

О ТОЧНОСТИ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА НИЗКОГО И ВЫСОКОГО ПОРЯДКОВ В ПРИЛОЖЕНИЯХ К МЕДЛЕННЫМ ИЗОТЕРМИЧЕСКИМ МИКРОТЕЧЕНИЯМ

© 2024 г. О. В. Ильин^{1,*}¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 44, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: oilyin@gmail.com

Поступила в редакцию 12.12.2023 г.

Переработанный вариант 14.04.2024 г.

Принята к публикации 31.05.2024 г.

Рассмотрен вопрос применимости двумерных решеточных уравнений Больцмана разного порядка на стандартных решетках к описанию медленных изотермических разреженных течений. В качестве эталонной задачи используется двумерное течение Пуазейля при разных числах Кнудсена. Данная задача численно решается с использованием нескольких решеточных уравнений Больцмана низкого и высокого порядков, имеющих от 9-ти до 53-х дискретных скоростей. Результаты сравниваются с решениями линеаризованного уравнения Больцмана, Бхатнагара–Гросса–Крука, которые используются в качестве эталонных. В ходе численных экспериментов показано, что увеличение порядка решеточного уравнения Больцмана (т.е. числа первых моментов локально-максвелловского распределения, воспроизводимых дискретным локальным равновесием решеточного уравнения Больцмана) не всегда приводит к повышению точности. В частности, предложена новая модель низкого порядка для 16-ти скоростей, правильно на качественном уровне описывающая диффузное отражение на твердых границах. Показано, что для данной модели можно получить достаточно точные значения объемного расхода скоростей скольжения для широкого интервала чисел Кнудсена по сравнению с другими рассматриваемыми моделями. Библ. 48. Фиг. 2.

Ключевые слова: решеточные уравнения Больцмана, разреженный газ, микротечения.

DOI: 10.31857/S0044466924090168, EDN: WIPGOR

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод решеточных уравнений Больцмана (РУБ), являющийся дискретизацией по пространственным и временным переменным кинетического уравнения Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК) (см. [1]), изначально разрабатывался для описания уравнений вязкой сплошной среды (см. [2]). Однако основным объектом описания данного метода является функция распределения жидкости или газа, поэтому РУБ определяют динамику не только гидродинамических моментов, но и моментов высокого порядка. Следовательно, естественным образом возникает задача построения РУБ, которые способны правильно описывать неравновесные эффекты, заключенные в негидродинамических моментах функции распределения. Важность задачи применения РУБ к описанию медленных разреженных течений обусловлена рядом потенциально интересных приложений, таких как моделирование микроэлектромеханических систем (МЭМС), например, микро-сопел (см. [3]) или течений сланцевого газа (см. [4]).

Одним из наиболее естественных способов расширения метода РУБ для описания неравновесных разреженных эффектов является повышение порядка решеточных моделей. Далее для наглядности будет удобно рассмотреть уравнение БГК, дискретизированное только по скоростям, но без дискретизации по пространству и времени:

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{\tau}(f_i^{\text{eq}} - f), \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где N — число дискретных скоростей, f_i — функция распределения, τ — время релаксации. Отметим, что классические РУБ есть по сути метод решения уравнения (1) с применением удобной дискретизации по пространственным и временным переменным. Состояние локального равновесия f_i^{eq} для РУБ обычно выбирается в виде (см. [5])

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \sum_{n=0}^M a_n H^{(n)}(c_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

где $M \geq 2$, $w_i > 0$ — веса решетки (аналоги абсолютно максвелловского распределения), c_i — дискретные скорости, $\mathbf{H}^{(m)}$ — полиномы Эрмита порядка m , a_m — коэффициенты, определяющие моменты локально-равновесной функции распределения (в общем случае они могут зависеть от пространственных и временной переменных). Отметим, что для дискретного набора скоростей c_i функция распределения (2) положительна для широкого интервала коэффициентов a_m , в частности, для девятискоростной модели $D2Q9$ состояние локального равновесия неотрицательно для чисел Маха меньших единицы (см. [1]). Так как в текущем исследовании рассматриваются медленные течения, то $f_i^{\text{eq}} \geq 0$. Дискретное по скоростям локальное распределение в виде (2) удобно тем, что коэффициенты a_m выражаются аналитически через гидродинамические величины.

Рассмотрим стандартное локально-максвелловское распределение, вычислим его моменты до порядка M включительно, это очевидно ρ , ρu и т.д. Пусть удастся построить набор весов и дискретных скоростей w_i , c_i так, что дискретное состояние равновесия (2) имеет совпадающие с локально-максвелловским моменты до порядка M включительно. Рассмотрим гидродинамические уравнения, получающиеся при разложении дискретной по скоростям модели по методу Чепмена—Энскога до членов порядка Kn^k (Kn — число Кнудсена) включительно. Можно показать, что первые моменты до порядка $M - k$, $k \leq M$, включительно, вычисленные из уравнений гидродинамики, которые получены на основе дискретно-скоростных уравнений (1) будут совпадать с решениями уравнений гидродинамики, полученными из разложения Чепмена—Энскога уравнения БГК (см. [5]). Таким образом, дискретная модель (1)–(2) способна описывать моменты функции распределения конечного порядка ровно с такой же точностью, как и уравнение БГК.

