УДК 532.5

Аккуратов И.Е.
Студент магистратуры
1 курс, Инженерная школа природных ресурсов
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Россия, г. Томск

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГИДРОДИНАМИКИ, ОСНОВАННОГО НА УРАВНЕНИЯХ БОЛЬЦМАНА

Аннотация: *В ходе работы произведен критический анализ современного метода моделирования течений в рамках идей молекулярно-кинетического подхода, благодаря которому возможно описывать процессы движения сред с меньшей погрешностью. Подобный подход является оригинальным, современным и универсальным, так как позволяет моделировать течения в широком диапазоне изменения числа Рейнольдса, а также учитывает пространственно-временную эволюцию флуктуаций поля скорости.*

Ключевые слова: *Гидродинамика, математическое моделирование, молекулярно-кинетический метод, обобщённые гидродинамические уравнения, уравнение Больцмана.*

Annotation: *In the course of the article, a critical analysis of the modern method of modeling flows is carried out in the framework of the ideas of the molecular kinetic approach, thanks to which it is possible to describe the processes of motion of media with less error. Such an approach is original, modern, and universal, since it allows one to simulate flows in a wide range of Reynolds number changes and also takes into account the spatiotemporal evolution of fluctuations of the velocity field.*

Keywords: *Hydrodynamics, mathematical modeling, molecular-kinetic method, generalized hydrodynamic equations, Boltzmann equation.*

Основные методики моделирования движения жидкостей и газов базируются на моделях сплошной среды, которые совместно с фундаментальными законами сохранения классической механики и разного рода предположениями касательно тензора поверхностных сил, дали систему уравнений движения идеальной жидкости – уравнения Эйлера, а далее и систему уравнений движения вязкой жидкости – уравнения Навье–Стокса, тем самым сформировать решения многих практически важных задач [1-4].

Уравнения Эйлера и Навье-Стокса не показывают влияние флуктуаций, при учете которых кардинально меняется ситуация [1,3-7].

И как отмечает Борис Владимирович Алексеев: «Теория турбулентности, основанная на уравнениях Навье-Стокса, зашла в тупик» [1].

Целью работы является переход от гидродинамического способа описания к молекулярно-кинетическому подходу, для которого основой являются не формулы для вязкой гидрогазодинамики, а кинетические уравнения, учитывающие развитие функции распределения элементарных частиц, после вычисления которых, благодаря усреднениям, получатся макроскопические величины в рассматриваемом течении (плотность, поле скоростей, поток энергии). Такой подход более совершенный и универсальный, так как позволяет моделировать течения с обширным диапазоном значения числа Рейнольдса, а также учитывает флуктуации в спектре пульсаций. Подобные уравнения получены на основе уравнений Больцмана.

Обобщенное уравнение неразрывности. На основе трудов Больцмана были сформулированы обобщенные уравнения гидродинамики (ОУГ), которые можно считать усовершенствованным вариантом фундаментальных уравнений гидродинамики, так как они учитывают в спектре пульсаций флуктуации и позволяют описывать течения в широком диапазоне чисел Рейнольдса, в том числе режимы ламинарно-турбулентных переходов [5].

Обобщенное уравнение неразрывности имеет вид [1,2,8]

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho-\tau\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot(\rho\overline{\boldsymbol{V}})\right)\right]+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\left[\rho\overline{\boldsymbol{V}}-\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\boldsymbol{V}})+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot(\rho\overline{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}})-\rho\boldsymbol{F}\right)\right]=0. \qquad (1)$$

где V – гидродинамическая скорость движения потока;

r – радиус-вектор;

F – внешние силы.

Уравнение (1) является фундаментальным уравнением неразрывности с учетом флуктуаций:

$\tau\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot(\rho\overline{\boldsymbol{V}})\right)$ – флуктуация величины плотности;

$\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\boldsymbol{V}})+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\rho\overline{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}}-\rho\boldsymbol{F}\right)$ – флуктуация величины импульса потока.

