

К вопросу об ограничении снизу на масштабы в механике сплошной среды

Б.Н. Четверушкин

Институт математического моделирования РАН

Аннотация

На примере задач газовой динамики рассматривается возможность модификации исходных математических моделей. Это изменение опирается на учет некоторых минимальных масштабов, меньше которых дальнейшая детализация решения уже не имеет смысла. Показано, что новые модели приводят к результатам практически не отличающимся от полученных на основе применения классических моделей. Дополнительные члены в них играют роль эффективных регуляризаторов решения.

1 Введение.

Многопроцессорные вычислительные системы сверхбольшой производительности (10TFLOPS) и выше открывают новые возможности для применения моделирования различных физических неустойчивостей, для аккуратного описания которых необходимо подробное пространственно-временное разрешение. Однако на пути реализации этих возможностей встречается ряд серьезных трудностей. Эти трудности связаны:

- с адаптацией вычислительных алгоритмов к архитектуре многопроцессорных систем (в первую очередь это относится к системам с распределенной памятью);
- с созданием вспомогательного инструментария, позволяющего решать задачи математической физики на высокопроизводительных многопроцессорных системах¹;
- верификации данных высокопроизводительных вычислений.

Последняя проблема является наиболее острой и напрямую связана с корректностью вычислительных алгоритмов и лежащих в их основе математических моделей. Связано это со следующим обстоятельством.

Во многих случаях высокопроизводительные системы для моделирования различных физических неустойчивостей дают возможность использовать пространственные

¹В частности к этим проблемам следует отнести проблемы генерации сеток, разбиения на подобласти при использовании неструктурированных сеток, визуализации данных многопроцессорных вычислений, проблемы создания пакетов прикладных программ и т.д. Во всех этих проблемах характерно тесное переплетение вопросов, присущих как прикладной математике, так и системному программированию

сетки с числом узлов 10^9 и более. На таких сетках влияние схемной вязкости, стабилизирующей численное решение а заодно сглаживающей естественные неустойчивости, становится малым. При этом становится открытым вопрос, каков характер неустойчивостей, наблюдаемых в численном решении — естественный или искусственный, имеющий счетное происхождение. В этом плане совершенно не случаен всплеск интереса в области исследований корректности уравнений Навье–Стокса. Заметим, что окончательного ответа на этот важный вопрос пока не удалось получить [1].

Интересно отметить, что более 30 лет тому назад О.А.Ладыженской была предпринята попытка доказательства существования решения уравнений Навье–Стокса для несжимаемой жидкости путем введения дополнительных регуляризующих членов кубичных по скорости и имеющих физический смысл вязкости [2]. В этом случае удается доказать существование решения для любого момента времени $t > 0$. Эти дополнительные члены появились путем осреднения уравнения Навье–Стокса по конечному объему. Однако физического обоснования такого осреднения не было дано.

В данной работе на примере задач механики сплошной среды будет показано, что построение таких регуляризующих сглаживающих членов вполне может быть произведено на основе относительно простого физического анализа задачи. Появление этих членов связано с выявлением минимальных размеров, меньше которых дальнейшая детализация решения уже не имеет смысла.

2 Некоторые простые примеры

С ограничением снизу на конечные размеры сталкиваемся уже при выводе уравнений, описывающих поведение сплошной среды. Процедура получения этих уравнений заключается в рассмотрении баланса массы, импульса и энергии для конечного объема и последующем переходе к дифференциальному описанию².

Этот переход опирается на предположение о произвольности объема. Однако сразу же делается оговорка, что в силу молекулярного строения вещества для выполнения предположения о сплошности среды этот объем должен содержать достаточное количество молекул — порядка нескольких десятков. Тем самым вводится понятие «физически бесконечно малого объема», характеризуемого ограничениями снизу на его размеры [3].

Для воздуха нормальной плотности этот размер d порядка 10^{-6} см, что значительно меньше длины свободного пробега l , находящегося в диапазоне $10^{-4} \div 10^{-5}$ см и значительно больших характерных размеров молекул газа $\sim 10^{-8}$ см. Таким образом, на расстояниях d по самому построению должны рассматриваться постоянные значения параметров.

В соответствующие уравнения, полученные при переходе к дифференциальному описанию, должны быть включены члены, гарантирующие сглаживание решения на расстояниях d . Подобное построение по крайней мере с физической точки зрения гарантирует ограниченность решения, не допуская его сильного изменения на расстояниях меньших по порядку чем d . Однако, забегая вперед, заметим, что в рамках газодинамического приближения это расстояние d можно существенно увеличить до длины свободного пробега l [4]–[6].

²При организации вычислений дифференциальные уравнения вновь с помощью алгоритмического представления заменяются на дискретные описания сплошной среды. То есть в осуществляемой цепочке: конечный объем — дифференциальные уравнения — дискретный вычислительный алгоритм, ее центральный элемент — дифференциальные уравнения служат вспомогательным звеном при переходе от одного дискретного описания к другому

Другим содержательным примером является исследование решения уравнения теплопроводности [7]

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial T}{\partial x} + I, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad (2.1)$$

где T — температура, t — время, x — пространственная координата, I — заданный в ограниченной области пространства источник тепла, $\kappa > 0$ — постоянный коэффициент теплопроводности.

При мгновенном выделении тепла в конечной области изменение температуры происходит также мгновенно во всем пространстве. И несмотря на то, что вдали от области выделения тепла это изменение исчезающе мало, тем не менее мгновенный отклик существует, что с физической точки зрения является некорректным. Тот же эффект будет наблюдаться при численном решении уравнения (2.1) с помощью неявной схемы

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = \kappa \frac{T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2} + I, \quad (2.2)$$

где j — номер временного слоя, i — номер узла по пространству, Δt и Δx соответственно шаги разностной аппроксимации по времени и пространству.

Однако, при использовании явной схемы

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = \kappa \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{\Delta x^2} + I, \quad (2.3)$$

скорость распространения тепла будет конечна.

При уменьшении Δt эта скорость будет увеличиваться, стремясь при $\Delta t \rightarrow 0$ к бесконечности. То есть в пределе приходим к случаю, описанному для решения уравнений (2.1) и (2.2).

Теперь зададимся вопросом: может ли быть шаг Δt бесконечно малым. При рассмотрении баланса тепла в какой-то ячейке $x \in [x_i, x_{i+1}]$ новое присущее ей равновесное состояние образуется только через время Δt по порядку величины не меньшее, чем τ — время между столкновениями молекул. Если для схемы (2.3) принять ограничение снизу на величину Δt

$$\Delta t \geq \tau, \quad (2.4)$$

то в результате получится решение, в котором отсутствует парадокс бесконечно быстрого распространения тепла.

Как видим, в этом примере учет естественного ограничения на используемые минимальные масштабы величин³ приводит к снятию физически необоснованных свойств, вытекающих из исходной математической постановки. Обратим особое внимание на то, что физически корректное решение удастся получить в рамках явной схемы (2.3), которая описывает естественную связь между настоящим и предыдущим состоянием среды.

³Ограничение на шаг по времени Δt и ограничение на шаг по пространству Δx связаны для схемы (2.3) естественным образом через условие ее устойчивости $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\kappa}$. Учитывая, что $\Delta t \sim \tau = l/c$, а $\kappa \sim lc$, где c — скорость звука, получим ограничение снизу по порядку величины для $\Delta x \sim l$

3 Кинетические схемы

В данном параграфе рассмотрим подход к моделированию задач газовой динамики — кинетические схемы, в которых использование естественных ограничений снизу на пространственно-временные масштабы играет существенную роль.

Опишем вывод кинетических схем на примере пространственно одномерного слоя [4]. Предположим:

- а) в момент времени $t = t^j$ в каждой пространственной ячейке существует постоянное для этой ячейки локально-максвелловское распределение

$$f_M = \frac{\rho_i}{(2RT_i)^{3/2}} \exp - \frac{(\xi - u_i)^2}{2RT}, \quad (3.1)$$

где R — газовая постоянная;

- б) в течение времени $t \in [t^j, t^{j+1}]$ частицы газа совершают бесстолкновительный разлет;
- в) в момент времени $t = t^{j+1}$ функция распределения f_i^{j+1} , полученная в результате разлета (и не являющаяся максвелловской), мгновенно максвеллизируется и вся процедура повторяется вновь.