Например, для описания вязкой среды, т.е. моментов до второго порядка включительно (плотность, импульс, тензор напряжений) на уровне уравнений Навье—Стокса (Kn^1) необходимо, чтобы f_i^{eq} имела моменты, равные максвелловским до третьего порядка включительно. В случае, если f_i^{eq} описывает правильно максвелловские моменты до второго порядка включительно, то в соответствующих уравнениях Навье—Стокса при моделировании изотермических течений содержатся ошибки порядка $O(Ma^3)$ (Ma — число Маха), однако важно отметить, что для случая медленных течений эти ошибки несутся и такие РУБ (называемые РУБ *низкого порядка*) часто используют в приложениях. Для РУБ *высокого порядка* соответствующее состояние локального равновесия правильно воспроизводит максвелловские моменты порядка 3 и выше. Отметим, что уравнения термо-гидродинамики (Kn^1) и полные уравнения Барнетта (Kn^2) будут воспроизводиться в случае, если f_i^{eq} обладает максвелловскими моментами соответственно до четвертого и пятого порядков включительно.

Для выполнения указанных условий для моментов следует брать коэффициенты a_m , совпадающими с максвелловскими, а также должны выполняться условия

$$\sum_i w_i \mathbf{H}^{(m)}(c_i) \mathbf{H}^{(m')}(c_i) = \delta_{mm'}, \quad 0 \leq m, m' \leq M, \quad (3)$$

из которых надо определить w_i , c_i . Один из возможных подходов нахождения весов и дискретных скоростей для РУБ основан на квадратурах Гаусса—Эрмита (см. [6]). В данном подходе веса w_i и скорости c_i имеют аналитические выражения. Проблема этого метода в том, что теории многомерных квадратур Гаусса—Эрмита нет, т.е. данным способом удобно строить одномерные РУБ. Модели РУБ для нескольких пространственных переменных получаются как тензорное произведение одномерных моделей, поэтому число дискретных скоростей будет расти квадратично (для двух пространственных переменных) или кубично (для трех пространственных переменных), что не очень желательно. Другой особенностью данного подхода является то, что получаемые дискретные скорости таковы, что отношения между ними в общем случае есть иррациональное число, поэтому стандартный шаг адвекции (из узла в узел) неприменим. В настоящей работе рассматриваются только РУБ, для которых множество дискретных скоростей имеет вид $(n_x c, n_y c)$, где n_x, n_y — целые числа, и c — постоянная величина (модели “на решетке”), соответствующие решетки будем называть *стандартными*. Построение моделей разного порядка на стандартных решетках (которые могут не иметь представления в виде произведения одномерных моделей) основано на решении системы (3), этой задаче посвящено большое число работ (см. [7]–[13]).

Естественно предположить, что повышение порядка РУБ повышает точность расчетов в задачах моделирования разреженного газа. Исследования показывают, что для правильного описания неравновесных эффектов в режимах, близких к свободномолекулярному $Kn \sim 1$, требуются модели очень высокого порядка (см. [14], [15]). Относительно медленная сходимость решений РУБ к эталонным решениям связана с тем, что для сдвиговых течений в областях с твердыми границами функция распределения не является непрерывной по скоростной координате, направленной перпендикулярно твердой стенке (см. [16]). Таким образом, для разреженных течений возникает необходимость (как в численном счете, так и аналитически) рассматривать отдельно две части функции распределения для скоростей, направленных в стенку и от стенки. Однако разложение по полиномам Эрмита плохо аппроксимирует разрывные функции распределения. Таким образом, возникает задача разложения по ортогональной системе полиномов (в полупространстве) двух частей функции распределения

(для скоростей, направленных в стенку и от стенки). Коэффициенты в разложении, стоящие при данных полиномах, очевидно выражаются через полумоменты функции распределения. В этом случае также правильно описываются полумоменты максвелловской функции распределения (т.е. интегралы берутся по полупространству скоростей). Очевидно, что моменты (как суммы полумоментов) также определены правильно (см. [17]–[19]). Данный метод дает очень точные результаты в силу того, что диффузное отражение частиц правильно воспроизводится, но продолжение этих моделей для нескольких пространственных координат требует большого числа дискретных скоростей, а также данные РУБ не относятся к классу моделей “на решетке”. В недавних исследованиях было предложено находить дискретные скорости и веса на основе квадратур Гаусса–Лежандра (и других квадратур) в полупространстве, такие модели способны описывать режимы, близкие к свободномолекулярным для тестовых течений (см. [20], [21]). Выбор квадратур типа Гаусса–Лежандра связан с тем, что в отличие от квадратур Гаусса–Эрмита в полупространстве при таком выборе удастся гораздо лучше аппроксимировать функции Абрамовитца, которые входят в решение задачи Куэтта для уравнения БГК (см. [20], [21]).

Существует другой подход к описанию неравновесных эффектов на основе РУБ (Гауссов подход), в котором дополнительные веса и решеточные скорости используются не для увеличения порядка модели, а для улучшения аппроксимации локального максвелловского распределения дискретно-скоростным распределением (см. [22], [23]). Также возможно применение гибридного подхода, в котором приграничные области моделируются методом Монте-Карло или уравнением БГК, а для внутренних областей используются РУБ (см. [24]–[28]).

В настоящей работе рассмотрено применение стандартных (“на решетке”) двумерных решеточных уравнений Больцмана разного порядка в приложениях к моделированию течения Пуазейля для разных чисел Кнудсена. Численные эксперименты, направленные на оценку возможности моделирования разреженных течений на основе нерегуляризованных РУБ разного порядка с одним временем релаксации, проводились ранее для разных эталонных течений (см. [29]–[32], [14], [15]). В настоящей работе эти исследования продолжены. Показано, что повышение порядка и числа скоростей РУБ не ведет автоматически к повышению точности, на результаты расчетов большее влияние оказывает правильность воспроизведения условий диффузного отражения. Рассмотрены РУБ для 9-и скоростей, новая модель низкого порядка для 16-и скоростей, две 17-и скоростные модели высокого порядка и модель для 53-х скоростей высокого порядка. Показано, что модели одного порядка с одинаковым числом скоростей (17 скоростей) дают существенно разные результаты, а новая 16-и скоростная модель низкого порядка показывает лучшую точность для переходного режима и режима скольжения в сравнении с остальными моделями. Это связано с тем, что все рассмотренные модели имеют сильно отличающиеся ошибки (формула (11)) для первого полумомента максвелловского распределения. Например, две 17-и скоростные модели имеют ошибки, равные 0.25 и 0.03, точность численных расчетов (табл. 2, фиг. 1, фиг. 2.) коррелирует с данной ошибкой (чем она больше – тем больше отклонение от эталонных значений.)

