partial x_\gamma} \\
&= -\frac{\partial(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta)}{\partial t} \\
&\quad - \frac{\partial(\rho c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha + \delta_{\alpha\gamma} u_\beta))}{\partial x_\gamma} \\
&= -\frac{\partial\rho}{\partial t} c_s^2 \delta_{\alpha\beta} - u_\alpha \frac{\partial(\rho u_\beta)}{\partial t} - u_\beta \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + u_\alpha u_\beta \frac{\partial\rho}{\partial t} \\
&\quad - c_s^2 \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\beta} - c_s^2 \frac{\partial(\rho u_\beta)}{\partial x_\alpha} - c_s^2 \frac{\partial(\rho u_\gamma)}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \\
&= u_\alpha \frac{\partial(\rho u_\beta u_\gamma)}{\partial x_\gamma} + u_\alpha c_s^2 \frac{\partial\rho}{\partial x_\beta} + u_\beta \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\gamma)}{\partial x_\gamma} + u_\beta c_s^2 \frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha} \\
&\quad - u_\alpha u_\beta \frac{\partial(\rho u_\gamma)}{\partial x_\gamma} - c_s^2 \rho \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - c_s^2 u_\beta \frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha} - c_s^2 \rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \\
&\quad - c_s^2 u_\alpha \frac{\partial\rho}{\partial x_\beta} = -\rho c_s^2 \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)}{\partial x_\gamma}.
\end{aligned} \tag{52}$$

При выводе (52) производные по времени заменялись производными по пространству с помощью уравнений Эйлера, что естественно в механике сплошной среды, где часто решения уравнений Эйлера используются как начальное приближение к решениям уравнения Навье-Стокса. Из подстановки (44) и (52) в (51) с обозначением $\mu = \rho c_s^2 \tau$ коэффициента динамической вязкости следует КГД во втором приближении в гидродинамических переменных:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} \\
&= -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right) - \tau \frac{\partial^2(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)}{\partial x_\beta \partial x_\gamma}.
\end{aligned} \tag{53}$$

Уравнение (53) воспроизводит уравнение Навье-Стокса, но с несколькими ошибками. Во-первых, наличие в КГД кубического члена, которого нет в Навье-Стоксе, но течение медленное, а значит, в размерных переменных это слагаемое порядка куба от числа Маха, что много меньше единиц. Во-вторых, в КГД в тензоре вязких напряжений отсутствует слагаемое, связанное с дивергенцией скорости, но в медленных течениях этой составляющей в уравнении Навье-Стокса обычно пренебрегают.

КГД в физических переменных

В данном пункте этого параграфа символ «звезда» у переменных, как и в разделе «Безразмерный вид», обозначает безразмерный вид, а «обычные» переменные – физические размерные параметры.

Рассмотрим полученную ранее КГД систему уравнений в обозначениях (21):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(\rho^* u_\alpha^*)}{\partial x_\alpha^*} &= 0; \\ \frac{\partial(\rho^* u_\alpha^*)}{\partial t^*} + \frac{\partial(\rho^* u_\alpha^* u_\beta^*)}{\partial x_\alpha^*} &= -\frac{\partial p^*}{\partial x_\alpha^*} + \frac{\partial}{\partial x_\beta^*} \left(\mu^* \left(\frac{\partial u_\beta^*}{\partial x_\alpha^*} + \frac{\partial u_\alpha^*}{\partial x_\beta^*} \right) \right) - \tau \frac{\partial^2(\rho^* u_\alpha^* u_\beta^* u_\gamma^*)}{\partial x_\beta^* \partial x_\gamma^*}. \end{aligned} \quad (54)$$

В обозначениях (21) выпишем связь между размерными и безразмерными параметрами:

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}, x_\alpha^* = \frac{x_\alpha}{\Delta x}, t^* = \frac{t}{\Delta t}, u_\alpha^* = u_\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (55)$$

Используя (55), получаем связь между решёточной динамической вязкостью и физической из элементарной кинетической теории:

$$\mu^* = \rho^* \nu^* = \rho^* (c_s^*)^2 \tau^* = \frac{\rho}{\rho_0} c_s^2 \frac{\Delta t^2}{\gamma \Delta x^2} \frac{\tau}{\Delta t} = \frac{\Delta t}{\rho_0 \Delta x^2} \rho \nu = \frac{\Delta t}{\rho_0 \Delta x^2} \mu. \quad (56)$$

