

УДК 532.7:519.213(045)

УРАХУВАННЯ КОЛЕКТИВНОГО РУХУ СЕРЕДОВИЩА У МОДИФІКОВАНОМУ МЕТОДІ РЕШІТЧАСТИХ РІВНЯНЬ БОЛЬЦМАНА

О. М. Глазок, канд. техн. наук, доц.

Національний авіаційний університет

kozalg@ukr.net

Запропоновано спосіб урахування колективного руху частинок у модифікованому математичному методі решітчастих рівнянь Больцмана, який може бути застосовано для чисельного моделювання руху газу або рідини на основі статистичного моделювання обміну речовиною між об'ємами скінченних елементів просторової структури. Розглянуто можливість урахування впливу температури на процес обміну речовиною.

Ключові слова: чисельне моделювання, метод решітчастих рівнянь Больцмана, колективне перенесення, функція розподілу, температура.

A method of accounting of collective motion of particles in the modified mathematical method of lattice Boltzmann equations is offered. This method can be applied for numerical simulation of gas or liquid motion on the basis of statistical modeling of matter exchange between the finite element volumes of a spatial structure. Possibility of account of temperature influence on the process of matter exchange is considered.

Keywords: numerical simulation, Lattice Boltzmann method, collective advection, distribution function, temperature.

Вступ

Завдяки стрімкому зростанню доступних обчислювальних можливостей та значному попиту у багатьох інженерних, біомедичних та інших застосуваннях, обчислювальна гідродинаміка активно розвивається. Нині є актуальним розвиток математичного апарату методів обчислювальної гідродинаміки, які поширюють її можливості та підвищують ефективність обчислень.

Одним із методів сучасної обчислювальної гідродинаміки є метод решітчастих рівнянь Больцмана (МРРБ), оснований на моделюванні рідкого чи газового середовища як сукупності мікроскопічних частинок. Його перевагами є гарна збіжність розв'язків та легкість адаптації рівнянь моделі до просторових структур довільних геометричних форм.

Постановка проблеми

Для методів чисельного моделювання, базованих на макроскопічному підході, можливість моделювання рухомих середовищ достатньою мірою обґрунтована теоретично та реалізована у відповідних програмних компонентах. Водночас, існуючі математичні підходи методу решітчастих рівнянь Больцмана орієнтовані переважно на розв'язання «статичних» задач, де у достатньому обсязі було виконано теоретичні дослідження можливості його застосування для моделювання руху середовища.

Мета статті

З огляду на вищесказане, мета статті полягає в тому, щоб запропонувати математичний апарат, що модифікує метод решітчастих рівнянь Больцмана для застосування під час практичного

розв'язання задач обчислювальної гідродинаміки у задачах, де середовище рухається у макроскопічному сенсі.

Аналіз досліджень і публікацій

Традиційні методи обчислювальної гідродинаміки та метод решітчастих рівнянь Больцмана оснований на принципово різних підходах до опису задачі. Традиційний шлях чисельного розв'язання гідродинамічної задачі полягає у формулюванні рівнянь Нав'є–Стокса та відповідних граничних умов. Після цього відбувається їх дискретизація по вершинам заданої у просторі сітки, чи по скінченним елементам, виділеним нею, і чисельне інтегрування [1; 2].

У методі рівнянь Больцмана формулюються співвідношення, що описують кінетичний аспект руху частинок середовища, що поділяється на мікроскопічні осередки. Для урахування макроскопічного руху середовища традиційно застосовується апроксимація Бхатнагара–Гросса–Крука [3]. Отримані дискретні співвідношення використовуються у ітераційному процесі, що включає два головних, почергово повторюваних кроки розрахунку: крок переміщення, на якому враховується розповсюдження частинок, і крок обміну, що моделює їх взаємодію [4]. Кінцевим результатом обчислення в обох випадках є значення швидкостей та тиску середовища в дискретних точках у просторі і часі.

У працях [5; 6], присвячених моделюванню за методом Больцмана, для моделювання руху середовища застосовано класичні розрахункові моделі. Також слід відзначити, що для моделювання переважно використовуються регулярні просторові структури.

У працях [7; 8] запропоновано модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана для використання в областях з нерегулярними решітками та криволінійними границями, що дозволяє застосування методу для розрахунків у областях довільної геометрії.

