

МОДИФІКОВАНИЙ МЕТОД РЕШІТЧАСТИХ РІВНЯНЬ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ ОБЛАСТЕЙ З КРИВОЛІНІЙНИМИ ГРАНИЦЯМИ

Глазок О.М., Національний авіаційний університет.

kozalg@ukr.net

Запропоновано модифікований математичний метод решітчастих рівнянь Больцмана, який може бути застосовано для чисельного моделювання руху рідини на основі скінченних елементів просторової структури поблизу криволінійних границь розрахункової області. На прикладі розв'язання двовимірної задачі розглянуто алгоритм знаходження функції розподілу імовірностей та результуючої сили, що діє на границю.

Ключові слова: чисельне моделювання, метод решітчастих рівнянь Больцмана, криволінійна границя, функція розподілу.

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 space structure elements in the neighbourhood of a curvilinear boundary. An algorithm of calculation of probabilities distribution function and of the resultant force acting on the boundary is considered on an example of a two-dimensional problem solving.

Keywords: numerical simulation, Lattice Boltzmann method, curvilinear boundary, distribution function.

Вступ

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

Постановка проблеми

Одним з методів сучасної обчислювальної гідродинаміки є метод решітчастих рівнянь Больцмана (МРРБ), оснований на моделюванні рідкого чи газового середовища як сукупності мікроскопічних частинок. Для методів чисельного моделювання, базованих на макроскопічному підході, можливість використання нерегулярних просторових структур у достатній мірі обґрунтована теоретично та реалізована у відповідних програмних компонентах. В той же час, 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.

Ціль статті

Ціль статті полягає в тому, щоб запропонувати модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана, придатний до застосування при практичному розв'язанні задач обчислювальної гідродинаміки в областях з криволінійними границями.

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 [1]. 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 гранично малій області простору з часом. Ці співвідношення формулюються одразу у дискретній формі, узгодженій із заданою обчислювальною сіткою. Таку ж форму отримують і граничні умови [2]. Отримані дискретні співвідношення використовуються у ітераційному процесі, що включає щонайменше два почергово повторюваних кроки розрахунку: крок переміщення, на якому враховується розповсюдження частинок, і крок обміну, що моделює їх взаємодію [3]. Кінцевим результатом обчислення в обох випадках є значення швидкостей та тиску середовища в дискретних точках в просторі і часі.

У опублікованих роботах спостерігається тенденція до використання регулярних просторових сіток [4-7]. Регулярна сітка, інваріантна щодо перетворення трансляції, дозволяє розглядати набори швидкостей, що мають властивості симетрії та трансляційної інваріантності [8], і, відповідно, задати і рівняння Больцмана у такій же інваріантній формі, що суттєво спрощує формальний опис задачі та алгоритми подальшої

комп'ютерної обробки даних. Платнею за цю економію є невідповідність введених обчислювальних структур до геометрії області задачі. У роботі [9] запропоновано модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана на основі нерегулярної сітки, що може бути адаптована до довільної геометрії задачі.

Основна частина

За рахунок пружного відбиття частинок від твердої границі їх вектори швидкості та імпульсу змінюються. Тому для використання МРРБ у приграничних областях до нього слід внести дві модифікації. По-перше, слід побудувати систему скінченних елементів, узгоджену з геометрією границі. По-друге, врахувати зміни функцій розподілу швидкостей для кроків МРРБ, спричинені наявністю границі.

Пропонуються два підходи до розрахунку функції розподілу для кроку переміщення, які умовно можна назвати «прямий підхід» і «зворотній підхід».

У першому випадку (рис. 1 – прямий підхід) алгоритм розрахунку наступний:

1. Обираємо початкову комірку, для якої проводиться розрахунок функції розподілу.

2. Будуємо ідеальну цільову сітку – множину цільових скінченних елементів переміщення частинок, побудовану на площині чи у просторі в припущенні, ніби границя відсутня.