Также из (55) получаем зависимость между решёточным давлением и давление совершенного газа:

$$p^* = \rho^* (c_s^*)^2 = \frac{\rho}{\rho_0} c_s^2 \frac{\Delta t^2}{\gamma \Delta x^2} = \frac{\Delta t^2}{\rho_0 \Delta x^2} p. \quad (57)$$

Перепишем (54) с помощью соотношений (55) – (57):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta t \Delta x}{\rho_0 \Delta x} \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} &= 0; \\ \frac{\Delta t^2}{\rho_0 \Delta x} \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2 \Delta x}{\rho_0 \Delta x^2} \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} &= -\frac{\Delta t^2 \Delta x}{\rho_0 \Delta x^2} \frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\frac{\Delta t}{\rho_0 \Delta x^2} \mu \frac{\Delta t \Delta x}{\Delta x} \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t^3 \Delta x^2}{\rho_0 \Delta t \Delta x^3} \tau \frac{\partial^2(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)}{\partial x_\beta \partial x_\gamma}. \end{aligned} \quad (58)$$

После сокращения общих множителей в обоих уравнениях, получим КГД следующего вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} &= 0; \\ \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} &= -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right) - \tau \frac{\partial^2(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)}{\partial x_\beta \partial x_\gamma}. \end{aligned} \quad (59)$$

Из связи давления и плотности в совершенном газе через квадрат скорости звука следует, что для низкоскоростных течений, когда перепад плотности незначительный, можно в (59) в уравнении неразрывности пренебречь производными от плотности, но в «почти» уравнении Навье-Стокса нельзя отбросить градиент давления. Таким образом, перепад давления в решёточной кинетической теории создаёт движение сплошной среды, как и в физической.

Граничные условия

Модель «прямоугольной ломаной»

Прежде чем рассмотреть граничные условия, заметим: пусть для скоростей i и j , таких что $\bar{c}_j = -\bar{c}_i$, выполняется следствие из вида равновесной функции (28):

$$f_i^{eq} - f_j^{eq} = 2\rho w_i \frac{u_\alpha c_{i\alpha}}{c_s^2} \quad (60)$$

Поскольку действует предположение о малости числа Кнудсена, то справедливо с точностью первого порядка от шага по времени соотношение:

$$f_i - f_j = f_i^{eq} - f_j^{eq} = 2\rho w_i \frac{u_\alpha c_{i\alpha}}{c_s^2}. \quad (61)$$

Теперь пусть имеется плоская граница, на которой лежат узлы решётки. Рассмотрим один из узлов, считая для определённости, что нормаль плоскости, направленная в сторону сплошной среды, сонаправлена с осью абсцисс. Введём обозначения i_0, i_+, i_- чтобы обозначить скорости $c_{i_0x} = 0, c_{i_+x} = 1, c_{i_-x} = -1$. Тогда выпишем уравнения для плотности и x-компоненты скорости в узле:

$$\rho = \sum_{i_0} f_{i_0} + \sum_{i_+} f_{i_+} + \sum_{i_-} f_{i_-} \quad \text{и} \quad \rho u_x = \sum_{i_+} f_{i_+} - \sum_{i_-} f_{i_-}. \quad (62)$$

Из формулы разлёта частиц (43) видно, что неизвестными являются f_{i_+} . Считая, что разлёт всех известных компонент произведён, чтобы найти неизвестные компоненты вычтем из первого уравнения системы (62) второе:

$$\rho(1 - u_x) = \sum_{i_0} f_{i_0} + 2 \sum_{i_-} f_{i_-} \quad (63)$$

Таким образом получено **граничное условие Цзоу-Хэ** для левой границы, позволяющее по одной из известных компонент течения определить вторую как:

$$\rho = \frac{\rho_z}{(1 - u_x)} \quad \text{или} \quad u_x = 1 - \frac{\rho_z}{\rho}, \quad \rho_z = \sum_{i_0} f_{i_0} + 2 \sum_{i_-} f_{i_-}. \quad (64)$$

Сами же неизвестные компоненты можно найти из (61):

$$f_{i_+} = f_{i_-} + 2\rho w_{i_-} \frac{u_\alpha c_{i_- \alpha}}{c_s^2}. \quad (65)$$

Для правой границы, когда нормаль противонаправлена оси абсцисс, неизвестны компоненты f_{i_-} , и в системе (62) следует произвести сложение. Решение следующее:

$$\rho = \frac{\rho_z}{(1 + u_x)} \quad \text{или} \quad u_x = 1 + \frac{\rho_z}{\rho}, \quad \rho_z = \sum_{i_0} f_{i_0} + 2 \sum_{i_+} f_{i_+}; \quad (66)$$

$$f_{i_-} = f_{i_+} + 2\rho w_{i_-} \frac{u_\alpha c_{i_- \alpha}}{c_s^2}. \quad (67)$$

Поскольку в (65) и (67) необходимо знать все компоненты скорости, их можно найти из (61), рассматривая частицы с параллельными осям ординат и аппликата скоростями.

