

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите

Директор ВШТМиМФ,

д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН

_____ А. М. Кривцов

«___» _____ 2024 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Моделирование и исследование парадокса граничного условия прилипания в процессах гидродинамики

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

Направленность

01.03.03_02 Биомеханика и медицинская инженерия

Выполнил

Студент гр. 5030103/00201

Е. В. Богомольная

Руководитель

Доцент ВШТМиМФ, к.ф.-м.н.

К. П. Фролова

Консультант

Главный научный сотрудник ИПМаш РАН, д.ф.-м.н.

Н.М. Бессонов

Санкт-Петербург

2024

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО**
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А. М. Кривцов

«__» _____ 20__ г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Богомольной Екатерине Вадимовне, гр. 5030103/00201

1. Тема работы: Моделирование и исследование парадокса граничного условия прилипания в процессах гидродинамики.
1. Срок сдачи студентом законченной работы: 10.06.2024
2. Исходные данные по работе: справочная литература, актуальные научные публикации по теме работы, основные уравнения движения для системы материальных точек.
3. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): обзор литературы и выбор физической и математической моделей (течение Паузейля в плоском канале), сравнение с классической постановкой задачи о течении газа в канале для сплошнородной модели (модель Больцмана для описания физических систем, содержащих большое число невзаимодействующих частиц), разработка молекулярно-динамической модели, задание вариантов граничных условий (отскок, прилипание, отскок с учетом неровностей поверхности канала), анализ полученных результатов.
2. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено.
4. Консультанты по работе: Бессонов Н.М. – главный научный сотрудник ИПМаш РАН, д.ф.-м.н.
3. Дата выдачи задания 28.02.2024

Руководитель ВКР _____ Фролова К. П., доцент ВШТМиМФ, к.ф.-м.н.

Задание принял к исполнению 28.02.2024

Студент _____ Богомольная Е. В.

РЕФЕРАТ

На 31 с., 19 рисунков, 0 таблиц, 15 источников

НЕСЖИМАЕМАЯ ВЯЗКАЯ ЖИДКОСТЬ, УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА, ТЕЧЕНИЕ ПУАЗЕЙЛЯ, МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, C++

В данной работе исследуется граничное условие прилипания в процессах гидродинамики с помощью молекулярно-динамической модели. Смоделирован поток среды в цилиндрическом канале круглого сечения на языке программирования C++, заданы различные варианты граничных условий. Проведен сравнительный анализ с математической моделью. Выдвинуто предположение о природе физического несоответствия между дискретной и сплошнородной моделями. В ходе работы предположение было подтверждено и обосновано экспериментально. Таким образом, результаты, полученные в данной работе, могут применяться для решения двумерных и трехмерных стационарных задач гидродинамики в дискретной постановке.

THE ABSTRACT

31 Pages, 19 figures, 0 tables, 15 sources

INCOMPRESSIBLE VISCOUS FLUID, NAVIER-STOKES EQUATIONS,
POISEULE FLOW, MOLECULAR DYNAMICS MODEL, C++

In this paper, the boundary condition of sticking in hydrodynamic processes is studied using a molecular dynamics model. The flow of a medium in a cylindrical channel of circular cross-section was modeled in the C++ programming language, and various options for boundary conditions were specified. A comparative analysis with a mathematical model was carried out. An assumption has been made about the nature of the physical discrepancy between the discrete and continuous-average models. During the work, the assumption was confirmed and justified experimentally. Thus, the results obtained in this work can be used to solve two-dimensional and three-dimensional stationary problems of hydrodynamics in a discrete formulation.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ СПРАВКА.....	8
1.1 Решения системы уравнений Навье-Стокса.....	8
1.2 Граничное условие прилипания.....	9
1.3 Течение Пуазейля.....	11
1.4 Метод частиц.....	14
ГЛАВА 2. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ.....	17
2.1 Постановка задачи.....	17
2.2 Математическая модель.....	18
2.3 Начальные и граничные условия.....	21
2.4 Алгоритм программы.....	26
ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ.....	30
3.1 Прилипание.....	30
3.2 «Зеркальный» отскок.....	31
3.3 «Модифицированный» отскок.....	32
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	34
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	36

ВВЕДЕНИЕ

Гидродинамика - раздел механики сплошных сред, наука о течении газа и низкомолекулярных жидкостей.

В список гидродинамических явлений, играющих немаловажную роль в нашей жизни, можно включить такие процессы, как циркуляция крови в кровеносных сосудах, течение расплавленных металлов и химических реагентов, грунтовых вод, различных жидкостей в недрах Земли, аэро- и гидродинамические течения вблизи летательных аппаратов и судов и т.д.

Однако при решении задач гидродинамики лишь для малого числа случаев можно применить аналитические методы решения, поэтому очень распространено моделирование процессов и поиск численных решений задач.

Несмотря на развитие вычислительного оборудования и появление новых численных методов, в настоящее время существует два основных подхода к решению задач механики жидкости или газа. Первый подход - решение полной системы уравнений Навье-Стокса, которая описывает поведение сжимаемых и несжимаемых жидкостей (газа), второй - расщепление этой системы. В данной работе речь пойдет именно о несжимаемой среде, то есть о среде с постоянной плотностью. Оба подхода применяются для решения обширного спектра задач, и выбор конкретного подхода обусловлен физическими особенностями моделируемого процесса и желаемой точностью решения. Один подход может оказаться более затратным с точки зрения вычислительных мощностей, другой может давать недостаточную точность.

Для решения задач гидродинамики численным моделированием существует множество методов. Один из них - метод молекулярной динамики. Он используется не так часто, так как в большинстве случаев жидкость или газ рассматриваются как сплошная среда, однако, если подойти к задаче с точки зрения молекулярно-кинетической теории, использование этого метода позволяет учитывать некоторые нюансы.

Известно, что существуют две противоположные концепции описания

мира - концепция непрерывности и концепция дискретности. Большая часть объектов, которая нас окружает, кажется нам состоящей из сплошного материала, что можно вполне успешно описать с помощью концепции континуальности. Однако известно также, что каждое вещество имеет определенную внутреннюю структуру, и она безусловно сказывается на его свойствах. Более того, эта структура проявляется на разных масштабных уровнях, начиная от атомарного, где любое вещество дискретно, до уровня, на котором уже тяжело различить отдельные атомы, но их большие группы создают неоднородности, которые можно рассмотреть и с континуальной, и с дискретной точки зрения.

Традиционные подходы механики сплошной среды к моделированию имеют существенные ограничения, поэтому набирает популярность моделирование на микроуровне. Если рассмотреть систему с большим количеством частиц, движение которых описывается уравнениями ньютоновской механики, и проинтегрировать ее, можно получить достаточно полную картину динамической эволюции молекулярной системы. Усреднив пространственные и энергетические характеристики движения, можно получить представление о структуре ансамбля частиц и о термодинамических и кинетических свойствах такой системы. Этот подход дает возможность исследовать макроскопические свойства молекулярных систем и получил широкое распространение в различных областях физики и других смежных наук.

Более того, при молекулярно-динамическом подходе есть вероятность столкнуться с неточностями между математическими моделями и реальными процессами, которые возникают в связи с тем, что в сплошнородных моделях не учитываются некоторые параметры[8]. Чаще всего это не влияет на результат решения, так как в большинстве задач этими параметрами можно пренебречь, однако это вызывает научный интерес.

Одной из таких неточностей стало граничное условие прилипания. При создании молекулярно-динамической модели потока среды в канале прямое

задание граничного условия прилипания оказалось не отвечающим физике. Цель данной выпускной квалификационной работы - исследование и постановка корректных граничных условий при моделировании потока среды в канале методом молекулярной динамики.

В работе реализовываются простейшие модели методом молекулярной динамики на языке программирования C++ в среде разработки Visual Studio 2008 года.

ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ СПРАВКА

1.1 Решения системы уравнений Навье-Стокса

Движение сплошной несжимаемой вязкой среды (жидкости или газа) в гидродинамике описывает система дифференциальных уравнений Навье-Стокса, состоящая из уравнения движения и уравнения неразрывности[5]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \underline{v} + \underline{f} \\ \nabla \cdot \underline{v} = 0 \end{cases}$$

где \underline{v} - вектор скорости;

p - давление;

ρ - плотность;

ν - кинематическая вязкость;

\underline{f} - вектор массовых сил.