Схематически бесстолкновительный разлет изображен на рис. 1. При этом площадь центральной ячейки $x \in [x^i, x^{i+1}]$, занятая частицами, имеющими положительное значение $\xi > 0$ молекулярной скорости и имеющими распределение $f_{i-1,M}^j$, будет равна $\xi \Delta t$. Соответственно для частиц, прилетевших справа ($\xi < 0$), эта площадь будет равна $|\xi| \Delta t$. Изменение функции распределения в центральной ячейке можно изобразить в виде соотношения

$$f_i^{j+1}(\xi) = f_{i,M}^j(\xi) + \xi \Delta t \frac{f_{i+1,M}^j(\xi) - f_{i-1,M}^j(\xi)}{2\Delta x} - \frac{\Delta t |\xi|}{2} \frac{f_{i+1,M}^j(\xi) - 2f_{i,M}^j(\xi) + f_{i-1,M}^j(\xi)}{\Delta x}. \quad (3.2)$$

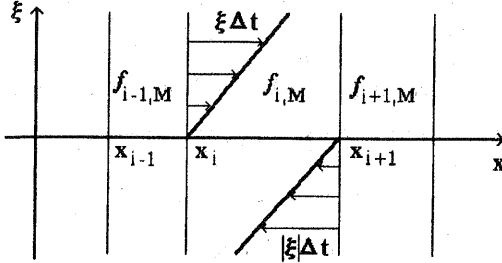
Здесь для простоты предположили, что все отрезки имеют одинаковый размер Δx .

Обратим внимание на одно важное свойство. Преобразование функции распределения, описываемое выражением (3.2), является инвариантным относительно преобразования координат по Галилею. В самом деле, значения локально максвелловских функций распределения для каждой ячейки в неподвижной и движущейся системе координат будут идентичны.

Будут совпадать и площади центральной ячейки, занятые частицами, приходящими слева и справа (рис. 1), так как они целиком определяются скоростями относительными по отношению к заданной скорости движения границ ячеек.

Для того, чтобы получить соотношения, связывающие значения газодинамических параметров на новом и старом слое по времени, проинтегрируем уравнение (3.2) по скоростям молекул, предварительно умножая его на сумматорные инварианты $\varphi(\xi) = 1, \xi, \xi^2/2$.

При этом существенно учтем одно из основных положений процедуры Чепмена-Энскога [8]–[9]



$$\int \varphi(\xi) d\xi = \int f_M \varphi(\xi) d\xi, \quad (3.3)$$

где f_M — определяется с помощью моментов функции распределения f .

В результате получим следующую систему уравнений.

Рис. 1: К получению кинетических схем на произвольной сетке

$$\frac{\rho_i^{j+1} - \rho_i^j}{\Delta t} + (\rho u)_x = \frac{\Delta x}{2} \left[\rho u \operatorname{erf}(s) + \frac{\rho}{\beta \sqrt{\pi}} \exp(-s^2) \right]_{\bar{x}x}, \quad (3.4)$$

$$\frac{(\rho u)_i^{j+1} - (\rho u)_i^j}{\Delta t} + (\rho u^2 + p)_x = \frac{\Delta x}{2} \left[(\rho u^2 + p) \operatorname{erf}(s) + \frac{\rho u}{\beta \sqrt{\pi}} \exp(-s^2) \right]_{\bar{x}x}, \quad (3.5)$$

$$\frac{E_i^{j+1} - E_i^j}{\Delta t} + (u(E + p))_x = \frac{\Delta x}{2} \left[u(E + p) \operatorname{erf}(s) + \frac{1}{\beta \sqrt{\pi}} \left(E + \frac{p}{2} \right) \exp(-s^2) \right]_{\bar{x}x}. \quad (3.6)$$

Здесь использованы следующие обозначения: $p = \rho RT$ — давление газа, $E = \rho \varepsilon + \rho u^2/2$ — полная энергия, $\varepsilon = RT(\gamma - 1)$ — внутренняя энергия, γ — показатель адиабаты, $\beta = 1/\sqrt{2RT}$, $s = \beta u$, $\operatorname{erf}(s)$ — функция ошибок $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-z^2) dz$, a_x и a_{xx} — соответственно центральная разность для аппроксимации первой пространственной производной и разностная вторая производная.

Получаемые таким образом газодинамические параметры удовлетворяют условиям преобразования Галилея. В самом деле, значения плотности, определяемой как интеграл от функции распределения f , $\rho = \int f d\xi$, которая в свою очередь находится инвариантным образом из соотношения (3.2). Инвариантно определяется температура $\frac{3}{2}RT = \int f \frac{c^2}{2} d\xi$, так как тепловая скорость $\bar{c} = \bar{\xi} - \bar{u}$ не зависит от выбора системы координат. Значение скорости в движущейся системе координат u связано с ее значением в неподвижной u' соотношением преобразования Галилея

$$u = u' + U, \quad (3.7)$$

где U — скорость системы координат. Соотношение (3.7) вытекает из кинетического определения макроскопической скорости

$$u = \frac{1}{\rho} \int f \xi d\xi = \frac{1}{\rho} \int f (c + u' + U) d\xi = u' + U.$$

Заметим, что система (3.4)–(3.6) может быть непосредственно получена из разностной аппроксимации уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial x} = J(f, f'), \quad (3.8)$$

где $J(f, f')$ — интеграл столкновений, обращающийся в нуль при интегрировании с сумматорными инвариантами $\varphi(\xi)$. Для этого выпишем схему с направленными разностями для уравнения (3.8)

$$\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + \xi \frac{f_{i+1}^j - f_{i-1}^j}{2\Delta x} = \frac{|\xi|\Delta x}{2} \frac{f_{i+1}^j - 2f_i^j + f_{i-1}^j}{\Delta x^2} + J(f, f'). \quad (3.9)$$

Интегрируя (3.9) с сумматорными инвариантами и заменяя f^j там, где это необходимо на ее локально максвелловское значение, приходим к схеме (3.4)–(3.8). Этот факт не является удивительным, учитывая, что схема (3.9) также как и выражение (3.2) получены в предположении ступенчато постоянного значения функции распределения на отрезке $x \in [x_i, x_{i+1}]$.

Естественно, что рассмотрение, приведшее к выражению (3.2) и впоследствии к уравнениям (3.4)–(3.6) для газодинамических параметров, можно привести и в более общем случае. На рис. 2 приведен фрагмент произвольной сетки, для которой аналогично (3.2) можно выписать выражение для функции распределения, трансформирующейся в результате бесстолкновительного разлета

$$\begin{aligned} \frac{f_I^{j+1} - f_{IM}^j}{\Delta t} + \frac{1}{\text{mes } V_I} \sum_{i=1}^k \int_{S_{iI}} (\bar{\xi}, \bar{n}_{iI}) \frac{f_{i,M}^{j+1} + f_{i,M}^j}{2} d\sigma = \\ = \frac{1}{2\text{mes } V_I} \sum_{i=1}^k \int_{S_{iI}} |(\bar{\xi}, \bar{n}_{iI})| (f_{i,M}^j - f_{I,M}^j) d\sigma. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Здесь f_{IM}^j и f_I^j — значения максвелловской и просто функции распределения в центральной ячейке, f_{iM}^j — значения максвелловской функции в соседних ячейках, k — число граней (3D геометрия) (ребер 2D геометрия) центральной ячейки, $\text{mes } V_I$ — объем (площадь) центральной ячейки. Интегралы в (3.10) берутся по граням (ребрам) центральной ячейки.