Пусть теперь плоскость является поверхностью твёрдого тела. Рассмотрим для этого случая четыре следствия условий Цзоу-Хэ:

1. **Условие непротекания первого порядка.** После выполнения разлёта частиц, для которых уместна формула (43), из условия (61) определяется касательная составляющая скорости. Так как абсцисса скорости равна нулю, то из (64) или (66) определяется плотность на стенке. Разлёт остальных частиц – по формуле (65) или (66).
2. **Условие прилипания первого порядка.** Так как все компоненты скорости должны быть равны нулю, то для частиц, скорости которых лежат на стенке, присвоим значения функции распределения значениями равновесной функции, так как если на стенке течение отсутствует, то и исходя из уравнения Больцмана, функция распределения постоянна. Для оставшихся компонент скорости выполним разлёт по формуле (43), если это возможно. Затем следует, как и в предыдущем условии, воспользоваться формулами (64) и (66) или (65) и (67).

3. **Условие непротекания второго порядка.** Заметим, что в узлах решётки, находящихся в одном шаге от стенки, компонентам функции распределения с теми же номерами, что и доопределяемые на границе, присваиваются значения столкновений на стенке. Для корректировки следует применить алгоритм из первого пункта и к этим узлам.
4. **Условие прилипания второго порядка.** Теми же соображениями, что и в пункте три, обусловлена необходимость корректировки функции распределения в узлах, стоящих в шаге от стенки. Для неё необходимо также в этих узлах выполнить алгоритм из первого пункта. Так по двум узлам вблизи границы будет сформирован линейный профиль скорости.

Модель «гладкой ломаной»

В предыдущем пункте граница твёрдого тела понималась как «ломаная» линия или поверхность, состоящая из квадратиков, расположенных друг к другу под прямыми углами. Вообще из теории меры множеств следует, что для моделирования кривых и поверхностей лучше использовать полигональные сетки, когда все вершины многоугольников лежат на аппроксимируемой поверхности. В методе решёточных уравнений Больцмана существуют подходы «полигонизирования» поверхности без построения полигонов. Их описание с описанием их достоинств и недостатков приведены в работе [14]. Здесь разобран только один из них (метод Цао из работы [13]), так как он показывает наилучшую устойчивость.

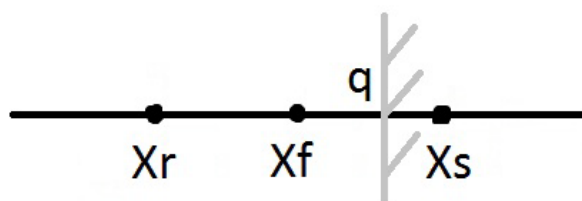


Рис. 4. Схема моделирования границы в методе Цао.

На рис. 4 показана схема понимания границы твёрдого тела в методе Цао. Пусть соседние узлы сетки \bar{x}_r , \bar{x}_f и \bar{x}_s расположены так, что первые два лежат в области течения, а последний — в твёрдом теле, при этом частицы рассматриваемой скорости (обозначим буквой i , с противоположено направленной скоростью $-j$) должны были бы приходить из узла \bar{x}_s в \bar{x}_f .

Также обозначим за $q \in [0; 1)$ расстояние между узлом \bar{x}_f и границей твёрдого тела, отнесённое к расстоянию между узлами \bar{x}_s в \bar{x}_f .

Например, пусть используется модель D3Q27 и в качестве \bar{x}_f рассматривается такой узел сетки из области течения, что граница твёрдого тела определена плоскостью, проходящей через узлы, определённые скоростями 19, 22 и 26. Данная ситуация проиллюстрирована на рис. 5.

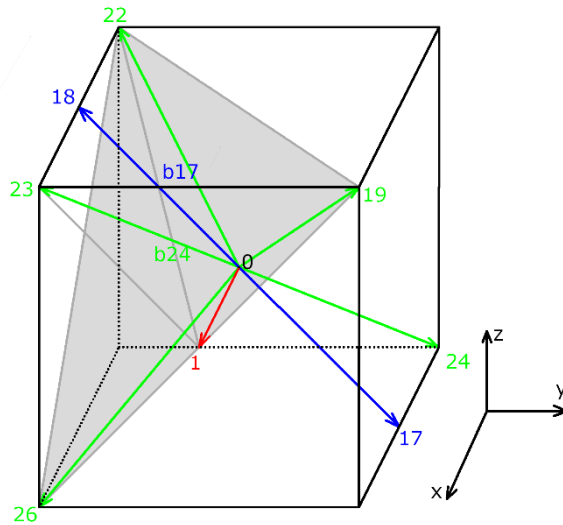


Рис. 5. Пример работы с границей твёрдого тела в методе Цао.