Количество существующих аналитических точных решений этой системы уравнений очень мало в связи с её нелинейностью и ограничивается двумя классами[5]: установившиеся движения с прямолинейными траекториями (ламинарные течения) в отсутствие нелинейных членов и «ползучие» движения, полученные в результате приближенной линеаризации уравнений Навье-Стокса путем отбрасывания малых конвективных ускорений.

Первый класс в виде плоскопараллельных установившихся течений ограничен линейными и параболическими профилями скорости, например, течение Куэтта, течение Куэтта-Тейлора, течение Пуайзеля и т.д. Вторым классом, соответствующим большим числам Рейнольдса, содержит в себе множество решений в виде «почти» плоскопараллельных течений: вертикальная компонента скорости значительно меньше горизонтальной, в связи с чем локально ее можно принимать равной нулю, а движение считать плоскопараллельным.

Для получения точных решений системы уравнений необходимо задать граничные, а в случае нестационарного течения и начальные условия. Основное граничное условие для вязкой сплошной среды - «прилипание» частиц среды к твердой стенке канала, то есть отсутствие скорости скольжения среды по поверхности, а именно отсутствие как нормальной к твердой поверхности относительной скорости между частицами среды и близлежащими точками поверхности, так и касательных составляющих относительной скорости[4].

Таким образом, для вязкой среды принято задавать скорость частиц равной нулю на неподвижной обтекаемой поверхности.

1.2 Граничное условие прилипания

На протяжении многих лет граничное условие прилипания среды к стенкам канала было экспериментальным фактом, не подлежащим сомнению. Привычно считать условие прилипания одним из незыблемых оснований гидродинамики, оно лежит в основе многих математических моделей.

Однако некоторые исследования показали, что граничное условие прилипания - допущение, гипотеза, которая хоть и работает в большинстве случаев, в определенных ситуациях влияет на расхождение между экспериментальными и теоретическими данными.

Ученые до сих пор задаются вопросом о корректности задания граничного условия прилипания, хотя эта проблема стоит остро уже несколько тысячелетий.

Л. Прандтль вводил в своих лекциях условие прилипания следующим образом: «Исследование поля скоростей, более точное, чем непосредственное наблюдение, показало, что жидкость непосредственно около самого тела не скользит по нему, а прилипает»[6]. Впервые спустя долгое время сделать шаг в сторону от решения уравнения Навье-Стокса с граничным условием прилипания предложили профессора Королевского технологического института К. Джонсон и Й. Хоффман. Вместо этого они предложили определять аэродинамическое сопротивление автомобиля численным решением с граничным условием проскальзывания. С. Гольштейн считал, что

неразрешенность вопроса о граничном условии прилипания на твердой стенке сыграла большую роль в развитии гидродинамики как науки и стала серьезной преградой на пути ее прогресса. Д. Бернулли замечал огромные расхождения между результатами вычислений, связанными с прилипанием и скольжением, для реальной и идеальной сред. Жирар допустил, что некоторый слой вязкой среды, который является довольно тонким, остается неразрывно связанным со стенкой канала, а оставшаяся часть скользит по внешней стороне этого слоя. Еще одну гипотезу выдвинул Навье: используя идеи молекулярной динамики, которые ранее позволили ему вывести уравнения движения вязкой жидкости, он предположил, что на границе твердой стенки есть скольжение, которое встречает сопротивление силы, пропорциональной относительной скорости.

За последние годы проведено много новых исследований, посвященных феномену прилипания и скольжения сплошных сред. По сей день считается, что между вязкой средой и твердой поверхностью относительное движение отсутствует.

В данной работе нас интересует один из наиболее простых случаев движения вязкой несжимаемой жидкости (газа) - ламинарное движение по цилиндрической трубе произвольного сечения. Линиями тока в этом случае будут являться прямые, параллельные оси трубы, а число Рейнольдса не должно превосходить некоторого критического значения, при котором течение перейдет в турбулентный режим.

Для того, чтобы ответить на вопрос, что же на самом деле происходит с жидкостью на границе, посмотрим на вопрос с точки зрения молекулярно-кинетической теории.

Течение жидкости или газа может быть описано статистикой Максвелла-Больцмана, а уравнения Навье-Стокса, в свою очередь, можно вывести из уравнения Больцмана, следовательно, движение жидкости или газа в канале можно представить прямым способом в молекулярно-динамическом моделировании как ансамбль частиц, который будет подчиняться законам движения ньютоновской механики[8]. Логично ожидать, что, опираясь на

существующую математическую модель, которая является довольно точным описанием эксперимента и теоретически является корректной, возможно смоделировать аналогичный поток и получить результат, соответствующий теории.

Учитывая расхождения в мнениях относительно граничных условий, будем задавать различные варианты, чтобы понять, в каком случае мы достигнем тех результатов, которые описывает теория.

1.3 Течение Пуазейля

Полученный результат будем сравнивать с математической моделью течения Пуазейля, простейшей и наиболее изученной моделью динамики вязкой жидкости или газа[2]. Течение Пуазейля - это ламинарный поток жидкости или газа через каналы в виде прямого кругового цилиндра радиуса a или слоя между параллельными плоскостями, находящимися на расстоянии h .

В двумерной постановке:

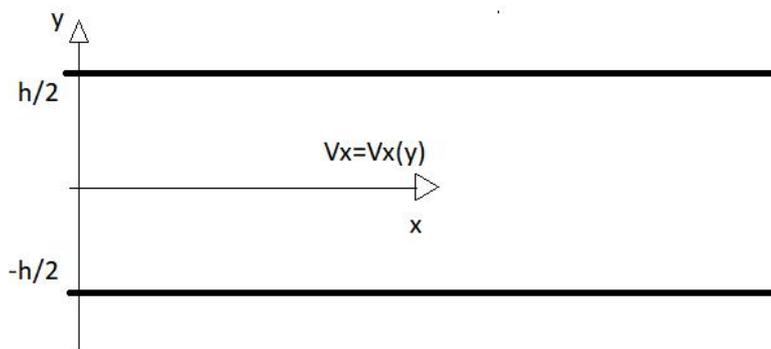


Рисунок 1.1. «Плоское» течение Пуазейля

Задано граничное условие прилипания на стенках:

$$v\left(-\frac{h}{2}\right) = v\left(\frac{h}{2}\right) = 0$$

Теперь предположим, что труба, по которой движется жидкость или газ, трехмерная и бесконечно длинная, а поток направлен вдоль оси трубы (вдоль оси z). В силу ламинарности течения двумя компонентами скорости можно пренебречь и положить их равными нулю.

Будем считать поток изотермическим, опустим действие объемных сил,

плотность ρ и динамическая вязкость μ - постоянные величины. Тогда, исходя из уравнений Навье-Стокса:

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}$$

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}$$

$$v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial z} = 0$$

Видно, что скорость зависит только от x и y , а давление - только от z . Таким образом, выполнено следующее равенство:

$$\mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial p}{\partial z}$$

Видно, что в левой и правой части независимые функции (в правой функция зависит от x, y , в левой - от z). Следовательно, обе части постоянны по отдельности. Для удобства введем

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \text{const} = -\frac{\Delta p}{l}$$

где Δp - постоянное вдоль всей трубы падение давления на произвольном участке длины l . В случае установившегося течения перепад давления Δp при умножении на площадь сечения трубы S будет выполнять функцию движущей силы, которую в свою очередь будут уравнивать силы сопротивления трения жидкости (газа) о поверхность трубы.