Черта над выражениями, зависящими от собственной скорости частиц, означает осреднение по скорости с использованием одночастичной функции распределения.

Обобщенное уравнение движения. Обобщенное уравнение движения с учетом флуктуации имеет вид [2]

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\overline{\boldsymbol{V}}-\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\boldsymbol{V}})+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\rho\overline{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}}-\rho\boldsymbol{F}\right)\right]-\boldsymbol{F}\left[\rho-\tau\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot(\rho\overline{\boldsymbol{V}})\right)\right]-$$

$$-\rho\overline{\boldsymbol{F}^{in}}+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\left[\rho\overline{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}}-\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}})+\frac{\partial}{\partial r}\cdot\rho(\overline{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}})\overline{\boldsymbol{V}}-\boldsymbol{F}\rho\overline{\boldsymbol{V}}-\rho\overline{\boldsymbol{V}}\boldsymbol{F}\right)\right]=0 \qquad (2)$$

где $\boldsymbol{F}^{in}$ – внутренняя сила, действующая в -масштабе.

τ – время пребывания частицы в клетке [3]

$$\tau=\frac{\Pi\mu}{p}.$$

Π – параметр, связанный с моделью взаимодействия частиц;

p – статическое давление;

$\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\boldsymbol{VV}}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\rho(\overline{\boldsymbol{VV}})\overline{\boldsymbol{V}} - \boldsymbol{F}\rho\overline{\boldsymbol{V}} - \overline{\rho\boldsymbol{V}\boldsymbol{F}}\right)$ – флуктуация тензорного момента второго порядка $\rho\overline{\boldsymbol{VV}}$.

μ – вязкость по экспериментальным данным Гильдебранда [6]

$$\mu = \frac{V_0}{B(V-V_0)} + \mu_0\frac{V-V_t}{V}, \tag{3}$$

где V_0 – собственный объем молекул;

B – коэффициент, не зависящий от сорта вещества;

μ_0 – вязкость, определяемая через среднее время между столкновениями частиц;

V_t – объем, по достижению которого начинается формироваться индивидуальность взаимодействующих частиц (находится экспериментально);

В уравнении (3) первое слагаемое правой части характеризует вязкость, которая учитывает только влияние «коллективного» эффекта в жидкости, второе слагаемое – вязкость, учитывающая «индивидуальность» частиц.

Обобщенное уравнение энергии. Обобщенное уравнение энергии с учетом флуктуации имеет вид [2,8]

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{1}{2}\rho\overline{V^2} - \tau\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\rho\overline{V^2}\right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\left(\frac{1}{2}\rho\overline{\boldsymbol{V^2}\boldsymbol{V}}\right) - \boldsymbol{F}\cdot\rho\overline{\boldsymbol{V}}\right)\right] +$$
$$+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\left[\frac{1}{2}\rho\overline{V^2}\overline{\boldsymbol{V}} - \tau\left(\frac{\partial}{\partial t}\left\{\frac{1}{2}\rho\overline{V^2}\overline{\boldsymbol{V}}\right\} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\left(\frac{1}{2}\rho\overline{V^2}\overline{\boldsymbol{VV}}\right) - \rho\boldsymbol{F}\cdot\overline{\boldsymbol{VV}} - \frac{1}{2}\rho\overline{V^2}\boldsymbol{F}\right)\right] -$$
$$-\left[\rho\boldsymbol{F}\cdot\overline{\boldsymbol{V}} - \tau\left(\boldsymbol{F}\left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\boldsymbol{V}}) + \frac{\partial}{\partial r}\cdot\rho\overline{\boldsymbol{VV}} - \rho\boldsymbol{F}\right)\right)\right] - \rho\overline{\boldsymbol{F}^{in}}\cdot\overline{\boldsymbol{V}} = 0 \tag{4}$$

где $\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\overline{V^2}\right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\left(\rho\overline{\boldsymbol{V^2}}\overline{\boldsymbol{V}}\right) - \boldsymbol{F}\cdot\rho\overline{\boldsymbol{V}}\right)$ – флуктуация члена $\rho\overline{V^2}$ левой части уравнения (4);

$\tau\left(\frac{\partial}{\partial t}\left\{\rho\overline{V^2}\overline{\boldsymbol{V}}\right\} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\cdot\left(\rho\overline{V^2}\overline{\boldsymbol{VV}}\right) - 2\rho\boldsymbol{F}\cdot\overline{\boldsymbol{VV}} - \rho\overline{V^2}\boldsymbol{F}\right)$ – независимая флуктуация тензорного момента третьего порядка $\rho\overline{V^2}\overline{\boldsymbol{V}}$.