Пусть необходимо рассмотреть решёточную частицу под номером 17. Тогда из (43) следует перенести значение из узла, определённого скоростью 18. Поэтому в данном случае в качестве \bar{x}_f выступает узел с нулевой скоростью, \bar{x}_r – со скоростью 17 и \bar{x}_s – 18. Точку пересечения отрезка 0, 18 с плоскостью 19, 22, 26 обозначим b17. Из треугольника 1, 22, 23 видим, что отрезок b17, 18 параллелен отрезку 1, 23 и делит сторону 22, 23 пополам, а значит, b17, 18 – средняя линия треугольника 1, 22, 23 и имеет длину $\sqrt{2}/2$. Тогда длина отрезка 0, b17 – $\sqrt{2}/2$, и для 17 скорости получаем $q = \frac{\sqrt{2}/2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$.

Пусть необходимо рассмотреть решёточную частицу 24. Тогда из (43) узлы в методе Цао: \bar{x}_f – также 0, \bar{x}_r – 24 и \bar{x}_s – 23. Пересечение отрезка 0, 23 с плоскостью 19, 22, 26 – b24. В правильной пирамиде 23, 19, 22, 26 отрезок 23, b24 является высотой, а сама точка b24 – центром масс треугольника 19, 22, 26. Поэтому отрезок 22, b24 равен $2\sqrt{\frac{2}{3}}$, а из треугольника 22, b24, 23 по теореме

Пифагора длина 23, b24 будет $2\frac{\sqrt{3}}{3}$. Тогда длина отрезка 0, b24 - $\frac{\sqrt{3}}{3}$, а для 23 скорости $q = \frac{\sqrt{3}}{3}/\sqrt{3} = \frac{1}{3}$.

Из данного примера видно, что метод Цао требует дополнительной работы с геометрией твёрдого тела. Если обтекаемое сплошной средой тело неподвижно в пространстве, то возникает логичное и естественное желание выполнить всю эту работу до старта газодинамического расчёта, записав нужные параметры в отдельный массив данных. Однако, согласно [15], современные многопроцессорные вычислительные машины обладают высокой вычислительной мощностью отдельного ядра и низкой скоростью обмена информацией между ядрами, поэтому на практике оказывается более удобным для каждого временного слоя в каждом «особенном» узле заново решать геометрические задачи, чем тормозить весь вычислительный процесс для обращения к нужному элементу памяти.

Пусть даны две функции $F(h)$ и $G(h)$, которые при этом будут «достаточно хорошими», чтобы построить для них интерполяционный полином Лежандра второго порядка. При этом на схеме Рис.4 X_f соответствует значение $h = 0$, точке $X_s - h = 1$, а $X_r - h = -1$.

Для функции F , взяв в качестве узлов интерполяционного многочлена точки X_f и X_r , имеем:

$$F(h) = (1 + h)F(X_f) - hF(X_r). \quad (68)$$

Для функции G , беря за узлы точки X_f и X_s , имеем:

$$G(h) = (1 - h)G(X_f) + hG(X_s). \quad (69)$$

При этом в качестве F и G взяв функции $f_i(\bar{x}, t + 1)$ и $f_j(\bar{x}, t + 1)$ соответственно, получим следующие интерполяционные формулы на границе твёрдого тела:

$$f_i(\bar{x}_f - \bar{c}_i q, t + 1) = (1 + q)f_i(\bar{x}_f, t + 1) - qf_i(\bar{x}_r, t + 1); \quad (70)$$

$$f_j(\bar{x}_f - \bar{c}_i q, t + 1) = (1 - q)f_j(\bar{x}_f, t + 1) + qf_j(\bar{x}_s, t + 1). \quad (71)$$

Теперь, следуя логике предыдущего пункта, приравняем (70) и (71) друг к другу и, используя (43) везде, кроме $f_i(\bar{x}_f, t + 1)$, получим:

$$(1 + q)f_i(\bar{x}_f, t + 1) - qf_i^*(\bar{x}_f, t) = (1 - q)f_j^*(\bar{x}_r, t) + qf_j^*(\bar{x}_f, t). \quad (72)$$

Таким образом получается **граничное условие Цао**:

$$f_i(\bar{x}_f, t + 1) = \frac{1 - q}{1 + q}f_j^*(\bar{x}_r, t) + \frac{q}{1 + q}(f_i^*(\bar{x}_f, t) + f_j^*(\bar{x}_f, t)). \quad (73)$$

Из (73) видно, что в методе Цао требуется работать с предыдущим узлом, но в отличие от граничных условий непротекания и прилипания второго порядка из предыдущего пункта, обходится меньшим числом операций (если не брать во внимание работу с геометрией), и реализация метода требует более простого ветвления алгоритма.