Уравнение сводится к уравнению Пуассона:

$$\nabla^2 v = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = -\frac{\Delta p}{\mu l}$$

В случае плоского ламинарного движения вязкой несжимаемой среды между двумя плоскостями $y = \pm h$ координата x исчезает, и уравнение Пуассона сводится к дифференциальному уравнению второго порядка:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = -\frac{\Delta p}{\mu l}$$

Его интегралом при граничных условиях $v = 0$ при $y = \pm h$ будет

$$v = \frac{\Delta p h^2}{2\mu l} \left[1 - \left(\frac{y}{h}\right)^2 \right]$$

Распределение скоростей в этом случае будет представлять собой параболу второго порядка, а максимальная скорость будет достигнута в плоскости симметрии потока при $y = 0$:

$$v_{max} = \frac{\Delta p h^2}{2\mu l}$$

Рассмотрим частный случай - течение сквозь цилиндрическую трубу круглого сечения. Если сечение - это окружность радиуса a , то его уравнение в плоскости:

$$x^2 + y^2 = a^2$$

Решением уравнения, которое удовлетворяло бы граничному условию обнуления скорости на контуре сечения, в этом случае будет

$$v = A \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2} \right)$$

Постоянная A , согласно уравнению, определится из условия

$$-\frac{4A}{a^2} = -\frac{\Delta p}{\mu l}$$

$$A = \frac{a^2 \Delta p}{4\mu l}$$

Тогда распределение скорости:

$$v = \frac{a^2 \Delta p}{4\mu l} \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2} \right)$$

где ∇p - градиент давления, μ - динамическая вязкость, l - длина канала.

Максимальное значение скорости достигается в центре канала, при этом средняя скорость равна половине максимальной:

$$v_{max} = \frac{a^2 \Delta p}{4\mu l} = 2v_{cp}$$

Профиль скоростей представляет собой параболу (рис.1.2), вертикальная скорость тождественно равна нулю.

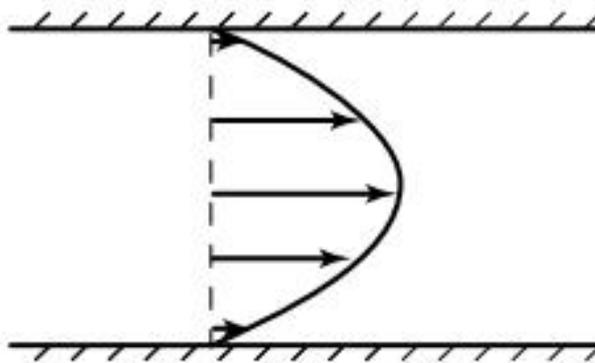


Рисунок 1.2. Профиль скоростей Пуазейля

1.4 Метод молекулярной динамики

Метод динамики частиц заключается в том, чтобы представить тело как ансамбль частиц, например, материальных точек или других условных тел, которые движутся в соответствии с классическими уравнениями динамики. Также задаются законы взаимодействия между материальными точками.

Наиболее разработанным вариантом метода динамики частиц является метод молекулярной динамики. Этот метод активно используется последние десятилетия для изучения различных свойств тел и материалов.

В классической молекулярной динамике частицами являются атомы и молекулы, из которых состоит материал, однако в этой работе для простоты поток среды представляется как совокупность некоторых точек заданного радиуса, не несущих в себе никаких свойств.

На сегодняшний день с учетом развития вычислительной техники используя метод молекулярной динамики можно рассматривать чрезвычайно маленькие объемы материала, вплоть до кубического микрометра. Поэтому любые наноструктуры (за некоторым исключением) могут быть смоделированы с чрезвычайно высокой точностью на современных многопроцессорных

вычислительных системах.

Для описания больших объемов материала, а тем более, макроскопических объектов, придерживаться молекулярной концепции не представляется возможным, в связи с чем частицы представляются элементами более крупного масштабного уровня. Такой подход набирает популярность в механике как альтернатива континуальному описанию материалов. Подобный метод часто, по традиции, также называют молекулярной динамикой, хотя более правильно говорить о динамике мезочастиц. Преимущество метода динамики частиц по сравнению с методами, основанными на концепции гипотезы сплошности, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала.

Метод динамики частиц позволяет устранить промежуточное континуальное звено и совместить дискретность физическую с дискретностью, которая необходима для численного расчета. Это положительно сказывается на скорости и точности вычислений.

Ограниченное применение метода динамики частиц в механике до настоящего времени связано с тем, что этот метод требует значительных компьютерных ресурсов. Однако рост производительности вычислительной техники, и, прежде всего многопроцессорных вычислительных систем, делает возможным в настоящее время эффективно применять метод частиц к моделированию свойств материалов.

Метод классической молекулярной динамики (рис.2) позволяет с использованием современных ЭВМ рассматривать системы, состоящие из нескольких миллионов атомов на временах порядка нескольких пикосекунд. Применение других подходов (тяжело-атомные, крупно-зернистые модели) позволяет увеличить шаг интегрирования и тем самым увеличить доступное для наблюдения время до порядка микросекунд. Для решения таких задач все чаще требуются большие вычислительные мощности, которыми обладают суперкомпьютеры.

time 2.44 ps

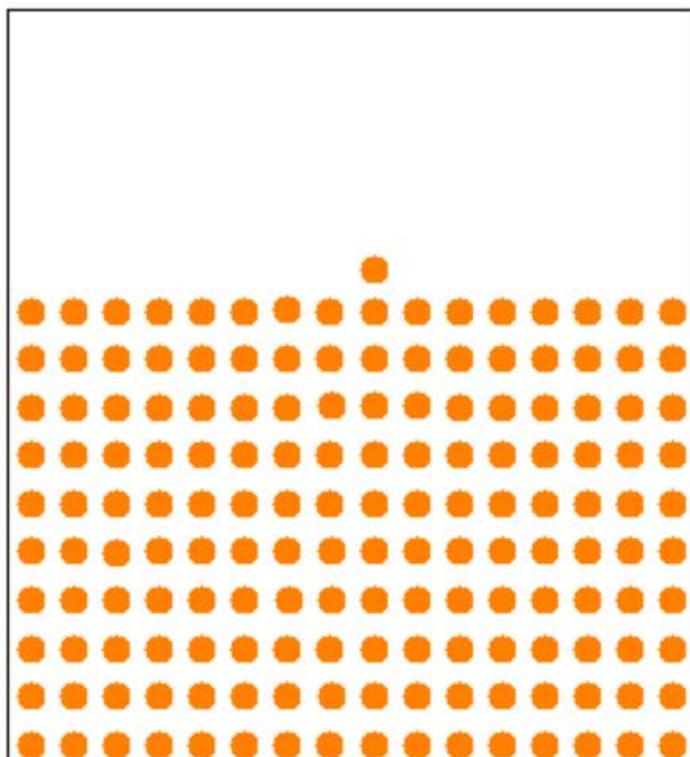


Рисунок 2. Метод молекулярной динамики

ГЛАВА 2. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

2.1 Постановка задачи

Метод динамики частиц основывается на рассмотрении совокупности материальных точек (частиц), взаимодействующих как между собой, так и с внешними силовыми полями[3].

Необходимо смоделировать поток среды, состоящей из частиц, в трехмерном цилиндрическом канале круглого сечения и создать пользовательский интерфейс для задания некоторых параметров без манипуляций с кодом программы. Часть параметров при моделировании будет зафиксирована, однако другие, такие как размер расчетной области, количество частиц, радиус частицы, дальность взаимодействия частиц, динамическая вязкость системы, шаг по времени и некоторые коэффициенты, могут задаваться пользователем в диалоговом окне для отслеживания динамики результатов эксперимента при различных входных данных.

Будет задано несколько вариантов граничных условий: прилипание, то есть «зануление» скорости частицы на стенке канала, «зеркальный» отскок и «модифицированный» отскок. Для каждого варианта будет построен график распределения скоростей. Цель работы - подобрать такие граничные условия, чтобы эпюра скоростей совпадала с теоретическим распределением скоростей течения Пуазейля. На рисунке 3 изображена физическая модель потока среды в канале.

