

УДК 532.5: 536.24

**Тыринов А.И., Авраменко А.А., Басок Б.И., Давыденко Б.В.***Институт технической теплофизики НАН Украины***МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОТЕЧЕНИЙ МЕТОДОМ РЕШЕТОК БОЛЬЦМАНА**

Розглянуто підхід до аналізу мікро- й макротечей з використанням методу решіток Больцмана. Отримано профілі розгінної течії для мікроканалу без проковзування та з умовою проковзування на стінці. Проаналізовано вплив числа Кнудсена на довжину початкової гідродинамічної ділянки й гідравлічний опір каналу.

Рассмотрен подход к анализу микро- и макротечений с использованием метода решеток Больцмана. Получены профили скорости на начальном участке для микроканала без проскальзывания и с условием проскальзывания на стенке. Проанализировано влияние числа Кнудсена на длину начального гидродинамического участка и гидравлическое сопротивление канала.

The analysis for micro- and macroflows using the lattice Boltzmann method is considered. The velocity profiles in the inlet length of a microchannel with slip and nonslip boundary conditions are obtained. The Knudsen number effect on the inlet length and channel hydraulic resistance is analysed.

$e$  – координаты положений решетки;  
 $f$  – функция распределения;  
 $f^e$  – функция равновесного распределения;  
 $h$  – полуширина канала;  
 $k$  – постоянная Больцмана;  
 $L$  – ширина канала;  
 $m$  – масса молекулы;  
 $p$  – давление;  
 $R$  – универсальная газовая постоянная;  
 $t$  – время;  
 $T$  – температура;  
 $u$  – скорость течения;  
 $w$  – весовые коэффициенты;

$x, y$  – координаты;  
 $\Lambda$  – длина свободного пробега;  
 $\nu$  – кинематическая вязкость;  
 $\rho$  – плотность;  
 $\tau$  – время релаксации;  
 $v$  – скорость молекулы;  
 $\text{Kn} = \Lambda/L$  – число Кнудсена.

**Типы переменных обозначаются диакритическими знаками:**

$\tilde{y}$  – размерная переменная;  
 $\bar{y}$  – безразмерная переменная;  
 $y$  – «решетчатая» переменная.

**Введение**

В настоящее время, в связи с развитием нанотехнологий, резко возрос интерес к моделированию микро- и нанопотоков. Разработан ряд методов, которые соответствуют различным линейным и временным масштабам потока. Можно отметить следующую классификацию. В микродиапазоне (microscale), который условно имеет верхнюю границу 10 nm и 1 ns используются методы молекулярной динамики (MD), в которых учитываются только консервативные (потенциальные) межмолекулярные валентные и невалентные силы [1,2]. В мезоскопическом диапазоне (mesoscale – 10 nm ... 1  $\mu$ m и 1 ns ... 10 ns) используется метод динамики диссипативных частиц (DPD), который учитывает не только невалентные потенциальные силы (по-

тенциал Ленарда-Джонса), но и диссипативные и стохастические взаимодействия [2]. Для этого же диапазона масштабов используется и метод решеток Больцмана, основанный на решетчатом уравнении Больцмана [3,4]. В настоящем исследовании данный метод используется для расчета гидродинамики микропотока в канале со скользящими граничными условиями на стенке. Такой режим течения соответствует диапазону чисел Кнудсена  $\text{Kn} = 0,1 \dots 0,001$ .

Метод решеток Больцмана (Lattice-Boltzmann Method, LBM), являющийся развитием идеи клеточных автоматов, появился в конце 20-го века. Одним из его достоинств является возможность выбора оператора столкновений, отражающего особенности микродинамики исследуемой среды. Таким образом, удается мо-

делировать явления, с которыми плохо справляются традиционные методы, основанные непосредственно на имитации макроскопических свойств жидкости. С другой стороны, этот метод можно рассматривать как дискретизацию уравнения Больцмана [5], что позволяет решать его численно.