В заключение стоит сказать, что можно построить интерполяционные полиномы более высокого порядка аппроксимации, используя при этом большее число узловых точек. Однако, как в показано в выводе конечно-разностной схемы методом характеристик, в решёточном Больцмане предполагается достаточная гладкость решения на каждом из временных интервалов в один шаг по времени и в области одной ячейки сетки. При экстраполяции решения неявно предполагается гладкость на отрезке, чуть большем, чем один шаг по времени, и области, немного большей одной ячейки сетки. Чем выше порядок аппроксимации, тем в больших окрестностях следует предполагать гладкость, что отрицательно будет сказываться на устойчивости метода.

Регуляризация

Основной алгоритм метода решёточного уравнений Больцмана обладает существенным недостатком – низкая устойчивость и невыполнение сеточной сходимости. Для его устранения проводится процедура, называемая регуляризацией. Методов регуляризации много, но далее описан алгоритм Деллара, так как он пусть и не является наиболее эффективным, но сохраняет основные преимущества решёточных уравнений: отсутствие конечно-разностных схем в алгоритме и вычисление значений в каждом узле используя только данные из самого узла.

Частичная регуляризация

Заметим, что из разложения Чепмена – Энскога $f_i = f_i^{eq} - (\tau + \frac{1}{2}) \frac{df_i^{eq}}{dt}$ из свойства (11) МПЭ следует, что функция распределения определяется большим числом полиномов, чем равновесная функция. Поэтому набор полиномов основного разложения: $\left\{ H^{(0)}\left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}}\right), H_\alpha^{(1)}\left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}}\right), H_{\alpha\beta}^{(2)}\left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}}\right) \right\}$, следует дополнить полиномами следующего порядка: $\left\{ H_{\alpha\beta\gamma}^{(3)}\left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}}\right) \right\}$. Заметим из (15), что дополнительные МПЭ с одинаковыми тремя индексами дают кубы соответствующих компонент скорости течения сплошной среды, а они определяют основную ошибку метода (данный факт будет пояснён в следующем пункте). Обратив внимание на свойство МПЭ (10), уберём неудобные функции из разложения, приняв за дополнительные МПЭ

следующий набор функции: $\left\{ H_{\alpha'\alpha'\beta'}^{(3)}\left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}}\right), H_{\alpha'\alpha'\beta'\beta'}^{(4)}\left(\frac{\bar{u}}{\sqrt{1-T}}\right) \right\}$. Здесь и далее под «штрихованным» греческими буквами обозначены также компоненты индекса, пробегающие все значения от 1 до d , но индексы, обозначенными разными буквами, не могут быть равными, и для них не подразумевается выполнение соглашения Эйнштейна о свёртке.

Таким образом, получаем вид регуляризованной равновесной функции:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{u_\alpha c_{i\alpha}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{(u_\alpha c_{i\alpha})^2}{c_s^4} - \frac{u_\alpha u_\alpha}{c_s^2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha', \beta'=1}^d \frac{u_{\alpha'}^2 u_{\beta'}}{c_s^4} \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \frac{c_{i\beta'}}{c_s} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha', \beta'=1}^d \frac{u_{\alpha'}^2 u_{\beta'}^2}{c_s^4} \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \left(\frac{c_{i\beta'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \right]. \quad (74)$$

Полная регуляризация

Из формулы (53) понимаем, что для решёточных уравнений Больцмана тензор вязких напряжений имеет вид:

$$\sigma'_{\alpha\beta} = -\rho\tau c_s^2 \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \tau \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)}{\partial x_\gamma}. \quad (75)$$