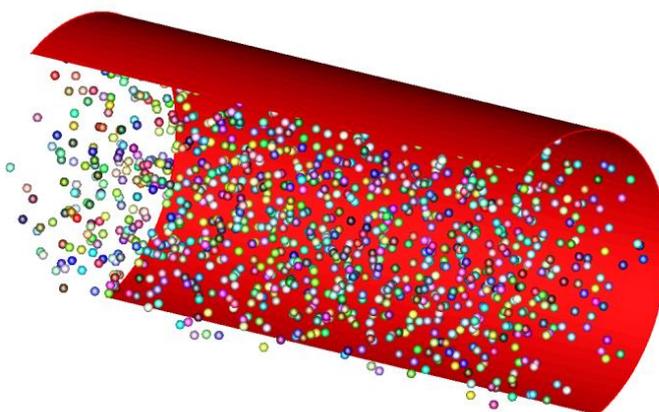


Рисунок 3. Физическая модель потока среды в канале

2.2 Математическая модель

Рассматривается система из N частиц. Будем решать систему дифференциальных уравнений от i до N :

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i$$

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_{k=1..N} F_{ik} + \underline{f} - v_i$$

где m_i - масса i -й частицы

r_i - радиус-вектор i -й частицы,

F_{ik} - сила, действующая на частицу i со стороны частицы k ,

\underline{f} - вектор массовых сил.

Сначала мы будем рассматривать примитивную молекулярно-динамическую модель Больцмана в двумерной постановке.

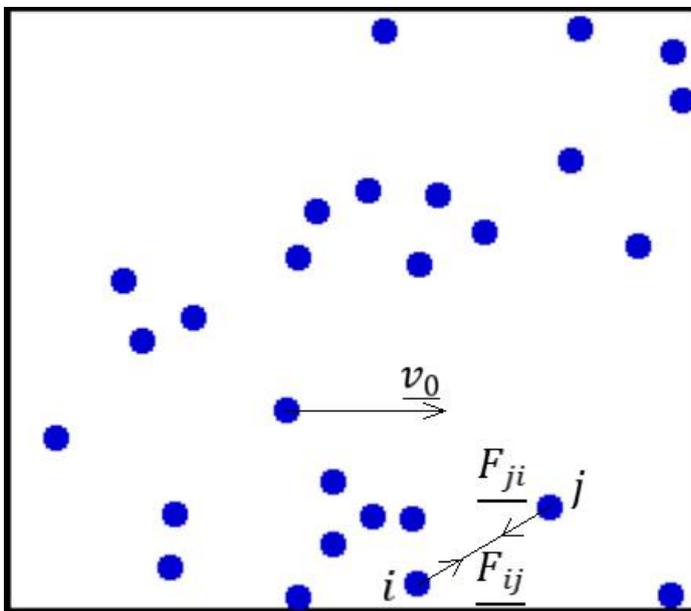


Рисунок 4.1. Простейшая модель в двумерной постановке

Она представляет собой агломерат частиц, которые хаотично передвигаются в расчетной области, соударяются между собой и сталкиваются

со стенками канала, вследствие чего вектора скорости частиц меняют свое направление. Некоторые частицы могут не взаимодействовать, а свободно пролетать в канале на протяжении всего расчета. Частицы в данном случае - микроскопические точки, движение которых подчиняется второму закону Ньютона.

Теоретически движение потока среды происходит по причине существования перепада давления Δp между началом и концом канала, но в данной работе для простоты мы будем использовать некую внешнюю силу, которая будет двигать весь поток частиц вправо (рис.4.2). Аналогично можно вывести формулу с внешней силой вместо перепада давления:

$$v = \frac{a^2 F}{4\mu l} \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2}\right)$$

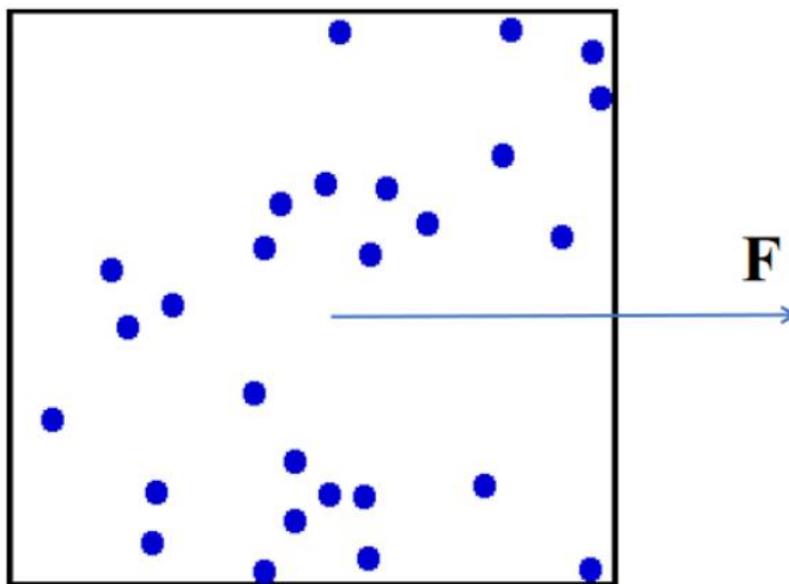


Рисунок 4.2. Внешняя сила, действующая на систему частиц

Для соблюдения условия непрерывности и возможности имитации куска бесконечно длинной пузелейевой трубы используется «закольцованность» модели, то есть частицы, которые вылетают за границу расчетной области справа, сразу же появляются у левой стенки. Таким образом, можно считать модель замкнутой на себя в плоскости, перпендикулярной плоскости экрана.

Левая и правая стенка - фиктивные, они лишь означают начало и конец расчетной области, частицы могут пролетать «сквозь» них. Верхняя и нижняя стенки - стенки канала, на них и будут задаваться граничные условия.

Масса для всех частиц будет равна единице. Динамическая вязкость в данном случае не постоянная. Будем подбирать ее так, чтобы средняя кинетическая энергия частиц оставалась постоянной, система не нагревалась и частицы не разгонялись до больших скоростей. Для таких целей часто используется термостат, однако в данном случае удобнее регулировать температуру системы и скорость частиц с помощью задания динамической вязкости.

Для корректного задания взаимодействия между частицами требуется конкретизировать силу \underline{F}_{ij} . Априори можно сказать, что

$$\underline{F}_{ij} = - \underline{F}_{ji}$$

руководствуясь третьим законом Ньютона. Сила задается направленной вдоль вектора, соединяющего центры частиц i и j (рис.4.1), соответственно единичным вектором силы будет

$$\frac{\underline{r}_i - \underline{r}_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

Зададим также некоторые свойства силы взаимодействия:

1) Пусть h - расстояние между частицами i и j . Очевидно, что с увеличением h сила взаимодействия будет убывать. Следовательно, на достаточно большом расстоянии (которое будет во много раз превосходить радиус самой частицы) сила станет настолько малой (будет стремиться к нулю), что ей можно будет пренебречь. Поэтому для ускорения счета предположим, что, начиная с некоторого заданного ограниченного расстояния h_0 сила перестанет действовать. Тогда

$$F_{ij} = 0 \text{ при } h > h_0$$

2) При $h \rightarrow 0$ сила отталкивания должна возрастать, чтобы не дать центрам шариков совпасть и графически стать одной частицей. Таким образом, по

модулю величина силы будет задана так:

$$F(h) = \begin{cases} K\left(\frac{h_0}{h} - 1\right), & h < h_0 \\ 0, & h > h_0 \end{cases}$$

где K - весовой коэффициент

В общем случае в молекулярной динамике при моделировании сложных молекул существуют и другие свойства для задания силы, но мы ограничимся только этими.

2.3 Начальные и граничные условия

В качестве начальных условий задается значение вектора скорости \underline{v}_i (одинаковым для всех частиц) от 1 до N . В начальный момент времени система частиц представляет собой решетку (рис.5.1), которая заполняет весь объем цилиндра, начальные скорости v_0 направлены по оси x .

