УДК 532.7: 517.962.8(045)

МОДИФІКОВАНИЙ МЕТОД РЕШІТЧАСТИХ РІВНЯНЬ БОЛЬЦМАНА З НЕРЕГУЛЯРНОЮ РЕШІТКОЮ

О. М. Глазок, канд. техн. наук, доц.

kozalg@ukr.net

Запропоновано модифікований математичний метод решітчастих рівнянь Больцмана, який може бути застосовано для чисельного моделювання руху рідини на основі скінченних елементів нерегулярної просторової структури. Наведено підхід до обчислення ймовірностей переміщення частинок між осередками нерегулярної сітки на основі інтегрування функції розподілу з відповідною віконною функцією.

Ключові слова: чисельне моделювання, метод решітчастих рівнянь Больцмана, нерегулярна решітка.

A modified mathematical method of lattice Boltzmann equations is offered. The offered method may be used for numerical modeling of fluid motion, based on finite elements of irregular space structure. An approach to calculation of probabilities of particles transfer between the cells of an irregular mesh based on integration of a distribution function with the corresponding window function is offered.

Keywords: numerical simulation, Lattice Boltzmann method, irregular mesh.

Вступ

У практиці проектних організацій широко використовуються пакети прикладних програм, що виконують гідродинамічний розрахунок будь-яких інженерних систем. Програмне забезпечення цього класу нині активно розвивається.

У сучасних програмних пакетах професійного рівня, призначених для математичного моделювання ламінарних і турбулентних течій, реалізовані математичні методи, що базуються на припущенні про прийнятність рівнянь Нав'є–Стокса для інтерпретації течій і прогнозу їх миттєвих характеристик. Розв'язання гідродинамічних задач зводиться при цьому до чисельного розв'язання відповідних систем диференціальних рівнянь. Рівняння Нав'є-Стокса (за їх фізичним змістом) є рівняннями збереження макроскопічних показників виділених об'ємів рідини, таких як маса або густина. Додатково записуються рівняння збереження, що описують момент імпульсу, кінетичну енергію тощо. Для турбулентних течій розглядаються статистичні властивості ансамблю течій при однакових з макроскопічного погляду зовнішніх умовах.

Метод решітчастих рівнянь Больцмана (МРРБ) є порівняно новим методом імітаційного моделювання руху рідини. Він оснований на моделюванні рідкого середовища як сукупності мікроскопічних частинок.

Постановка проблеми

Потреби предметної галузі, до задач якої застосовують методи обчислювальної динаміки рідин, передбачають розв'язання задач для площинних та просторових областей складних геометричних форм. Чисельні методи, на яких базуються запис та подальше розв'язання відповідних систем диференціальних рівнянь, формулюються в декартових системах координат та відповідно на прямокутних обчислювальних сітках регулярної структури. Застосування таких методів на нерегулярних структурах потребує спеціальної адаптації математичного апарату.

Для методів чисельного моделювання, що ґрунтуються на рівняннях Нав'є–Стокса, можливість використання нерегулярних просторових структур достатньою мірою обґрунтована теоретично та реалізована у відповідних програмних компонентах.

Так, у розповсюджених програмних пакетах (ANSYS, Flowvision та ін.) на стадії препроцесінгу генерується обчислювальна решітка, структура якої узгоджена з геометрією досліджуваних об'єктів. У подальшому ця решітка використовується для розв'язання системи диференціальних рівнянь Нав'є–Стокса руху рідини.

Водночас, для методу решітчастих рівнянь Больцмана не було виконано у достатньому обсязі теоретичних досліджень можливості використання нерегулярних обчислювальних структур, і програмні реалізації цього підходу не набули поширення.

Мета статті дослідити модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана, придатний до застосування під час практичного розв'язання задач обчислювальної гідродинаміки на нерегулярних обчислювальних структурах (скінченних елементах непрямокутної форми).