2. РЕШЕТОЧНЫЕ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА НА СТАНДАРТНЫХ РЕШЕТКАХ

В настоящей работе рассмотрены стандартные модели (“на решетке”), т.е. набор скоростей для таких моделей имеет вид $\mathbf{c}_i \equiv (n_{i,x}c, n_{i,y}c)$, где $n_{i,x}, n_{i,y}$ – целые числа и $c > 0$ – постоянная величина. Данные РУБ являются дискретизацией уравнения (1) по пространству и времени, решаемые в два шага (столкновение и адвекция)

$$f_i^*(t, \mathbf{x}) = f_i(t, \mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{\tau + \frac{\Delta t}{2}} (f_i^{\text{eq}} - f_i)(t, \mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (4)$$

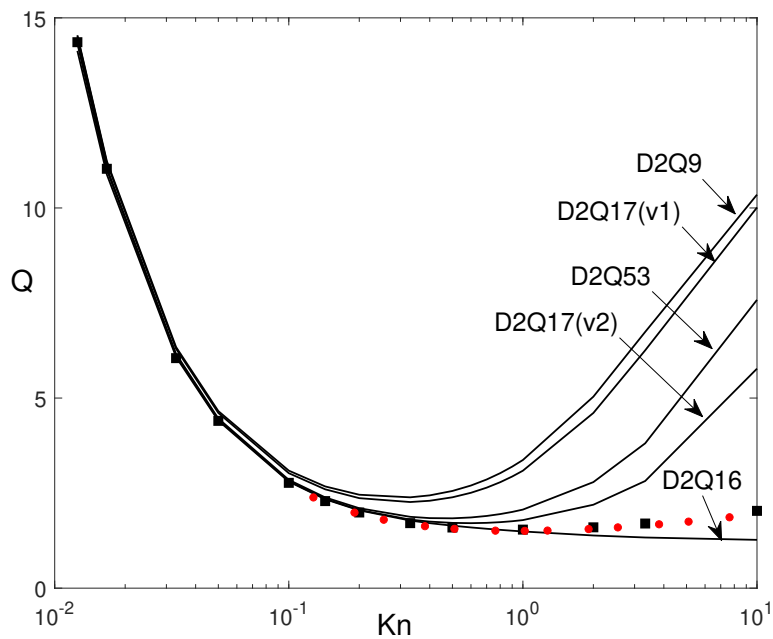
$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = f_i^*(t, \mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (5)$$

где f^* – промежуточная функция распределения после столкновения. В работе $\Delta t = 1$, следовательно, расстояние между узлами решетки есть $\Delta x = c\Delta t = c$, τ – время релаксации. Функция распределения локального равновесия имеет вид

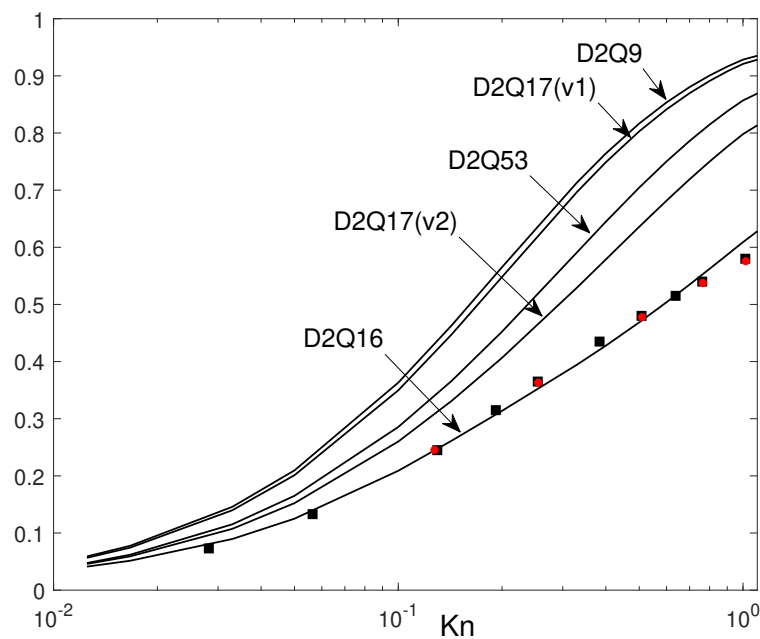
$$f_i^{\text{eq}} = w_i \sum_{m=0}^M \mathbf{a}^{(m)} \mathbf{H}^{(m)}(\mathbf{c}_i). \quad (6)$$

Здесь

$$\begin{aligned} a^{(0)} &= \rho, \quad a_x^{(1)} = \rho u_x, \quad a_y^{(1)} = \rho u_y, \\ a_{xx}^{(2)} &= \frac{1}{2}\rho(\Theta + u_x^2), \quad a_{yy}^{(2)} = \frac{1}{2}\rho(\Theta + u_y^2), \quad a_{xy}^{(2)} = \rho u_x u_y, \\ a_{xxx}^{(3)} &= \frac{1}{6}\rho(u_x^3 + 3u_x\Theta), \quad a_{xxy}^{(3)} = \frac{1}{2}\rho(\Theta + u_x^2)u_y, \quad a_{xyy}^{(3)} = \frac{1}{2}\rho(\Theta + u_y^2)u_x, \quad a_{yyy}^{(3)} = \frac{1}{6}\rho(u_y^3 + 3u_y\Theta), \end{aligned}$$



Фиг. 1. Двумерное течение Пуазейля. Представлены значения объемного расхода Q (формула (10)) для разных чисел Кнудсена). Красные кружки обозначают решение линейаризованного уравнения Больцмана для твердых сфер (см. [39]), черные квадраты соответствуют решению линейаризованного уравнения БГК (см. [38]).



