

УДК 532.[5.032+582.7]+519.642.2

В.В. Вановский^{1,2}, А.Г. Петров^{2,1}

Численная схема для решения уравнений типа Бассе в гидродинамике

Московский физико-технический институт
Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН
vladimir.vanovsky@gmail.com

Аннотация

Для вычисления интегралов с ядром Бассе и моделирования интегродифференциальных уравнений типа Бассе была предложена численная схема третьего порядка точности. Схема была испытана на модельном интеграле и на реальной задаче о фокусировке частицы в поле стоячей акустической волны в жидкости и показала ускорение в вычислении интеграла в 1000 раз и более при сравнении с существующими аналогами. Показано, что точность схемы соответствует заявленной и что реальная задача о частице хорошо моделируется с помощью неё. Предложенная численная схема может найти свои приложения в биологии и медицине в задачах акустофореза и осаждения частиц.

1 Введение

Численное моделирование интегродифференциального уравнения с памятью затруднено тем, что на каждом шаге вычислений требуется интегрировать предысторию системы, что приводит к квадратичной зависимости времени моделирования от числа шагов. В случае интегралов с сингулярным ядром ситуация ещё усложняется тем, что обычные схемы расчёта интегралов не обеспечивают нужной точности.

Одно из таких уравнений – уравнение Бассе в гидродинамике. Сила Бассе описывается интегральным оператором:

$$\hat{I}(f) = \int_{\tau=0}^t \frac{f(\tau)d\tau}{\sqrt{\pi(t-\tau)}} . \quad (1)$$

Ядро имеет сингулярность при $\tau \rightarrow t$. Самые последние результаты по эффективному интегрированию таких интегралов изложены в обзоре [1]. Мы сконцентрируемся на точном расчёте интеграла до заданного уровня точности, как это сделано в [2], оценим погрешность предложенного метода и на модельном примере сравним его с уже имеющимися альтернативами.

2 Численная схема

Подынтегральная функция в (1) считается $k - 1$ раз непрерывно дифференцируемой на отрезке $[0, t]$ и имеющей ограниченную какой-то константой k -ую производную на всём открытом интервале $(0, t)$. Выбирается равномерная сетка интегрирования из n точек с шагом h , $t = nh$. Можно показать, что при таких предположениях существует численная схема, дающая погрешность не более $Mh^n\sqrt{t}$, где M – некая константа. Коэффициенты схемы будут подсчитаны для $k = 3$ (следуя [2] мы будем называть такую схему 3-го порядка точности, хотя формально она будет второго порядка, как максимальная степень полинома, точно интегрируемая схемой).

Интеграл можно переписать, как:

$$I = \hat{I}(f) = -2\sqrt{\frac{h}{\pi}} \sum_{i=1}^N \int_{i-1}^i f(hx) d\sqrt{n-x} = 2\sqrt{\frac{h}{\pi}} \sum_{i=1}^n I_i, \quad (2)$$

$$I_i = - \int_{i-1}^i f(hx) d\sqrt{n-x} .$$

Функция f на интервале $((i-1)h, ih)$ представляется разложением в ряд Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа:

$$f(\tau) = f_{i-1} + f'_{i-1}(\tau - t_{i-1}) + f''_{i-1}(\tau - t_{i-1})^2/2 + \dots$$

$$\dots + f_{i-1}^{(k-1)}(\tau - t_{i-1})^{k-1}/(k-1)! + f^{(k)}(\xi)(\tau - t_{i-1})^k/k!, \quad (3)$$

$$(i-1)h \leq \xi \leq \tau \leq ih, \quad t_{i-1} = (i-1)h, \quad f_i = f(t_i) = f(ih) .$$