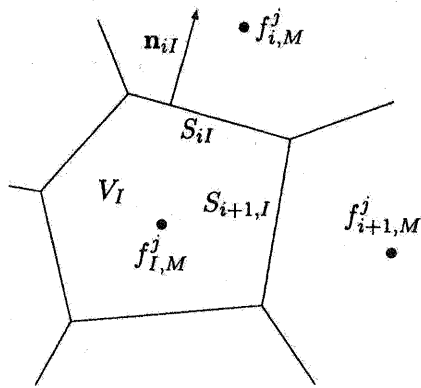


Рис. 2: К получению кинетических схем на произвольной сетке

Чтобы получить кинетическую схему на произвольных сетках достаточно проинтегрировать выражение (3.10) по скоростям молекул с сумматорными инвариантами. В результате получается алгоритм, являющийся вычислительным ядром соответствующего пакета прикладных программ [10], позволяющий считать сложные [5],[6], в том числе, и индустриальные задачи.

Вернемся вновь к основной теме данной работы: выявлению минимальных масштабов, меньше которых не имеет смысл дальнейшая детализация. Как видно из способа получения выражений (3.2) и (3.10) ясно, что рассматривать ячейки, характерные размеры которых по порядку величины меньше длины свободного пробега l , не имеет смысла. В самом деле, в противном случае невозможно гарантировать столкновение молекул, которое является причиной

их максвеллизации. Напомним, что существование максвелловского распределения внутри расчетной ячейки является основой построения кинетических схем. Сделаем два важных замечания.

Замечание 3.1. Ограничение снизу на характерный размер ячейки является не только следствием положений, положенных в основу вывода кинетических схем, но и непосредственно вытекает из самого смысла газодинамического приближения. В самом деле, уравнения газовой динамики могут быть получены из кинетического уравнения Больцмана при условии близости функции распределения к ее локально-максвелловскому значению

$$f \approx f_M. \quad (3.11)$$

В свою очередь из (3.11) следует, что f и являющиеся ее моментами газодинамические параметры должны слабо меняться на расстояниях меньших или порядка длины свободного пробега. Поэтому рассмотрение в газодинамическом приближении расстояний существенно меньших, чем l , уже не имеет смысла.

Замечание 3.2. Если в выражении (3.5), описывающем в рамках кинетических схем изменение импульса, в качестве размера Δx взять длину свободного пробега, то стоящий в правой части этого уравнения диссипативный член при условии $|u| \ll c$ будет соответствовать естественной вязкости. При этом получающийся коэффициент вязкости будет совпадать с коэффициентом, вытекающим из элементарной кинетической теории

$$\mu = \rho c l / 2. \quad (3.12)$$

Это замечание скажется важным при дальнейшем использовании кинетических схем для описания вязких течений.

4 Квазигазодинамическая система уравнений

Рассмотренные в предыдущем параграфе кинетические схемы (3.4)–(3.6) представляют определенные неудобства при их использовании. Особенно применительно к моделированию вязких течений. Более удобной в этом смысле является квазигазодинамическая система уравнений КГУ [5], [6], [11], которая может быть получена как дифференциальное приближение кинетических схем. Рассмотрим один из способов получения КГУ системы.

Предположим, что в момент времени $t = t^j$ функция распределения является локально максвелловской, слабо меняющейся на расстоянии порядка длины свободного пробега l ; в течение времени $t \in [t^j, t^{j+1}]$ $t^{j+1} = t^j + \tau$ частицы газа совершают бесстолкновительный разлет (рис. 3); в момент времени $t = t^{j+1}$ приходит мгновенная максвеллизация и вся процедура повторяется вновь.

Как видно, единственным отличием от предположений, положенных в основу вывода кинетических схем, является то, что вместо предположения о ступенчато постоянном характере f_M^j (для моделирования вязких течений размер ячейки порядка l) делается предположение о слабом изменении f_M^j на расстоянии порядка l .

Бесстолкновительный разлет в течение времени τ может быть описан выражением (рис. 3)

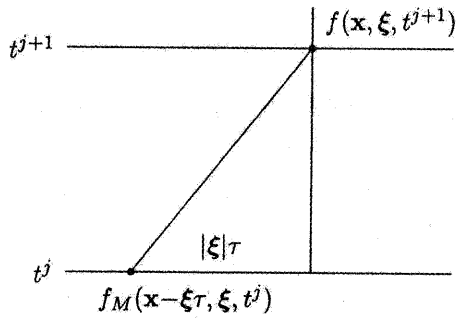
$$f(t^{j+1}, \bar{x}, \bar{\xi}) = f_M(t^j, \bar{x} - \xi\tau, \bar{\xi}). \quad (4.1)$$

Разложим правую часть выражения (4.1) в ряд Тейлора, ограничившись двумя первыми членами разложения

$$f^{j+1} - f_M^j = -\tau \xi_i \frac{\partial f_M}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\tau^2}{2} \xi_i \xi_k \frac{\partial f_M}{\partial x_k} + O(\tau^3). \quad (4.2)$$

Это разложение имеет смысл, если параметр $|\xi|\tau/L$, где L — характерный размер задачи, малый. Другими словами, если τ придать смысл времени между столкновениями частиц, то $|\xi|\tau \sim \sigma\tau$ будет иметь порядок длины свободного пробега l . Поэтому вполне естественным выглядит ранее сделанное предположение о слабом изменении f_M на характерном расстоянии порядка l .

Рис. 3: Изменение функции распределения при бесстолкновительном разлете.



Чтобы получить уравнения, описывающие поведение газодинамических параметров, умножим выражение (4.2) последовательно на сумматорные инварианты $\varphi(\xi) = 1, \bar{\xi}, \xi^2$ и проинтегрируем по всем скоростям молекул. При этом получим КГУ систему, которую выпишем на примере 2D случая⁴

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{j+1} - \rho^j}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p), \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\rho u)^{j+1} - (\rho u)^j}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^3 + 3pu) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y}(\rho u^2 v + pv) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 v + pv) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv^2 + pu), \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\rho v)^{j+1} - (\rho v)^j}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 v + p) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 u + pu) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x}(\rho v^2 u + pu) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^3 + 3pv), \end{aligned} \quad (4.5)$$

⁴Во всех предыдущих рассмотрениях, связанных как с получением кинетических схем, так и КГУ системы, не учитывалось влияние поля внешних сил на движение молекул. Это сделано для большей простоты изложения, хотя проведение соответствующих выкладок с учетом влияния поля внешних сил не представляет особого труда

$$\begin{aligned}
& \frac{E^{j+1} - E^j}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x}(u(E+p)) + \frac{\partial}{\partial y}(v(E+p)) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(u^2 \left(E + \frac{5}{2}p \right) + \frac{1}{2}pv^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y} (uv(E+p)) + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial x} (uv(E+p)) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left(v \left(E + \frac{5}{2}p \right) + \frac{1}{2}pu^2 \right) + \\
& + \frac{\gamma}{\gamma-1} \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{p}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\tau}{2} \frac{p}{Pr} \frac{\partial}{\partial x} (RT) \right] + \\
& + \frac{\gamma}{\gamma-1} \left[\frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{p}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\tau}{2} \frac{p}{Pr} \frac{\partial}{\partial y} (RT) \right], \\
& E = \rho \frac{u^2 + v^2}{2} + \varepsilon(T, \rho); \quad p = p(T, \rho); \quad \tau = \frac{2\mu}{p}.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Здесь по сравнению с ранее введенными дополнительно используются обозначения: v — скорость вдоль второго пространственного направления y , γ — показатель адиабаты, Pr — число Прандтля.

Сделаем одно замечание.

Замечание 4.1. Используя процедуру вывода КГУ системы, описанную выше, придем к уравнению энергии (4.6) с числом Прандтля, равным единице ($Pr = 1$), что не соответствует ситуации в реальных газах. Поэтому для аккуратного описания процесса теплопроводности в рамках КГУ вместо 1 ставится число Pr , соответствующее его значению для данного газа. Подобная процедура идентична получению уравнений, описывающих течение вязкого газа из БГК модели [12]

$$\frac{df}{dt} = \nu(\Phi - f), \tag{4.7}$$

где вместо локально-максвелловского распределения f_M используется искусственно введенное анизотропное локально-максвелловское распределение Φ .