Фиг. 2. Двумерное течение Пуазейля. Представлены значения нормализованных скоростей скольжения на стенках для разных чисел Кнудсена. Красные кружки обозначают решение линейаризованного уравнения Больцмана для твердых сфер (см. [39]), черные квадраты соответствуют решению на основе метода Монте-Карло (см. [12]).

$$\begin{aligned}
a_{xxxx}^{(4)} &= \frac{1}{24}\rho(u_x^4 + 6u_x^2\Theta + 3\Theta^2), \quad a_{yyyy}^{(4)} = \frac{1}{24}\rho(u_y^4 + 6u_y^2\Theta + 3\Theta^2), \\
a_{xxyy}^{(4)} &= \frac{1}{6}\rho(u_x^3 + 3u_x\Theta)u_y, \quad a_{xyyy}^{(4)} = \frac{1}{6}\rho(u_y^3 + 3u_y\Theta)u_x, \quad a_{xxyy}^{(4)} = \frac{1}{4}\rho(\Theta + u_x^2)(\Theta + u_y^2), \\
a_{xxxx}^{(4)} &= \frac{1}{120}\rho(u_x^5 + 15u_x\Theta^2 + 10u_x^3\Theta), \quad a_{yyyy}^{(4)} = \frac{1}{120}\rho(u_y^5 + 15u_y\Theta^2 + 10u_y^3\Theta), \\
a_{xxxxy}^{(4)} &= \frac{1}{24}\rho(u_x^4 + 6u_x^2\Theta + 3\Theta^2)u_y, \quad a_{yyyxy}^{(4)} = \frac{1}{24}\rho(u_y^4 + 6u_y^2\Theta + 3\Theta^2)u_x, \\
a_{xxxxy}^{(4)} &= \frac{1}{12}\rho(u_x^3 + 3u_x\Theta)(\Theta + u_y^2), \quad a_{xyyyx}^{(4)} = \frac{1}{12}\rho(u_y^3 + 3u_y\Theta)(\Theta + u_x^2),
\end{aligned}$$

где ρ, u_x, u_y — плотность и скорости потока, также $\Theta \equiv T - 1$ есть отклонение температуры от температуры абсолютно максвелловского распределения (которая равна единице для всех рассматриваемых моделей), T — температура газа.

Таблица 1. Приведены веса w_i для дискретных скоростей c_i , а также скорости c , рассматриваемых в работе решеточных моделей уравнения Больцмана: $D2Q9$ [1], $D2Q16$ [35], два варианта (обозначаемые $v1$ и $v2$) моделей $D2Q17$ [11], $D2Q53$ [8], N_i — число дискретных скоростей в соответствующей скоростной группе. Для модели $D2Q16$ веса равны: $w_1 = \frac{79-\sqrt{97}}{180}, w_2 = 1/2 - w_1 = \frac{11+\sqrt{97}}{180}$. Для краткости для модели $D2Q53$ значения w_i, c приведены с тремя знаками после запятой, значения соответствующих весов с машинной точностью могут быть найдены в [8]

c_i	N_i	$D2Q9$	$D2Q16$	$D2Q17(v1)$	$D2Q17(v2)$	$D2Q53$
0	1	$\frac{16}{36}$	—	$\frac{190-8\sqrt{10}}{405}$	$\frac{35}{288}$	2.053×10^{-1}
$(\pm c, 0)$	4	$\frac{4}{36}$	—	$\frac{12\sqrt{10}-15}{200}$	—	1.048×10^{-1}
$(\pm c, \pm c)$	4	$\frac{1}{36}$	w_1^2	$\frac{150-39\sqrt{10}}{800}$	$\frac{45}{256}$	5.869×10^{-2}
$(\pm 2c, 0)$	4	—	—	—	—	1.679×10^{-2}
$(\pm 2c, \pm c)$	8	—	—	—	—	7.657×10^{-3}
$(\pm 2c, \pm 2c)$	4	—	—	—	$\frac{9}{640}$	1.549×10^{-3}
$(\pm 3c, 0)$	4	—	—	$\frac{295-92\sqrt{10}}{16200}$	$\frac{1}{36}$	5.25×10^{-4}
$(\pm 3c, \pm c)$	8	—	—	—	—	4.779×10^{-4}
$(\pm 3c, \pm 3c)$	4	—	—	$\frac{130-41\sqrt{10}}{64800}$	$\frac{23}{11520}$	1.196×10^{-5}
$(\pm 4c, \pm c)$	8	—	$w_1 w_2$	—	—	6.074×10^{-6}
$(\pm 4c, \pm 4c)$	4	—	w_2^2	—	—	—
$(\pm 5c, 0)$	4	—	—	—	—	3.306×10^{-7}
c		$\sqrt{3}$	$\sqrt{\frac{1}{(16-30w_1)}}$	$\sqrt{\frac{5+\sqrt{10}}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	1.128

Скорости c_i, c и веса w_i моделей приведены в табл. 1. РУБ $D2Q9, D2Q16$ являются моделями низкого порядка, для них берется $M = 2$ в формуле (6). Для моделей $D2Q17v1, D2Q17v2$ берется $M = 3, \Theta = 0$; для $D2Q53$ имеем $M = 5$, и Θ может быть отлично от нуля. Подчеркнем, что $D2Q53$ может описывать течения на уровне уравнений Барнетта.