Основна частина

1. Урахування температури у функції розподілу. У класичному підході до побудови моделі за методом решітчастих рівнянь Больцмана на квадратній сітці опис кроку перенесення будувється на основі припущення про те, що коефіцієнти перенесення мають постійні значення [9]:

1) коефіцієнт, що відображає відносну кількість частинок, що залишилися в даній клітині

$$k_z = 4/9; \quad (1)$$

2) коефіцієнт переносу «по прямій», тобто до клітини, що має з початковою клітиною спільний відрізок границі

$$k_p = 1/9; \quad (2)$$

3) коефіцієнт перенесення по діагоналі, до клітини, що має з даною спільну кутову точку

$$k_k = 1/36. \quad (3)$$

На основі цього розподілу для стану спокою обчислюється «зміщений» розподіл, у якому рух середовища враховується шляхом зміни цих коефіцієнтів.

Відоме кінетичне визначення температури на основі розподілу Максвелла, як міри середньої кінетичної енергії руху молекул [10]:

$$\langle e \rangle = \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{3}{2} kT, \quad (4)$$

де $\langle e \rangle$ — середня енергія молекули; m — маса молекули; v — швидкість молекули; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К — постійна Больцмана; T — температура; кутові дужки відображають усереднення по ансамблю молекул.

Із співвідношення (4) можна отримати оцінку для середньоквадратичної швидкості молекул:

$$\bar{v}(T) = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \frac{\sqrt{3kT}}{m}. \quad (5)$$

Таким чином, частинки мають розподіл швидкостей, що залежить від температури, а фізичні розміри осередку моделі незмінні, тому можна зробити припущення про те, що коефіцієнти (1—3) мають залежати від температури. Для зворотної сумісності з класичною моделлю будемо вимагати відповідності значень коефіцієнтів при базовому значенні температури $T = T_0$:

$$k_z(T_0) = \frac{4}{9}; \quad k_p(T_0) = \frac{1}{9}; \quad k_k(T_0) = \frac{1}{36}. \quad (6)$$

Частина речовини, що залишає осередок за один крок модельного часу за базової температури $T = T_0$, дорівнює

$$u(T_0) = 4k_p(T_0) + 4k_k(T_0) = 4 \cdot \frac{1}{9} + 4 \cdot \frac{1}{36} = \frac{5}{9}, \quad (7)$$

а залишається в осередку

$$k_z(T_0) = 1 - u(T_0) = 1 - \frac{5}{9} = \frac{4}{9}. \quad (8)$$

Крім цього, залежність, що вводиться, має відповідати двом вимогам, що впливають з виразу (5):

1) при $T = 0^\circ \text{K}$ уся речовина має залишитися в осередку — частинки знаходяться у спокої, тобто

$$k_z(0) = 1; \quad (9)$$

2) при $T \rightarrow \infty$ швидкості частинок також зростають і прагнуть до нескінченності, тому при $T \rightarrow \infty$ практично вся речовина буде залишати осередок за один крок модельного часу:

$$k_z(T) \rightarrow 0,$$

$$u(T) = 4 \cdot k_p(T) + 4 \cdot k_k(T) \rightarrow 1. \quad (10)$$

Для визначення загального вигляду залежності коефіцієнтів витрати від температури введемо функцію $f(T)$, таку, що $f(T_0) = 1$ і виконуються співвідношення

$$k_p(T) = \frac{1}{9} f(T); \quad k_k(T) = \frac{1}{36} f(T). \quad (11)$$

Частина речовини, що залишає осередок за один крок модельного часу при довільній температурі T , дорівнює

$$u(T) = 4k_p(T) + 4k_k(T) = 4 \frac{1}{9} f(T) + 4 \frac{1}{36} f(T) = \frac{5}{9} f(T). \quad (12)$$

Частина речовини, що залишається в осередку за один крок модельного часу за довільної температури T , дорівнює

$$k_z(T) = 1 - u(T) = 1 - \frac{5}{9} f(T). \quad (13)$$

Отже, функція $f(T)$ повинна мати такі властивості:

1) $f(T_0) = 1$, у цьому випадку співвідношення (11), (12), (13) перетворюються у співвідношення (6), (7), (8) відповідно, які описують частковий випадок розподілу речовини за базової температури.

