ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ   
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

**Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова**

Загвоздина Ксения Олеговна

**РЕШЁТОЧНОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА В ЗАДАЧАХ ГИДРОДИНАМИКИ**

Выпускная квалификационная работа – магистерская диссертация

по направлению 01.04.04 «Прикладная математика»

шифр наименование направления подготовки

студента образовательной программы магистратуры  
«Суперкомпьютерное моделирование в науке и инженерии»

наименование образовательной программы

|  |  |
| --- | --- |
| Студент  Загвоздина К.О.\_\_  Рецензент  д.…н., проф.  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ | Научный руководитель  PhD, доцент  \_\_\_\_\_\_\_Буровский Е.А.  Консультант  д.…н., проф.  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| Москва 2020 | |

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

**Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова**

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение магистерской диссертации**

студенту группы МСКМ-181 Загвоздиной Ксении Олеговне

1. Тема работы

|  |
| --- |
| Решёточное уравнение Больцмана в задачах гидродинамики |
|  |

1. Цель работы

|  |
| --- |
| Исследовать метода решёточного уравнения Больцмана на задаче течении |
| Куэтта |
|  |

1. Формулировка задания

|  |
| --- |
| Требуется расчитать скорости жидкости в тестовой задаче при |
| задействовании различных методов учёта граничных условий |
|  |

Проект ВКР должен быть предоставлен студентом в срок до «25» декабря 2019 г.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Научный руководитель ВКР | «25» декабря 2019 г. | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Буровский Е.А. |

Первый вариант ВКР предоставлен студентом в срок до «15» апреля 2020 г.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Научный руководитель ВКР | «15» апреля 2020 г. | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Буровский Е.А. |

Итоговый вариант ВКР предоставлен студентом в срок до «20» мая 2020 г.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Научный руководитель ВКР | «19» мая 2020 г. | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Буровский Е.А. |
| Задание выдано студенту | «9» сентября 2019 г. | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Буровский Е.А. |
| Задание принято к исполнению студентом | «9» сентября 2019 г. | \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Загвоздина К.О. |

# Аннотация

Целью работы является исследование метода решёточного уравнения Больцмана на простейшей задаче гидродинамики, течении Куэтта. Основная задача состояла в расчёте скоростей жидкости при использовании различных методов реализации граничных условий. В первой части работы вводятся метод решёточного уравнения Больцмана и двух разных подходов к учёту граничных условий. Во второй части работы сравниваются результаты численных экспериментов при использовании разных равновесных функций распределения и пространственных сеток. В третьей части для решения тестовой задачи используется существующее решение, библиотека Palabos.

# ABSTRACT

The aim of this work is to study the method of the lattice Boltzmann equation on the simplest problem of hydrodynamics, the Couette flow. The main task was to calculate the fluid velocities using various methods for implementing boundary conditions. Firstly, we introduce the lattice Boltzmann method and two different approaches to accounting for boundary conditions. Secondly, we compare the results of numerical simulations using different equilibrium distribution functions and spatial grids. At last, the open-source library Palabos is used to solve the test problem.

Содержание

[Аннотация 3](#_Toc40809600)

[ABSTRACT 4](#_Toc40809601)

[Введение 6](#_Toc40809602)

[1. Постановка задачи 6](#_Toc40809603)

[2. Кинетическое уравнение Больцмана 6](#_Toc40809604)

[3. Общий метод решёточного уравнения Больцмана 8](#_Toc40809605)

[3.1. Блок-схема решения 9](#_Toc40809606)

[4. Граничные условия 11](#_Toc40809607)

[5. Численный эксперимент 12](#_Toc40809608)

[6. Параметры расчёта 15](#_Toc40809609)

[7. Численный эксперимент с использованием библиотеки Palabos 17](#_Toc40809610)

[7.1. Вопрос о консервативности 20](#_Toc40809611)

[7.2. Граничные условия проскальзывания 21](#_Toc40809612)

[Заключение 23](#_Toc40809613)

[Список использованной литературы 24](#_Toc40809614)

[Приложение. Технические особенности использования библиотеки Palabos 25](#_Toc40809615)

# Введение

Существует три основных типа описаниния динамики жидкости: макроскопический, микроскопический и мезоскопический. Уравнение Навье-Стокса, основной метод моделирования гидродинамики, является макроскопическим описанием, то есть жидкость в модели является сплошной средой с значениями скорости и плотности. Микроскопические методы, например, метод молекулярной динамики, описывают взаимодействия между элементарными частицами жидкости с помощью ньютоновской динамики. Мезоскопические методы описывают распределения совокупностей частиц. В работе речь пойдёт об одном из мезоскопических методов.