**Решетчатое уравнение Больцмана**

Метод решеток Больцмана основан на дискретизации уравнения Больцмана в приближении BGK [6]

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} = \frac{1}{\tilde{\tau}} (\tilde{f}^e - \tilde{f}), \quad (1)$$

названном так по фамилиям авторов (Bhatnagar-Gross-Krook). В уравнении (1)  $\tilde{\tau}$  – время релаксации, а  $\tilde{f}^e$  – равновесное распределение молекул, соответствующее распределению Максвелла

$$\tilde{f}^e = \tilde{\rho} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m(\tilde{\mathbf{v}} - \tilde{\mathbf{u}})^2}{2kT} \right). \quad (2)$$

Уравнение (1) в виде конечных разностей будет выглядеть следующим образом

$$\frac{\tilde{f}(\tilde{x}_i + \Delta\tilde{x}_i, \tilde{v}_i, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) - \tilde{f}(\tilde{x}_i + \Delta\tilde{x}_i, \tilde{v}_i, \tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\tilde{f}(\tilde{x}_i + \Delta\tilde{x}_i, \tilde{v}_i, \tilde{t}) - \tilde{f}(\tilde{x}_i, \tilde{v}_i, \tilde{t})}{\Delta\tilde{x}_i} = \frac{\tilde{f}^e - \tilde{f}}{\tilde{\tau}}. \quad (3)$$

Для  $i$ -мерного пространства число векторов скоростей  $\tilde{v}_i$  является конечным. Принимая, что положение  $\tilde{x}_i + \tilde{v}_i \Delta\tilde{t}$  должно занимать фиксированное положение в пространственной решетке,  $\Delta\tilde{x}_i = \tilde{v}_i \Delta\tilde{t}$ . Кроме того, так как вектор скорости фиксирован, то  $\tilde{f}(\tilde{x}_i, \tilde{v}_i, \tilde{t}) = \tilde{f}(\tilde{x}_i, \tilde{t})$ . С учетом сказанного, формула (3) примет вид

$$\frac{\tilde{f}(\tilde{x}_i + \Delta\tilde{x}_i, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) - \tilde{f}(\tilde{x}_i, \tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} = \frac{\tilde{f}^e - \tilde{f}}{\tilde{\tau}}. \quad (4)$$

Раскладываем левую часть выражения (4) в ряд Тейлора до второго порядка

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} + \frac{1}{2} \Delta\tilde{t} \left( \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} \right) + \tilde{v}_j \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} \right) \right) + O(\partial^3) = \frac{\tilde{f}^e - \tilde{f}}{\tilde{\tau}}. \quad (5)$$

После подстановки из (1) значения для  $\tilde{f}$  получим

$$\frac{\partial \tilde{f}^e}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} - \left( \tilde{\tau} - \frac{\Delta\tilde{t}}{2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} \right) + \tilde{v}_j \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial \tilde{f}^e}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}^e}{\partial \tilde{x}_i} \right) \right) + O(\partial^3) = \frac{\tilde{f}^e - \tilde{f}}{\tilde{\tau}}. \quad (6)$$

Умножив уравнение (6) на  $\tilde{v}_i$ , проинтегрируем полученное уравнение по  $\tilde{\mathbf{v}}$

$$\int \tilde{v}_j \left[ \frac{\partial \tilde{f}^e}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} - \left( \tilde{\tau} - \frac{\Delta\tilde{t}}{2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{x}_i} \right) + \tilde{v}_j \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left( \frac{\partial \tilde{f}^e}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v}_i \frac{\partial \tilde{f}^e}{\partial \tilde{x}_i} \right) \right) \right] d\tilde{\mathbf{v}} = \int \frac{\tilde{f}^e - \tilde{f}}{\tilde{\tau}} d\tilde{\mathbf{v}}. \quad (7)$$

Используя для  $\tilde{f}^e$  выражение из (2) и проинтегрировав (7) получим

$$\tilde{\rho} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{t}} + \tilde{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j} = -\frac{\partial(\tilde{\rho}RT)}{\partial \tilde{x}_i} + \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_j} \left( \tilde{\rho} \left( \tilde{\tau} - \frac{1}{2} \right) \Delta\tilde{t} RT \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial \tilde{x}_i} \right) \right), \quad (8)$$