Далее разложение функции (3) подставляется в (2) до требуемого порядка точности, результаты интегрирования аппроксимируются через значения функции в узлах сетки и получаются коэффициенты численной схемы. Для $k = 3$ получаем следующий интеграл:

$$I_i = - \int_{i-1}^i \left\{ f_{i-1} + hf'_{i-1}(x - i + 1) + (h^2/2)f''_{i-1}(x - i + 1)^2 + (h^3/6)f'''(\xi)(x - i + 1)^3 \right\} d\sqrt{n-x}, \quad \xi \in ((i-1)h, ih) , \quad (4)$$

который аппроксимируется взвешенной суммой значений функции в точках $(i-2)h$, $(i-1)h$, ih :

$$\tilde{I}_i \approx \left(\sqrt{n-i+1} - \sqrt{n-i} \right) (\alpha_i f_{i-2} + \beta_i f_{i-1} + \gamma_i f_i) . \quad (5)$$

Для аппроксимации используется значение функции в трёх точках, так как это минимальное количество точек для обеспечения погрешности

порядка h^3 . После интегрирования и обозначения

$$\varepsilon_i = \left(\sqrt{n-i+1} - \sqrt{n-i} \right)^2$$

получается следующее разложение по степеням h :

$$\begin{aligned} I_i/\sqrt{\varepsilon_i} = & f_{i-1} + hf'_{i-1} \left(\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_i}{6} \right) + \frac{h^2}{2} f''_{i-1} \left(\frac{1}{3} + \frac{\varepsilon_i}{6} + \frac{\varepsilon_i^2}{30} \right) + \\ & + \frac{h^3}{6} f'''(\xi) \left(\frac{1}{4} + \frac{3\varepsilon_i}{20} + \frac{\varepsilon_i^2}{20} + \frac{\varepsilon_i^3}{140} \right), \quad \xi \in ((i-1)h, ih) . \end{aligned} \quad (6)$$

Далее, раскладывая (5) в ряд Тейлора и приравнивая к (6) с точностью до второго порядка малости по h , получаем следующую линейную систему уравнений вместе с оценкой погрешности:

$$\begin{aligned} \alpha_i + \beta_i + \gamma_i &= 1 \\ \gamma_i - \alpha_i &= 1/2 + \varepsilon_i/6 \\ \alpha_i + \gamma_i &= 1/3 + \varepsilon_i/6 + \varepsilon_i^2/30 \\ \frac{I_i}{\sqrt{\varepsilon_i}} + \frac{h^3}{6} f'''(\xi) \left(\frac{1}{4} + O\left(\frac{1}{n-i}\right) \right) &= \Leftrightarrow \frac{|I_i - \tilde{I}_i|}{\sqrt{\varepsilon_i}} < \frac{h^3}{6} f'''_{\max} \left(\frac{11}{12} + O\left(\frac{1}{n-i}\right) \right) \\ = \frac{\tilde{I}_i}{\sqrt{\varepsilon_i}} + \frac{h^3}{6} (\gamma_i f'''(\xi') - \alpha_i f'''(\xi'')) & \\ \xi, \xi' \in ((i-1)h, ih) & \\ \xi'' \in ((i-2)h, (i-1)h) & \end{aligned} \quad \begin{aligned} \alpha_i &= -1/12 + \varepsilon_i^2/60 \\ \beta_i &= 2/3 - \varepsilon_i/6 - \varepsilon_i^2/30 \\ \gamma_i &= 5/12 + \varepsilon_i/6 + \varepsilon_i^2/60 \\ f'''_{\max} &= \max(f'''(\xi)), \\ \xi &\in ((i-2)h, ih) . \end{aligned} \quad (7)$$

Используя (7) получаем оценку всего интеграла (2) и погрешность аппроксимации:

$$\begin{aligned} I \approx \tilde{I} &= 2\sqrt{\frac{h}{\pi}} \sum_{i=1}^n \tilde{I}_i = 2\sqrt{\frac{h}{\pi}} \sum_{i=1}^n \sqrt{\varepsilon_i} (\alpha_i f_{i-2} + \beta_i f_{i-1} + \gamma_i f_i), \\ err = |I - \tilde{I}| &< \frac{11}{36\sqrt{\pi}} h^3 \sqrt{t} f'''_{\max} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \right), \quad n \rightarrow \infty . \end{aligned} \quad (8)$$