Аналіз досліджень і публікацій

Традиційні методи обчислювальної гідродинаміки та метод решітчастих рівнянь Больцмана основані на принципово різних підходах до опису задачі. Традиційний шлях чисельного розв'язання гідродинамічної задачі полягає у формулюванні рівнянь Нав'є–Стокса та відповідних

© Глазок 0. М., 2014

граничних умов [1]. Ці співвідношення визначають макроскопічні параметри — тиск, щільність і швидкість рідини в кожній точці простору як неперервні функції в кожен момент часу залежно від початкових і граничних умов і параметрів середовища. Після цього відбувається їх дискретизація по заданій обчислювальній сітці і чисельне інтегрування. У методі рівнянь Больцмана формулюються співвідношення, що описують кінетичний аспект руху частинок середовища. Ці співвідношення базуються на рівнянні Больцмана, яке описує з мікроскопічного погляду зміни щільності розподілу частинок за швидкостями в кожній точці (області) простору з часом. Суттєво, що ці співвідношення формулюються одразу в дискретній формі, узгодженій із заданою обчислювальною сіткою. Таку саму форму отримують і граничні умови [2]. Отримані дискретні співвідношення використовуються у ітераційному процесі, що включає щонайменше два почергово повторюваних кроки розрахунку: крок, на якому враховується розповсюдження частинок, і крок, що моделює їх взаємодію [3].

Кінцевим результатом обчислення в обох випадках є значення швидкостей та тиску середовища в дискретних точках у просторі і часі.

Перевагами класичних реалізацій методу решітчастих рівнянь Больцмана є можливість легкого врахування будь-якої моделі мікроскопічних взаємодій у рідині або газі [4], а також простота розпаралелювання обчислень, оскільки вимагає виконання однотипних операцій на всіх комірках заданої обчислювальної решітки [5].

У МРРБ простір задачі дискретизується шляхом поділу на скінченні об’єми і подальше абстрагування — подання кожного скінченного об’єму вузлом обчислювальної решітки. Частинки середовища, що належать до даного скінченного об’єму, приписуються до відповідного вузла. Таким чином, у кожний момент розрахункового часу для кожного вузла відома кількість частинок та їх розподіл за швидкостями. Такий опис простору задачі природним чином приводить до дискретизації швидкостей частинок. Сутність швидкості як явища полягає у переміщенні об’єкта з однієї точки простору в іншу. Згідно з прийнятим у МРРБ описам задачі, ці точки подаються дискретним набором вузлів. Тому у МРРБ розглядається лише дискретний набір швидкостей частинок.

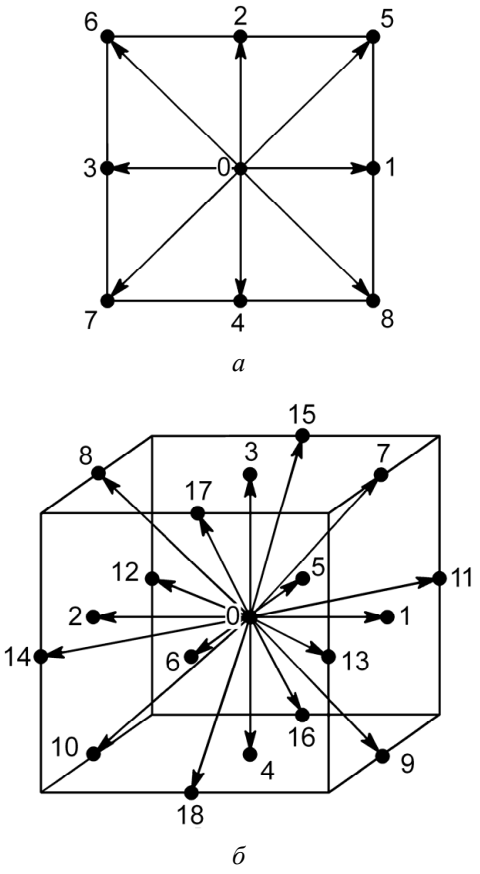
Дозволеними вважаються швидкості, які забезпечують переміщення частинок з одного вузла решітки в інший (найчастіше — сусідній) за час Δt, що відповідає одному кроку обчислення. В результаті набір дозволених векторів швидкості руху частинок збігається з набором дозволених векторів (напрямків) переміщення.