где  $\tau = \tilde{\tau} / \Delta\tilde{t}$ ,  $R = k/m$ . Правая часть уравнения (7) будет равна нулю, так как согласно [5] интеграл от интеграла столкновений, умноженного на инвариант столкновения  $\tilde{\mathbf{v}}$  равен нулю. При выводе уравнения (8) учитывались соотношения

$$\bar{\rho} = \int \tilde{f} d\tilde{v}, \quad \bar{\rho} \tilde{u} = \int \tilde{v} \tilde{f} d\tilde{v}. \quad (9)$$

Сравнивая уравнение Навье-Стокса с (8), можно увидеть, что кинематическая вязкость определяется как

$$\tilde{\nu} = \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \Delta \tilde{t} R T. \quad (10)$$

Обезразмеривая (8) по микромасштабам решетки с учетом того, что средняя скорость частиц

$$\tilde{v}_A = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{3RT}, \quad (11)$$

получим безразмерную форму в «решетчатых» переменных для несжимаемого потока

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (12)$$

где

$$u_i = \frac{\tilde{u}_i}{\tilde{v}_A}, \quad p = \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho} \tilde{v}_A^2}, \quad x_i = \frac{\tilde{x}_i}{\Delta \tilde{x}}, \quad t = \frac{\tilde{t}}{\Delta \tilde{t}}. \quad (13)$$

Из (12) получаем, что вязкость для дискретной «решетчатой» модели

$$\nu = \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) = \frac{2\tau - 1}{6}. \quad (14)$$

### Связь между безразмерными и «решетчатыми» переменными

Для определения времени релаксации  $\tau$  необходимо определить связь между ним и макромасштабами потока. Для этого обезразмерим уравнение Навье – Стокса

$$\frac{\tilde{U}_0}{\tilde{\Omega}} \frac{\partial \left( \frac{\tilde{u}_i}{\tilde{U}_0} \right)}{\partial \left( \frac{\tilde{t}}{\tilde{\Omega}} \right)} + \frac{\tilde{U}_0^2}{\tilde{L}} \frac{\tilde{u}_j}{\tilde{U}_0} \frac{\partial \left( \frac{\tilde{u}_i}{\tilde{U}_0} \right)}{\partial \left( \frac{\tilde{x}_j}{\tilde{L}} \right)} = -\frac{\tilde{U}_0^2}{\tilde{L}} \frac{\partial \left( \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho} \tilde{U}_0^2} \right)}{\partial \left( \frac{\tilde{x}_i}{\tilde{L}} \right)} + \frac{\tilde{\nu} \tilde{U}_0}{\tilde{L}^2} \frac{\partial}{\partial \left( \frac{\tilde{x}_j}{\tilde{L}} \right)} \left( \frac{\partial \left( \frac{\tilde{u}_i}{\tilde{U}_0} \right)}{\partial \left( \frac{\tilde{x}_j}{\tilde{L}} \right)} + \frac{\partial \left( \frac{\tilde{u}_j}{\tilde{U}_0} \right)}{\partial \left( \frac{\tilde{x}_i}{\tilde{L}} \right)} \right), \quad (15)$$

где  $\tilde{U}_0, \tilde{\Omega}, \tilde{L}$  – макромасштабы скорости, времени и длины соответственно. Макромасштабы времени и длины связаны с «решетчатыми» масштабами

$$\Delta t = \tilde{\Omega} / N_{iter} = \tilde{\Omega} \delta_t, \quad \Delta x = \tilde{L} / N = \tilde{L} \delta_x. \quad (16)$$

После преобразований выражения (15) получим

$$\frac{\tilde{L}}{\tilde{\Omega} \tilde{U}_0} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{t}} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial}{\partial \bar{x}_j} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial \bar{x}_i} \right), \quad (17)$$

где

$$\text{Re} = \frac{\tilde{U}_0 \tilde{L}}{\tilde{\nu}}, \quad \bar{p} = \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho} \tilde{U}_0^2}, \quad \bar{u}_i = \frac{\tilde{u}_i}{\tilde{U}_0}, \quad \bar{t} = \frac{\tilde{t}}{\tilde{\Omega}}, \quad \bar{x}_i = \frac{\tilde{x}_i}{\tilde{L}}. \quad (18)$$