Численные схемы порядков 1-3, полученные по приведённой выше методике, были проверены на модельной функции $f(\tau) = \cos \tau$, проинтегрированной на интервале $[0, 50\pi]$. Ответ сходится к аналитическому, выраженному через интеграл Френеля $\sqrt{2}C(10) \approx 0.70696351315804088$. Такой же модельный интеграл использован в [1].

Из рис. 1 можно видеть, что точность схемы соответствует заявленной и что скорость её работы более чем в 1000 раз выше, чем у схемы [2] третьего порядка точности и гораздо выше, чем у любой другой схемы из [1] (при этом наши вычисления проводились в довольно медленной среде Matlab, а в указанной статье использовался Fortran). Более того, коэффициенты схемы зависят только от $n-i$ и могут быть посчитаны заранее для всех n при моделировании интегродифференциальных уравнений.

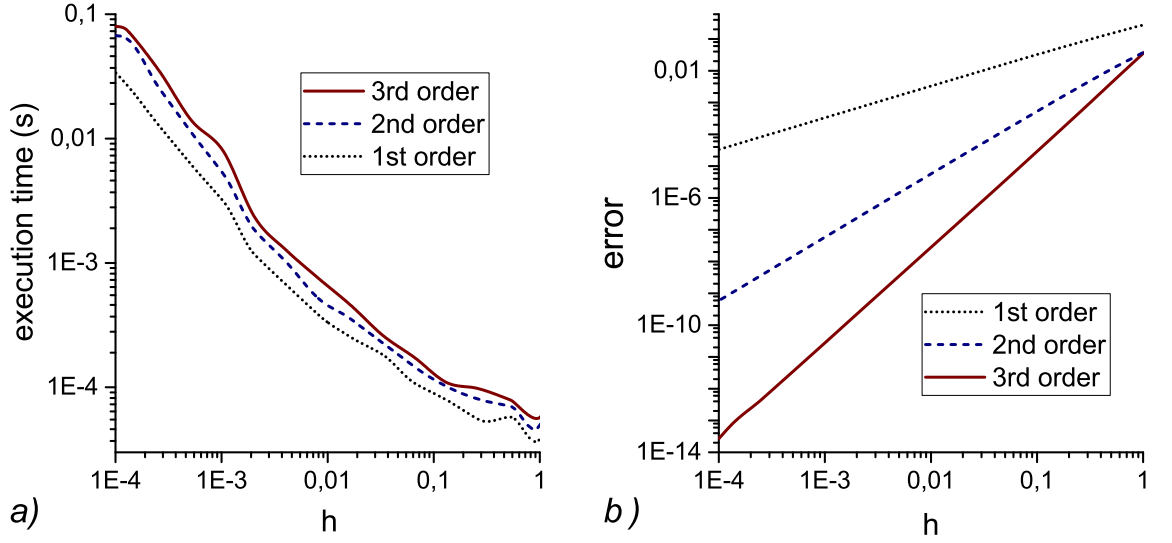


Рис. 1: Время (a) и погрешность (b), как функция величины шага, показаны точками, пунктиром и сплошной линией для схем порядков точности 1-3, соответственно.