Цей набір у МРРБ називають решіткою (*lattice*). Він обирається наперед і вважається однаковим для кожного просторового вузла. Це узгоджується з визначенням решітки як сутності, за допомогою якої шляхом паралельних перенесень можна отримати всю просторову решітку.

Структура решітки позначається абревіатурою *DnQm*, де *n* — розмірність простору; *m* — кількість різних векторів у решітці [6].

Будь-яка решітка повинна містити нульовий вектор, спрямований з вузла до нього самого — цей вектор описує частинки, які під час переходу до наступного кроку розрахункового часу залишаються у даному вузлі.

Часто використовуються решітки D2Q9 (рис. 1, *а*), D3Q15, D3Q19 (рис. 1, *б*).



а

б

Рис. 1. Решітки D2Q9 (*а*) і D3Q19 (*б*)

Решітки, зображені на рис. 1, ураховують лише можливості переміщення частинки за один такт розрахункового часу в один із сусідніх вузлів.

З метою підвищення точності апроксимації також застосовуються обчислювальні схеми більш високих порядків, набори дозволених швидкостей частинок, які враховують можливість переміщення частинок за один крок розрахунку не лише в осередки, найближчі до даного, а й у більш віддалені, урахування післядії на наступних кроках обчислення, тощо [7; 8].

Основна частина

Вибір решітки МРРБ виконується на основі врахування таких чинників [9; 10]:

1) точність моделювання — чим більша кількість різних векторів, що присутні в решітці, тим точніше модель відображатиме реальний рух середовища;

2) оцінка обчислювальних витрат; так, наприклад, розрахунок на решітці D2Q5 буде швидший за розрахунок на решітці D2Q9;

3) вимоги щодо симетрії решітки.

Вимоги повторюваності та симетрії решітки є перевагами з погляду застосування МРРБ на регулярній сітці, оскільки дозволяють звести обчислення до виконання над усіма вузлами однотипних арифметичних операцій з одними і тими самими коефіцієнтами. Водночас, ці вимоги є перепонами для переходу до нерегулярних просторових структур. У випадку нерегулярної решітки дискретний набір дозволених швидкостей визначається геометрією скінченних об'ємів, що оточують поточний скінченний об'єм; однак, через неперіодичність структури, набір дозволених швидкостей виявиться унікальним для кожного вузла.

Для побудови модифікованого МРРБ використаємо функцію розподілу щільності ймовірності частинок за координатами і за швидкостями $f(\mathbf{r},\boldsymbol{v},t)$, де $\mathbf{r}=(x,y,z)$ — радіус-вектор, що описує просторове розташування точки; $\boldsymbol{v}=\left(v_x,v_y,v_z\right)$ — вектор швидкості.

Величина

$$f(\mathbf{r},\boldsymbol{v},t)d^3\mathbf{r}d^3\boldsymbol{v} = \\ = f(x,y,z,v_x,v_y,v_z,t)\,dx\,dy\,dz\,dv_x\,dv_y\,dv_z$$

описує кількість частинок, що в момент часу t знаходяться у просторовому кубі з координатами від x до $x+dx$, від y до $y+dy$, від z до $z+dz$, і з швидкостями в діапазоні від v_x до v_x+dv_x, від v_y до v_y+dv_y, від v_z до v_z+dv_z.

Ця функція нормується на масу газу в досліджуваній системі, тому макроскопічна щільність газу в кожній точці визначається як сума (інтеграл) від щільності ймовірності в даній точці по всіх можливих значеннях швидкості

$$\rho=\int f d\boldsymbol{v}\,.$$

Аналогічно макроскопічну швидкість можна визначити через співвідношення

$$\rho\,\mathbf{u}=\int f\boldsymbol{v}d\boldsymbol{v}\,.$$

Цикл розрахунку за модифікованим МРРБ починається з кроку перенесення, який виконується на основі даних про поточну макроскопічну щільність, поточну макроскопічну швидкість та поточну функцію розподілу в кожному вузлі, що представляє скінченний елемент.