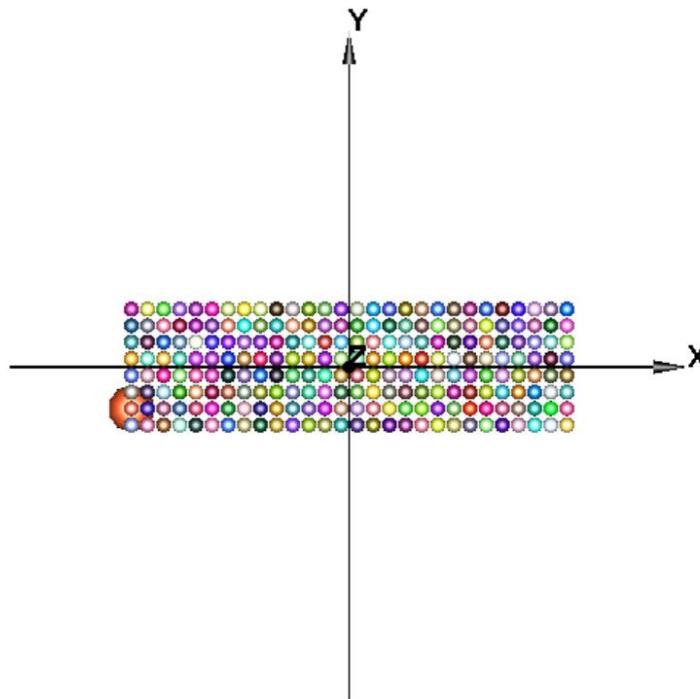


Рисунок 5.1. Система частиц в начальный момент времени. Вид 1

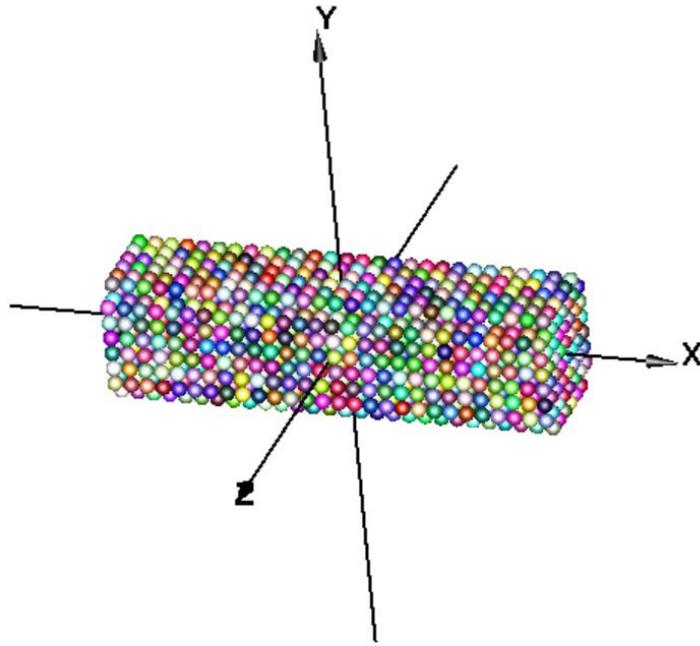


Рисунок 5.2. Система частиц в начальный момент времени. Вид 2

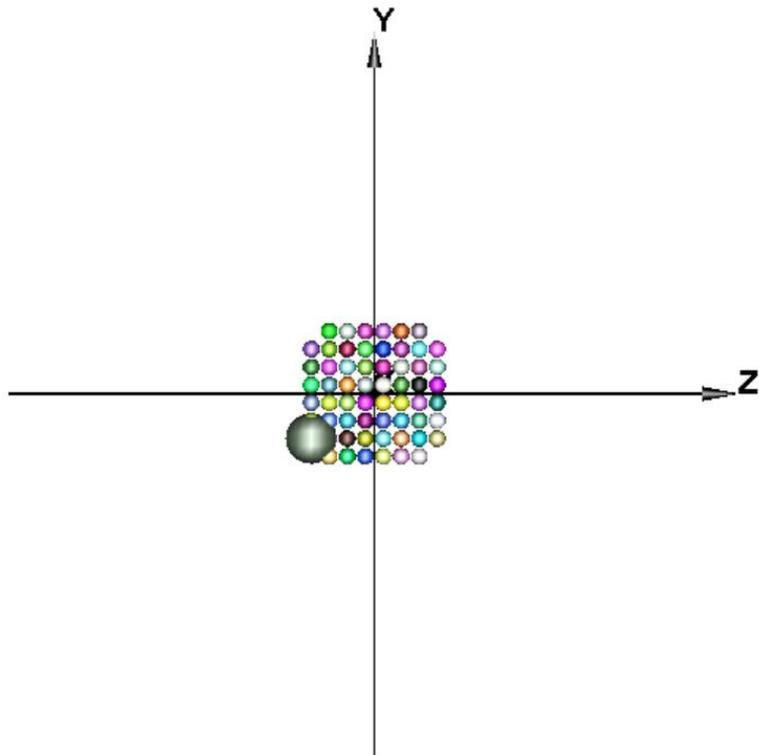


Рисунок 5.3. Система частиц в начальный момент времени. Вид 3

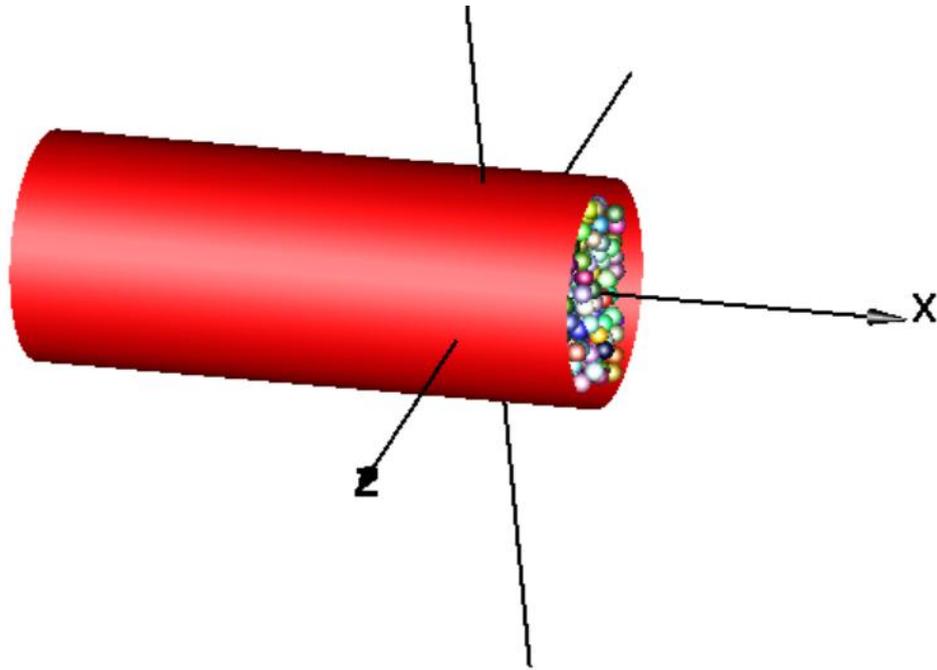


Рисунок 5.4. Система частиц в канале в начальный момент времени. Вид 4

Граничные условия задаются в трех вариациях.

1) Прямое задание граничного условия прилипания

Скорость частицы становится нулевой, как только она соприкасается со стенкой. В этом случае зануляются все компоненты скорости.

$$v_x\left(-\frac{h}{2}\right) = v_x\left(\frac{h}{2}\right) = 0$$

$$v_y\left(-\frac{h}{2}\right) = v_y\left(\frac{h}{2}\right) = 0$$

$$v_z\left(-\frac{h}{2}\right) = v_z\left(\frac{h}{2}\right) = 0$$

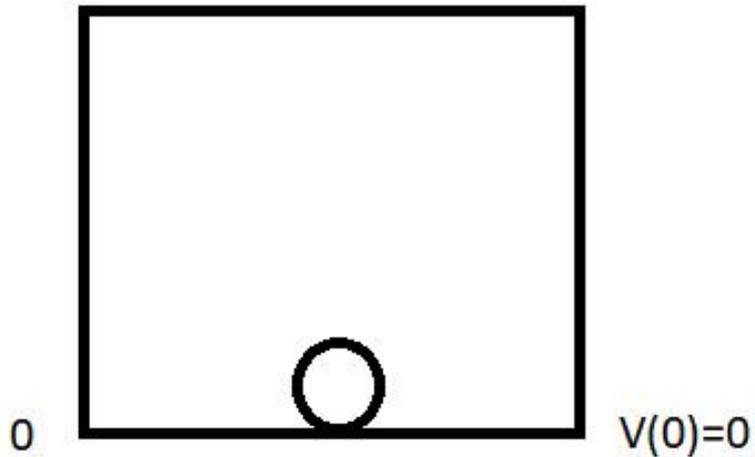


Рисунок 6.1. Условие прилипания

2) «Зеркальный» отскок

Частица, прилетающая на стенку под случайным углом (в результате столкновений с другими частицами), отскакивает от стенки под таким же углом. Скорость при этом остается неизменной по величине (модулю), однако меняется по направлению (одна компонента скорости не меняется, вторая - меняет знак на противоположный). В программе это условие задается следующим образом:

$$v_{x1} = v_{x2}$$

$$v_{y1} = -v_{y2}$$

где v_{x1} , v_{y1} - скорости до соударения со стенкой, v_{x2} , v_{y2} - скорости после соударения со стенкой.