2) $f(0) = 0$, у цьому випадку співвідношення (13) набуває вигляду $k_z(T) = 1$ — частковий випадок для нульової температури.

$$3) \lim_{T \rightarrow \infty} f(T) = \frac{9}{5}, \quad (14)$$

тоді $\lim_{T \rightarrow \infty} k_z(T) = 0$, $\lim_{T \rightarrow \infty} u(T) = \frac{5}{9} f(T) = 1$;

Як перше наближення візьмемо функцію $f(T)$ такого вигляду:

$$f(x) = \frac{x}{T_0} \text{ якщо } x \in [0..T_0];$$

$$f(x) = \frac{9}{5} - \frac{4 T_0}{5 x} \text{ якщо } x \in [T_0..+\infty). \quad (15)$$

При такому визначенні вимоги співвідношень (6)–(14) виконано. Функція (15) має лам другої похідної в точці $x = T_0$, однак це не вплине на результати моделювання, оскільки модель LBM не використовує безпосередньо значення похідних.

2. Визначення загальної температури і колективної швидкості після релаксації. З погляду кінетичної теорії газів, середня енергія всіх частинок, що знаходилися в осередку до виконання кроку перенесення описується виразом (4). Якщо до виконання кроку в осередку за температури T_0 знаходилося N частинок, то їх загальна енергія може бути оцінена виразом

$$E(T_{(0)}) = N \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = N \frac{m}{2} \langle (v_{(0)})^2 \rangle = N \frac{3}{2} kT_{(0)}.$$

З емпіричних міркувань зрозуміло, що переміщуються переважно більш швидкісні частинки, тобто середня енергія та середня швидкість частинок, що покидають осередок, вища, ніж середня енергія тих частинок, що залишаються. Оцінити відмінність середніх енергій різних фракцій частинок можна виходячи з геометричних міркувань. Частинки, які переміщуються в сусідні клітини, мають додаткову кінетичну енергію колективного руху із швидкістю $\frac{\Delta l}{\Delta t}$ для «прямих» напрямків руху і $\frac{\Delta l}{\Delta t} \sqrt{2}$ для «діагональних» напрямків руху, де Δl — геометричний розмір клітини; Δt — тривалість кроку в часі.

Втрати енергії, пов'язані з втратою більш енергійної фракції частинок, компенсуються надходженням частинок із сусідніх клітин, які, у свою чергу, також мають середню енергію більшу загальної. Чисельна оцінка показує, що при температурах, близьких до кімнатної, найбільш імовірна швидкість частинок має порядок швид-

кості звуку, тому в задачах дозвукового руху середовища можна у першому наближенні знехтувати зміною температури, пов'язаною з дозвуковим колективним рухом.

Якщо \mathbf{v}_i — i -й вектор швидкості (для решітки D2Q9 $i = 0..8$), а n_i — кількість частинок однакової маси m , що надійшли в осередок з такою швидкістю, то сумарний імпульс частинок дорівнює:

з мікроскопічного погляду —

$$\mathbf{P} = \sum_i (n_i \cdot m \mathbf{v}_i), \quad (16)$$

з макроскопічного —

$$\mathbf{P} = M \mathbf{V}, \quad (17)$$

де \mathbf{P} — колективний імпульс; $M = nm$ — загальна маса частинок в осередку; \mathbf{V} — колективна швидкість.

З виразів (16) та (17) отримаємо вираз для колективної швидкості після релаксації:

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \frac{\mathbf{P}}{M} = \frac{\sum_i (n_i \cdot m \mathbf{v}_i)}{\sum_i (n_i \cdot m)} = \frac{m \sum_i (n_i \cdot \mathbf{v}_i)}{m \sum_i (n_i)} = \\ &= \frac{\sum_i (n_i \cdot \mathbf{v}_i)}{\sum_i (n_i)}. \end{aligned}$$

У процесі чисельного моделювання необхідно знаходити компоненти вектора \mathbf{V} . Зокрема, для двовимірного випадку:

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= (V_1; V_2); \quad \mathbf{v}_i = (v_{i1}; v_{i2}); \\ V_1 &= \frac{\sum_i (n_i \cdot v_{i1})}{\sum_i n_i}; \quad V_2 = \frac{\sum_i (n_i \cdot v_{i2})}{\sum_i n_i}. \end{aligned}$$

3. Корекція розподілу за напрямками після релаксації. Знайдену колективну швидкість необхідно врахувати на наступному кроці моделювання під час моделювання етапу переміщення. Класичним підходом є модифікація коефіцієнтів розподілу речовини. Для кожного з дозволених напрямків руху коефіцієнти k_p та k_k змінюються за певним законом, залежно від вектора колективної швидкості. При цьому для кожної пари коефіцієнтів, що відповідають протилежним векторам дозволених швидкостей руху, від одного з них віднімається певна величина, що залежить, зокрема, від взаємного розташування направляючого вектору даного напрямку руху та напрямку вектору колективної швидкості, а до іншого з цієї пари векторів така ж величина додається.