Примем, что  $U_0 \Omega = L$  и перейдем в (18) от безразмерных переменных к «решетчатым».

$$\frac{\delta_x}{\delta_t^2} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\delta_x}{\delta_t^2} u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\delta_x}{\delta_t^2} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{1}{\delta_x \delta_t} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (19)$$

Сравниваем (12) и (19) с учетом (14), получим

$$\nu = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\delta_t}{\delta_x^2} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\delta_t}{\delta_x} \frac{1}{\delta_x} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\Delta \tilde{t}}{\tilde{\Omega}} \frac{\tilde{L}}{\Delta \tilde{x}} \frac{1}{\delta_x} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\tilde{U}_0}{\underbrace{\tilde{L} / \tilde{\Omega}}_{\tilde{v}_A}} N = \frac{\bar{U}_0 N}{\text{Re}}, \quad (20)$$

где  $\bar{U}_0 = \tilde{U}_0 / \tilde{v}_A$ .

Таким образом, проведенный анализ показывает эквивалентность «решетчатого» уравнения Больцмана (1) безразмерному уравнению Навье-Стокса.

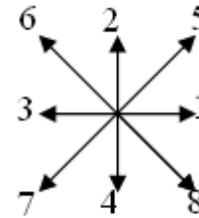
**Метод решеток Больцмана**

Для решения уравнения (1) был предложен метод решеток Больцмана. Одни из первых работ, где был рассмотрен данный метод, это работы [7, 8].

Основная идея метода решеток Больцмана состоит в том, что положение частиц предполагается дискретным, т.е. частица может занимать положение только в узлах заданной решетки. Форма ячеек решетки может быть выбрана произвольно, но для декартовых координат наиболее приемлемой является прямоугольная решетка.

При описании решеток используются обозначения в виде  $DnQi$ , где  $n$  – размерность решетки, а  $i$  – количество скоростных каналов. Для двумерных задач обычно используется двумерная решетка  $D2Q9$  с девятью скоростными каналами (рис. 1), а для трехмерных –  $D3Q15$  с пятнадцатью.

Для дискретной решетки с количеством



**Рис. 1. Скоростные каналы решетки D2Q9.**

скоростных каналов равным  $\alpha$  выражения для расчета макропараметров имеют следующий вид

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad \rho u = \sum_{\alpha} v_{\alpha} f_{\alpha},$$

$$p = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} (v_{\alpha} - u)^2 f_{\alpha}. \tag{21}$$

Для выполнения расчетов с помощью модели решеток Больцмана необходимо определить выражение для равновесного распределения  $f^e$ , зависящее от выбранной пространственной решетки.

Распределение Максвелла (2) раскладываем в ряд Тейлора по текущей скорости потока  $u$ , так как она намного меньше скорости молекул ( $v \gg u$ ). Полученное выражение имеет вид

$$f^e = \rho \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{mv^2}{2kT} \right) \left( 1 - \frac{u^2}{2RT} + \frac{v \cdot u}{RT} + \frac{v^2 u^2}{2RT} \right). \tag{22}$$

Согласно [9] вычисление таких макровеличин, как плотность, скорость и энергия в трехмерном пространстве эквивалентно вычислению интеграла

$$I = \int \psi(v) f^e dv = \rho \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int \psi(v) \exp \left( -\frac{mv^2}{2kT} \right) \left( 1 - \frac{u^2}{2RT} + \frac{v \cdot u}{RT} + \frac{v^2 u^2}{2RT} \right) dv, \tag{23}$$

где  $\psi(v)$  является полиномиальной функцией от  $v$ . Для решетки  $D2Q9$ , показанной на рис. 1, примем функцию  $\psi(v)$  в виде

$$\psi_{m,n}(v) = v_x^m v_y^n, \tag{24}$$

где  $v_x$  и  $v_y$  – пространственные  $x$  и  $y$  компоненты скорости молекул  $v$  соответственно. После подстановки (24) в (23) интеграл (23) примет вид

$$I = \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n} \left\{ \left( 1 - \frac{u^2}{2RT} \right) I_m I_n + \frac{2(u_x I_{m+1} I_n + u_y I_m I_{n+1})}{\sqrt{2RT}} + \frac{u_x^2 I_{m+2} I_n + 2u_x u_y I_{m+1} I_{n+1} + u_y^2 I_m I_{n+2}}{RT} \right\}, \tag{25}$$