Используя замечание про «штрихованные» индексы, рассмотрим подробно вид диагональных компонент (63):

$$\begin{aligned} \sigma'_{\alpha'\alpha'} &= -2\rho\tau c_s^2 \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} + \tau \frac{\partial(\rho u_{\alpha'}^3)}{\partial x_{\alpha'}} + \sum_{\gamma'=1}^d \frac{\partial(\rho u_{\alpha'}^2 u_{\gamma'})}{\partial x_{\gamma'}} = \\ &= -2\rho\tau c_s^2 \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} + 3\rho\tau u_{\alpha'}^2 \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} + \tau u_{\alpha'}^3 \frac{\partial \rho}{\partial x_{\alpha'}} \\ &+ \sum_{\gamma'=1}^d \frac{\partial(\rho u_{\alpha'}^2 u_{\gamma'})}{\partial x_{\gamma'}} = -2\rho c_s^2 \tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} \\ &+ \tau u_{\alpha'}^3 \frac{\partial \rho}{\partial x_{\alpha'}} + \sum_{\gamma'=1}^d \frac{\partial(\rho u_{\alpha'}^2 u_{\gamma'})}{\partial x_{\gamma'}}. \end{aligned} \quad (76)$$

$$\begin{aligned}
\sigma'_{\alpha'\beta'} &= -\rho\tau c_s^2 \left(\frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\beta'}} \right) + \tau \frac{\partial(\rho u_{\alpha'}^2 u_{\beta'})}{\partial x_{\alpha'}} + \tau \frac{\partial(\rho u_{\alpha'} u_{\beta'}^2)}{\partial x_{\beta'}} \\
&+ \tau \sum_{\gamma'=1}^d \frac{\partial(\rho u_{\alpha'} u_{\beta'} u_{\gamma'})}{\partial x_{\gamma'}} \\
&= -\rho\tau c_s^2 \left(\frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\beta'}} \right) \\
&+ \tau \rho u_{\alpha'} u_{\beta'} \left(\frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\beta'}} + \sum_{\gamma'=1}^d \frac{\partial u_{\gamma'}}{\partial x_{\gamma'}} \right) \\
&+ \tau \left(u_{\alpha'} \frac{\partial(\rho u_{\alpha'} u_{\beta'})}{\partial x_{\alpha'}} + u_{\beta'} \frac{\partial(\rho u_{\alpha'} u_{\beta'})}{\partial x_{\beta'}} \right) \\
&+ \sum_{\gamma'=1}^d u_{\gamma'} \frac{\partial(\rho u_{\alpha'} u_{\beta'})}{\partial x_{\gamma'}} \\
&= -\rho\tau c_s^2 \left(\frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\beta'}} \right) \\
&+ \tau \rho u_{\alpha'} u_{\beta'} \left(\frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\beta'}} + \sum_{\gamma'=1}^d \frac{\partial u_{\gamma'}}{\partial x_{\gamma'}} \right) \\
&+ \tau u_{\alpha'} u_{\beta'} \left(u_{\alpha'} \frac{\partial \rho}{\partial x_{\alpha'}} + u_{\beta'} \frac{\partial \rho}{\partial x_{\beta'}} + \sum_{\gamma'=1}^d u_{\gamma'} \frac{\partial \rho}{\partial x_{\gamma'}} \right) \\
&+ \tau \rho \left(u_{\alpha'} \frac{\partial(u_{\alpha'} u_{\beta'})}{\partial x_{\alpha'}} + u_{\beta'} \frac{\partial(u_{\alpha'} u_{\beta'})}{\partial x_{\beta'}} \right) \\
&+ \sum_{\gamma'=1}^d u_{\gamma'} \frac{\partial(u_{\alpha'} u_{\beta'})}{\partial x_{\gamma'}} \\
&= -\rho\tau c_s^2 \left(\frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\beta'}} \right) - \tau u_{\alpha'} u_{\beta'} \frac{\partial \rho}{\partial t} \\
&+ \tau \rho \left(u_{\alpha'}^2 \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\alpha'}} + u_{\alpha'} u_{\beta'} \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\alpha'}} + u_{\beta'}^2 \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\beta'}} \right. \\
&+ \left. u_{\alpha'} u_{\beta'} \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\beta'}} + \sum_{\gamma'=1}^d \left(u_{\alpha'} u_{\gamma'} \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\gamma'}} + u_{\beta'} u_{\gamma'} \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\gamma'}} \right) \right) \\
&= -\rho\tau c_s^2 \left(\frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\alpha'}} + \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial x_{\beta'}} \right) - \tau u_{\alpha'} u_{\beta'} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \tau \rho u_{\alpha'} \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial t} \\
&- \tau u_{\alpha'} \frac{\partial \rho}{\partial x_{\beta'}} - \tau \rho u_{\beta'} \frac{\partial u_{\alpha'}}{\partial t} - \tau u_{\beta'} \frac{\partial \rho}{\partial x_{\alpha'}}.
\end{aligned} \tag{77}$$

