

МОДЕЛЮВАННЯ РУХУ РІДИНИ В ТРИВИМІРНІЙ ОБЛАСТІ З РУХОМИМИ ГРАНИЦЯМИ

В роботі запропоновано використання решітчастого методу Больцмана для моделювання руху рідин у тривимірних областях за умови, що він відбувається під дією перистальтичних процесів. Розглянуто основні принципи побудови решітчастої моделі Больцмана на тривимірній решітці D3Q27, описано спосіб задавання граничних умов на мезоскопічному та макроскопічному рівні. Дано короткий опис принципів побудови програмної моделі та наведено результати моделювання.

In this paper, we proposed using lattice Boltzmann method for modeling fluid flow in a three-dimensional area, if this flow occurs under the influence of peristaltic process. The basic principles of construction of lattice Boltzmann model for three-dimensional lattice D3Q27 were considered. Boundary conditions on mesoscopic and macroscopic levels were described. A brief description of the principles of design software model was done and some results of the simulation were presented.

Ключові слова: решітчастий метод Больцмана, математичне моделювання, перистальтичний процес.

1. Вступ

Відчутний прогрес у сфері високопродуктивних обчислень, який об'єктивно ґрунтується на широкому застосуванні на практиці багатоядерних структур, розподілених обчислень, хмарних обчислень та інших сучасних технологій, відкрив нові можливості у дослідженні складних фізичних процесів, зокрема процесів, які відбуваються у біологічних об'єктах [1]. Складність цих процесів зумовлена, перш за все, високою мінливістю та значною кількістю фізичних параметрів, від яких істотно залежить розвиток фізичного процесу. Зокрема, до процесів, які характеризуються згаданими властивостями, відносяться процеси руху рідин. Загальною характеристикою даних процесів є той факт, що рух рідин в біологічних об'єктах значною мірою залежить від руху обмежуючих рідину поверхонь. Такі процеси називають перистальтичними процесами [2]. Безпосереднє вимірювання параметрів перистальтичних процесів пов'язане з істотними труднощами, викликаними впливом засобів вимірювання на досліджуваний фізичний процес. Тому, на сьогодні, математичне моделювання перистальтичних процесів залишається одним з ефективних методів їх дослідження. Традиційний підхід при побудові математичних моделей перистальтичних процесів ґрунтується на дослідженні нелінійної нестационарної крайової задачі, в основі якої лежить система рівнянь, що містить рівняння Нав'є-Стокса та рівняння неперервності потоку. Розв'язування даної

крайової задачі, за умови зміни в часі форми області, може бути реалізовано з достатньою точністю тільки з використанням чисельних методів і потребує великої кількості обчислень, оскільки швидка зміна параметрів потребує високого ступеня дискретизації [3].

Згадані проблеми, що виникають при моделюванні перистальтичних процесів, стали причиною пошуку альтернативних підходів, серед яких важливе місце займають нейронні мережі, кліткові автомати та інші засоби опису складних процесів. Серед них одне з чільних місць займає підхід, який ґрунтується на розв'язуванні решітчастого рівняння Больцмана у кожному з вузлів дискретизованої області і має назву решітчастої моделі Больцмана (РМБ).

2. Решітчаста модель Больцмана

Для опису руху рідини в області дослідження на мезоскопічному рівні будемо застосовувати рівняння Больцмана. У загальному вигляді це рівняння є рівнянням з частинними похідними, яке описує еволюцію функції розподілу елементарного об'єму рідини [4].

$$\frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} + v \nabla f(x, v, t) = \Omega(f(x, v, t)), \quad (1)$$

де $\Omega(f)$ – оператор колізій, $f(x, v, t)$ – функція розподілу густини, яка задає ймовірність того, що частинка в момент часу t перебуватиме в кубі з вершиною в точці x і довжиною

сторони dx , а її швидкість буде знаходитися в діапазоні від v до dv .

