

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ КАПЛИ ПО СТЕНКЕ КАНАЛА ПРЯМОУГОЛЬНОГО СЕЧЕНИЯ С ПЕРЕМЕННОЙ СМАЧИВАЕМОСТЬЮ

А.Л. Куперштох

*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН,  
Новосибирский государственный университет,  
630090, Новосибирск, Россия*

## Введение

Капля, лежащая на горизонтальной твердой поверхности, неподвижна. Однако, если свойства материала поверхности изменяются по координате, то может меняться и уровень смачиваемости. Это достигается градиентными по свойствам покрытиями. В этом случае контактные углы тоже изменяются по координате. Поэтому капля уже не может находиться в равновесии и начинает двигаться.

Угол смачивания тесно связан с величиной сил взаимодействия молекул жидкости и твердой поверхности. В общем случае контактные углы зависят от скорости перемещения контактной линии по поверхности.

Для нестационарного движения капли задачу приходится моделировать численно. При этом нужно описывать течения флюида с поверхностным натяжением на границе раздела жидкость–газ и взаимодействием с твердой поверхностью. Для компьютерного моделирования такой задачи использовался метод решеточных уравнений Больцмана (LBM), впервые предложенный в работах [1,2].

## Метод решеточных уравнений Больцмана

Для компьютерного моделирования такой задачи использовался вариант метода решеточных уравнений Больцмана (LBM), описанный в работах [3-7]. Для трехмерной модели D3Q19 [8] допустимы 19 возможных векторов скорости частиц  $\mathbf{c}_k$ , для которых модуль скорости принимает значения  $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t$  и  $\sqrt{2}h/\Delta t$ , где  $h$  – шаг сетки, а  $\Delta t$  – шаг по времени. Тогда уравнение эволюции для функций распределения  $N_k$  можно записать в виде

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(N) + \Delta N_k,$$

где  $\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - N_k(\mathbf{x}, t)) / \tau$  – оператор столкновений в виде BGK,  $\tau$  – характерное время релаксации к локальному равновесию. Для учета объемных сил (внутренних и внешних) используется метод точной разности (EDM) [6,7]

$$\Delta N_k(\mathbf{x}, t) = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}).$$

Гидродинамические переменные: плотность жидкости  $\rho$  и скорость  $\mathbf{u}$  в узле вычисляются по формулам  $\rho = \sum_{k=0}^b N_k$  и  $\rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k N_k$ .

Для описания уравнения состояния  $P(\rho, T)$  использована модель псевдопотенциала [9]  $U = P(\rho, T) - \rho \theta$ , в которой вводятся внутренние силы  $\mathbf{F} = -\nabla U$ , действующие на вещество в узле решетки. Использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса в приведенных переменных

© А.Л. Куперштох, 2017

$$\tilde{P} = \frac{8\tilde{\rho}\tilde{T}}{3-\tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2.$$

Влияние твердой поверхности на флюид моделировалось силами взаимодействия между узлами жидкости и твердой поверхности, которые описывали степень смачивания и величину контактных углов. Эти силы действуют на узел  $\mathbf{x}$ , принадлежащий флюиду, со стороны ближайших узлов, представляющих твердую поверхность [10,11]

$$\mathbf{F}_k = w_k \psi(\rho(\mathbf{x})) B(\tilde{\rho}_{\text{эфф}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)) \mathbf{e}_k.$$

Здесь  $\tilde{\rho}_{\text{эфф}}$  – эффективная приведенная плотность.

### Параллельные расчеты на GPU

Расчеты проводились на настольном суперкомпьютере "Supermicro 4027GR" на основе графических процессоров (GPU) (6 модулей GTX Titan-Black и 2 модуля GTX Titan Xp). Общее количество доступных потоковых процессоров (ядер) компьютера более 30000 и 60 Гбайт быстрой внутренней памяти. Параллельные вычисления выполняются одновременно на всех ядрах графических процессоров. Кроме того, внутренняя память GPU на порядок быстрее, чем оперативная память компьютера.

### Результаты компьютерного моделирования

На рис. 1 показаны результаты моделирования капли,двигающейся по горизонтальной смачиваемой твердой стенке с градиентом смачивания.

Зависимость эффективной приведенной плотности от координаты  $x$  принималась линейной

$$\tilde{\rho}_{\text{эфф}} = 1 + 0.0004x.$$

На плоскости  $z = 0$  принимались условия непротекания и непроскальзывания.

Граница движущейся капли в центральном вертикальном сечении (рис. 2) получена путем компьютерной обработки полей плотности вещества. Эффект движения капли вдоль оси  $x$  возникает из-за того, что наступающий контактный угол оказывается меньше отступающего, так как степень смачиваемости возрастает с увеличением координаты  $x$ .

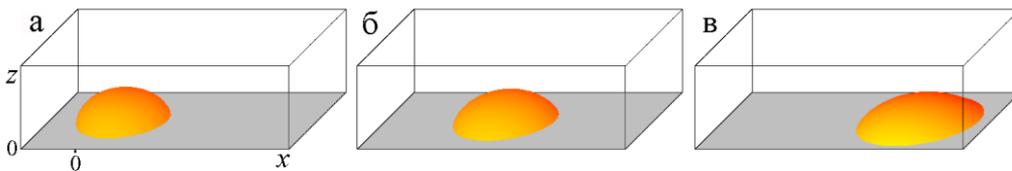


Рис. 1. Движение капли по твердой поверхности с переменной смачиваемостью. Расчетная сетка  $512 \times 272 \times 160$ .  $t = 2000$  (а),  $20000$  (б),  $50000$  (в).

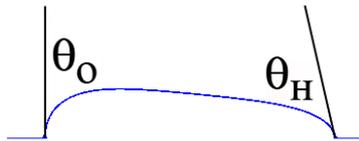


Рис. 2. Граница движущейся направо капли в центральном вертикальном сечении  $x - z$  рассчитана по распределению плотности жидкости и пара в центральном вертикальном сечении  $x - z$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **McNamara G. R., Zanetti G.** Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // *Physical Review Letters*. 1988. Vol. 61, No. 20. P. 2332–2335.
2. **Higuera F. J., Jiménez J.** Boltzmann approach to lattice gas simulations. // *Europhys. Lett.* 1989. Vol. 9, No. 7. P. 663–668.
3. **Куперштох А.Л.** Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.
4. **Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I.** On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2009. Vol. 58, No. 5. P. 965–974.
5. **Куперштох А.Л.** Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 130–138.
6. **Куперштох А.Л.** Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2004. Т. 4, № 2. С. 75–96.
7. **Kupershtokh A.L.** Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*, 2010. Vol. 59, No. 7. P. 2236–2245.
8. **Qian Y.H., d’Humières D., Lallemand P.** Lattice BGK models for Navier – Stokes equation // *Europhys. Lett.* 1992. Vol. 17. P. 479–484.
9. **Qian Y. H., Chen S.** Finite size effect in lattice-BGK models // *International Journal of Modern Physics C*. 1997. Vol. 8, No. 4. P. 763–771.
10. **Kupershtokh A.L., Ermanyuk E.V., Gavrilov N.V.** The rupture of thin liquid films placed on solid and liquid substrates in gravity body forces // *Comm. Comp. Phys*. 2015. Vol. 17. P. 1301–1319.
11. **Kupershtokh A. L.** Dynamics of droplets moving on a solid surface: Lattice Boltzmann simulations // *MATEC Web of Conferences*. 2016. Vol. 84. P. 00018.