Формула (77) была преобразована из учёта того, что в главном приближении выполняются уравнения Эйлера. В низкоскоростных течениях производные скорости по координатам меняются сильнее, чем остальные,

оттого из (76) и (77) можно сделать вывод, что диагональные элементы тензора вязких напряжений определены несколько другой вязкостью, чем остальные компоненты. Поэтому из формулы (41) вычтем то, что даёт ошибку в КГД, и получим:

$$\begin{aligned}
& f_i(\bar{x} + \bar{c}_i, t + 1) \\
&= f_i(\bar{x}, t) + \frac{2}{2\tau + 1} (f_i^{eq}(\bar{x}, t) - f_i(\bar{x}, t)) \\
&- \frac{w_i}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} \right. \\
&- 1) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)}.
\end{aligned} \tag{78}$$

Здесь в (76) используется неравновесный момент:

$$\begin{aligned}
M_{\alpha\beta}^{n(2)} &= \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} (f_i - f_i^{eq}) = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(-\left(\tau + \frac{1}{2}\right) f_i^{(1)} \right) \\
&= -\left(\tau + \frac{1}{2}\right) M_{\alpha\beta}^{1(2)}.
\end{aligned} \tag{79}$$

Обозначим за M^d моменты от дополнительного слагаемого к конечно-разностной схеме в формуле (78). Используя соотношения (29), найдём вид первых нескольких из них:

$$\begin{aligned}
M^{d(0)} &= - \sum_i \left(\frac{w_i}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \right) \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} \left(\sum_i w_i c_{i\alpha'}^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_i w_i \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \tag{80} \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} c_s^2 - 1 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} = 0.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_{\beta}^{d(1)} &= - \sum_i \left(c_{i\beta} \frac{w_i}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \right) \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} \left(\sum_i w_i c_{i\alpha'}^2 c_{i\beta} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_i w_i c_{i\beta} \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \tag{81} \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} 0 - 0 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} = 0.
\end{aligned}$$

В (81) учтено, что совершенные симметричные тензоры третьего и первого порядков состоят только из нулевых компонент, поэтому рассматривать каждую из компонент добавочного момента первого порядка не нужно.

$$\begin{aligned}
M_{\beta'\beta'}^{d(2)} &= - \sum_i \left(c_{i\beta'} c_{i\beta'} \frac{w_i}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \right) \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} \left(\sum_i w_i c_{i\alpha'}^2 c_{i\beta'}^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_i w_i c_{i\beta'}^2 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} c_s^4 (\delta_{\alpha'\beta'} \delta_{\alpha'\beta'} + \delta_{\alpha'\beta'} \delta_{\alpha'\beta'} + \delta_{\beta'\beta'} \delta_{\alpha'\alpha'}) \right. \\
&\quad \left. - c_s^2 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \tag{82} \\
&= - \sum_{\alpha'=1}^d \delta_{\alpha'\beta'} \delta_{\alpha'\beta'} \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \\
&= - \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\beta'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\beta'\beta'}^{n(2)} \\
&= - \frac{\tau \frac{3u_{\beta'}^2}{2c_s^2}}{\left(\tau + \frac{1}{2} \right) \left(\tau \left(1 - \frac{3u_{\beta'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2} \right)} M_{\beta'\beta'}^{n(2)} \\
&= \frac{\tau \frac{3u_{\beta'}^2}{2c_s^2}}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\beta'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} M_{\beta'\beta'}^{1(2)} = 2\rho c_s^2 \tau \frac{3u_{\beta'}^2}{2c_s^2} \frac{\partial u_{\beta'}}{\partial x_{\beta'}} + O(Ma^4).
\end{aligned}$$

При суммировании в (82) рассматриваются диагональные компоненты тензора, а символ Кронекера будет ненулевым, только если индекс суммирования будет равен индексу рассматриваемой компоненты.

$$\begin{aligned}
M_{\beta'\gamma'}^{d(2)} &= - \sum_i \left(c_{i\beta'} c_{i\gamma'} \frac{w_i}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \right) \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} \left(\sum_i w_i c_{i\alpha'}^2 c_{i\beta'} c_{i\gamma'} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_i w_i c_{i\beta'} c_{i\gamma'} \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} c_s^4 (\delta_{\alpha'\beta'} \delta_{\alpha'\gamma'} + \delta_{\alpha'\gamma'} \delta_{\alpha'\beta'} \right. \\
&\quad \left. + \delta_{\beta'\gamma'} \delta_{\alpha'\alpha'}) - 0 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d (0 - 0) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} = 0.
\end{aligned} \tag{83}$$