В качестве тестовой задачи была выбрана двумерная задача течения Куэтта несжимаемой жидкости, имеющая аналитическое решение. В этой задаче жидкость течёт по каналу, в котором верхняя стенка движется с постоянной скоростью. [1]

# Постановка задачи

Исследование посвящено задаче определения влияния двух способов учёта граничных условий (ГУ) в решении двумерной задачи Куэтта методом решёточного уравнения Больцмана. Анализ проведён на основе -ошибок численных решений.

Цель работы – исследовать метод решёточного уравнения Больцмана на простейшей задаче гидродинамики (течение Куэтта).

Основная задача – расчёт скоростей жидкости в тестовой задаче при задействовании различных методов учёта граничных условий (ГУ).

# Кинетическое уравнение Больцмана

Полагая, что есть функция распределения частиц, а – их скорость, можно записать уравнение Больцмана:

Так как истинный оператор столкновений Больцмана представляет сложноберущийся двойной интеграл по пространству скоростей [1], в данной работе взамен него используется оператор BGK

где – время релаксации. Этот оператор удовлетворяет всем необходимым законам сохранения (массы, импульса и энергии) и условию локального стремления функции распределения к равновесной. Заметим также, что оператор BGK устремляет начальное распределение к равновесному с экспоненциальной скоростью [2]. Если не учитывать столкновения, т.е. , то уравнение Больмана превратится в уравнение непрерывности в фазовом пространстве.

Предполагаем, что в равновесии частицы распределены по Максвеллу. Предполагая, что жидкость идеальна, можно показать, что равновесное распределение будет иметь вид (ЕБ: 1. размерность: в экспоненте масса? 2. степень температуры: размерность, это для трехмерия cтепень 3/2?)

где – относительная скорость частицы (отклонение скорости частицы от средней локальной скорости), – плотность жидкости [3].

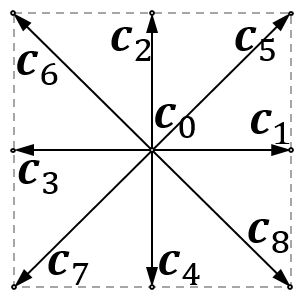
Функция распределения микроскопических частиц, представляющая собой плотность массы в физическом пространстве и пространстве скоростей, связана с макроскопическими параметрами жидкости следующим образом:

Таким образом, уравнение Больцмана эквивалентно уравнению Навье-Стокса, описывающему гидродинамику с макроскопической точки зрения.

# Общий метод решёточного уравнения Больцмана

Дискретные функции распределения определены в точках квадратной решётки с шагом в физическом пространстве и в моменты времени с шагом . Для простоты обычно считают, что и .

Дискретные скорости вводятся совместно с весами , и образуют набор скоростей, обозначаемый DdQq, где d – размерность физического пространства, q – количество дискретных скоростей. В данном исследовании выбран набор D2Q9. Скорости определяются таким, чтобы за один шаг по времени частица перемещалась из текущего узла пространственной решётки в соседний, т.е.



*Рис. 1. Дискретные скорости в наборе D2Q9*

Дискретные функции распределения выражают плотности частиц со скоростью (рассматриваем двумерный случай в связи с размерностью решаемой задачи). Подобно непрерывной функции распределения, макроскопические плотность и скорость определяются как моменты дискретной функции распределения:

Дискретизируя уравнение Больцмана, получаем решёточное уравнение Больцмана:

Таким образом, частицы перемещаются в соседний узел . Оператор моделирует столкновение частиц с помощью их перераспределения по . Дискретный оператор BGK может быть записан следующим образом:

Дискретная равновесная функция распределения получена из непрерывной функции путём разложения её по полиномам Эрмита:

где – скорость звука в жидкости при изотермическом процессе [4].