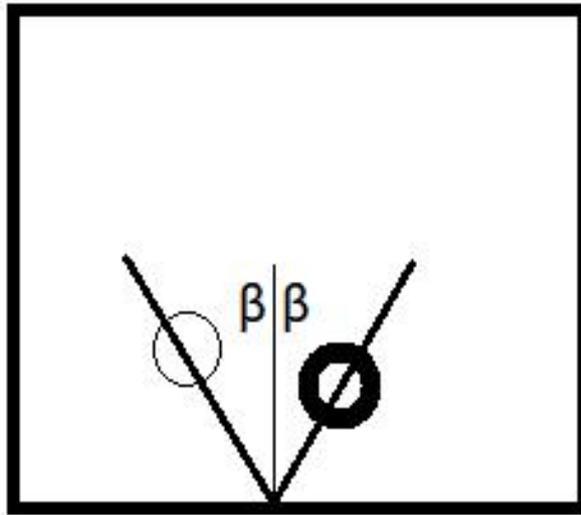


Рисунок 6.2. «Зеркальный» отскок

3) «Модифицированный отскок»

Частица, прилетающая на стенку под случайным углом (в результате столкновений с другими частицами), отскакивает от стенки под произвольным углом. Такое условие было задано исходя из предположения о том, что поверхность канала не может быть идеально гладкой для «зеркального» отскока, и имеет некоторые шероховатости, в утрированном смысле «углубления» (рис. 7.1), попадая в которые частица проходит некоторый путь с несколькими «зеркальными» отскоками и вылетает под случайным углом (рис. 7.2). В программе это реализовано как задание величины угла через генерацию случайного числа.

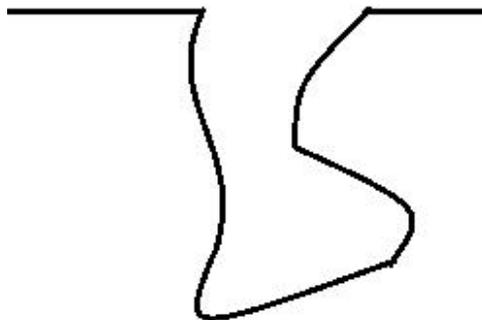


Рисунок 7.1. «Углубление» в поверхности

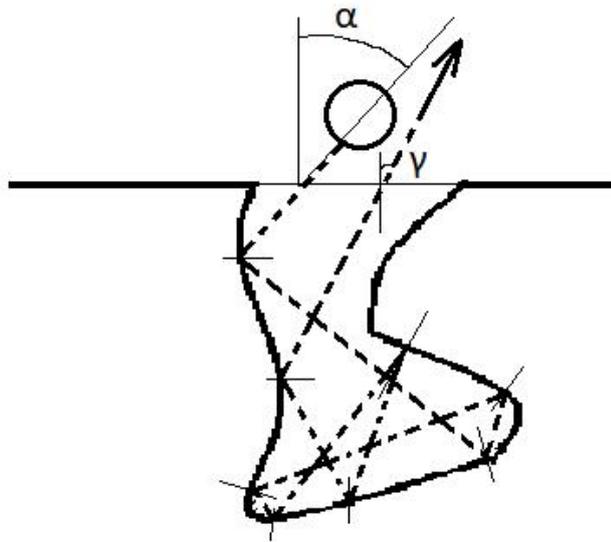


Рисунок 7.2. Возможный путь частицы внутри углубления

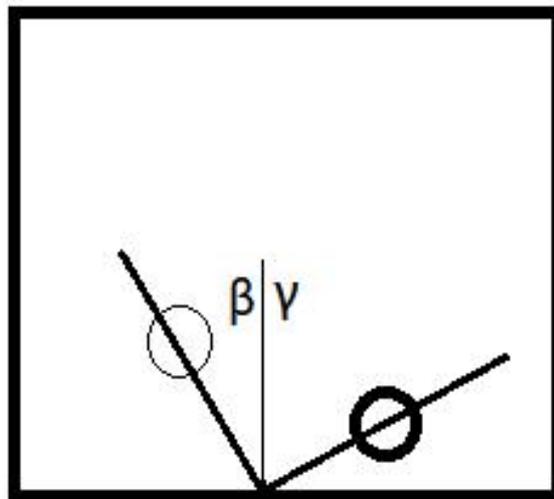


Рисунок 6.3. Модифицированный отскок

2.4 Алгоритм программы

Как упоминалось ранее, модель и пользовательский интерфейс реализованы на языке программирования C++ в среде разработки Visual Studio.

C++ представляет собой высокоуровневый компилируемый язык программирования общего назначения со статической типизацией, который подходит для создания самых различных приложений. На сегодняшний день

C++ является одним из самых популярных и распространенных языков.

Visual Studio - среда разработки, которая позволяет выполнять весь цикл разработки в одном месте. Это комплексная интегрированная среда (IDE), которую можно использовать для записи, редактирования, отладки и сборки кода, а затем развертывания приложения. Помимо редактирования и отладки кода Visual Studio включает компиляторы, средства завершения кода, управление версиями, расширения и многое другое, чтобы улучшить каждый этап процесса разработки программного обеспечения.

Программа разработана с применением принципов объектно-ориентированного программирования. Будем численно интегрировать явную схемой с шагом по времени Δt . В процессе интегрирования на каждом шаге подсчитываются характеристики частиц такие как координата, скорость и суммарная действующая на частицу сила.

В целях оптимизации вычислительного процесса расчетная область делится на подобласти, в которые распределяются частицы. Специфика метода частиц состоит в необходимости интегрирования очень большого числа уравнений, что налагает определенные требования экономии компьютерной памяти. При расчете методом частиц большая часть компьютерного времени уходит на вычисление сил взаимодействия между частицами. Для ускорения расчета потенциал взаимодействия обычно обрезается на некотором заданном расстоянии h_0 . Тогда, если расстояние между частицами превосходит h_0 , то считается, что взаимодействие между частицами пренебрежимо мало и оно не учитывается в расчетах. Однако при большом количестве частиц даже вычисление расстояния между ними потребует слишком большого времени, так как число необходимых операций пропорционально квадрату числа частиц. Поэтому для расчетов, производимых в данной работе, пространство разбивается на кубические ячейки с ребром h_0 . Для частиц, находящихся в некоторой ячейке, рассматривается взаимодействие только с частицами из пограничных с ней ячеек. Таким образом, удается добиться, что число операций оказывается пропорциональным числу частиц.[3]

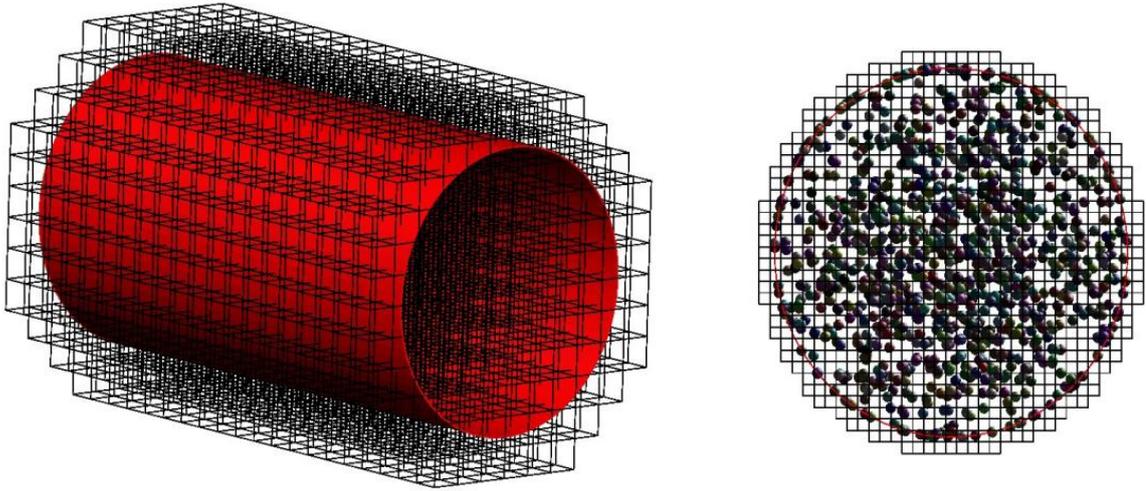


Рисунок 8. Разбиение расчетной области на подобласти

Такой подход позволяет избавить программу от лишнего счета и ускорить процесс вычисления.