Аналогичная ситуация и с величинами коэффициента вязкости μ , уравнений состояния $p(T, \rho)$, $\varepsilon(T, \rho)$ и показателя адиабаты γ , которые в газах не всегда совпадают с их значениями, полученными на основе элементарной кинетической теории. В этом случае, как и обычно в газовой динамике, в КГУ системе используются реальные, подтвержденные экспериментальными и теоретическими данными, значения коэффициента вязкости μ и уравнений состояния. В этой связи становится удобным выделение в явном виде в уравнении (4.6) члена $\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{Pr} \frac{\tau}{2} p \frac{\partial}{\partial x_i} RT$, соответствующего теплопроводности.

Замечание 4.2. Проблема излишне подробного шага по времени из-за малости τ по сравнению с характерным газодинамическим временем t так же как и неудобства, связанные с возможным изменением τ по пространственным переменным, могут быть преодолены с помощью различных вычислительных подходов, подробно описанных в [6].

После двух замечаний обсудим связь КГУ системы и уравнений Навье–Стокса а также проблему инвариантности КГУ системы относительно преобразования Галилея. Эта система получена из выражения (4.2), которое, в свою очередь, является следствием разложения в ряд Тейлора правой части соотношения (4.1). Это разложение проведено с точностью до $O(\tau^2)$. В свою очередь исходное выражение (4.1) по своему смыслу инвариантно относительно преобразования Галилея. Таким образом, можно сказать,

что инвариантность КГУ системы относительно преобразования Галилея выполняется с точностью до членов порядка $O(\tau^2)$.

Тот же самый результат об инвариантности может быть получен в результате непосредственного группового анализа некоторых частных случаев (например, пространственно-двумерного изотермического течения), описываемых КГУ системой [13]⁵.

Выражение «выполнение инвариантности с точностью до $O(\tau^2)$ » непривычно и невольно вызывает желание сделать ехидное замечание насчет «осетрины второй свежести». Однако на практике с подобной ситуацией приходится сталкиваться регулярно, например, аппроксимируя инвариантные уравнения Навье–Стокса с помощью конечно-разностной схемы. Эта разностная схема, с помощью которой получается численное решение, инвариантна с точностью до членов порядка некоторой степени от шага сетки. Напомним, что шаг сетки, как правило, существенно больше длины свободного пробега l , в свою очередь тесно связанным со временем между столкновениями молекул τ .

В случае с КГУ системой находимся в аналогичной ситуации. Она получена из инвариантного соотношения (4.1), которое оказывается не всегда удобно для проведения конкретных вычислений. При этом члены, дающие отличие от инвариантности порядка $O(\tau^2)$ (или $O(l^2)$), существенно меньше аналогичных членов, возникающих при аппроксимации уравнений Навье–Стокса, разностной схемы. Те же самые рассуждения можно привести и при переходе от инвариантных кинетических схем типа (3.4)–(3.6) к КГУ системе, являющейся их дифференциальным приближением. Заметим, что ранее рассмотренные в §3 кинетические схемы являются одним из немногих инвариантных алгоритмов для нахождения газодинамических параметров.

Система КГУ по своему построению гарантирует сглаживание решения на расстоянии порядка длины свободного пробега, что является физически оправданным. Однако другим важным свойством, которому должна удовлетворять как КГУ, так и любая другая альтернативная система, описывающая движение вязкого газа, это близость решения, полученного на их основе, к решению уравнений Навье–Стокса, когда применение последних оправдано.

Не останавливаясь на деталях вывода, который подробно приведен в [6], можно показать, что КГУ система отличается от уравнений Навье–Стокса на члены порядка малости $O(\tau^2)$. Заметим, что сами уравнения Навье–Стокса получены на основе процедуры Чепмена–Энскога с точностью до $O(\tau^2)$. Связь между КГУ системой и уравнениями Навье–Стокса можно записать с помощью символического выражения

$$\text{КГУ} = N - S + O(\tau^2). \quad (4.9)$$

Таким образом, основным достоинством КГУ системы является наличие дополнительных малых членов, которые фактически не влияют на решение, но гарантируют его сглаживание на расстояниях порядка длины свободного пробега l . Это, по меньшей мере, с физической точки зрения гарантирует ограниченность решения⁶ уравнений, описывающих течение вязкой жидкости.

⁵В принципе возможно получение аналога КГУ системы с более высокой точностью выполнения свойства инвариантности, например, с точностью до членов порядка $O(\tau^3)$. Для этого достаточно правую часть выражения (4.1) разложить в ряд Тейлора с точностью до $O(\tau^3)$. При этом получим

$$f^{j+1} - f_M^j = -\tau \xi_i \frac{\partial f_M^j}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\tau^2}{2} \xi_i \xi_k \frac{\partial f_M}{\partial x_k} + \frac{\tau^3}{6} \frac{\partial}{\partial x_i} \xi_i \frac{\partial}{\partial x_k} \xi_k \frac{\partial}{\partial x_p} \xi_k f_M^j + O(\tau^3). \quad (4.8)$$

Интегрируя выражение (4.8) с сумматорными инвариантами, приходим к разновидности КГУ системы, являющейся аналогом уравнений Барнетта

⁶Возможности КГУ системы и кинетических схем связаны не только с возможностью корректного описания течения вязкого газа. Их можно применять для моделирования течений умеренно-

Автор также хотел бы обратить внимание на работы Ю.А. Климонтовича [14]–[15], в которых гарантируется сглаживание решения. Однако полученные в результате уравнения газовой динамики вряд ли следует признать удачными. В частности уравнение неразрывности имеет вид в условии отсутствия поля внешних сил

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} D \frac{\partial \rho}{\partial x_k}, \quad (4.10)$$

где D — коэффициент диффузии, по порядку величины совпадающей с вязкостью.

Диссипативный член в уравнении (4.10) имеет первый порядок $O(\tau)$ в отличие от аналогичных дополнительных членов в КГУ системе, имеющих порядок $O(\tau^2)$. Поэтому решение на основе системы, в которую входит уравнение (4.10), может существенно отличаться от решения, полученного на основе уравнений Навье–Стокса.

5 Lattice Boltzmann схемы и метод стабилизационных поправок

Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений успешно использовались для моделирования сложных газодинамических течений [5],[6]. В последнее время для моделирования подобных явлений на высокопроизводительных вычислительных системах активно начали использоваться Lattice Boltzmann схемы (LBS) [16],[17]. Проследим связь между кинетическими схемами и LBS, обратив особое внимание на использование в последних характерных минимальных масштабов [18].

Основой для развития LBS послужила работа [19], в которой для получения газодинамических параметров, также как и в кинетических схемах использовались дискретные модели для описания одночастичной функции распределения.

Простая и наиболее популярная LBS схема строится на базе кинетической модели Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК) [9]

$$\frac{df}{dt} = \nu(f_M - f), \quad (5.1)$$

где ν — частота столкновений, непосредственно связанная со временем между столкновениями молекул τ .

Явная разностная аппроксимация LBS, связывающая значения функции распределения на момент времени t^j и $t^{j+1} = t^j + \Delta t$, имеет вид

$$f(\bar{x}_i, \bar{\xi}_k, t^{j+1}) = f(\bar{x}_i - \bar{\xi}_k \Delta t, \xi_k, t^j) + \nu(f_{Mi}(x_i - \xi_k \Delta t, \xi_k, \Delta t) - f(\bar{x}_i - \xi_k \Delta t, \xi_k, t^j)), \quad (5.2)$$

где ξ_k — специально подобранный набор скоростей, гарантирующий попадание молекул в точки с координатами x_i в момент времени t^{j+1} из ближайших точек разностного шаблона (рис. 4)⁷.