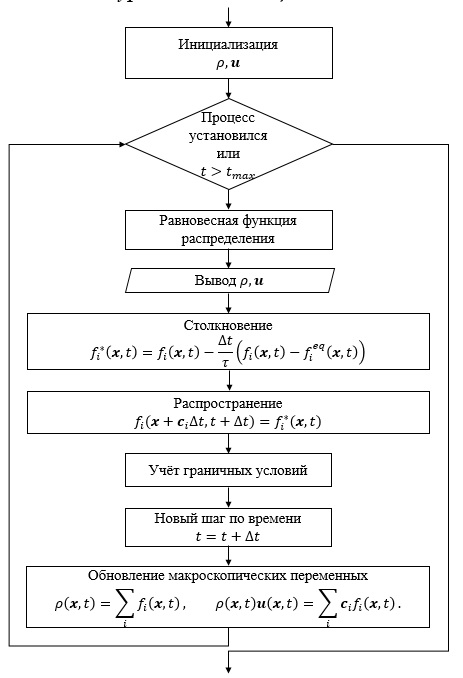
Решёточное уравнение Больцмана можно разделить на две части:

1. нахождение функции распределения после столкновения:
2. распространение:

.

# Блок-схема решения

На рис. 2 представлена условная блок-схема метода решёточного уравнения Больцмана.



*Рис. 2. Блок-схема метода решёточного уравнения Больцмана*

# Граничные условия

Задача течения Куэтта является задачей Дирихле, т.е. задана скорость границ. В данной работе использованы три типа граничных условий.

*Периодические граничные условия* внедряются в схему решения на этапе распространения:

Следующие два метода принципиально отличаются друг от друга вводимыми пространственными сетками.

*Link-wise метод отскока учёта граничных условий в задаче Дирихле с жёсткой стенкой*. В данном случае сетка вводится таким образом, чтобы граница раздела твёрдой стенки и жидкости проходила между узлами сетки. Принцип этого метода заключается в том, что частицы, попавшие на границы, должны быть отражены в своё прежнее положение.

В этом случае

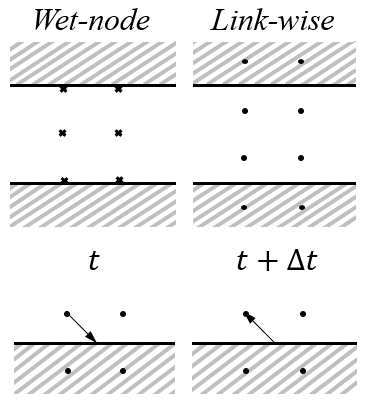
где – узлы пространственной сетки, лежащие ближе всего к данной границе, – плотность около границы, – скорость на границе (задана). Так как в исследуемой задаче предполагается, что жидкость несжимаема, сложностей с вычислением не возникает. Если же это не так, за значение берут либо , либо .

*Wet-node метод учёта граничных условий в задаче Дирихле с жёсткой стенкой.* Здесь сетка вводится таким образом, что граничные узлы лежат как можно ближе к физической границе раздела. Этот метод заключается в (а) нахождении плотности жидкости на границе, (б) нахождении распределения на границе. Плотность жидкости на границе находится из условия её непроницаемости. Например, для нижней границы из уравнений на моменты функции распределения

следует, что

Функцию распределения на границе можно найти несколькими способами [2]. Рассмотрим способ, называемый неравновесным методом отскока. Он заключается в том, что к неравновесной части функции распределения применяется правило отскока с поправкой на тангенсальный импульс :

где *,* – единичный вектор скорости, направленный вдоль границе. Импульс находится из проэкции первого момента функции распределения на .

**

*Рис. 2. Графическая интерпретация рассматриваемых способов учёта ГУ*

# Численный эксперимент

Тестирование методов проводилось на задаче течения Куэтта [1] – в плоском сосуде высотой находится несжимаемая жидкость, нижняя граница сосуда неподвижна, верхняя граница движется с постоянной скоростью . Профиль скорости в данной модели записывается следующим образом [3]:

Численные эксперименты показали, что в рамках данной задачи метод link-wise учёта граничных условий стабилен только при [4]. Также была доказана консервативость схем (выполнение законов сохранения).