Це означає, що початковий потік частинок, підрахований для даного напрямку для випадку осередку з нульовою колективною швидкістю, після внесення спотворення може збільшитися максимум удвічі, а зменшитися мінімум до нуля. Інакше кажучи, величина множника, що модифікує вектори, може змінюватися від 0 до 2. За нульової швидкості модифікувальний множник дорівнює одиниці.

У граничному випадку нескінченної колективної швидкості, вектор якої спрямований у той же бік, що і направляючий вектор даного напрямку, модифікувальний множник дорівнює 2; у протилежному граничному випадку — 0.

Для знаходження модифікувального множника необхідно знайти скалярний добуток вектора швидкості на направляючий вектор одиничної довжини даного дозволеного напрямку. На його основі визначимо таку функцію $y(\mathbf{V})$:

$$x_{vi} = \frac{(\mathbf{V} \cdot \mathbf{e}_i)}{|\mathbf{V}|};$$

при $x_{vi} = 0$ $y(x_{vi}) = y(0) = 1$;

при $x_{vi} > 0$

$$y(x_{vi}) = 2 - \frac{1}{(x_{vi} + 1)} = \frac{2(x_{vi} + 1) - 1}{(x_{vi} + 1)} = \frac{1 + 2x_{vi}}{1 + x_{vi}}.$$

При $x_{vi} < 0$

$$y(x_{vi}) = 2 - y(-x_{vi}) = 2 - \left(2 - \frac{1}{(-x_{vi} + 1)} \right) = \frac{1}{1 + |x_{vi}|}.$$

Цю функцію можна використати для визначення залежності коефіцієнтів розповсюдження від колективної швидкості.

Врахування колективного руху шляхом такої зміни коефіцієнтів розподілу речовини використовується у класичній моделі руху середовища на основі решітчастих рівнянь та клітинних автоматів [3; 9]. Цей спосіб відповідає принципу побудови моделі, але недостатньо відображає фізичну сутність модельованого процесу. Так, наприклад, чи можна вважати вірним припущення, що частка частинок, які залишаються у осередку решітки D2Q9 по закінченні кроку модельного часу, не залежить від колективної швидкості середовища? З міркувань кінетичної теорії це не так, оскільки за наявності колективного руху має місце зміщений розподіл частинок за швидкостями, і площа його центральної частини, що потрапляє у вікно фільтрації, очевидно, залежить від зміщення.

Ця площа максимальна, коли колективна швидкість середовища дорівнює нулю, і зменшується при зростанні модуля швидкості. За великих швидкостях ця частка має наближатися до нуля. Розгляд моделі також показує, що максимальний колективний імпульс частинок, який може бути в ній задано шляхом модифікації коефіцієнтів розповсюдження, обмежений: для «прямих» напрямків — величиною $\frac{2}{9} M \frac{l}{\tau}$, для «діагональних» напрямків — величиною $\frac{1}{9\sqrt{2}} M \frac{l}{\tau}$, де M — загальна маса речовини в осередку; l — крок решітки; τ — тривалість кроку модельного часу.

Навіть якщо піддати модифікації коефіцієнт k_z , це не приведе до принципового розв'язання проблеми; обмеження на імпульс зміниться лише чисельно. У будь-якому разі максимальний імпульс, який можна змоделювати за рахунок модифікації коефіцієнтів, обмежений величиною $M \frac{l}{\tau} \sqrt{2}$. Подолати ці недоліки моделі можна одним з двох способів.