Выбор f_{Mi} , несколько отличной от классической локально максвелловской функции f_M (3.1), определяется необходимостью выполнения в разностном виде

$$\sum f_{Mi} \varphi(\xi) \Delta \xi = \sum f_i \varphi(\xi) \Delta \xi \quad (5.3)$$

для каждого шаблона аналога основного положения процедуры Чепмена–Энскога (3.3).

разреженных газов [5],[6] с $K_n \sim 0.001$. Однако обсуждение этих вопросов выходит за рамки данной публикации.

⁷Представленная на рис. 4 схема D₂Q₉ для 2D геометрии связывает значения функции f^{j+1} в точке x_i с девятью ее значениями на предыдущем слое по времени. Возможны и более сложные шаблоны, особенно в случае пространственных трехмерных задач [17].

Общим для кинетических схем и LBS является использование дискретных моделей для описания функции распределения и применения процедуры Чепмена–Энскога для нахождения газодинамических параметров на новом слое по времени. На самом деле эта связь еще ближе, если учесть, что КГУ система — дифференциальное приближение кинетических схем помимо процедуры, описанной в §4, может быть получена непосредственно из БГК модели (5.1) [6], разностный аналог которой (5.2) положен в основу LBS.

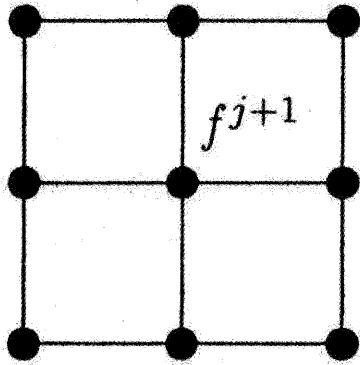


Рис. 4: Шаблон для одной из возможных (D_2Q_9) схем LBS.

Заметим, что получение КГУ системы непосредственно из БГК модели естественно. В самом деле, одним из условий вывода кинетических схем и КГУ системы является мгновенная максвеллизация на новом слое по времени t^{j+1} . Напомним, что именно условие максвеллизации молекул после процедуры их столкновения является условием получения уравнений (5.1) из уравнения Больцмана [9].

Поняв связь между кинетическими схемами, КГУ системой и LBS [18], видно, что в качестве эффективной длины свободного пробега l у последних выступает характерный размер расчетной ячейки. На этом расстоянии (минимальным по аналогии с l для кинетических схем) LBS гарантирует сглаживание решения, что в конечном итоге и обеспечивает ее возможности при моделировании сложных течений

вязкого газа.

Однако, необходимо учесть, что h (шаг сетки), как правило, существенно больше реальной длины свободного пробега l и эффективный коэффициент вязкости

$$\mu \sim h, \quad (5.4)$$

реализуемый в рамках LBS, будет значительно превышать его натуральную величину.

Для несжимаемой жидкости и слабосжимаемого газа эту трудность легко обойти. В этом случае определяется безразмерный параметр — число Рейнольдса

$$\text{Re} = \frac{\rho U L}{\mu}, \quad (5.5)$$

где U и L — характерные значения макроскопической скорости и длины. Для описания реального процесса достаточно так изменить параметры задачи, например, U или L , чтобы получаемое значение числа Рейнольдса совпадало с его естественным значением несмотря на отличие μ от натурального коэффициента вязкости.

Отсутствие возможности простой перенормировки числа Рейнольдса в более общем случае послужило причиной того, что основные работы в области LBS сосредоточены на моделировании течений несжимаемой жидкости или слабосжимаемого газа⁸. Однако, следует обратить внимание на ряд работ, например, [20], в которых рассматривается применение LBS для моделирования сжимаемого газа.

Обратим внимание на то, что с вычислительной точки зрения кинетические схемы и LBS чрезвычайно просты. По своей структуре — это явные схемы, адаптация которых

⁸Заметим, что при использовании КГУ системы, в силу аналитических процедур, положенных в основу ее построения и позволяющих применять в полученных уравнениях реальное время между столкновениями τ и связанную с ним длину свободного пробега l , ограничений на сжимаемость газа не существует.

на архитектуру многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью не составляет особого труда. Этот факт также является одной из основных причин возрастающего интереса к указанным алгоритмам.

Явные схемы более обоснованы с физической точки зрения. Кроме того, любопытно обратить внимание на то, что уравнение энергии КГУ системы (4.6) в отсутствие движения вещества переходит в явную форму записи уравнения теплопроводности. В этом случае реализуется конечная скорость распространения тепла при наличии присущей КГУ системе ограничения снизу ($\Delta t \sim \tau$) на допустимый шаг по времени.

Подводя итоги обсуждения связи кинетических схем и LBS, отметим еще раз, что их возможности при моделировании сложных газодинамических течений в своей основе опираются на сглаживание полученного с их помощью решения на некоторых минимальных размерах, меньше которых дальнейшая детализация описания уже не производится. Рассмотрим с этой точки зрения еще один перспективный подход, опирающийся на ту же методологию — метод стабилизационных поправок.

Этот метод, наиболее ярко представленный в работах Е. Ônata, например [21],[22], удобнее рассмотреть на примере одномерного уравнения конвекции — диффузии, которое имеет вид

$$-u \frac{d\Phi}{dx} + k \frac{d^2\Phi}{dx^2} + Q = 0, \quad x \in [a, b]. \quad (5.6)$$

Предположим для простоты, что коэффициенты u и k постоянны и положительны. Обозначим диффузионную часть потока $q = -\frac{d\Phi}{dx}$, а адвективную — через $u\Phi$.

Уравнение баланса для отрезка $[a, b]$, $x_a = x_b - h$, может быть записано в виде

$$kq(x_b) - [u\Phi](x_b) - kq(x_b - h) + [u\Phi](x_b - h) - \frac{1}{2}[Q(x_b) + Q(x_b - h)] = 0 \quad (5.7)$$

с учетом того, что интеграл от источника Q представлен с помощью формулы трапеций. Представим выражения для потоков и источника в виде разложения в ряд Тейлора и подставим в выражение (5.7)

$$-u \frac{d\Phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\Phi}{dx} \right) + Q - \frac{h}{2} \frac{d}{dx} \left[-u \frac{d\Phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\Phi}{dx} \right) + Q \right] = 0. \quad (5.8)$$

Считая диффузионный поток и источник малыми, поэтому, отбрасывая их составляющие пропорциональные h , получим следующее уравнение

$$-u \frac{d\Phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\Phi}{dx} \right) + Q + \frac{h}{2} \frac{d}{dx} u \frac{d\Phi}{dx} = 0, \quad (5.9)$$

которое при $h = 0$ перейдет в исходное уравнение (5.6).

По сравнению с (5.6) в (5.9) появился дополнительный диффузионный член $\frac{h}{2} \frac{d}{dx} u \frac{d\Phi}{dx}$, который, как показано на примерах расчетов, приведенных в [21],[22], обеспечивает стабильность решения, в частности связанную с отсутствием нефизических отрицательных значений Φ . Появление дополнительного диффузионного члена связано с учетом сглаживания на расстоянии h — минимальном масштабе, меньше которого дальнейшая детализация решения уже не имеет смысла.

На первый взгляд кажется, что сеточный размер h не имеет реального физического смысла. Однако, на практике при наличии достаточных вычислительных мощностей величина шага h выбирается из условия описания тех или иных особенностей течения. Величина h имеет смысл минимального масштаба; особенности, проявляемые на размерах меньше которого по тем или иным причинам в данной постановке задачи уже

не учитываются. То есть, во многих случаях масштаб h имеет реальный физический смысл.

Между методом стабилизационных поправок и КГУ системой существует еще большая аналогия. Умножим и поделим дополнительный диффузионный член в (5.9) на величину u . При этом, учитывая, что u постоянна, получим

$$-u \frac{d\Phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\Phi}{dx} \right) + Q + \frac{d}{dx} \frac{\tau}{2} \frac{d\Phi u^2}{dx} = 0, \quad (5.10)$$

где $\tau = h/u$ является согласно терминологии [21],[22] внутренним временем.