Рассматривались два варианта ввода равновесной функции распределения [3]:

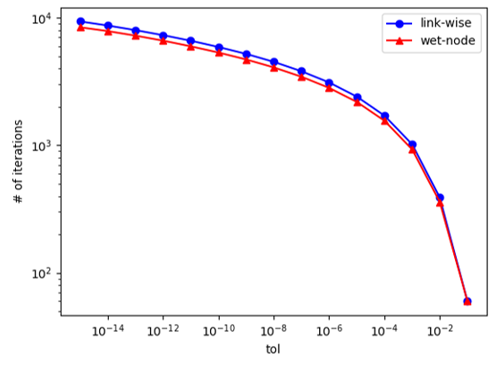
Параметры численного эксперимента:

1. Расчётная область , , , ,

, .

1. Количество шагов по времени

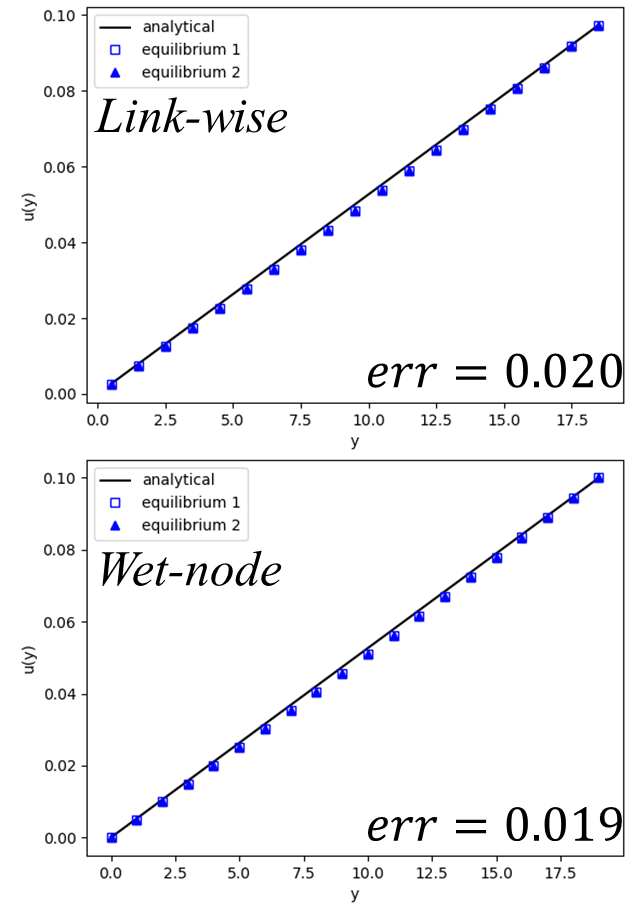
В результате сравнения их применения в рамках одного метода учёта ГУ выяснилось, что добавление новых членов в разложении аналитической функции распределения Максвелла-Больцмана по полиномам Эрмита не улучшает точность общего метода. При этом, метод wet-node учёта ГУ позволяет решить задачу течения Куэтта до установления за чуть меньшее количество итераций.



*Рис. 4. Количество итераций до установления с заданной точностью tol для подходов link-wise и wet-node учёта ГУ при и*

Среднеквадратичное отклонение было расчитано с использованием аналитического решения задачи :

Методы wet-node и link-wise учёта ГУ дают одинаковые решения данной задачи. При этом авторы [3] говорят, что метод wet-node сложен в реализации для решения 3D задач.



*Рис. 5. Численное и аналитическое решения модельной задачи для link-wise и wet-node методов учёта ГУ и разных равновесных фукций распределения при*  *, и , ошибка*

# Параметры расчёта

В основном, моделирование методом LBM проводится с использованием *решёточных единиц измерения*, в которых все физические величины представляются безразмерными.

Обезразмеривание величины достигается её делением на выбранную эталонную величину (коэффициент преобразования) той же размерности. Получаемое число называют решёточным значением величины. Например, для скорости потока жидкости решёточное значение

где – размерное значение скорости, – коэффициент преобразования скорости. Для задания расчётной области необходимо иметь единственный коэффициент преобразования . Далее обезразамеренные значения величин будем обозначать , а коэффициенты преобразования – .

Кинематическая вязкость в размерных расчитывается по следующей формуле:

В решёточных единицах измерения для вычисления кинематической вязкости необходимо задать число Рейнольдса

где и – характерные скорость жидкости и размер области, и безразмерную обезразмеренное значение характерной скорости , пропорциональную числу Маха

Отсюда выражение для безразмерной вязкости примет вид

где – размер пространственной сетки.