Отметим, что τ переходит в значение среднего времени столкновения частиц $\tau_\text{р}$ для разреженного газа, что обеспечивает "сквозное" описание системы «жидкость – газ» с помощью обобщенных гидродинамических уравнений (1), (2), (4) [10].

В заключении хотелось бы сказать, что система (1), (2), (4) является более современной и актуальной для моделирования гидродинамических процессов по сравнению с уравнениями Навье-Стокса. На базе работ Больцмана создаются программы математического моделирования, а также вытекает множество других подходов описания ламинарных и турбулентных течений. Считаю, что развитие методов ветвления результатов кинетических уравнений позволит в дальнейшем дать полноценную картину всех спектральных областей турбулентных течений довольно широкого генезиса.

Новые уравнения уже применяют для решения задач в таких областях, как астрофизика, физика атмосферы (развитии общей теории и моделировании) и т.д. (см., например, [9,10]). В нефтегазовых приложениях, в которых рассматриваемый метод еще не использовался, необходимо проведение исследования по изучению опыта применения ОУГ для дополнительного анализа явлений. Все это представляет предмет перспективных будущих задач. Их решение поспособствует дальнейшему развитию отрасли, оптимизации энергозатрат (например, в транспортировке УВ сырья), использованию усовершенствованных технологий.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Алексеев, Б.В. Физические основы обобщенной больцмановской кинетической теории газов / Б.В. Алексеев // Успехи физических наук. – 2000. – Т. 170, № 6. – С. 649–679.

2. Алексеев, Б.В. К кинетической и гидродинамической теории жидкостей / Б. В. Алексеев // Теплофизика высоких температур. – 1998. – Т. 36, № 2. – С. 215–222.

3. Алексеев, Б.В. Нелокальная физическая кинетика / Б.В. Алексеев // Вестник Томского государственного университета. – 2008. – № 3. – С. 53–58.

4. Белоцерковский, О.М. Применение уравнения Каца к моделированию турбулентности / О.М. Белоцерковский, Н.Н. Фимин, В.М.

Чечёткин // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010. – Т. 50, № 3. – С. 575-584.

5. Chen, H. Recovery of full rotational invariance in lattice Boltzmann formulations for high Knudsen number flows / H. Chen, R. Zhang, I. Staroselsky, M. Jhon // Physica A. – 2006. – 362:125–131.

6. Alexeev, B.V. Generalized Boltzmann Physical Kinetics. Elsevier. –2004.

7. Белоцерковский, О.М. Когерентные структуры в гидродинамике и кинетические уравнения / О.М. Белоцерковский, Н. Н. Фимин, В. М. Чечёткин // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010. – Т. 50, № 9. – С. 1613–1623.

8. Алексеев, Б.В. Граничные условия в теории обобщенных гидродинамических уравнений / Б.В. Алексеев // Теплофизика высоких температур. – 2004. – Т. 42, № 4. – С. 551-562.

9. Alexeev B.V. ArXiv, 1012.5286 (physics. gen-ph): Problems of antimatter after Big Bang, dark energy and dark matter. Solutions in the frame of non-local physics (2010).

10. Соловчук, М.А. Уравнения обобщенной гидродинамики в кинетической теории и распространение акустических волн в разряженном газе [Текст]: дис. на соиск. учен. степ. канд. физ.-мат. наук (01.04.02) / Соловчук Максим Александрович; РГУ им. И. Канта. – Калининград, 2007. – 89 с.