Переход от уравнения (5.9) к уравнению (5.10) имеет прямую аналогию с выводом КГУ системы непосредственно из порождающей ее кинетической схемы [5]. Здесь также рассматривается характерное кинетическое время

$$\tau = \frac{h}{|\xi_0|}, \quad (5.11)$$

где ξ_0 — характерное значение скорости молекулы, за которую она пересекает расчетную ячейку. Впоследствии для описания течений вязкого газа эта величина ξ_0 заменялась на скорость звука c , а h на l — длину свободного пробега.

Отметим также, что дополнительные диссипативные члены (5.10) метода стабилизационных поправок по своей структуре похожи на диссипативные члены КГУ системы. Этот факт является не случайным, учитывая общую методологию, заложенную в их основу.

Как видно в кинетических и Lattice Boltzmann схемах, методе стабилизационных поправок используется общий подход, связанный с применением минимальных масштабов. Чтобы еще раз обратить внимание на общность данной методологии, рассмотрим ее применение, связанное с решением задачи фильтрации и моделированием поведения одночастичной функции распределения.

6 Некоторые дополнительные примеры, ограничения снизу на используемые масштабы

Вначале рассмотрим возможную модификацию кинетического уравнения Больцмана. Для этого вернемся к одному из способов получения кинетических схем, описанному в § 3. Дифференциальным приближением для схемы (3.9) будет уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} |\xi| \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + J(f, f') \quad (6.1)$$

Дополнительный диффузионный член $\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} |\xi| \Delta x \frac{\partial f}{\partial x}$, стоящий в правой части (6.1), являющийся следствием разностной аппроксимации, гарантирует сглаживание на расстоянии Δx .

При все более подробной аппроксимации этот дополнительный член будет вместе с Δx стремиться к нулю и в итоге уравнение (6.1) перейдет в уравнение Больцмана. Однако зададимся вопросом, связано ли ограничение снизу на Δx только с возможностями используемой вычислительной схемы или имеет более глубокий физический смысл. Для этого вспомним, что функция распределения f имеет вероятностный характер. И для того, чтобы физически определить вероятность распределения молекул по скоростям,

необходимо рассмотреть ансамбль, состоящий по меньшей мере из нескольких десятков частиц.

Это количество частиц не локализовано в точке, а расположено в конечном объеме с характерным линейным размером Δx . По аналогии с «физически бесконечно малым объемом» нет смысла рассматривать размеры, меньшие, чем Δx . Проводя на примере воздуха нормальной плотности оценку Δx , получим

$$l_0 \ll \Delta x \ll l, \quad (6.2)$$

где l_0 — размер молекулы, а l — длина свободного пробега.

То, что входящий в правую часть уравнения (6.1) коэффициент Δx существенно меньше длины свободного пробега l , имеет очень большое значение. В этом случае результаты, полученные на основе модифицированного уравнения (6.2), включая коэффициенты переноса, практически не будут отличаться от данных, полученных на основе классического уравнения Больцмана [6],[23]. Вместе с тем, по самому построению уравнение (6.1) обладает корректностью по крайней мере с физической точки зрения. По аналогии с работой [24] для уравнения (6.1) вполне возможно доказательство существования решения.

Уравнение (6.1) отличается от предложенного автором работы [25] обобщенного уравнения Больцмана

$$\frac{Df}{Dt} - \frac{D}{Dt} \left(\tau \frac{Df}{Dt} \right) = J(f, f'), \quad (6.3)$$

где D/Dt — дифференциальный оператор, стоящий в левой части уравнения Больцмана, τ — частота столкновений непосредственно связанная с длиной свободного пробега.

Наличие вторых производных, пропорциональных τ (и l) в уравнении (6.3), может привести к существенным отличиям в некоторых практически важных случаях (например, $K_n \sim 1$) от решения, полученного на основе уравнения Больцмана. Факт ошибочности применения уравнения Больцмана и, наоборот, справедливости использования уравнения (6.3) пока не нашел подтверждения.

Наоборот, использование уравнения (6.1) не приводит к сколь-нибудь заметным отличиям от результатов, полученных на основе уравнения Больцмана, при условии выполнения (6.2). В этом смысле имеется полная аналогия по сравнению КГУ системы и уравнений Навье–Стокса. Использование уравнения (6.1) в силу наличия сглаживающих членов может оказаться полезным при моделировании одночастичной функции распределения на высокопроизводительных системах.

Другим примером является моделирование процесса фильтрации в классической постановке, для описания которого служит система уравнений [26]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \bar{u} = 0, \quad (6.4)$$

$$K \bar{u} = -\operatorname{grad} p, \quad (6.5)$$

$$\rho = \rho_0 [1 + \beta(p - p_0)], \quad (6.6)$$

где K — коэффициент проницаемости, зависящий как от свойств породы, так и от вязкости фильтрующейся жидкости; p_0, ρ_0 — постоянные значения давления и плотности; β — коэффициент, учитывающий связь между изменением плотности и давления⁹.

⁹Как правило для несжимаемой жидкости этот коэффициент мал, так как уже небольшое изменение плотности приводит к сильному изменению давления.

Закон, открытый экспериментально Дарси в 1857 г., описываемый уравнением (6.5), может быть получен непосредственно из уравнения системы Навье–Стокса, описывающим изменение импульса [27]. При этом пренебрегалось влиянием конвективных членов, а само решение осреднялось на характерном масштабе τ . Обсудим выбор масштаба \tilde{l} .

При рассмотрении течения жидкости в пористой среде необходимо рассматривать ее движение вокруг зерен породы, форма и расположение которых достаточно произвольны. Однако, как показывает практика, для осредненного на расстояниях, значительно превышающих размеры зерен породы решения, эти особенности среды не играют роли. Определяющим для среды становятся ее осредненные характеристики, такие как, например, коэффициент проницаемости K . Минимальным масштабом в этом случае выступает размер \tilde{l} , в качестве которого можно выбирать расстояние порядка $10 \div 10^2$ зерен породы.

Из приведенных рассуждений видно, что постановка (6.4)–(6.6) эклектична. В самом деле в рамках уравнения (6.5) учитывается осреднение на масштабах порядка \tilde{l} , а в уравнении (6.4) нет.

Используя рассуждения, во многом аналогичные выводу кинетических схем и КГУ системы, можно получить дополнительные диссипативные члены для уравнения (6.4) [28],[29], которое примет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \bar{u} = \operatorname{div} \frac{\tilde{l} c}{2} \operatorname{grad} \rho, \quad (6.7)$$

где \tilde{l} — обсуждаемый выше масштаб осреднения, c — характерная скорость распространения возмущения, в качестве которой можно выбрать скорость звука в фильтрующейся жидкости.

Отметим, что ввиду малости \tilde{l} по сравнению с размерами геологического пласта, наличие дополнительного члена в (6.7) не вносит сколь-нибудь заметных изменений по сравнению с классической постановкой (6.4)–(6.6). Вместе с тем, как показывают примеры расчета [28],[29], наличие регуляризирующего члена дает заметные преимущества при численной реализации.

Заметим, что в самом способе построения уравнения (6.7) имеется значительный произвол в выборе параметров \tilde{l} и c . Важно, чтобы эти параметры находились по порядку величины в указанных выше диапазонах (например, \tilde{l} от 10 до 100 диаметров зерен породы). Это дает дополнительные удобства при организации вычислений. То же самое можно сказать о параметре Δx , входящем в кинетическое уравнение (6.1).

В несколько более замаскированном виде это свойство присуще и дополнительным, по сравнению с уравнениями Навье–Стокса, диссипативным членам КГУ системы. Согласно (4.9), эти члены имеют второй порядок малости $O(\tau^2)$ и, например, если в правой части уравнения (4.3) вместо истинного τ взять не очень сильно отличающиеся от него значения, регуляризирующий эффект дополнительных диссипативных членов останется прежним.