Закон подобия в гидродинамике [5] гласит, что две системы течения несжимаемой жидкости являются подобными, если они имеют одинаковую геометрию и одинаковые числа Рейнольдса. Отсюда получаем условие на коэффициенты подобия, выполнение которого необходимо для соответствия результатов численного расчёта и физического эксперимента:

Часто в качестве параметра численного моделирования задают безразмерное значение частоты релаксации

а решёточное значение времени релаксации вычисляют по формуле

Здесь множитель возникает засчёт умножения деления на безразмерный квадрат скорости звука .

# Численный эксперимент с использованием библиотеки Palabos

На сегодняшний день в мире существует множество коммерческих и некоммерческих пакетов, реализующих метод LBM. В работе была использована библиотека с открытым исходным кодом Palabos, разработанная на языке C++ в Университете Женевы [6]. Критериями выбора были документация, распространённость использования и широкий спектр решаемых задач.

Входным параметром программы является переменная класса IncomprFlowParam, требующая задания безразмерных значений скорости, частоты релаксации, размеров расчётной области, размера пространственной сетки и числа Рейнольдса [6]. Опционально можно задать физические значения коэффициентов преобразования скорости и длины (по умолчанию ). По этим данным производится расчёт безразмерных значений вязкости, шага по пространству и шага по времени.

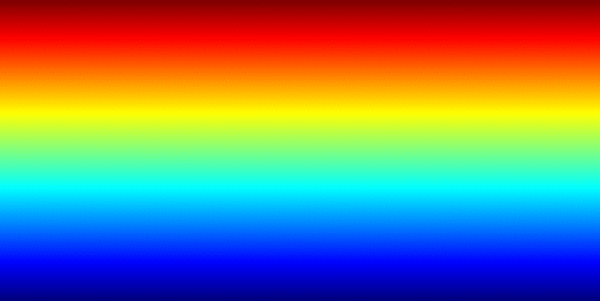
Результатом проведённого моделирования является переменная класса MultiBlockLattice2D, на каждом временном шаге содержащая информацию о плотности и скоростях жидкости [7].

Моделирование проводилось при следующих значениях безразмерных параметров:

Начальное значение безразмерной плотности . Коэффициенты преобразования заданы по умолчанию. Шаги по пространству в любом направлении

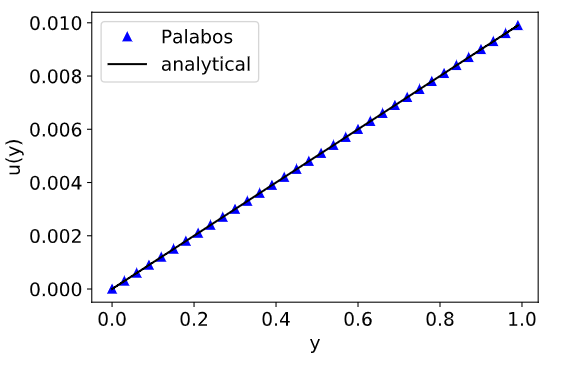
откуда шаг по времени На границах, как и ранее, были заданы периодические граничные условия – на левой и правой, и условия прилипания – на верхней и нижней.

График плотности нормы скорости в момент времени изображён на рис.6.



*Рис. 6. График плотности нормы скорости в момент времени*

Пакет Palabos позволил решить это задачу с большой точностью, средне квадратичное отклонение График зависимости нормы скорости от координаты канала представлен на рис.7.



*Рис. 7. График зависимости нормы скорости от ширины канала*

*в момент установления ()*

Несмотря на высокую точность решения, в процессе использования библиотеки Palabos были отмечены непредвиденные результаты.

# Вопрос о консервативности

Во время моделирования проводилось исследование не только точности получаемых результатов, но и выполнения законов сохранения энергии и массы. Для этого расчёт проводился до определённого времени ().

Выполнение закона сохранения энергии было доказано, безразмерное значение полной энергии .

Во время предыдущих расчётов, проводившихся до момента времени , можно было заметить незначительный рост безразмерного значения плотности . После увеличения периода моделирования стала очевидна линейная зависимость плотности от времени (см. рис.8).