Рассмотрим подробнее модель $D2Q16$. Используемое в работе РУБ $D2Q16$ имеет низкий порядок $M = 2$ и относится к классу моделей “на решетке”, но отметим, что для 16-ти скоростей можно получить модель высокого порядка ($M = 3$), однако в этом случае решетка не является стандартной и имеет скорости $(\sqrt{3} - \sqrt{6}c, \sqrt{3} + \sqrt{6}c)$ (отношение скоростей равно 0.318) (см. [33], [34], [9]). Данная модель выводится из следующих соображений (см. также [35]). Для того чтобы моменты f_i^{eq} совпадали с максвелловскими моментами до второго порядка включительно необходимо, чтобы выполнялись равенства

$$w_1 + w_2 = \frac{1}{2}, \quad w_1 c_1^2 + w_2 c_2^2 = \frac{1}{2}, \quad w_1 c_1^4 + w_2 c_2^4 = \frac{3}{2}, \quad (7)$$

данные соотношения получаются после умножения функции f_i^{eq} , $M = 2$ на 1, c_i , c_i^2 , суммирования по i и последующего приравнивания результата к выражениям для максвелловских моментов. Веса w_i и скорость c вычисляются из уравнений (7) при условии $c_1 = c$, $c_2 = 4c$. В итоге получаем $w_1 = \frac{79-\sqrt{97}}{180} \approx 0.3842$, $w_2 = 1/2 - w_1 = \frac{11+\sqrt{97}}{180} \approx 0.1158$ и $c = \sqrt{\frac{1}{(16-30w_1)}} \approx 0.4727$.

3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ПУАЗЕЙЛЯ ДЛЯ РАЗНЫХ ЧИСЕЛ КНУДСЕНА

В качестве тестовой задачи рассмотрим двумерное течение Пуазейля газа между параллельными твердыми стенками под действием внешней силы (направленной вдоль стенок) для разных чисел Кнудсена.

Считаем, что ось y параллельна стенкам канала, переменная x — перпендикулярна стенкам. Так как рассматривается медленное течение, то амплитуда внешней силы мала и в ходе численных расчетов соответствующие члены в РУБ можно брать в линеаризованной форме (см. [1])

$$F_i = w_i c_{i,y} F, \quad (8)$$

где F — безразмерная амплитуда внешней силы, в численных расчетах она берется равной 10^{-6} , максимальное число Маха составляет 10^{-4} .

На открытых концах применяются периодические граничные условия. На твердых стенках задаются кинетические граничные условия (диффузное отражение газа) (см. [36], [37]). Количество пространственных узлов между стенками равно 100. Кинетические граничные условия реализуются следующим образом. Считается, что стенка расположена на расстоянии $0.5c$ от ближайшего узла решетки, в котором моделируется движение газа (приграничный узел). Если для вычисления функции распределения РУБ f_i , соответствующей скорости c_i , необходимо выполнить шаг адвекции из узла, расположенного за стенкой (вне моделируемой области), то используются кинетические граничные условия

$$f_i(t, x, y) = \frac{\sum_{c_j n < -L} |c_j n| f_j(t, x, y)}{\sum_{c_j n > L} |c_j n| w_j} w_i, \quad (9)$$

где L — расстояние между приграничным узлом (x, y) и стенкой, n — нормаль к стенке, направленная внутрь моделируемой области.

Скорости скольжения для течения определяются как $u(0)/u_{\text{max}}$, где $u(0)$ — скорость газа у стенки, u_{max} — максимальная величина продольной скорости (в центре моделируемого канала).

Объемный расход определяется следующим образом (см. [29]):

$$Q = \frac{1}{4U_0 H K n} \int_0^H u(s) ds, \quad (10)$$

где $U_0 = FH^2/(8\rho\nu)$ — средняя скорость для решения уравнения Навье—Стокса с граничными условиями прилипания, H — расстояние между стенками, ρ — плотность газа, ν — вязкость, равная τ для всех моделей, u — продольная скорость.

Для сравнения точности РУБ в качестве эталонных значений объемного расхода используются данные, полученные Черчиньяни с соавторами для линеаризованного уравнения БГК (см. [38]) и Овады с соавторами для линеаризованного уравнения Больцмана (для твердых сфер); для скоростей скольжения используются результаты из статьи Овады с соавторами (см. [39]) и решения на основе метода Монте-Карло (см. [12]).

Отметим, что все рассматриваемые РУБ, кроме $D2Q16$, имеют дискретные скорости, направленные параллельно стенкам. Поэтому при увеличении числа Кнудсена для таких моделей будут наблюдаться эффекты “убегания”, (см. [40], [41]), т.е. частицы, движущиеся параллельно стенкам, практически не будут испытывать столкновений. На практике это приводит к завышению объемного расхода Q . Также большое влияние на результаты расчетов оказывает точность, с которой рассматриваемые модели описывают диффузное отражение. В первую очередь, интерес представляет первый полумомент максвелловского распределения, т.е.

$$m_x^+ = \int_0^\infty \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{c_x^2 + c_y^2}{2}\right) c_x dc_x dc_y = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Для рассматриваемых в настоящей работе РУБ относительные ошибки первого полумомента существенно различаются. Определим относительную ошибку формулой

$$\text{err} \equiv \frac{|\sum_{i: c_{i,x} > 0} w_i c_{i,x} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}}|}{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}}. \quad (11)$$

Таблица 2. Приведены значения объемного расхода для течения Пуазейля при разных числах Кнудсена. *BGK* обозначает решения линеаризованного уравнения Больцмана [38]