3. На основі ідеальної будуємо реальну цільову сітку:

а) елементи ідеальної цільової сітки, що знаходяться у просторі, доступному для переміщення середовищі (не зайнятому границею), залишаємо без змін;

б) для тих елементів цільової сітки, що потрапили у просторову область, недоступну через наявність границі, будуємо відповідні відображені елементи. Функція розподілу частинок для цих елементів відповідає функції розподілу кроку переміщення для ідеальної сітки. Однак у цьому випадку мають місце відмінності форми та просторового розташування елементів, а крім того, в результаті відбиття від границі змінюється і розподіл частинок за напрямками руху.

в) окремо розглядаємо елементи ідеальної цільової сітки, через які безпосередньо проходить границя. Кожен з таких елементів розбивається кривою границі на дві частини - реальну частину, що зберігається у реальній сітці як новий приграничний елемент, та уявну частину, для якої слід будувати відображення.

4. Агрегуємо відповідні частини функції розподілу для відображених елементів до

функцій розподілу клітин реальної сітки, на які накладося відображення елементу ідеальної сітки.

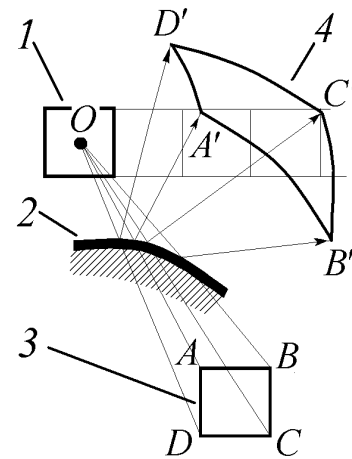


Рис. 1. Ілюстрація прямого методу знаходження функції розподілу.

- 1 – початкова комірка та стартова точка у ній;
- 2 – тверда границя;
- 3 – кінцева комірка ідеальної сітки;
- 4 – відповідна кінцева комірка реальної сітки.

У другому випадку (рис. 2 – зворотній підхід) алгоритм розрахунку наступний:

1. Обираємо початкову комірку, для якої проводиться розрахунок функції розподілу.

2. Будуємо реальну цільову сітку з урахуванням геометрії границі.

3. Для кожного цільового скінченного елемента обираємо опорні точки, враховуючи міркування щодо точності розв'язання задачі;

4. Для кожної з опорних точок знаходимо вектор прямого переміщення; на основі знайдених векторів переміщень інтегруємо функцію розподілу за площею елемента.

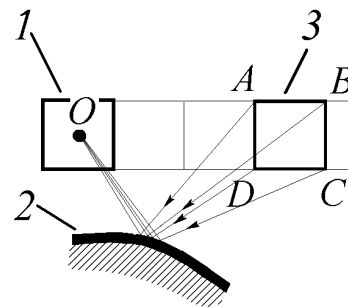


Рис. 2. Ілюстрація зворотнього методу знаходження функції розподілу.

- 1 – початкова комірка та стартова точка у ній;
- 2 – тверда границя;
- 3 – кінцева комірка реальної сітки.

5. Для кожної з опорних точок розв'язуємо задачу про дзеркальне відображення від границі. Визначаємо можливі вектори переміщень з відбиттям. На основі знайдених векторів переміщень інтегруємо додаткову частину функції розподілу за площею елемента.

Однією з величин, що мають практичне значення для проектувальників, є сила, що діє на тверду границю внаслідок зіткнень з нею частинок. Для визначення цієї сили використаємо другий закон Ньютона в імпульсній формі. Нехай до тіла маси m прикладена рівнодіюча сила \vec{F} . Прискорення тіла \vec{a} дорівнює похідній вектора швидкості, тому звичайний запис другого закону Ньютона:

$$m\vec{a} = \vec{F}$$

можна переписати:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}$$

Якщо внести константу m під знак похідної, отримаємо у лівій частині похідну імпульса:

$$\frac{d(m\vec{v})}{dt} = \vec{F}; \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}. \quad (1)$$

Згідно співвідношення (1), на тіло діє результуюча сила, що дорівнює швидкості зміни імпульса тіла.