Оскільки рух елементарного об'єму рідини є наслідком певної послідовності зіткнень з такими ж сусідніми елементарними об'ємами, то цей факт описує оператор колізій, що стоїть в правій частині рівняння (1). З метою зменшення кількості обчислень часто використовують найпростіший оператор колізій, що представлений виразом:

$$\Omega(f(x, v, t)) = \frac{1}{\tau} (f(x, v, t) - f^{(eq)}(x, v, t)), \quad (2)$$

де τ – константа, яка визначає масштаб часу, необхідний для встановлення локальної рівноваги, $f^{(eq)}(x, v, t)$ – рівноважна функція розподілу густини Максвелла-Больцмана.

Застосування до моделювання еволюції елементарного об'єму рідини рівнянь (1) та (2) утворює широко відому модель BGK [5]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} + v \nabla f(x, v, t) = \\ = \frac{1}{\tau} (f(x, v, t) - f^{(eq)}(x, v, t)) \end{aligned} \quad (4)$$

Найвною є певна проблема переходу від мезоскопічного рівня, на якому існує деяка множина еволюцій функцій розподілу для кожного елементарного об'єму, до макроскопічних параметрів поведінки рідини в кожній точці досліджуваної області. Такими параметрами найчастіше є розподіл тиску та поле швидкостей в області дослідження. На сьогодні не існує строгого доведення існування залежностей між мезоскопічними та макроскопічними параметрами руху рідини, але численні практичні дослідження показали, що така залежність існує і її точність значною мірою визначається способом дискретизації області. В загальному випадку мезоскопічний та макроскопічний рівні моделювання пов'язані виразами:

$$\rho = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, v, t) dv = \sum_{k=0}^8 f_i = \sum_{k=0}^8 f_k^{(eq)}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} v \cdot f(x, v, t) dv = \frac{1}{\rho} \sum_{k=0}^8 v_k f_k = \\ &= \frac{1}{\rho} \sum_{k=0}^8 v_k f_k^{(eq)} \end{aligned} \quad (6)$$

де u – вектор швидкості потоку рідини, ρ – масова густина потоку рідини.

З рівнянь (5) та (6) видно, що макроскопічні параметри u та ρ формуються на основі попередньо обчислених швидкостей елементарних об'ємів у вузлах решітки та значень функції розподілу у відповідних вузлах. Для одержання згаданих мікроскопічних параметрів виконаємо дискретизацію області з урахуванням законів збереження [6], в результаті чого одержуємо систему, яка складається з Q рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_k(x, t)}{\partial t} + v_k \nabla f_k(x, t) = \frac{1}{\tau} (f_k(x, t) - f_k^{(eq)}(x, t)), \\ k = 0, 1, 2, \dots, Q-1, \end{aligned} \quad (7)$$

де Q – кількість вузлів дискретизації, $f_k(x, t)$ – функція розподілу густини, що пов'язана з напрямком вектора мезоскопічної швидкості v_k , $f_k^{(eq)}(x, t)$ – відповідна вектору v_k рівноважна функція розподілу густини.

Отже, решітчаста модель Больцмана представлена системою рівнянь (7), які, описуючи рух елементарних об'ємів рідини на мезоскопічному рівні, завдяки BGK-переходу дозволяють визначити макроскопічні параметри, які узгоджуються з результатами обчислень крайової задачі на основі рівняння Нав'є-Стокса.

Для обчислення системи рівнянь (7) виконаємо їх дискретизацію для кожного вузла решітки з часовим кроком Δt та просторовим кроком $\Delta x_k = v_k \Delta t$ [9]:

$$\begin{aligned} \frac{f_k(x_k + v_k \Delta t, t + \Delta t) - f_k(x_k + v_k \Delta t, t)}{\Delta t} + \\ + \frac{f_k(x_k + v_k \Delta t, t) - f_k(x_k, t)}{\Delta x_k} = \\ = - \frac{f_k(x_k, t) - f_k^{(eq)}(x_k, t)}{\tau}. \end{aligned} \quad (8)$$

З метою спрощення обчислень задаємо кроки дискретизації в часі та просторі рівними $\Delta x_k = \Delta t = 1$. Тоді решітчасте рівняння Больцмана для k -го вузла решітки матиме вигляд:

$$\begin{aligned} f_k(x_k + v_k \Delta t, t + \Delta t) - f_k(x_k, t) = \\ = - \frac{1}{\tau} (f_k(x_k, t) - f_k^{(eq)}(x_k, t)) \end{aligned} \quad (9)$$

де x_k – точка в дискретизованому фізичному просторі.