3 Моделирование интегродифференциального уравнения Бассе-Буссинеска-Озеена

Уравнение Бассе-Буссинеска-Озеена (ВВО) описывает движение малой сферической частицы в нестационарном потоке жидкости $v(x, t)$ при малых числах Рейнольдса:

$$\begin{aligned}
(m_{\text{particle}} + m_{\text{added}})\ddot{x} &= F_{\text{inertial}} + F_{\text{Stokes}} + F_{\text{Basset}} + F_{\text{Faxen}} + F_g, \\
m_{\text{particle}} &= \frac{4}{3}\pi\rho_p a^3, \quad m_{\text{added}} = \frac{2}{3}\pi\rho a^3, \\
F_{\text{inertial}} &= \frac{4}{3}\pi\rho a^3 \left(w + \frac{W}{2} \right), \quad w = \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x}, \quad W = \frac{\partial v}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial v}{\partial x}, \\
F_{\text{Stokes}} &= -6\pi\mu a(\dot{x} - v), \\
F_{\text{Basset}} &= -6\pi\mu a t_\mu^{1/2} \left(\frac{d}{dt} \right)^{1/2} (\dot{x} - v), \quad t_\mu = \frac{\rho a^2}{\mu}, \\
\left(\frac{d}{dt} \right)^{1/2} (\dot{x} - v) &= \int_{t'=0}^t \left(\frac{d^2 x}{dt'^2} - W(t') \right) \frac{dt'}{\sqrt{\pi(t-t')}} + \frac{\dot{x}(0) - v(0)}{\sqrt{\pi t}}, \\
F_{\text{Faxen}} &\sim \mu a^3 \nabla^2 v \sim \mu a v (a/\lambda)^2, \\
F_g &= \frac{4}{3}\pi a^3 (\rho_p - \rho) g.
\end{aligned} \tag{9}$$

Здесь ρ_p и ρ обозначают плотности частицы и жидкости, a обозначает радиус частицы, μ – вязкость жидкости, считаемая не зависящей от плотности. Ускорения частицы в смысле Лагранжа и Эйлера обозначены как w и W . Сила Бассе написана в форме, предложенной [3], инерциальная сила в форме, предложенной [4].

Последние два члена считаются пренебрежимо малыми и (9) делением

на $(2/3)\pi a^3$ преобразуется к виду:

$$(\rho + 2\rho_p)\ddot{x} = 2\rho w + \rho W - \frac{9\mu}{a^2} \left(\frac{dx}{dt} - v \right) + F_B, \quad (10)$$

$$F_B = -\frac{9\sqrt{\rho\mu}}{a} \left(\int_{t'=0}^t \left(\frac{d^2x}{dt'^2} - W(t') \right) \frac{dt'}{\sqrt{\pi(t-t')}} + \frac{\dot{x}(0)-v(0)}{\sqrt{\pi t}} \right).$$

Безразмерная амплитуда акустической волны обозначена как $b \ll 1$ и определена как отношение максимальной скорости течения жидкости в волне к скорости звука в жидкости. Также вводятся безразмерные переменные расстояния и времени $q = (\omega/c)x$, $\tau = \omega t$ и безразмерный параметр вязкости $K = \frac{3\mu}{\omega\rho a^2 b} \sim 1$, ω – угловая частота колебаний в волне. Аналогично [5] вычисляется асимптотическое решение для усреднённой траектории движения частицы при $b \rightarrow 0$.

Осреднённая и неосреднённая силы Бассе вычислялись с помощью схемы 3-го порядка (8). Всё уравнение рассчитывалось с помощью 5-точечной схемы для аппроксимации с нужной точностью вторых производных под интегралом.

На рис. 2 траектория тяжёлой частицы $\rho_p/\rho = 1.5$ промоделирована для $b = 16/3 \cdot 10^{-4}$. Траектория при столь малом b практически совпадает с асимптотическим решением для $b \rightarrow 0$. Моделирование точного уравнения заняло 8 часов на одном ядре современного процессора i7, осреднённое уравнение было промоделировано за 170 мс. Возможность рассчитывать точную траекторию частицы до таких больших значений безразмерного времени ($\tau_{\max} = 60000$, $h = 0.05$, $1.2M$ шагов) показывает существенное преимущество нашей схемы перед использованной в [5].