где

$$I_m = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} \zeta^m d\zeta, \quad \zeta = \frac{v}{\sqrt{2RT}}. \tag{26}$$

Используя формулу Эрмита для интегрирования, получим

$$I_m = \sum_{j=1}^3 \omega_j \zeta_j^m \quad (27)$$

Для трех значений переменной

$$\zeta_1 = -\sqrt{3/2}, \quad \zeta_2 = 0, \quad \zeta_3 = \sqrt{3/2} \quad (28)$$

весовые коэффициенты будут равны

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}, \quad \omega_2 = 2\frac{\sqrt{\pi}}{3}, \quad \omega_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6} \quad (29)$$

Таким образом, интеграл (25) примет следующий вид

$$I = \frac{\rho}{\pi} \sum_{i,j=1}^3 \omega_i \omega_j \Psi(v_{i,j}) \left[ 1 + \frac{(v_{i,j} \cdot u)}{RT} + \frac{(v_{i,j} \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right], \quad (30)$$

где  $v_{i,j} = (v_i, v_j) = \sqrt{2RT}(\zeta_i, \zeta_j)$ . Следовательно, сравнивая выражения (21) и (30), функцию равновесного распределения можно записать в виде выражения

$$f_{i,j}^e = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} \rho \left[ 1 + \frac{(v_{i,j} \cdot u)}{RT} + \frac{(v_{i,j} \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right]. \quad (31)$$

Определим координаты положений решетки

$$e_\alpha = \begin{cases} (0, 0), & \alpha = 0 \\ (\cos \Theta_\alpha, \sin \Theta_\alpha)c, & \Theta_\alpha = (\alpha - 1)\pi / 2, \quad \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2}(\cos \Theta_\alpha, \sin \Theta_\alpha)c, & \Theta_\alpha = (\alpha - 5)\pi / 2 + \pi / 4, \quad \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases}, \quad (32)$$

и весовые коэффициенты для каждого направления

$$w_\alpha = \frac{\omega_i \omega_j}{\pi} = \begin{cases} 4/9, & \alpha = 0 \\ 1/9, & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36, & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases}. \quad (33)$$

Тогда, учитывая выражение для скорости звука в решетке

$$RT = c_s^2 = \frac{c^2}{3}, \quad (34)$$

получим выражение для равновесного распределения частиц при использовании решетки  $D2Q9$

$$f_\alpha^e = w_\alpha \rho \left[ 1 + \frac{3(e_\alpha \cdot u)}{c^2} + \frac{9(e_\alpha \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right]. \quad (35)$$

### Граничные условия

Выбор граничных условий при численном моделировании имеет первостепенное значение, поскольку они влияют на его точность и сходимость. Граничные условия являются не-

простой проблемой в методе решеток Больцмана. Трудности возникают из того, что известна только макроскопическая информация на границах расчетной области (например, отсутствие скольжения на стенках). Для реализации этих граничных условий необходимо перевести эту макроскопическую информацию в соответствующую микроскопическую функцию распределения.

В настоящее время существуют два типа граничных условий для метода решеток Больцмана. В первом подходе граничные узлы являются «мокрыми», то есть являются частью жидкости. Следовательно, совокупности частиц такого узла удовлетворяют результатам разложения Чепмена-Энскога. Они могут быть разложены на равновесные и неравновесные и связаны с макроскопическими переменными потока. В подходе "обратного отскока" граничные узлы расположены вне жидкости. Они осуществляют динамику обратного отскока, т.е. значение вероятности для каждого направ-

ления частицы копируется в противоположную вероятность соседней частицы. Поскольку эти узлы не являются частью жидкости, для них невозможно вычислить значения макроскопических переменных.