Kn	<i>BGK</i>	<i>D2Q9</i>	<i>D2Q16</i>	<i>D2Q17(v1)</i>	<i>D2Q17(v2)</i>	<i>D2Q53</i>
0.0125	14.36	14.54	14.13	14.51	14.33	14.38
0.0167	11.03	11.23	10.88	11.19	11.01	11.06
0.033	6.05	6.35	6.08	6.30	6.13	6.16
0.05	4.40	4.66	4.40	4.60	4.43	4.46
0.1	2.77	3.09	2.80	3.02	2.82	2.85
0.143	2.29	2.68	2.34	2.60	2.35	2.39
0.2	1.99	2.46	2.05	2.37	2.06	2.11
0.33	1.71	2.39	1.78	2.27	1.80	1.88
0.4	—	2.44	1.71	2.30	1.75	1.84
0.5	1.595	2.56	1.64	2.39	1.72	1.84
0.6	—	2.70	1.60	2.51	1.71	1.86
0.7	—	2.86	1.56	2.64	1.72	1.90
0.8	—	3.02	1.53	2.79	1.74	1.95
0.9	—	3.20	1.51	2.94	1.76	2.01
1	1.54	3.37	1.49	3.09	1.79	2.07
2	1.60	5.03	1.39	4.61	2.19	2.79
3.33	1.70	6.74	1.33	6.26	2.82	3.81
10	2.03	10.35	1.27	10.01	5.77	7.59

Наименьшую ошибку (11), равную 0.004, имеет модель *D2Q16*. Для решеточных моделей *D2Q9*, *D2Q17(v1)*, *D2Q53*, *D2Q17(v2)* ошибки *err* равны 0.28, 0.25, 0.11, 0.03 соответственно.

Полученные значения объемного расхода представлены в табл. 2 и на фиг. 1. Решеточные уравнения Больцмана *D2Q53*, *D2Q17(v2)* при $Kn < 0.05$ имеют примерно одинаковую точность, модель *D2Q16* дает значения немного более отличающиеся от эталонного. При $0.05 \leq Kn \leq 1$ модель *D2Q16* воспроизводит значения объемного расхода, которые отличаются от решения линеаризованного уравнения БГК всего на несколько процентов. Это связано с тем, что остальные РУБ менее точно, чем *D2Q16*, описывают условия диффузного отражения, а также подвержены эффектам “убегания”. Если исключить из рассмотрения *D2Q16*, то наименее подвержена этому эффекту модель *D2Q17(v2)*, которая наиболее правильно предсказывает значения *Q*. В свободномолекулярном режиме точность всех моделей падает, *D2Q16* не воспроизводит кнудсеновский минимум, остальные РУБ завышают объемный расход. Аналогичным образом модель *D2Q16* дает наиболее правильные скорости скольжения в режиме скольжения и переходном режиме, фиг. 2.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматривается задача описания медленных изотермических разреженных течений на основе решеточных уравнений Больцмана разного порядка на стандартных решетках. Исследуются РУБ с количеством дискретных скоростей от 9-ти до 53-х. Основной интерес настоящего исследования представляет вопрос влияния структуры дискретных скоростей на точность моделирования разреженного газа, поэтому включение дополнительных времен релаксации, модификация времени релаксации в зависимости от числа Кнудсена и расстояния до стенки, дополнительная регуляризация РУБ в работе не рассматриваются. В качестве тестовой задачи используется медленное двумерное течение Пуазейля для разных чисел Кнудсена.

Для течения Пуазейля показано, что увеличение порядка для РУБ и числа дискретных скоростей не обязательно ведет к увеличению точности. Ранее аналогичный результат был подтвержден для течения Куэтта

(см. [31]). На результаты расчетов основное влияние оказывает точность воспроизведения диффузного отражения, а также появление эффектов “убегания” (при наличии у модели скоростей, параллельных стенкам, частицы с этими скоростями почти не испытывают столкновений). Условия диффузного отражения можно качественно описать полумоментами максвелловского распределения. Результаты численного счета показывают, что, чем хуже модель воспроизводит первый максвелловский полумомент, тем большие отличия она дает в сравнении с эталонными решениями.

Например, модель $D2Q53$ описывает гидродинамику на уровне уравнений Барнетта, но имеет худшую точность, чем модели $D2Q16$, $D2Q17(v2)$, в силу того что последние две модели лучше воспроизводят первый полумомент распределения Максвелла (условия диффузного отражения). Среди двух моделей одинакового порядка и одинаковым числом скоростей ($D2Q17(v1)$, $D2Q17(v2)$) существенно более близкие к эталонным решения имеет модель с меньшей относительной ошибкой первого полумомента распределения Максвелла ($D2Q17(v2)$).

Построена новая модель для 16-ти дискретных скоростей ($D2Q16$), отличающаяся от предложенной ранее 16-ти скоростной модели (см. [29]) тем, что новая модель имеет низкий порядок, но относится к классу моделей “на решетке”. Несмотря на понижение порядка, для РУБ $D2Q16$ значения объемного расхода и скоростей скольжения на стенках при $\text{Kn} \leq 1$ имеют отклонения от эталонных (уравнения Больцмана и БГК, метод Монте-Карло) всего на несколько процентов. Преимущество данной модели относительно остальных во многом обусловлено постановкой задачи: рассмотрено медленное течение, нет эффектов переноса тепла, нет дискретных скоростей, которые параллельны стенкам. Отметим, что недостатком модели $D2Q16$ является то, что она не может полноценно описать пограничный слой и не предсказывает кнудсеновский минимум. Также, в силу того, что новая $D2Q16$ есть РУБ низкого порядка, она вносит кубические ошибки по числу Маха в уравнения гидродинамики (которые несущественны для медленных течений), тогда как остальные рассмотренные модели лишены этого недостатка. Кроме того, в отличие от всех остальных рассматриваемых моделей решеточное уравнение $D2Q53$ может описывать процессы переноса тепла. Отдельно стоит отметить, что на результаты моделирования течений с применением решеточных уравнений Больцмана может оказывать влияние появление ложных инвариантов (см. [42]). В теории дискретных уравнений Больцмана задаче построения моделей с правильным числом инвариантов посвящено много исследований (см. [43]–[46]). В численных расчетах на основе РУБ эффекты, связанные с лишними инвариантами наблюдаются при симуляции многофазных течений (см. [47]).