4 Выводы

Предложенная численная схема для вычисления интеграла Бассе показала себя гораздо проще и быстрее существующих аналогов. Работа схемы 3-го порядка точности была продемонстрирована на модельном интеграле и на модельной задаче о фокусировке частицы в стоячей акустической волне. Предложенная схема позволила продлить расчёт точного уравнения до гораздо больших времён, чем в предыдущих работах на эту тему, а именно до момента остановки частицы в узле давления стоячей волны, и доказать численно сходимость асимптотики к точному решению.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 14-19-01633).

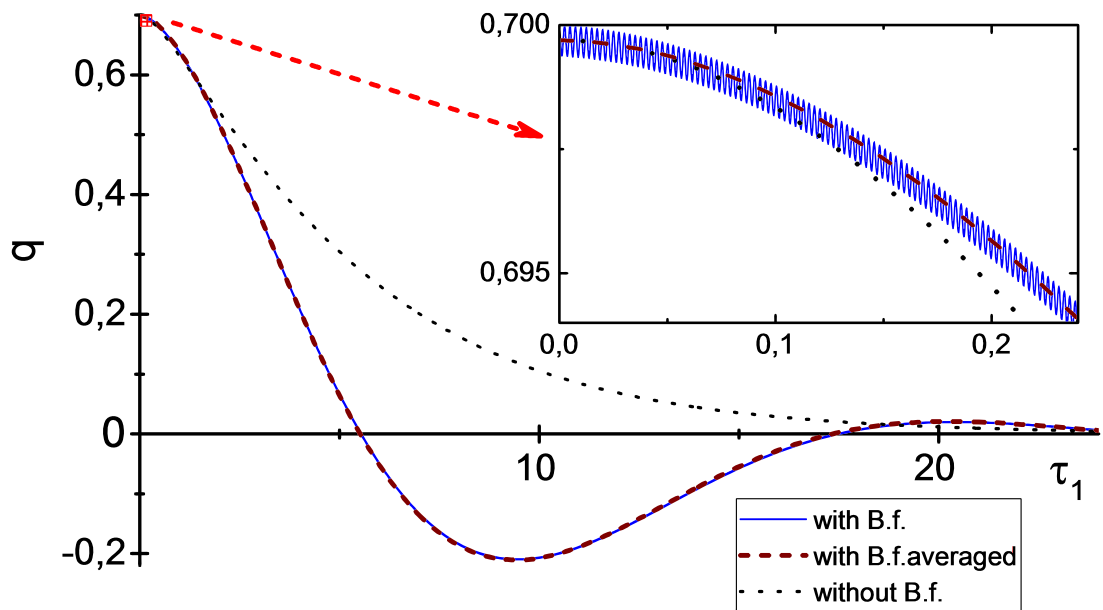


Рис. 2: Точное и асимптотическое решения интегродифференциального ВВО уравнения (пунктирная и сплошная линии) и численное решение того же уравнения в пренебрежении силой Бассе (точки). Вставка показывает увеличенную начальную часть траектории частицы. $\tau_1 = 3b\tau/4$ обозначает "медленное" безразмерное время

Список литературы

- [1] Moreno-Casas, P.A., Bombardelli, F.A.: Computation of the Basset force: recent advances and environmental flow applications. *Environmental Fluid Mechanics*, 16(1), 193–208 (2016)
- [2] Daitche, A.: Advection of inertial particles in the presence of the history force: Higher order numerical schemes. *Journal of Computational Physics*, 254, 93–106 (2013).
- [3] Michaelides, E.E.: A novel way of computing the Basset term in unsteady multiphase flow computations. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 4(7), 1579–1582 (1992).
- [4] Maxey, M.R., Riley, J.J.: Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids*, 26(4), 883–889 (1983).
- [5] Аксенов А. В., Петров А. Г., Шундерюк М. М.: О движении твердых частиц в жидкости в нелинейной стоячей ультразвуковой волне. *Докл. РАН*, Т. 439, № 1, С. 37–41 (2011).