В 1997 году был предложен способ задания значений скорости и давления на «мокрых» границах [9,10]. Рассмотрим подробно принцип задания значений скорости с компонентами  $(u_x, u_y)$  для нижней горизонтальной границы прямоугольной расчетной области. После расчета течения значения распределений для  $f_0, f_1, f_3, f_4, f_7, f_8$  известны. Необходимо определить выражения для плотности  $\rho$  и  $f_2, f_5, f_6$ . Из (21) для решетки D2Q9 можно записать следующие зависимости

$$\rho = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \quad (36)$$

$$u_x \rho = f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8, \quad (37)$$

$$u_y \rho = f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8. \quad (38)$$

Формулу для расчета плотности можно найти из (36) и (38)

$$\rho = \frac{1}{1-u_y} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_4 + f_7 + f_8)], \quad (39)$$

но для решения системы относительно  $f_2, f_5, f_6$  необходимо еще одно уравнение. Его можно получить из предположения, что метод обратного отскока применим для неравновесной части распределения частиц в направлении нормали к поверхности. В данном случае

$$f_2 - f_2^e = f_4 - f_4^e. \quad (40)$$

Учитывая (32) – (38), получим выражения для  $f_2, f_5, f_6$

$$\begin{aligned} f_2 &= f_4 + \frac{2}{3} \rho u_y, \\ f_5 &= f_7 - \frac{1}{2} (f_1 - f_3) + \frac{1}{2} \rho u_x + \frac{1}{6} \rho u_y, \\ f_6 &= f_8 + \frac{1}{2} (f_1 - f_3) - \frac{1}{2} \rho u_x + \frac{1}{6} \rho u_y. \end{aligned} \quad (41)$$

Аналогичный подход позволяет задать значение давления на границе.

Граничное условие, известное как «открытый выход», реализует нулевой градиент скорости на выходе канала. Допустим, что выход расположен на вертикальной границе с нормальным компонентом скорости  $u_x$  и номером ячейки  $n$ . Для первого порядка точности необходимо установить  $u_x^n = u_x^{n-1}$  и затем пересчитать функции распределения для  $f_3, f_6, f_7$ , используя (42). Если необходим второй порядок точности, то значение скорости определяется из выражения  $u_x^n = (4u_x^{n-1} - u_x^{n-2}) / 3$ .

$$\begin{aligned} f_3 &= f_1 + \frac{2}{3} \rho, \\ f_6 &= f_8 - \frac{1}{2} (f_2 - f_4) - \frac{1}{6} \rho u_x^n, \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2} (f_2 - f_4) - \frac{1}{6} \rho u_x^n. \end{aligned} \quad (42)$$

### Несжимаемые течения

Описанная выше модель решеток Больцмана, основанная на равновесном распределении (35), является сжимаемой и при моделировании несжимаемых сред дает погрешность результата, вызванную сжимаемостью. Для расчета несжимаемых течений (таких, например, как течение Пуазейля) необходимо модифицированное уравнение равновесного распределения, имеющее вид

$$f_\alpha^e = w_\alpha \left[ \rho + \frac{3(e_\alpha \cdot u)}{c^2} + \frac{9(e_\alpha \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right]. \quad (43)$$

Тогда значения макропараметров будут вычисляться следующим образом

$$\rho = \sum_\alpha f_\alpha, \quad u = \sum_\alpha v_\alpha f_\alpha, \quad (44)$$

а значение плотности при задании скорости на границе вместо выражения (39) будет определяться как

$$\rho = u_y + [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_4 + f_7 + f_8)]. \quad (45)$$

### Моделирование микротечений

При моделировании микротечений значение времени релаксации определяется не по вязкости среды, а по числу Кнудсена. Используя уравнение Максвелла для вязкости

$$\tilde{v} = \frac{\Lambda u_A}{3} \quad (46)$$

и выражение (10), находим связь между числом Кнудсена и временем релаксации

$$\tau = Kn N_y + \frac{1}{2}. \quad (47)$$

где  $N_y$  – количество элементов решетки поперек канала.