Процес розв’язування рівняння (9) складається з двох кроків.

1. Зіткнення:

$$f'_k(x_k, t + \Delta t) = f_k(x_k, t) - \frac{1}{\tau} \left(f_k(x_k, t) - f_k^{(eq)}(x_k, t) \right) \quad (10)$$

2. Розповсюдження:

$$f_k(x_k + v_k \Delta t, t + \Delta t) = f'_k(x_k, t + \Delta t). \quad (11)$$

В (10) і (11) функція розподілу f_k описує стан елементарного об’єму рідини після чергового зіткнення в точці дискретного простору x_k .

Значення елементів множини $\{v_k\}$ визначаються залежно від вимірності моделі та кількості зв’язаних вузлів, які утворюють базовий елемент решітки.

В рамках даної роботи використана тривимірна модель, основою якої є решітка D3Q27 з базовими елементами, що показані на рис. 1.

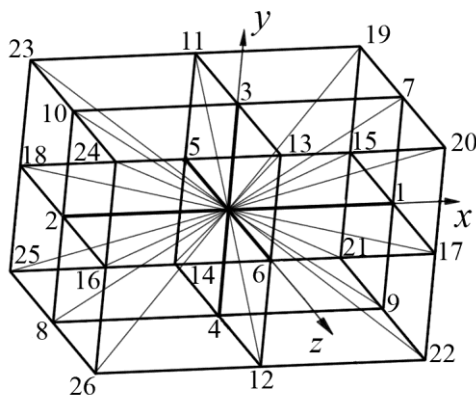


Рис. 1. Базовий елемент тривимірної решітки D3Q27 решітчастої моделі Больцмана

Для даної моделі рівноважна функція розподілу густини визначається з виразу:

$$f_k^{(eq)}(x, t) = \omega_k \rho \left[1 + \frac{3}{c^2} v_k \cdot u + \frac{9}{2c^4} (v_k \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} (u \cdot u) \right] \quad (12)$$

де v_k – вектор швидкості k -го об’єму рідини, $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ – константа швидкості розповсюдження активності в решітці, u – вектор макроскопічної

швидкості, ω_k – ваговий коефіцієнт у вузлі k , $\Delta x, \Delta t$ – відповідно крок решітки та крок у часі.

Вектори решіткової швидкості масштабуються ваговими коефіцієнтами при визначенні рівноважної функції розподілу густини у вузлі решітки k . Коефіцієнти масштабування ω_k для кожного значення v_k визначаються з виразів:

$$v_k = \begin{cases} (0, 0, 0), & k = 0 \\ (\pm 1, 0, 0)c, (0, \pm 1, 0)c, (0, 0, \pm 1)c, \\ \text{при } k = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \\ (\pm 1, \pm 1, 0)c, (0, \pm 1, \pm 1)c, (\pm 1, 0, \pm 1)c \\ \text{при } k = 7, 8, 9, \dots, 18, \\ (\pm 1, \pm 1, \pm 1)c, & k = 19, 20, 21, \dots, 26 \end{cases} \quad (13)$$

$$\omega_k = \begin{cases} 8/27, & k = 0, \\ 2/27, & k = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \\ 1/54, & k = 7, 8, 9, \dots, 18, \\ 1/216, & k = 19, 20, 21, \dots, 26. \end{cases} \quad (14)$$

Якщо локальний розподіл тиску в області дослідження виразити через функцію розподілу, враховуючи, що $p_k = c_m^2 f_k$, то рівноважне рівняння розподілу тиску матиме вигляд:

$$p_k = c_m f_k^{(eq)} = \omega_k \left\{ p + p_0 \left[3 \frac{v_k \cdot u}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(v_k \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right] \right\}, \quad (15)$$

де $c_m = \frac{c}{\sqrt{3}}$ швидкість розповсюдження звуку у

досліджуваному середовищі, p_0 – середній тиск, для якого характерне співвідношення $p = c_s^2 \rho$ за умови, що досліджувана рідина є нестисливою.