Для течений разреженного газа в сложных геометриях углы между дискретными скоростями и стенкой непостоянны, таким образом, точность расчетов для течений в пористых средах может отличаться от результатов для течения Пуазейля. В частности, также представляет интерес задача моделирования течения Пуазейля для разных чисел Кнудсена решеточными моделями Больцмана при разных углах поворота решетки. Также важной является задача оценки точности моделей для течений в микроканалах с шероховатостями и течений через пористые среды с разной геометрией пор (см. [48]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Vigen E. The Lattice Boltzmann Method. Principles and Practice. Springer, 2017.
2. McNamara G., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice gas automata // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2332–2335.
3. Karniadakis G., Beskok A., Aluru N. Microflows and Nanoflows. Fundamentals and Simulation. Springer, 2005.
4. Wang J., Chen L., Kang Q., Rahman S. The lattice Boltzmann method for isothermal micro-gaseous flow and its application in shale gas flow: A review // Int. J. Heat Mass Transf. 2016. V. 95. P. 94–108.
5. Shan X., Yuan X., Chen H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation // J. Fluid Mech. 2006. V. 550. P. 413–441.
6. Shan X., He X. Discretization of the Velocity Space in the Solution of the Boltzmann Equation // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 65–67.
7. Philippi P., Hegele Jr. L., dos Santos L., Surmas R. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. P. 056702.
8. Surmas R., Ortiz C., Philippi P. Simulating thermohydrodynamics by finite difference solutions of the Boltzmann equation // Eur. Phys. J. 2009. V. 90. P. 81–90.

9. *Chikatamarla S., Karlin I.* Lattices for the lattice Boltzmann method // *Phys. Rev. E.* 2009. V. 79. P. 046701.
10. *Shan X.* General solution of lattices for Cartesian lattice Bhatnagar–Gross–Krook models // *Phys. Rev. E.* 2010. V. 81. P. 036702.
11. *Shan X.* The mathematical structure of the lattices of the lattice Boltzmann method // *J. Comput. Sci.* V. 17. P. 475–481.
12. *Feuchter C., Schleifenbaum W.* High-order lattice Boltzmann models for wall-bounded flows at finite Knudsen numbers // *Phys. Rev. E.* 2016. V. 94. P. 013304.
13. *Spiller D., Dünweg B.* Semiautomatic construction of lattice Boltzmann models // *Phys. Rev. E.* 2020. V. 101. P. 043310.
14. *Meng J.-P., Zhang Y.* Gauss–Hermite quadratures and accuracy of lattice Boltzmann models for non-equilibrium gas flows // *Phys. Rev. E.* 2011. V. 83. P. 036704.
15. *Shi Y., Wu L., Shan X.* Accuracy of high-order lattice Boltzmann method for non-equilibrium gas flow // *J. Fluid Mech.* 2020. V. 907. P. A25.
16. *Gross E., Ziering S.* Kinetic theory of Linear Shear flow // *Phys. Fluid.* 1958. V. 1. P. 215–223.
17. *Ambrus V., Sofonea V.* Implementation of diffuse-reflection boundary conditions using lattice Boltzmann models based on half-space Gauss–Laguerre quadratures // *Phys. Rev. E.* 2014. V. 89. P. 041301(R).
18. *Ambrus V., Sofonea V.* Application of mixed quadrature lattice Boltzmann models for the simulation of Poiseuille flow at non-negligible values of the Knudsen number // *J. Comput. Sci.* 2016. V. 17. P. 403.
19. *Ambrus V., Sofonea V.* Lattice Boltzmann models based on half-range Gauss–Hermite quadratures // *J. Comput. Phys.* 2016. V. 316. P. 760.
20. *Shi Y.* Velocity discretization for lattice Boltzmann method for noncontinuum bounded gas flows at the micro- and nanoscale // *Phys. Fluid.* 2022. V. 34. P. 082013.
21. *Shi Y.* Comparison of different Gaussian quadrature rules for lattice Boltzmann simulations of noncontinuum Couette flows: From the slip to free molecular flow regimes // *Phys. Fluid.* 2023. V. 35. P. 072015.
22. *Ilyin O.* Intermediate Lattice Boltzmann–BGK method and its application to micro-flows // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. V. 1163. P. 012030.
23. *Ilyin O.* Gaussian Lattice Boltzmann method and its applications to rarefied flows // *Phys. Fluid.* 2020. V. 32. P. 012007.
24. *Di Staso G., Clercx H., Succi S., Toschi F.* Lattice Boltzmann accelerated direct simulation Monte Carlo for dilute gas flow simulations // *Phil. Trans. R. Soc. A.* 2016. V. 374. P. 20160226.
25. *Di Staso G., Clercx H., Succi S., Toschi F.* DSMC–LBM mapping scheme for rarefied and non-rarefied gas flows // *J. Comput. Sci.* 2016. V. 17. P. 357–369.
26. *Di Staso G., Srivastava S., Arlemark E., Clercx H., Toschi F.* Hybrid lattice Boltzmann–direct simulation Monte Carlo approach for flows in three-dimensional geometries // *Comput. Fluid.* 2018. V. 172. P. 492–509.
27. *Aristov V., Ilyin O., Rogozin O.* A hybrid numerical scheme based on coupling discrete-velocities models for the BGK and LBGK equations // *AIP Conf. Proc.* 2019. V. 2132. P. 060007.
28. *Aristov V., Ilyin O., Rogozin O.* Kinetic multiscale scheme based on the discrete-velocity and lattice-Boltzmann methods // *J. Comput. Sci.* 2020. V. 40. P. 101064.
29. *Kim S., Pitsch H., Boyd I.* Accuracy of higher-order lattice Boltzmann methods for microscale flows with finite Knudsen numbers // *J. Comput. Phys.* 2008. V. 227. P. 8655–8671.
30. *Tang G., Zhang Y., Emerson D.* Lattice Boltzmann models for nonequilibrium gas flows // *Phys. Rev. E.* 2008. V. 77. P. 046701.