*Рис. 8. График зависимости разности начальной и текущей плотностей от времени*

Объём расчётной области с течением времени остаётся неизменным, следовательно, закон сохранения массы не выполняется. Делая такой вывод, мы предполагаем сохранение линейной монотонной зависимости плотности от времени на последующих итерациях метода.

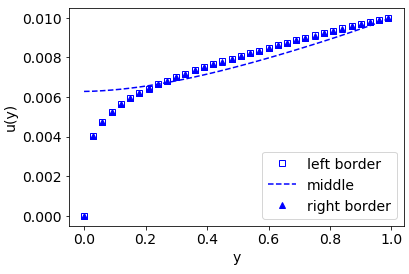
# Граничные условия проскальзывания

С использованием библотеки Palabos была решена задача течения Куэтта с граничным условием проскальзывания (free-slip) на нижней неподвижной границе. Эта задача возникла в ходе освоения пакета.

За счёт наличия в задаче периодических граничных условий ожидалось равномерное распространение скорости по ширине расчётной области. Однако при численном моделировании распространение происходило неравномерно, в нижних углах расчётной области скорость оставалась близкой к нулю (см. рис.9-10).



*Рис. 9. График плотности нормы скорости в момент времени*



*Рис. 7. График зависимости нормы скорости от ширины канала*

*в момент времени на правой и левой границе и в середине расчётной области*

Такие результаты могут указывать на неполную обработку условых узлов сетки в пакете. Как отмечалось в книге [1], обработка граничных условий на углах представляет собой нетривиальную задачу.

# Заключение

Были расчитаны точности решений задачи течения Куэтта при различных модификациях метода решёточного уравнения Больцмана и граничных условий. Зависимость точности от количества членов в разложении равновесной функции распределения частиц по функции Эрмита не наблюдается. Wet-node и link-wise методы учёта ГУ дают одинаковые решения, при этом wet-node метод теряет в лёгкости программной реализации (метод завязан на геометрии области расчёта и её границ, что сложно применять в 3D).

Течение Куэтта было смоделировано с использованием библиотеки с открытым исходным кодом Palabos. Это решение даёт лучшую точность, однако консервативность метода, реализованного в библиотеке, ставится под сомнение.

# Список использованной литературы

1. G. Falkovich. Fluid Mechanics - A Short Course for Physicists // Cambridge University Press, 2011.
2. Q. Zou, X. He, Phys. Fluids 9, 1591 (1997).
3. T. Kruger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, and E. M. Viggen, The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice (Springer International Publishing, 2017).
4. M. Bouzidi, M. Firdaouss, P. Lallemand, Phys. Fluids 13, 3452 (2001).
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. том VI. Гидродинамика //М: Наука. – 1986.
6. Palabos User Guide, Release 1.0 r1, University of Geneva, 2019.
7. Palabos: open source lattice Boltzmann library. URL: <https://unigespc.gitlab.io/palabos/docs/html/> (дата обращения: 16.05.2020).

# Приложение. Технические особенности использования библиотеки Palabos

Во время использования библотеки Palabos для моделирования задачи течения Куэтта на языке C++ нам пришлось столкнуться со следующими техническими особенностями:

1. Компиляция программ с использованием этой библиотеки возможно только на Unix-подобных операционных системах. Перед началом работы с библиотекой убедитесь, что на вычислительной машине установлены язык программирования Python 2.7, пакет make и интерфейс MPI.
2. Важен порядок задания граничных условий. Периодические граничные условия задаются в начале методом periodicity переменной класса MultiBlockLattice2D, граничные условия иных видов задаются во вторую очередь методом setVelocityConditionOnBlockBoundaries переменной класса OnLatticeBoundaryCondition2D.
3. Инициализация равновесной функции распределения должна производится после каждого определения скоростей на границах.
4. Перед переходом к основному алгоритму (итерации по времени) необходимо задать решётку – применить метод initialize существующей переменной класса MultiBlockLattice2D.
5. Встроенные средства библиотеки позволяют сохранять полученные на каждой итерации данные в файлы формата .vti или .vts, для чтения которых разработчики библиотеки советуют использовать приложение Paraview.[6] Однако, визуализация данных возможна и с использованием пакета vtk на языке Python.