Кроме того, в диапазоне значений числа Кнудсена  $Kn = 0,001 \div 0,1$  условие прилипания на стенках не выполняется. Скорость проскальзывания на стенке определяется выражением

$$u_{xw} = \Lambda \frac{\partial u_x}{\partial y}. \quad (48)$$

В «решетчатых» переменных значение скорости проскальзывания вычисляется следующим образом

$$u_{xw} = u'_x \frac{Kn N_y}{(1 + Kn N_y)}, \quad (49)$$

где  $u'_x$  – продольная компонента скорости в соседней со стенкой ячейке.

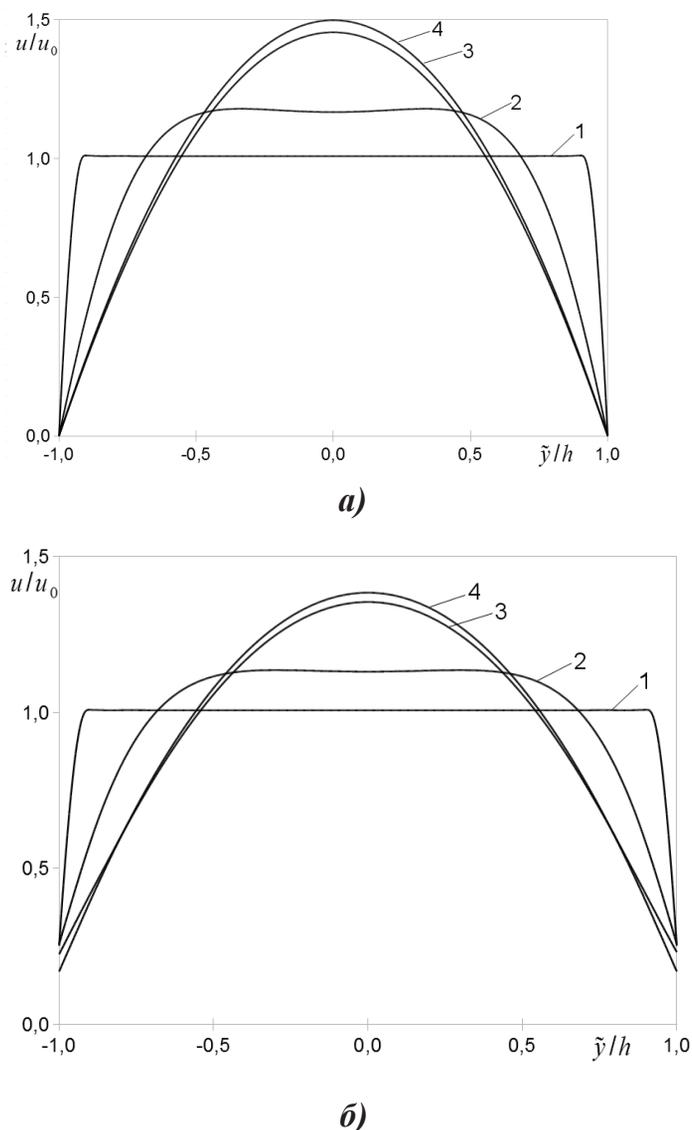
### Результаты моделирования

Было проведено моделирование гидродинамики разгонного течения в микроканале с соотношением сторон, равном 15 (решетка 600x40 элементов). Исследовался диапазон чисел Кнудсена  $Kn = 0,001 \dots 0,1$ . Входная скорость в «решетчатых» единицах – 0,01.

Метод решеток Больцмана был реализован в среде GNU Octave, совместимой со средой MATLAB. Время счета одного варианта на 4-ядерном компьютере с частотой 2,4 ГГц и объемом оперативной памяти 4 Гб составило 16 минут.

На рис. 2 представлены профили скорости разгонного течения без проскальзывания (а) и для значения числа Кнудсена  $Kn = 0,1$  (б).