7 Результаты численных расчетов

В этом параграфе будут рассмотрены некоторые результаты численных расчетов, которые иллюстрируют возможности алгоритмов, использующих дополнительные регуляризирующие члены. На рис. 5а и 5б представлены поля скоростей, возникающих при

обтекании сферы потоком с небольшим числом $Re = 25$ и скоростью, определяемой числом Маха $M = 0.15$. На рис. 5а демонстрируются данные натурного эксперимента,

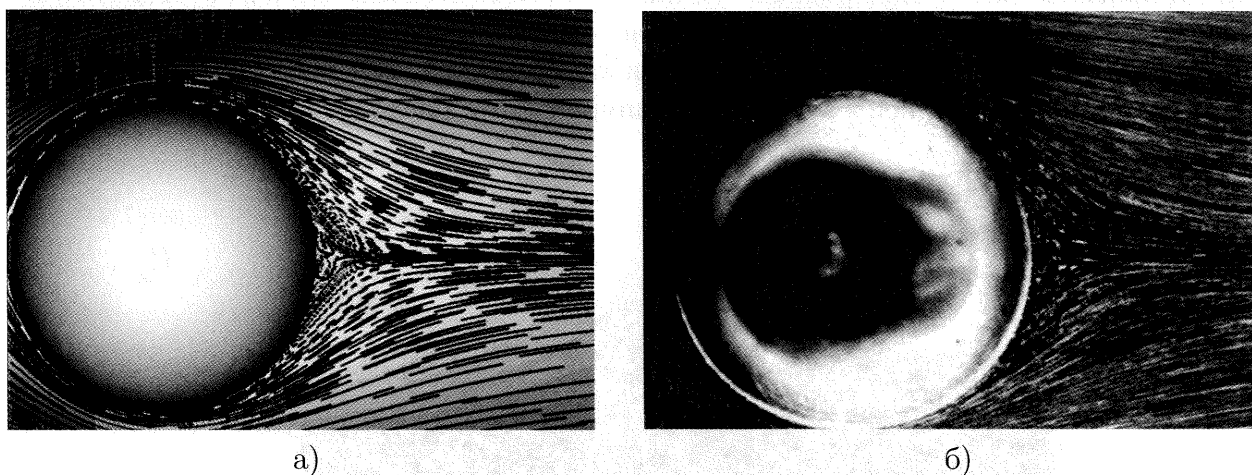


Рис. 5: Линии тока при обтекании сферы: а) — эксперимент, б) — расчетные данные

а на рис. 5б данные расчета на основе использования КГУ системы. Для расчета использовалась неструктурированная сетка, состоящая из тетраэдров. Сетка сгущалась к поверхности сферы. Расчет проводился на многопроцессорной системе, состоящей из 25 процессоров. Следует обратить внимание на совпадение данных расчета и эксперимента. Это подтверждает связь между КГУ системой и традиционной моделью Навье–Стокса (§4). Вместе с тем алгоритмы, опирающиеся на КГУ систему, легко адаптируются на архитектуру многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью, в том числе и при использовании неструктурированных сеток.

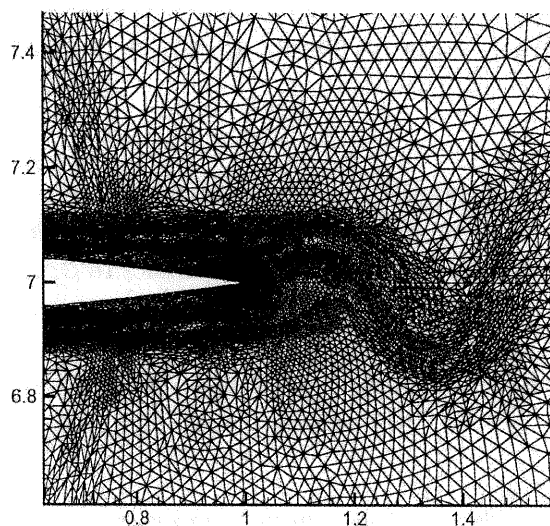


Рис. 6: Фрагмент динамически адаптивной сетки

Неструктурированные сетки в последнее время широко используются в высокопроизводительных многопроцессорных расчетах. На рис. 6 представлен фрагмент сетки при моделировании обтекания крылового профиля. Аппроксимация происходит на неструктурированных треугольных сетках. Заметим, что кинетические схемы дают возможность простой аппроксимации на неструктурированных сетках (§3).

В приведенном расчете используются динамические адаптивные сетки. При этом значительное сгущение сетки происходит автоматически после предварительного расчета в наиболее интересных зонах. В данном примере таковыми зонами являются пограничный слой и вихревой след за обтекаемым телом. На рис.7а и 7б представлены результаты, демонстрирующие возможности кинетических схем при расчете турбулентных течений. При этом используется комбинированный подход.

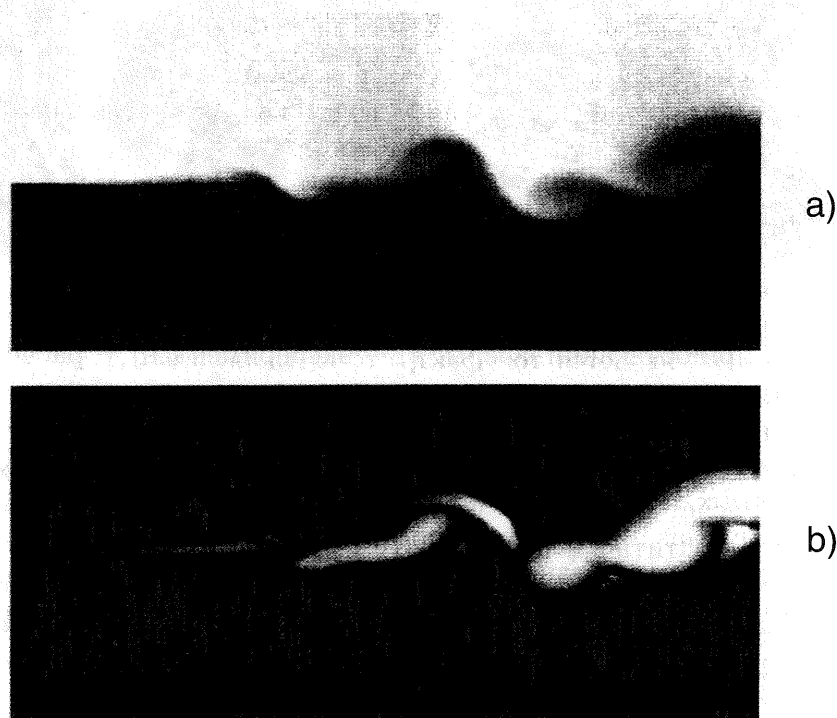


Рис. 7: Вычислительная шпирен-фотография турбулентного слоя смешения: а) температура, б) турбулентная вязкость.

В рамках этого подхода вначале с помощью прямого моделирования на высокопроизводительных системах определяется поле течения, включающее неустойчивости крупных масштабов. Затем, опираясь на полученные таким образом характеристики течения, для нахождения неустойчивостей более мелких масштабов используются различные модели турбулентной вязкости. При этом неявно используется тот факт, что чем меньше масштаб неустойчивостей, тем с большей надежностью можно говорить об их однородности и справедливости применения для их описания универсальных законов турбулентности.

Замечание 7.1. Прямое моделирование турбулентности существенно опирается на детальное описание газодинамических полей. Вычислителям хорошо известны трудности, связанные с моделированием неустановившихся течений вязкого газа при подробной пространственно-временной дискретизации уравнений, описывающих поведение газодинамических полей. Во многих случаях результаты моделирования на подробных сетках перестают коррелировать с аналогичными данными, полученными на грубых сетках. При этом достоверность моделирования, в первую очередь неустойчивостей мелких масштабов, весьма проблематична. Заметим, что многолетний опыт использования кинетических схем и КГУ системы свидетельствует о возможности избежать подобных негативных эффектов.