Перший — полягає в тому, щоб ввести в алгоритм моделювання два додаткових етапів: моделювання колективного руху речовини та релаксації. На етапі моделювання колективного руху речовини весь осередок переміщується у напрямку вектора колективної швидкості на відстань, пропорційну добутку модуля цього вектора і постійній часу моделювання (тривалості модельного кроку) τ . Після того, як група частинок зайняла нове положення, вони розподіляються по осередках, на території яких вони опинилися, при цьому запам'ятовується їх розподіл за швидкостями. Така операція виконується над кожним осередком решітки. Таким чином, на цьому кроці у кожному осередку відбувається втрата речовини, за рахунок того, що деяка кількість частинок переходить в інші осередки, і в той же час відбувається надходження речовини з деяких сусідніх осередків. Після того, як виконано крок моделювання колективного руху, треба виконати додатковий крок релаксації, під час якого виконати облік речовини, що опинилася на території осередку після моделювання колективного руху, та визначити інтегральний статистичний розподіл за швидкостями для кожного осередку.

Водночас колективний рух може бути врахований і у функціях розподілу на етапі класичного «статичного» перенесення. При цьому пропонується ввести у модель параметр, який пов'яже ступінь урахування колективного руху на цих двох етапах.

Альтернативна можливість врахування колективного руху — використовувати решітку більш високого порядку, тобто таку, у якій переміщення речовини протягом одного кроку моделювання дозволено не лише в сусідній осередок, а й у більш віддалені, і відповідно модифікувати коефіцієнти розподілу залежно від колективної швидкості.

Висновки

У статті запропоновано спосіб врахування у модифікованому математичному методі решітчастих рівнянь Больцмана колективного руху частинок і впливу температури на процес переміщення речовини.

Існуючі моделі враховують колективний рух середовища за рахунок модифікації коефіцієнтів розподілу на етапі перенесення, однак такий підхід має суттєві обмеження, оскільки він недостатньо відповідає фізичній сутності модельованого процесу. Запропоновано враховувати вплив колективного руху шляхом уведення в алгоритм моделювання двох додаткових етапів — колективного переміщення та релаксації, з уведенням параметру, який регулюватиме ступінь врахування колективного руху на кожному з цих етапів, або за рахунок використання сіток вищих порядків з відповідною модифікацією коефіцієнтів перенесення.

Якщо характерний розмір сіточної структури перевищує характерний розмір, пов'язаний з колективним рухом середовища, то обидві моделі можуть дати однаковий результат.

Необхідним напрямком подальших досліджень є формулювання умов, що описують в термінах решітки колективний рух рідини біля твердої границі, у випадку, коли скалярний добуток вектору швидкості колективного руху та нормалі границі ненульовий.

ЛІТЕРАТУРА

1. Chung T. J. Computational Fluid Dynamics. 2nd edition / T. J. Chung. — Cambridge University Press, 2014. — 1058 p.
2. Moukalled F. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab / F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish. — Springer, 2015. — 791 p.
3. Succi S. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond / Sauro Succi. — Oxford University Press, 2001. — 304 p.
4. Narvaez A. Evaluation of pressure boundary conditions for permeability calculations using the lattice-Boltzmann method / Ariel Narvaez Salazar, Jens Harting // Advances in Applied Mathematics and Mechanics. — 2010. — Vol. 2, No. 5. — P. 685–700.
5. Perumal D. Application of Lattice Boltzmann Method to Fluid Flows in Microgeometries / D. Arumuga Perumal, Gundaravarapu V.S. Kumar and Anoop K. Dass // CFD Letters. — 2010. — Vol. 2(2). — P. 75–84.
6. De Izarra L. High-order lattice Boltzmann models for gas flow for a wide range of Knudsen numbers / Leonard de Izarra, Jean-Louis Rouet, Boujema Izrar // Phys. Rev. E. — 2011. — Vol. 84, No. 6. — P. 1–7.
7. Глазок О. М. Модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана з нерегулярною сіткою / О. М. Глазок // Наукоємні технології. — 2014. — № 4 (24). — С. 419–422.
8. Глазок О. М. Модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана для областей з криволінійними границями / О. М. Глазок // Наукоємні технології. — 2015. — № 1 (25). — С. 43–46.
9. Mohamad A. A. Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes / A. A. Mohamad. — Springer, 2011. — 178 p.
10. Ландау Л. Д. Статистическая физика. Ч. 1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М. : Физматлит, 2010. — 616 с.

Стаття надійшла до редакції 27.11.2014