Отже, результуючий процес моделювання руху рідини дозволяє визначити локальний розподіл тиску у вузлах решітки за допомогою рівнянь, які визначають динаміку зміни локального тиску для кожного вузла решітки:

1. Зіткнення:

$$p'_k(x + v_k \Delta t, t + \Delta t) - p_k(x, t) = -\frac{1}{\tau} \left[p_k(x, t) - p_k^{(eq)}(x, t) \right], \quad (16)$$

2. Розповсюдження:

$$p_k(x_k + v_k \Delta t, t + \Delta t) = p'_k(x_k, t + \Delta t) \quad (17)$$

Макроскопічні параметри розподілу тиску та поля швидкостей визначимо з рівнянь:

$$p = \sum_k p_k, \quad u = \frac{1}{\rho_0} \sum_k v_k p_k \quad (17)$$

3. Формування граничних умов

Дослідження параметрів руху рідини під дією перистальтичних процесів проводились в трубко-видній області, форма якої показана на рис. 2

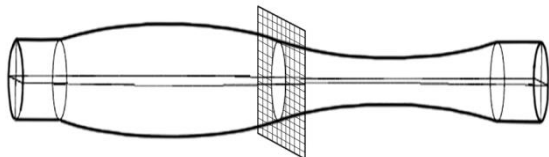
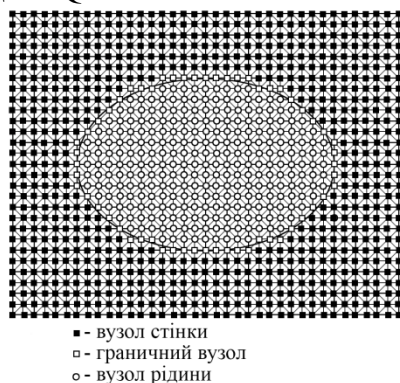


Рис. 2. Триплексна форма

Ця форма має назву триплексної форми, оскільки складається з прямолінійної випуклої та вигнутої частин трубки. Вона використовується при реконструктивних операціях травного тракту, тому її гідродинамічні характеристики мають велике практичне значення. Розглянемо принцип задавання граничних умов у даній області на прикладі поперечного перерізу, який є однією з площин, сформованих міжвузловими зв'язками на решітці D3Q27.



- - вузол стінки
- - граничний вузол
- - вузол рідини

Рис. 3. Переріз з трьома типами вузлів

На рис.3 зображено переріз об'єкта моделювання у місці, яке показано на рис.2. Границя має форму еліпса відповідно до форми перерізу досліджуваного об'єкта. Довільний вузол решітки може належати стінці, границі або рідині. Приналежність вузла до множини граничних вузлів залежить від того, чи знаходиться фізична границя в зоні притягання вузла.

Така зона визначається для кожного вузла і геометрично є кубом з даним вузлом, розміщеним на перетині його діагоналей, і довжиною сторони, яка дорівнює кроку дискретизації решітки (рис.4).

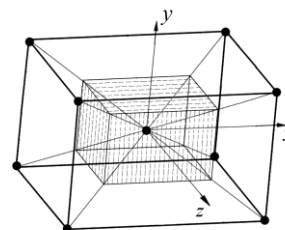


Рис. 4. Зона притягання вузла решітки

Оскільки математична модель передбачає наявність рухомої границі, то статус кожного з вузлів визначається динамічно в залежності від положення фізичної границі. Окремою задачею є перехід від граничних умов, які задані на макроскопічному рівні у термінах розподілу тиску та поля швидкостей на поверхні стінки об'єкта, до граничних умов на рівні вузлів решітки Больцмана.

Оскільки в приграничній зоні частина сусідніх з граничним вузлів не належить рідині, то для таких вузлів необхідно довизначити відповідну функцію розподілу з метою збереження термодинамічної рівноваги [7] та виконання закону розподілу Максвелла-Больцмана.

4. Реалізація математичної моделі

При розв'язуванні задачі в описаній вище математичній постановці використано бібліотеку «Palabos» з відкритими кодами, яка орієнтована на моделювання тривимірних об'єктів решітчастим методом Больцмана. Для реалізації математичної моделі з рухомими границями розроблено програмний код, який забезпечує проведення послідовності моделювань з урахування зсуву границь обмежуючого рідину об'єкта.