Похідну імпульса в формулі (1) можна замінити на співвідношення скінченних прирощень величин:

$$\frac{\Delta\vec{p}}{\Delta t} = \vec{F}. \quad (2)$$

В цьому випадку \vec{F} – середня сила, що діє на тіло протягом інтервала часу Δt . Така заміна добре узгоджується з природою методу решітчатих рівнянь Больцмана; природним вибором для величини Δt у (2) буде тривалість пари кроків МРББ (переміщення та обміну). Отже, для знаходження сили реакції слід просумувати векторні величини – зміни імпульсів частинок, що відбиваються від границі протягом кроку МРББ, та розділити на тривалість кроку.

Розглянемо двовимірний приклад розрахунку траєкторій руху частинок, що стикаються з границею. В практиці проектування та виробництва авіаційної техніки традиційним методом задання профілю поверхонь обтікання є табличний метод. Тобто, вхідні дані містять масиви величин

$$x[i], y[i], i = \overline{1..N}. \quad (3)$$

Виконаємо інтерполяцію профіля, тобто для кожного довільного $x = x_0$ визначити відповідні точки таблиці і на їх основі знайти коефіцієнти

інтерполюючого виразу. Для прикладу розглянемо інтерполяцію профілю багаточленом третього ступеня:

$$a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 = y. \quad (4)$$

Для знаходження коефіцієнтів a_3, a_2, a_1, a_0 достатньо обрати 4 найближчих пари координат з таблиці (3).

На рис. 3 подано приклад опису одного з можливих варіантів взаємного розташування границі та траєкторії руху частинки.

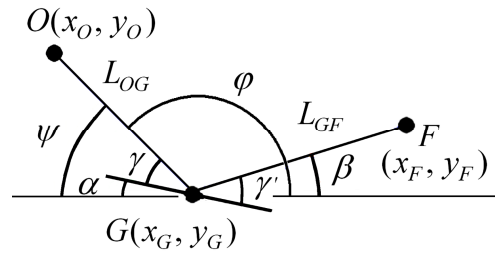


Рис. 3. Приклад опису задачі про переміщення частинки, що відбивається від границі.

Частинка рухається з початкової точки O , відбивається від границі у точці G і завершує рух у точці F . Кутовий коефіцієнт нахилу траєкторії частинки до зіткнення дорівнює

$$k_{OG} = \frac{y_G - y_0}{x_G - x_0}.$$

Для випадку, зображеного на рис. 3,

$$k_{OG} = \operatorname{tg}(\varphi) = -\operatorname{tg}(\psi) < 0.$$

Знаючи координати точки $O(x_0, y_0)$, напрямок польоту частинки (заданий величиною кута ψ) та маючи інтерполяційна побудови для границі, знайдимо координати точки G . Рівняння прямої OG :

$$\begin{aligned} \frac{y - y_0}{x - x_0} &= \frac{y_G - y_0}{x_G - x_0}; \\ y &= y_0 + \frac{y_G - y_0}{x_G - x_0} x - \frac{y_G - y_0}{x_G - x_0} x_0; \\ y &= k_{OG}x + b_{OG}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{де } k_{OG} = \frac{y_G - y_0}{x_G - x_0}, \quad b_{OG} = y_0 - \frac{y_G - y_0}{x_G - x_0} x_0.$$

Тепер необхідно співставити (5) і (4), оскільки координати точки G задовольняють обом цим рівнянням:

$$\begin{aligned} a_3x_G^3 + a_2x_G^2 + a_1x_G + a_0 &= k_{OG}x + b_{OG}; \\ a_3x_G^3 + a_2x_G^2 + (a_1 - k_{OG})x + (a_0 - b_{OG}) &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Для знаходження координат точки G необхідно знайти розв'язок x_G рівняння (6) на

одному з відрізків $x \in [x_i, x_{i+1}]$, використовуючи коефіцієнти рівняння (4) a_3, a_2, a_1, a_0 , що відповідають цьому відрізьку. Після того, як такий розв'язок x_G знайдено, значення y_G можна знайти з рівняння (4) чи (5).