При цьому використовуються наближення методу, що полягають у таких припущеннях:

1) при фіксованому t величина макроскопічної швидкості $\mathbf{u}$ є постійною в усьому обсязі кожного виділеного скінченного елемента, тобто відсутня залежність $\mathbf{u}(\mathbf{r})$;

2) при фіксованих $\mathbf{u},\boldsymbol{v},t$ функція розподілу f є постійною в усьому обсязі кожного виділеного скінченного елемента, тобто відсутня залежність $f(\mathbf{r})$.

Ці наближення з погляду їх формулювань повторюють аналогічні наближення для стандартного МРРБ. Фактично макроскопічна швидкість $\mathbf{u}$ і функція розподілу f є неперервними, залежними від $\mathbf{r}$ функціями, тому обидва ці припущення можуть бути виконані лише з деякою точністю. Ця точність залежить від геометричних параметрів обраних скінченних елементів, а також параметрів шуканих макроскопічних функцій.

Для випадку нерегулярної обчислювальної решітки доведеться перевіряти умови досягнення точності окремо для кожного скінченного елемент, який може мати власні, унікальні геометричні параметри. При цьому може виникнути необхідність у корекції розмірів елементів (зокрема, необхідність поділу деяких скінченних об'ємів на частини, якщо задана точність не досягнута).

Для виконання кроку перенесення необхідно використати дані про множину дозволених напрямків руху та частки переміщуваних мас речовини. Для нерегулярної решітки ці дані будуть унікальними для кожного виділеного скінченного елемента. Процес їх отримання може бути проведений один раз перед початком моделювання і повторений у випадку проведення корекції структури обчислювальної решітки. Алгоритм вибору множини дозволених напрямків руху задається дослідником. Для визначення часток переміщуваних мас необхідно аналітично або чисельним методом розрахувати вирази

$$\omega_{ik}=\int\limits_{V_i}\int\limits_{V_k}\int\limits_{\mathrm{v}} f\left(\mathbf{r}_i,\boldsymbol{v},t\right)W_{ik}\left(\boldsymbol{v}\right)d\boldsymbol{v}dV_k dV_i\,,$$

що подають імовірності переміщення частинок протягом одного такту розрахункового часу з об'єму i-го до об'єму k-го скінченного елемента.

Тут $W_{ik}\left(\boldsymbol{v}\right)$ — відповідна віконна функція, яка відображає геометричні умови щодо переміщень, які вводяться у розгляд. Після цього виконується другий крок, на якому необхідно з урахуванням виконаних переміщень перерахувати маси,

швидкості, рівноважні функції розподілу для кожного скінченного елемента.

Нарешті, на третьому кроці необхідно «зіштовхнути» частинки, що прибули в даний вузол, тобто перерозподілити частинки по напрямах. При цьому зміниться функція розподілу:

$$f(\mathbf{r}+\upsilon dt, \upsilon+\frac{\mathrm{F}}{m}dt, t+dt)\, d^3\mathbf{r}\, d^3\upsilon - \\ - f(\mathbf{r},\upsilon,t) d^3\mathbf{r} d^3\upsilon = dN_{coll},$$

де **F** — зовнішня сила; m — маса молекули; dN_{coll} — зміна кількості частинок у пучку за рахунок зіткнень.

Величина $dN_{coll} = dN_{coll}(\mathbf{r},\upsilon,t)$ може бути описана формулою Батнагара–Гросса–Крука [4]:

$$dN_{coll} = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{v} dt, \qquad (1)$$

де $f^{eq} = f^{eq}(\rho,\mathbf{v},\mathbf{u})$ — рівноважна функція розподілу, що залежить від макроскопічної щільності і швидкості в даній точці; оскільки ці величини є функціями координати і часу, то рівноважну функцію розподілу можна подати як залежність $f^{eq} = f^{eq}(\mathbf{r},\mathbf{v},t)$; τ — стала часу релаксації, величина якої пов'язана із в'язкістю середовища.