Одним з важливих етапів постановки задачі в рамках створеної системи моделювання є задавання параметрів тривимірної області, що обмежує рух рідини. Для вирішення цієї задачі використано реалізовану в бібліотеці «Palabos» функцію імпортування файлів, які задають форму границі обмежуючої поверхні в форматі STL. Для створення такої поверхні застосовано пакет тривимірної комп'ютерної графіки «Blender 2.78». Відповідний STL-файл містить координати вузлів стінок поверхні з граничними умовами без ковзання зі зворотним відскоком (bounce-back).

Перший етап обробки вхідних даних полягає у перетворенні структури даних з STL-файлу в більш ефективну внутрішню структуру даних бібліотеки «Palabos». Така структура даних TriangleBoundary3D на наступному кроці у подальшому використана для задавання граничних умов.

Задача моделювання руху рідини в трубковидній області відноситься до класу задач з внутрішнім потоком. Тому вузли, які розміщуються всередині області обчислень, належать рідині, і їх динаміка має відрізнятися від динаміки вузлів, які знаходяться за обмежуючою поверхнею. Процес задавання динаміки вузлів та забезпечення відповідних зв'язків між локальними елементами області називають процесом вокселізації, в результаті якого формується структура даних бібліотеки «Palabos» MultiBlockLattice3D, яка підтримує зв'язки між елементарними об'ємами у тривимірному просторі відповідно до заданого дескриптора решітки D3Q27.

Процес моделювання виконується як послідовність колізій та розповсюджень, які ітеративно повторюються до досяжності збіжності відповідно до заданого критерію оцінки.

Модифікація бібліотеки «Palabos» полягає у розробці механізму перетворення структури MultiBlockLattice3D з результатами моделювання у структуру зі зміненою геометрією граничних вузлів та до визначенні нових вузлів, виходячи з умови підтримки термодинамічної рівноваги.

Для підвищення точності моделювання підтримується також механізм динамічної зміни дискретизації області досліджень з автоматичним перевизначенням граничних вузлів.

5. Результати моделювання

В рамках роботи побудована математична модель руху рідини в триплексній трубковидній формі під дією перистальтичних коливань її стінок. Макроскопічні коливання довільної точки поверхні просторової форми описуються модулем швидкості, вектор якої направлений по нормалі до осі просторової форми x і визначається функцією:

$$U_n(t, x, \delta, \varphi, \lambda, \gamma) = U_{\max} \cdot U_t(t, \lambda) \cdot U_x(x, \delta, \varphi, \lambda),$$

Зміну модуля швидкості у часі описує вираз $U_t(t, \lambda) = \sin^2\left(\frac{\pi t}{\lambda}\right)$, а просторова складова проходить три стадії, які визначаються умовами у виразі, в залежності від кроку δ :

$$U_x(x, \delta, \varphi, \gamma) = \begin{cases} \cos(\pi x/\varphi) \text{ при } \delta=0, \\ -\cos(\pi x/\varphi - \delta\gamma) + \\ + \cos(\pi x/\varphi - (\delta+1)\gamma) \\ \text{при } 0 < \delta < \delta_{\max}, \\ -\cos(\pi x/\varphi - \delta\gamma) \text{ при } \delta = \delta_{\max} \end{cases}$$

При $\delta = 0$ відбувається зростання деформації поверхні. На проміжних кроках відповідна формула описує зменшення деформації попереднього кроку та зростання деформації наступного. Останній крок δ_{\max} характеризується поверненням деформованої поверхні до початкового стану.

Загальну оцінку продуктивності перистальтичного процесу будемо визначати через об'ємну швидкість потоку V [м³/с], яка є інтегралом від границь перерізу на кінцях трубчатої форми.

Модель дозволяє відображати поточний стан границі та області, що дає можливість візуальної оцінки результатів моделювання. На рис.5 показано приклад відображення поля швидкостей руху границі при перистальтичному коливанні.

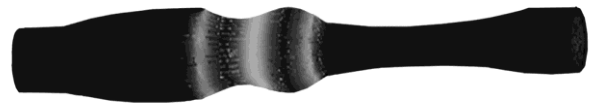


Рис. 5. Візуальне відображення руху границі при перистальтичному коливанні

В результаті прогонки моделі одержано залежності об'ємних швидкостей через початковий та кінцевий перерізи та об'єму потоку від часу, які показані на рис.6 та рис.7.