На рис.7а и 7б приведены результаты расчета слоя смешения (данные расчетов на основе КГУ системы представлены И.В. Абалакиным и Т.Н. Козубской). Этот слой возникает при движении двух движущихся с разной U_0 ($M_a = 0.7$, $M_b = 0.3$) слоев воздуха. В качестве модели, описывающей развитие средне и мелкомасштабной турбулентности на фоне рассчитанных прямым путем крупномасштабных неустойчивостей, использовалась широко известная $(k - \varepsilon)$ дифференциальная модель турбулентности. При этом турбулентная вязкость определялась через энергию и скорость диссипации турбулентной энергии.

Перейдем к моделированию процесса фильтрации на основе предложенной модели (6.5)–(6.7), использующей дополнительный регуляризирующий член. На рис. 8 приведены расчетные данные по давлению плоско-радиального потока, притекающего к добывающей скважине [26]. В обоих случаях, как для традиционной модели (6.4)–(6.6), так и

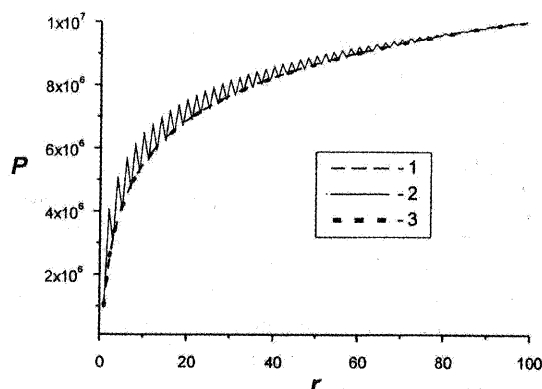


Рис. 8: Давление вблизи скважины: 1 – точное решение, 2 – решение на основе системы (6.4)–(6.6), 3 – решение системы (6.5)–(6.7)

для модели (6.5)–(6.7) с дополнительным диссипативным членом, использовалась явная схема с аппроксимацией второго порядка точности для пространственных производных первого порядка. Эта схема хорошо адаптируется к архитектуре многопроцессорных систем с распределенной памятью. Как видно на рис. 8 модель (6.5)–(6.7) позволяет успешно гасить осцилляции счетного характера.

8 Заключение

Данная работа во многом опирается на хорошо известные факты или ранее опубликованные результаты, в том числе и автора. Однако в настоящей работе эти результаты рассматриваются под единым углом зрения, определяющим наличие минимальных масштабов, меньше которых не имеет смысла дальнейшая детализация решения.

Эти масштабы могут иметь различную физическую природу. Они непосредственно зависят от характера изучаемого явления. Поэтому построенные на их основе регуляризаторы выполняют не только математические функции, связанные со сглаживанием численного решения, а могут рассматриваться как естественные составляющие моделей, описывающих изучаемое явление. При этом имеет место тесная связь с соответствующими классическими моделями.

Список литературы

- [1] Кошелев А.И., Челнак С.И. Регулярность решения некоторых краевых задач для квазилинейных эллиптических и параболических систем. // СПб.: Изд-во С. Петербургского университета, 2000, 355с.
- [2] Ладыженская О.А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. // М.: Наука, 1970, 288с.
- [3] Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. // М.: Наука, 1987, 840с.
- [4] Волчинская М.И., Павлов А.Н., Четверушкин Б.Н. Об одной схеме интегрирования уравнений газовой динамики. // М.: Препринт N 113 ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1983, 12с.
- [5] Четверушкин Б.Н. Кинетически согласованные схемы в газовой динамике. // М.: Изд-во МГУ, 1999, 232с.
- [6] Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. // М.: Макс-Пресс, 2004, 328с.
- [7] Власов А.А. Статистические функции распределения. // М.: Наука, 1966, 440с.
- [8] Коган М.Н. Динамика разреженного газа. // М.: Наука, 1967, 440с.
- [9] Либов Р. Введение в теорию кинетических уравнений. // М.: Мир, 1974, 371с.
- [10] Chetverushkin B.N., Gasilov V.A., Polyakov S.V., Iakobovskii M.V. and Romanyukha N.Yu. Parallel software project GIMM: Numerical study of complex CFD problems. // Int. conf. Parallel CFD 2004 (Las Palmas de Gran Canaria, Spain, May 2004). A Collection of Abstracts, pp.257–258. IVSANI, Un. od Las Palmas de Gran Canaria, 2004.
- [11] Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Использование кинетических моделей для расчета газодинамических течений. // В кн. «Математическое моделирование. Процессы в нелинейных средах». М.: Наука, 1986, сс.261–278.
- [12] Черчиньяни К. О методах решения уравнения Больцмана. // В кн. «Неравновесные явления: Уравнение Больцмана». Под ред. Д.н. Л. Либовца, Е.У. Монтролла. М.: Мир, 1986, сс.132–204.

- [13] Ковалев В.Ф., Четверушкин Б.Н. Об инвариантности квазигазодинамической системы уравнений. // ДАН, 2003, т.388, N 6, сс.743–746.
- [14] Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. // М.: Янус, 1995.
- [15] Климонтович Ю.Л. Единое описание кинетических и газодинамических процессов.// Труды семинара: Время, хаос и математические проблемы под рук. В.А. Садовниченко. Ин-т математических исследований сложных систем МГУ. М.: 2004, сс.65–104.
- [16] Tsutahara M., Takada N., Kataohta N. Lattice gas and Lattice Boltzmann Methods. // New method of computational fluid dynamics. Corona Publishing. Tokyo, 1999, p.162 (in Japan).
- [17] Succi S. The Lattice Boltzmann equation in fluid dynamics and beyond.// Claredon Press, Oxford, 2001, p.304.
- [18] Мачин Д.Е., Четверушкин Б.Н. Кинетические и Lattice Boltzmann схемы. // Математическое моделирование, 2004, т.16, N 3, сс.87–99.
- [19] Mc. Namara G.R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation for simulate lattice gas automata. // Phys. Rev. Lett, 1986, v.56, N 14, pp.1505–1508.
- [20] Hsu A.T., Yany T., Ecer A. and Lopez I. A review of Lattice Boltzman model for compressible flow.// In Parallel computational fluid dynamics. Advanced numerical methods software and applications. Ed. by Chetverushkin et. all Elsevur, 2004, pp.19–28.
- [21] Oñata E. Derivation of stabilized equations for numerical solution of advective–diffusive transport and fluid flow problems. // Comput Math. Appl. Mech. Eng. 1998, v.151, pp.233–265.
- [22] Oñata E., Manzan M. Stabilization techniques for finite element analysis of convection–diffusion problems.// Inter Centre for Numer. Methods in Engeneering N 183. Barselona, 2000, p.43.
- [23] Абалакин И.И., Четверушкин Б.Н. Применение кинетически согласованных разностных схем как модели для описания течений умеренно–разреженных газов. // Математическое моделирование, 1993, т.5, N 5, сс.61–70.
- [24] Wieser W. Lequation de Boltzmann avec de viscosite. Solution globales sous des hypotheses faibles sur la condetion initial.// C.R. Acad. Sc. Parie, t.298, serie I, N 8, 1989.
- [25] Алексеев Б.Д. Обобщенная больцмановская физическая кинетика. // Теплофизика высоких температур, 1997, т.35, N 1, сс.129–146.
- [26] Басниев Л.С., Кочина И.Н., Максимов В.М. Подземная гидромеханика. // М.: Наука, 1993, 416с.
- [27] Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах.// М.: Наука, 1984, 352с.

- [28] Трапезникова М.А., Белоцерковская М.Е., Четверушкин Б.Н. Аналог кинетически-согласованных схем для моделирования задачи фильтрации. // Математическое моделирование, 2002, т.14, N 10, сс.69–76.
- [29] Белоцерковская М.Е., Опарин А.И., Четверушкин Б.Н. Использование вложенных сеток для моделирования процесса фильтрации. // Математическое моделирование, 2004, т.16, N 12.
- [30] Фриш У. Турбулентность. Наследие А.Н. Колмогорова. // М.: Физматлит, 1998, 343с.