Формула (1) подає відображення неперервного закону вирівнювання з експоненційним загасанням у дискретному розрахунковому часі.

Рівноважна функція розподілу визначається на основі модифікованого розподілу Максвелла:

$$f^{eq} = \left(\frac{\rho}{2\pi RT}\right)^{D/2} \exp\left(-\frac{(\upsilon-\mathbf{u})^2}{2RT}\right), \qquad (2)$$

де R — універсальна газова стала; T — температура; D — розмірність простору; υ — вектор швидкості, щільність імовірності для якого ми знаходимо; **u** — вектор макроскопічної швидкості.

Різниця $\upsilon - \mathbf{u}$, введена у формулу (2), дозволяє перейти до системи координат, пов'язаної з макроскопічним рухом середовища, і записати розподіл Максвелла в ній. З метою урахування впливу зовнішніх сил замість (2) може бути використано розподіл Максвелла–Больцмана.

Висновки

У статті було запропоновано модифікований математичний метод решітчастих рівнянь Больцмана, який дозволяє виконувати чисельне моделювання руху рідини або газу на основі опису явищ на мікрорівні, з використанням геометрично нерегулярних обчислювальних структур (скінченних елементів). Наведено підхід до обчислення ймовірностей переміщення частинок між осередками нерегулярної решітки на основі інтегрування функції розподілу з відповідною віконною функцією.

Можливими напрямами подальших досліджень є вивчення зв'язку між геометричними параметрами скінченних елементів та точністю отриманих результатів; розробка ефективних (з погляду обсягу обчислень) алгоритмів перевірки виконання умов на точність та корекції опису задачі у випадку їх невиконання; дослідження впливу підвищення порядку опису задачі на точність отриманих результатів.

ЛІТЕРАТУРА

1. *Tu J.* Computational Fluid Dynamics, Second Edition: A Practical Approach //J. Tu, G. H. Yeoh, C. Liu. — Butterworth-Heinemann, 2012. — 456 p.

2. *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.

3. *Succi S.* The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond /S. Succi. — Oxford University Press, 2001. — 304 p.

4. *Sukop M. C.* Lattice Boltzmann modeling: an introduction for geoscientists and engineers /M. C. Sukop, D. T. Thorne. — Berlin : Springer, 2006. — 172 p.

5. *Bikulov D. A.* Realization of the lattice Boltzmann equation method for calculation on a GPU-cluster / D. A. Bikulov, D. S. Senin, D. S. Dyomin, A. V. Dmitriev, N. E. Grachev //Calculation methods and programming. – 2012. — Vol. 13. — P. 13–19.

6. *Chikatamarla S.* Lattices for the lattice Boltzmann method / S. Chikatamarla, I. V. Karlin. — Phys. Rev. E. — April 2009. — No. 79 (4), 46701. — 18 p.

7. *Dubois F.* Towards higher order lattice Boltzmann schemes /François Dubois and Pierre Lallemand //J. Stat. Mech. — June 2009. — Issue 06. — P06006. — 47 p.

8. *De Izarra L.* High-order lattice Boltzmann models for gas flow for a wide range of Knudsen numbers / L. de Izarra, J.-L. Rouet, Boujema Izrar // Phys. Rev. E. — 2011. — Vol. 84, No. 6. — Pp. 1–7.

9. *Kutay M. E.* Laboratory validation of lattice Boltzmann method for modeling pore-scale flow in granular materials /M. E. Kutay, A. H. Aydilek, E. Masad. // Computers and Geotechnics. — 2006. — No. 33. — P. 381–395.

10. *Rubinstein R.* Theory of the lattice Boltzmann equation: Symmetry properties of discrete velocity sets / R. Rubinstein, L.-S. Luo // Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics). — 2008. — Vol. 77:036709.

Стаття надійшла до редакції 02.09.2014.