31. *Shi Y., Brookes P., Yap Y., Sader J.* Accuracy of the lattice Boltzmann method for low-speed noncontinuum flows // *Phys. Rev. E.* 2011. V. 83. P. 045701(R).
32. *de Izarra L., Rouet J.-L., Izrar B.* High-order lattice Boltzmann models for gas flow for a wide range of Knudsen numbers // *Phys. Rev. E.* 2011. V. 84. P. 066705.
33. *Chikatamarla S., Karlin I.* Entropy and Galilean invariance of lattice Boltzmann theories // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 190601.
34. *Bardow A., Karlin I., Gusev A.* Multispeed models in off-lattice Boltzmann simulations // *Phys. Rev. E.* 2008. V. 77. P. 025701(R).
35. *Ilyin O.* Nonclassical Heat Transfer in a Microchannel and a Problem for Lattice Boltzmann Equations // *Comp. Math. Math. Phys.* 2023. V. 63. P. 2297–2305.
36. *Ansumali S., Karlin I.* Kinetic boundary conditions in the lattice Boltzmann method // *Phys. Rev. E.* 2002. V. 66. P. 026311.
37. *Meng J., Zhang Y.* Diffuse reflection boundary condition for high-order lattice Boltzmann models with streaming-collision mechanism // *J. Comput. Phys.* 2014. V. 258. P. 601–612.
38. *Cercignani C., Lampis M., Lorenzani S.* Variational approach to gas flows in microchannels // *Phys. Fluid.* 2004. V. 16. P. 3426–3437.
39. *Ohwada T., Sone Y., Aoki K.* Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *Phys. Fluid.* 1989. V. 1. P. 2042–2049.
40. *Toschi F., Succi S.* Lattice Boltzmann method at finite Knudsen numbers // *Europhys. Lett.* 2005. V. 69. P. 549.
41. *Montessori A., Prestininzi P., La Rocca M., Succi S.* Lattice Boltzmann approach for complex nonequilibrium flows // *Phys. Rev. E.* 2015. V. 92. P. 043308.
42. *Kandhai D., Koponen A., Hoekstra A., Kataja M., Timonen J., Sloot P.M.A.* Implementation Aspects of 3D Lattice-BGK: Boundaries, Accuracy, and a New Fast Relaxation Method // *J. Comput. Phys.* 1999. V. 150. P. 482–501.
43. *Bobylev A., Cercignani C.* Discrete Velocity Models Without Nonphysical Invariants // *J. Stat. Phys.* 1999. V. 97. P. 677–686.
44. *Веденяпин В., Орлов Ю.* О законах сохранения для полиномиальных гамильтонианов и для дискретных моделей уравнения Больцмана // *ТМФ.* 1999. Т. 121. С. 307–315.
45. *Vedenyapin V.* Velocity inductive construction for mixtures // *Transp. Theor. Stat. Phys.* 1999. V. 28. P. 727–742.
46. *Bobylev A., Vinerean M.* Construction of Discrete Kinetic Models with Given Invariants // *J. Stat. Phys.* 2008. V. 132. P. 153–170.
47. *Guo Z., Shi B., Zheng C.* Chequerboard effects on spurious currents in the lattice Boltzmann equation for two-phase flows // *Phil. Trans. R. Soc. A.* 2011. V. 369. P. 2283–2291.
48. *Su W., Lindsay S., Liu H., Wu L.* Comparative study of the discrete velocity and lattice Boltzmann methods for rarefied gas flows through irregular channels // *Phys. Rev. E.* 2017. V. 96. P. 023309.

ON THE ACCURACY OF LOW- AND HIGH-ORDER LATTICE BOLTZMANN EQUATIONS IN APPLICATIONS TO SLOW ISOTHERMAL MICROFLOWS

O. V. Ilyin*

119333 Moscow, Vavilov Str., 44, Federal Research Center Computer Science and Control, RAS, Russia

**e-mail: oilyin@gmail.com*

Received: 12.12.2023

Revised: 14.04.2024

Accepted: 31.05.2024

Abstract. The question of the applicability of two-dimensional lattice Boltzmann equations of different orders in standard lattices to the description of slow isothermal sparse flows is considered. The two-dimensional Poiseuille flow at different Knudsen numbers is used as a reference problem. This problem is numerically solved using several lattice Boltzmann equations of low and high orders having from 9 to 53 discrete velocities. The results are compared with solutions of the linearized Boltzmann, Bhatnagar-Gross-Krook equations, which are used as reference ones. Numerical experiments have shown that an increase in the order of the Boltzmann lattice equation (i.e., the number of first moments of the local-Maxwell distribution reproduced by the discrete local equilibrium of the Boltzmann lattice equation) does not always lead to an increase in accuracy. In particular, a new low-order model for 16 velocities is proposed, which correctly describes the diffuse reflection at solid boundaries at a qualitative level. It is shown that for this model, it is possible to obtain sufficiently accurate values of the volumetric flow rate of sliding velocities for a wide range of Knudsen numbers in comparison with other models under consideration.

Keywords: lattice Boltzmann equations, rarefied gas, microflows.