Программа состоит из нескольких этапов. На подготовительном этапе задаются начальные условия, а именно скорости. Также задаются радиус-векторы скорости \underline{r}_i для каждой частицы, вследствие чего частицы распределяются по расчетной области так, чтобы они графически не совместились, а также случайным образом задается начальная скорость (одинаковая для всех частиц). На втором этапе расчетная область разделяется на кубические подобласти со стороной, равной расстоянию h_0 . По окончании подготовительного этапа начинаются шаги по времени.

Сначала частицы распределяются по подобластям. Далее, с учетом начальных условий, для каждой частицы просчитывается сила, действующая на нее, которая включает в себя как силу взаимодействия, так и внешнюю силу.

$$\underline{f}_i = \sum_{j=1}^N \underline{F}_{ij} + \underline{F}$$

Затем находят новые скорости, частицы перемещаются в новое положение. После этого переходим к новому шагу по времени.

Конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений имеет вид:

$$\frac{r_i^{n+1} - r_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(v_i^{n+1} + v_i^n)$$
$$m \frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{\Delta t} = f_i$$

После пересчета начинается новая итерация с учетом новых начальных условий, полученных на предыдущем шаге.

В процессе изменения скоростей частиц отрисовывается график, который и должен показать параболу Пуазейля при верно заданных граничных условиях.

ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1 Прилипание

При моделировании потока среды с граничным условием прилипания возникла следующая картина (рис. 9): скорость частиц, достигающих стенки, становится нулевой, однако в скором времени они выстраиваются в сплошной ряд вдоль стенки, рано или поздно заполняя всю длину трубы, и сами становятся «стенкой». Впоследствии к ним «прилипают» другие частицы, касающиеся этой «стенки». В конечном итоге частиц не остается, так как было задано конечное количество частиц. Все они становятся стенкой, их скорость обнуляется, поток останавливается. Несмотря на то, что в данной модели поток закольцован, а в математической модели Пуазейля на вход постоянно подается поток, просвет канала будет сужаться, пока полностью не будет перекрыт неподвижными частицами. Эпюра скоростей в данном случае не является параболой и не сходится с теоретическим распределением. Распределение скоростей сводится к нулю, что априори не может соответствовать пуазейлевому распределению скоростей.

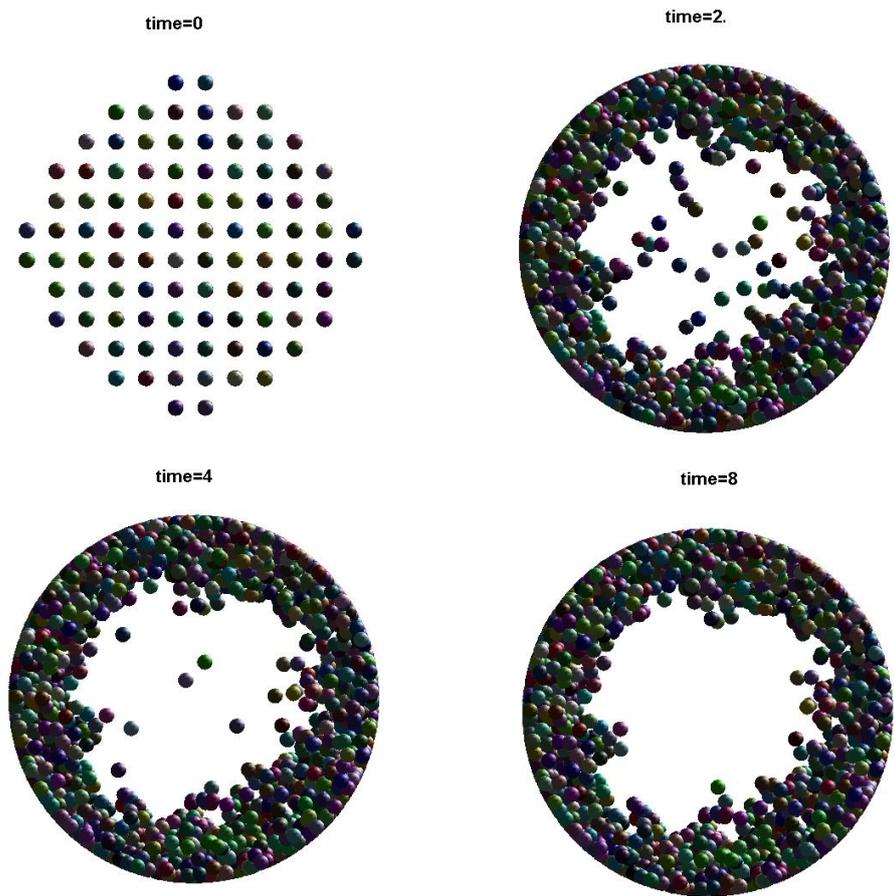


Рисунок 9. Моделирование с граничным условием прилипания

3.2 «Зеркальный» отскок

При моделировании «зеркального» отскока движение потока продолжилось, однако распределение скоростей частиц по прошествии достаточно большого количества времени наблюдения так же не показало параболу Пуазейля. На рис.10.1 показаны теоретическое распределение скоростей и распределение, полученное экспериментально.