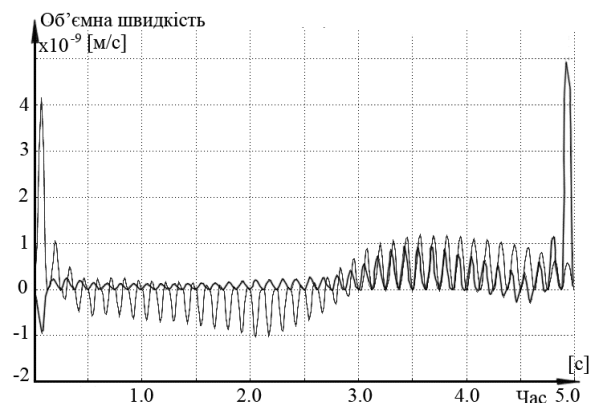


Рис. 6. Об'ємні швидкості рідини через початковий та кінцевий перерізи триплексної форми

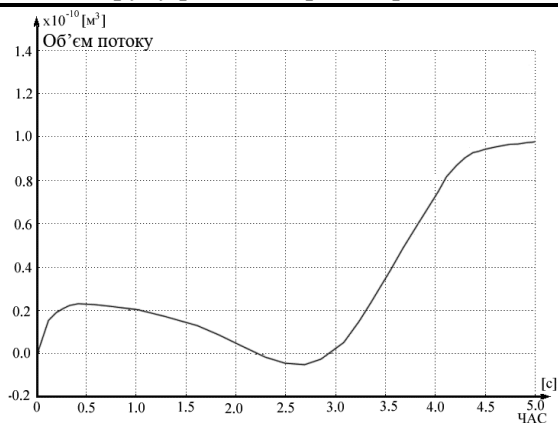


Рис. 7. Об'єм потоку

5. Висновки

Доступність багатоядерних та розподілених обчислювальних структур привела до бурхливого розвитку нових обчислювальних методів, які характеризуються природною паралельністю. Серед таких методів у дослідженні складних гідродинамічних процесів чільне місце займа-

ють решітчасті моделі Больцмана. В роботі застосовано даний метод для дослідження тривимірної нестационарної моделі руху рідини у триплексній трубковидній формі під дією перистальтичних коливань. Для побудови програмної реалізації моделі було модифіковано бібліотеку з відкритими кодами «Palabos» для одержання можливості динамічної зміни форми обмежуючої поверхні в ході моделювання.

В результаті моделювання одержано дані про поле швидкостей руху рідини та розподіл тиску в області моделювання. Інтегральні параметри моделі представлені графіками залежностей для об'ємних швидкостей через вхідний та вихідний переріз, а також залежністю об'єму потоку від часу.

Список посилань

1. Новотарський М.А., Нестеренко Б.Б. Штучні нейронні мережі: обчислення. – Праці Інституту математики НАН України. – Т51. – К.: Ін-т математики НАН України, 2004. – 408 с.
2. Новотарський М.А., Нестеренко Б.Б. Математическое моделирование перистальтических процессов на клеточных нейронных сетях // Искусственный интеллект. – 2012. – № 4. – С.578-587.
3. Novotarskiy M.A. Solving of boundary value problems for mathematical physics equations in cellular neural networks // Radio Electronics, Computer Science, Control. – 2003. – №1. – P.42-47.
4. Mohamad A.A. Lattice Boltzmann method / A.A. Mohamad. – London: Springer-Verlag. – 2011. – 178 p.
5. Bhatnagar P.L. A model for collision processes in gases. I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component system / P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook // Physical Review. – 1954. – Vol.94, №3 – P.511–525.
6. He X., Luo L-S. Theory of the lattice Boltzmann equation: from Boltzmann equation to lattice Boltzmann equation / X. He, L-S. Luo // Physical Review E. – 1997. – Vol. 56, №6. – P.6811–6817.
7. Inamuro T. A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations // Physics of Fluids. – 1995. – Vol. 7, №12. – P.2928–293.