Поскольку в (83) рассматривается любой недиагональный элемент дополнительного момента, то третье слагаемое в тензоре четвёртого порядка будет нулевым. Индекс суммирования может быть либо не равен ни одной из рассматриваемых компонент, либо равен только одной из них, а следовательно, первое и второе слагаемые тензора четвёртого порядка тоже нулевые.

$$\begin{aligned}
M_{\beta\gamma\delta}^{d(3)} &= - \sum_i \left(c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} \frac{w_i}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{c_{i\alpha'}^2}{c_s^2} - 1 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \right) \\
&= - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} \left(\sum_i w_i c_{i\alpha'}^2 c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_i w_i c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} \quad (84) \\
&= \\
&\quad - \frac{1}{2c_s^2} \sum_{\alpha'=1}^d \left(\frac{1}{c_s^2} 0 - 0 \right) \left(\frac{1}{\tau \left(1 - \frac{3u_{\alpha'}^2}{2c_s^2} \right) + \frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\tau + \frac{1}{2}} \right) M_{\alpha'\alpha'}^{n(2)} = 0.
\end{aligned}$$

В (84) равенство нулю достигается так же, как и в (81), за счёт нечётного порядка.

Теперь можно сделать анализ регуляризованной КГД-системы. Из равенств (80) и (81) следует, что уравнение неразрывности в (48) и (49) не изменится. Из (84) получаем, что момент, вычисляемый в (52) и определяющий тензор вязких напряжений, также не изменится. Согласно (83) диагональные компоненты тензора вязких напряжений из (53) останутся нетронутыми. А вот добавление в (53) слагаемых, вид которых раскрыт в формуле (82), сократит из уравнения Навье-Стокса КГД-системы ошибки, определённые кубом скорости, вследствие чего останутся ошибки порядка пятой степени числа Маха.

Список литературы

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа (кинетическая теория) / Коган М.Н. – издательство «Наука», М., 1967, 440 с. с илл.
2. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. Методы Монте–Карло в механике жидкости и газа. / Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. – ООО «Азбука - 2000», М., 2008 - 300 с. ISBN 978-5-7417-0226-0
3. Timm Kruger, Halim Kusumaatmaja, Aleksandr Kuzmin, Orest Shardt, Goncalo Silva, Erlend Magnus Viggen, The lattice Boltzmann method, Springer International Publishing Switzerland– 2017, 705p. ISBN 978-3-319-44647-9.
4. Alecsander J. Wagner, A practical introduction to the lattice Boltzmann method, North Dakota State University, Fargo – 2008.
5. Мысовских И.П. Интерполяционные кубатурные формулы / Мысовских И.П. – Издательство «Наука», Новосибирск, 1981, 336 с. с илл.
6. Abramowitz M., Stegun I. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables (U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1964).
7. Grad H. Commun. Pure Appl. Math. 2(4), 325 (1949).
8. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Том 2 / Г. Бейтмен, А. Эрдейи – издательство «Наука», М., 1966, 296 с.
9. Рябенский В.С. Введение в вычислительную математику / Рябенский В. С. – Издательство «Физматлит», М., 2008, 288с. ISBN 978-5-9221-0926-0.
10. Mattila K., Philippi P.C., Hegele L.A., Jr. (2017). High-order regularization in lattice-Boltzmann equations. Physics of Fluid, 29(4), 046103.
Doi:10.1063/1.4981277
11. Chtistophe Coreixas, “High-order extension of the recursive regularized lattice Boltzmann method”. Universite de Toulouse, 2018.
12. Dellar P.J. Lattice Boltzmann algorithm without cubic defects in Galilean invariance on standard lattices // Journal of Computational Physics, 259, 270-283 (2014).
13. Weifeng Zhao, Wen-An Yong, A family of single-node second-ordered boundary schemes for the lattice Boltzmann method // Journal of Computational Physics, arXiv: 1712.08288v1 (2017)/
14. Andres Mauricio Aguirre Mesa, Study of Lattice Boltzmann Boundary Conditions for Fluid Structure Interaction. Department of Mechanical Engineering Universidad EAFIT, Medellin, 2014.
15. Четверушкин Б.Н. Кинетически–согласованные схемы в газовой динамике: новая модель вязкого газа, алгоритмы, параллельная реализация, приложения / Четверушкин Б.Н. – М.: Издательство МГУ, 1999, - 232 с., ISBN 5-211-04165-8.