Тепер можна знайти довжину відрізьку OG :

$$L_{OG} = \sqrt{(x_O - x_G)^2 + (y_O - y_G)^2}$$

Кутовий коефіцієнт нахилу дотичної до границі у точці G дорівнює

$$k_G = 3a_3x_G^2 + 2a_2x_G + a_1,$$

звідки можна визначити величину α .

Кут падіння траєкторії частинки на «дзеркало» границі $\gamma = \psi - \alpha$. Якщо вважати поверхню границі ідеальною, то кут відбиття (γ') дорівнює куту падіння (γ). Для урахування неідеальності поверхні необхідно ввести до розгляду функцію розподілу імовірності за кутами падіння та відбиття: $\Phi(\gamma, \gamma')$.

Кут, за яким спрямований відбитий промінь $\beta = \gamma' - \alpha$ (задає напрямок руху частинки після відбиття у макроскопічній системі координат).

Довжина відрізьку GF $L_{GF} = L - L_{OG}$, де L – загальна довжина шляху частинки протягом кроку МРРБ. Вона визначається з тривалості кроку та функції розподілу швидкостей, визначеної на попередньому кроці для частинок початкового елемента.

Координати кінцевої точки F (x_F, y_F):

$$x_F = x_G + L_{GF} \cos \beta; \quad y_F = y_G + L_{GF} \sin \beta.$$

Модуль імпульсу, переданого границі в результаті відбиття частинки:

$$p_G = 2p_0 \cos\left(\pi - \frac{\gamma + \gamma'}{2}\right),$$

де p_0 – модуль повного імпульсу частинки.

Висновки

В статті запропоновано модифікований математичний метод решітчастих рівнянь Больцмана, який дозволяє виконувати чисельне моделювання руху рідини або газу на основі опису явищ на мікрорівні у областях, наближених до твердої границі. Запропонований математичний апарат

дозволяє врахувати вплив відбиття частинок від твердої границі на функції розподілу імовірності за напрямками та швидкостями руху. Розглянуто приклад розв'язання двовимірної задачі про відбиття частинки.

Можливим напрямком подальших досліджень є пошук форм та методів подання опису задачі, які б забезпечили можливість часткового застосування трансляційної симетрії для укрупнення обчислень і скорочення обсягу обчислювальних операцій.

ЛІТЕРАТУРА

1. Tu J. Computational Fluid Dynamics, Second Edition: A Practical Approach /Jiyuan Tu, Guan Heng Yeoh, Chaoqun 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 /Sauro Succi. – Oxford University Press, 2001. – 304 p.
4. 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). – Pp. 75-84.
5. Perumal D. Numerical simulation of gaseous microflows by lattice Boltzmann method / D.A.Perumal, V. Krishna, G.Sarvesh and A.K.Dass //International Journal of Recent Trends in Engineering. – 2009. – No. 1(5). – Pp. 15-20.
6. Биколов Д.А. Реализация метода решеточных уравнений Больцмана для расчетов на GPU-кластере /Д.А.Биколов, Д.С.Сенин, Д.С.Демин, А.В.Дмитриев, Н.Е.Грачев. //Вычислительные методы и программирование. – 2012. – Т. 13. – С. 13-19.
7. 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. – Pp. 1–7.
8. 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.
9. Глазок О.М. Модифікований метод решітчастих рівнянь Больцмана з нерегулярною сіткою /О.М.Глазок //Наукоємні технології. – 2014. – № 4 (24). – С. 419-422.
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. – Pp. 13-19.
9. Glazok O.M. Modified method of lattice Boltzmann equations with irregular lattice /O.M.Glazok //Science-Based Technologies. – 2014. – No. 4 (24). – Pp. 419-422.