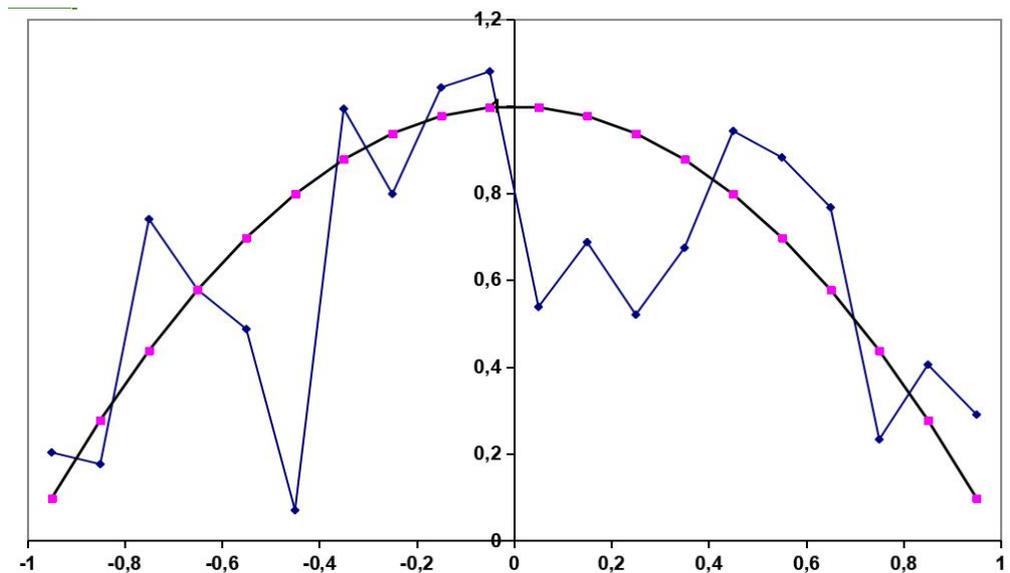


Рисунок 10.1. Распределение скоростей с граничным условием «зеркальный» отскок

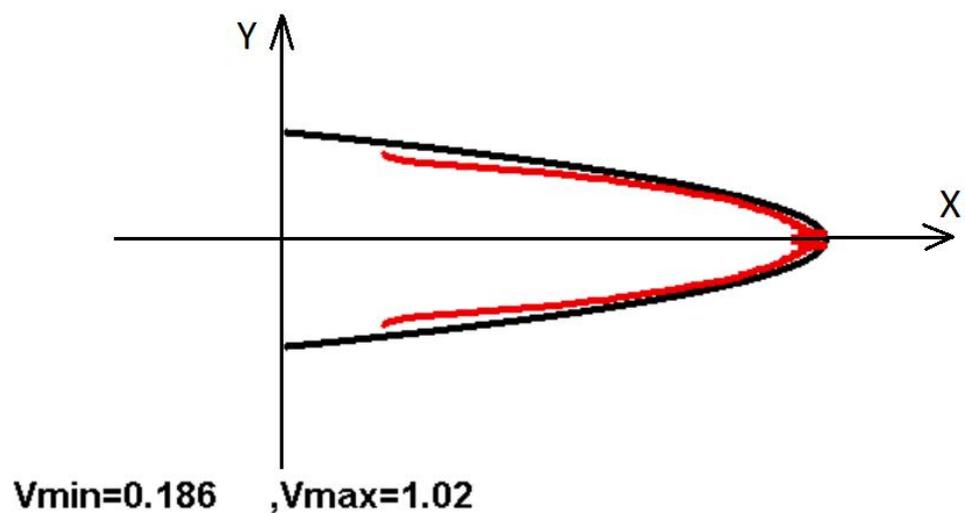
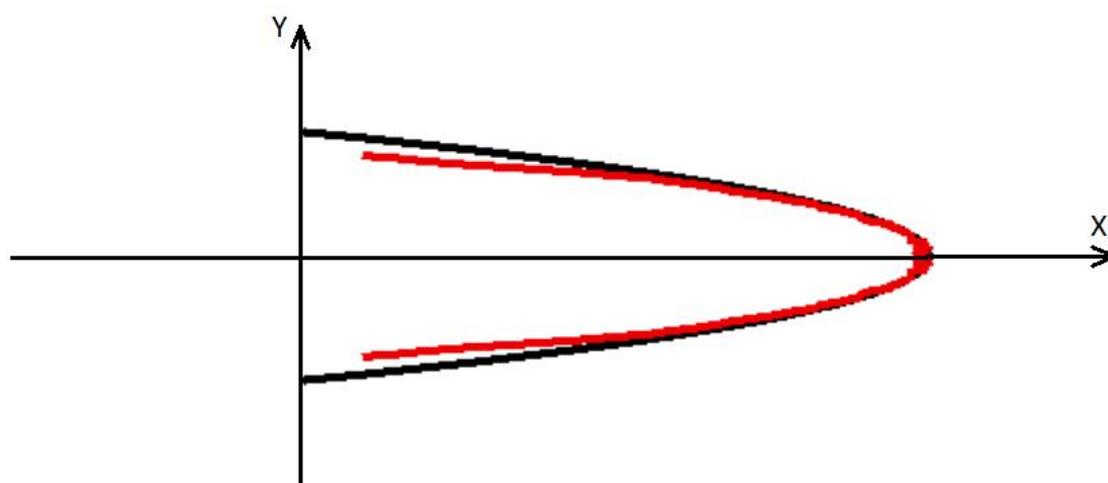


Рисунок 10.2. Распределение скоростей с граничным условием «зеркальный» отскок

3.3 «Модифицированный» отскок

При моделировании «модифицированного» отскока удалось получить параболу, приближенную к параболе Пуазейля, что говорит о том, что из всех заданных вариантов граничных условий этот вариант является наиболее реалистичным. Очевидно, что при отскоке на случайный угол в движении частиц существует некоторая закономерность. В связи с этим можно сделать вывод, что предположение о шероховатости поверхности может являться верным. Более того, идеальной гладкости в каналах действительно трудно

достичь, большинство материалов имеют неровности.



$V_{min}=0.097$, $V_{max}=1.02$

Рисунок 11. Распределение скоростей с граничным условием «модифицированный» отскок

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построение корректной численной схемы для интегрирования уравнений движения сплошной среды до настоящего времени представляет собой сложную проблему.

Дать точное математическое описание состояния жидкости (газа) на современном уровне развития науки и техники не представляется возможным. По этой причине жидкость (газ) в гидравлике рассматривают как сплошную среду, заполняющую пространство без пустот и промежутков, то есть не принимают во внимание молекулярное строение жидкости.

Несмотря на то, что гипотеза о непрерывности жидкой среды или газа упрощает исследования, так как позволяет рассматривать все характеристики жидкости (скорость, плотность, давление и т.д.) как функции координат точки в пространстве и времени, причем в большинстве случаев эти функции предполагаются непрерывными и дифференцируемыми, при рассмотрении ситуации с точки зрения молекулярной динамики могут возникнуть расхождения между теоретическими и экспериментальными результатами.

В данной работе были исследованы различные граничные условия при моделировании движения частиц среды в канале молекулярно-динамическим методом. Был реализован численный метод, который позволяет рассчитать параметры частиц на каждом шаге, что дает нам картинку о динамической эволюции системы.

Для автоматизации вычислительного процесса была разработана программа на языке C++. Дополнительно был создан интерфейс на языке C++, который позволяет взаимодействовать с программой, задавать скорости и количество частиц.

Графики, полученные в результате анализа, предоставляют важную визуальную информацию о поведении частиц среды при различных граничных условиях. Было проведено сравнение аналитических результатов и результатов, полученных численно. Это сравнение позволило оценить точность выдвинутой теории и подтвердить его применимость для решения задач гидродинамики.

В перспективе для более глубокого исследования на примере аналогичной модели можно задать характеристики молекул, конкретизировать силу взаимодействия, задать больше свойств и больше вариантов граничных условий.

В целом, данная работа представляет собой значимый вклад в область исследования процессов гидродинамики, моделирования и исследования поведения частиц на микроуровне. и предлагает эффективный инструмент для анализа и моделирования их поведения.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Астарита Дж., Маруччи Дж. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. — М.: Мир, 1978. — 312 с
2. Жилин П. А. Рациональная механика сплошных сред. Санкт-Петербург: Издательство Политехнического Университета, 2012.- 584 с.
3. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М.: Физматлит, 2007. – 304 с.
4. Лойцянский Л.Г. Ламинарный пограничный слой. Дрофа, 1962. - 479 с.
5. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. Дрофа, 1950. - 840 с.
6. Мейз, Дж. Теория и задачи механики сплошных сред. - М.: ЛКИ, 2007. - 320 с.
7. Прандтль Л., Титъенс О. Гидро- и аэромеханика, т.2. Движение жидкостей с трением и технические приложения. М.-Л.: ОНТИ, 1935.- 283 с.
8. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Наука, 1970. 166-170 с.
9. Филипов Н.Н. Общая физика. Гидродинамика. - М.: МАИ, 2004. - 36 с.
10. Аульченко С.М., Васильева Е.И., Каледин В.О. Моделирование ламинарного течения вязкой сжимаемой жидкости при малых скоростях: статья // Вестник КемГУ №2 (542) Т.1. 2013. - с. 170-173
11. Batchelor G.K. An Introduction to Fluid Dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. 142-148 pp.
12. Brandon D.J., Aggarwal S.K. A Numerical Investigation of Particle Deposition on a Square Cylinder Placed in a Channel Flow // Aerosol Science & Technology, Vol. 34, No. 4, Nov 2001. pp. 340-352
13. Holman J.P., Lloyd J.R. Computational Fluid Dynamics. The basics with applications. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, Inc., 1995. 4-10 pp. 14. Singha S., Sinhamahapatra K.P. Flow past a circular cylinder between parallel walls at low Reynolds numbers // Ocean Engineering, Vol. 37, No. 8-9, June 2010. pp. 757-769
15. Williams A. C++ Concurrency in Action. New York: Manning Publications Co., 2012. 15-20 pp.