Из рисунков видно, что стабилизация потока при увеличении числа Кнудсена наступает раньше. Это обусловлено ослаблением взаимодействия потока со стенками канала. Исследования показали, что для  $Kn = 0,1$  уча-

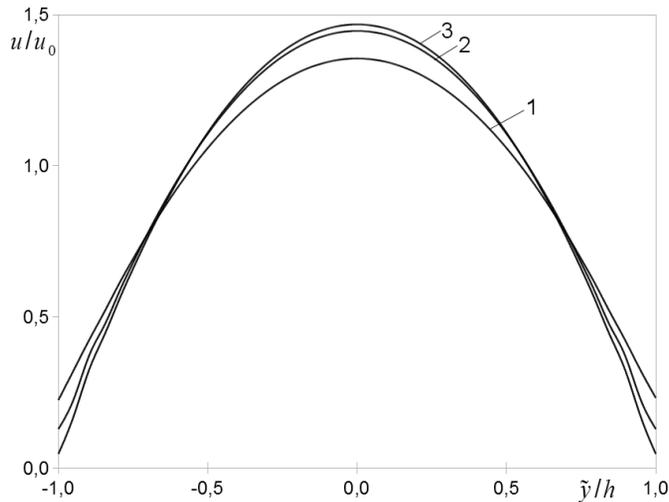


**Рис. 2. Профили скорости разгонного течения без проскальзывания (а) и при значении  $Kn = 0,1$  (б) для разных расстояний от входа, нормированных шириной канала:**  
1 –  $x/L = 0$ ; 2 – 0,25; 3 – 1,25; 4 – 15.

сток гидродинамической стабилизации потока уменьшается примерно на 30 % по сравнению со случаем течения без проскальзывания.

Следует также отметить, что по мере развития потока скорость на стенке канала уменьшается, что вызвано уменьшением локального градиента скорости по мере удаления от входа канала.

На рис. 3 показаны установившиеся профили скорости на выходе канала для различных значений числа Кнудсена. Из рисунка видно, что при увеличении числа Кнудсена значения максимальной скорости на выходе уменьшаются, а скорости проскальзывания на стенках растут (скорость на стенке пропорциональна значению числа Кнудсена). При этом среднеинтегральная скорость в канале сохраняется.



**Рис. 3. Установившиеся профили скорости для различных значений чисел Кнудсена: 1 –  $Kn = 0,1$ ; 2 –  $0,05$ ; 3 –  $0,01$ .**

На основе полученных результатов была проведена оценка значений коэффициента гидравлического сопротивления для значений числа Кнудсена  $Kn = 0,0 \dots 0,1$ . При этом разница давлений рассчитывалась по формуле (21). Анализ результатов показал, что для относительного коэффициента гидравлического сопротивления справедливо соотношение

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \frac{1}{1 + 6Kn}, \quad (50)$$

где  $\lambda_0$  – коэффициент гидравлического сопротивления для течения без проскальзывания на стенке. Из формулы (50) следует, что рост скорости проскальзывания ведет к уменьшению коэффициента гидравлического сопротивления по гиперболической зависимости. Подобная формула для относительного коэффициента ги-

дравлического сопротивления была получена на основе приближенного аналитического решения в работе [11].

### Выводы

Для расчета микротечений предложен метод решеток Больцмана. Данный метод является альтернативой подходу, использующему уравнение Навье-Стокса. Он позволяет моделировать как макротечения ( $Kn = 0$ ), так и микротечения ( $Kn > 0$ ).

Используя метод решеток Больцмана, проведен расчет разгонного микротечения в канале с соотношением сторон 1:15. На основе полученных результатов построены профили скоростей в различных сечениях канала. Установлено, что значение числа Кнудсена уменьшает длину начального гидродинамического участка. Показано, что увеличение степени разреженности потока ведет к уменьшению гидравлического сопротивления.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *J.M. Haile*. Molecular dynamics simulation, NY.: Wiley, 1992. – 512 p.
2. *G. Karniadakis, A. Beskok, Aluru N.* Microflows and Nanoflows Fundamentals and Simulation, NY.: Springer, – 2005. – 817 p.
3. *Brian J.N. Wylie* Application of two-dimensional cellular automaton lattice-gas models to the simulation of hydrodynamics. – University of Edinburgh, 1990.
4. *Maxwell J.B.* Lattice Boltzmann methods for interfacial wave modeling. – University of Edinburgh, 1997.
5. *Черчильяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана. – М.: Мир. – 1978. – 492 с.
6. *P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook* (1954). "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems". Physical Review 94. – P. 511–525.
7. *Shan X, Chen H.* (1993) Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. Phys Rev E 47. –P. 1815–1819.