
9. VAJA: MREŽNA BOLTZMANNNOVA METODA

Dominik Primožič

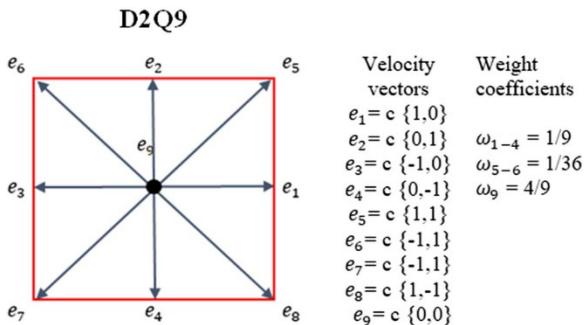
27. MAJ 2025

1. naloga

S pomočjo mrežne Boltzmannove metode simuliraj tok tekočine zaradi gravitacije v navpičnem 2D kanalu, če imamo notri pravokotno oviro.

Metode

Mrežna Boltzmannova metoda (LBM) se uporablja za simulacijo toka tekočin z nizko hitrostjo. V dveh dimenzijah se pogosto uporablja D2Q9 mreža, ki vsaki točki obravnava devet sosedov s svojimi hitrostmi in utežmi.



Slika 1. Vir: DOI:10.1002/mma.8939

Označimo s $f_i(x, t)$ porazdelitveno funkcijo za mrežno smer i na mestu (x,y). V LBM sistemu rešujemo enačbo:

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{\text{eq}}(x, t)] + F_i$$

kjer je τ relaksacijski čas, F zunanjia sila in f_i^{eq} ravnotežna porazdelitev podana z:

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left(1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u \cdot u}{2c_s^2} \right)$$

kjer je u makroskopska hitrost tekočine, za stabilnost LBM mora biti pod 0.1, c pa je hitrost toka v modelu. Relaksacijski čas se izračuna prek kinematične viskoznosti, ki pa se izračuna iz vhodni parametrov Re , U in širine kanala.

$$\nu = \frac{U \cdot L}{Re}$$

$$\tau = 3\nu + \frac{1}{2}$$

Gravitacijo lahko upoštevamo na več načinov, najbolj preprost je "streamline shift", kjer hitrost preprosto zamaknemo za gravitacijski pospešek.

$$\mathbf{u} = \mathbf{u} + g\Delta t.$$

Samo simulacijo izvajamo z reševanjem LBM enačbe, upoštevamo "bounce back" robne pogoje na stenah in ovir ter periodične na izhodu in vhodu. Po simulaciji trkov se vse točke na mreži prestavijo na sosednje mesto:

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(x, t)$$

Za vsak korak lahko izračunamo tudi makroskopske količine, kot sta hitrost in gostota.

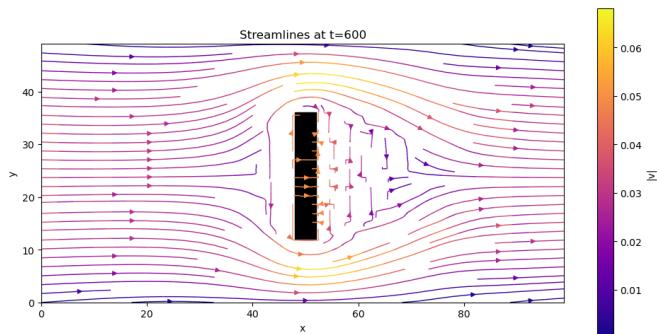
$$\rho(x) = \sum_i f_i(x)$$

$$u(x) = \frac{1}{\rho(x)} \sum_i f_i(x) e_i + F \Delta t$$

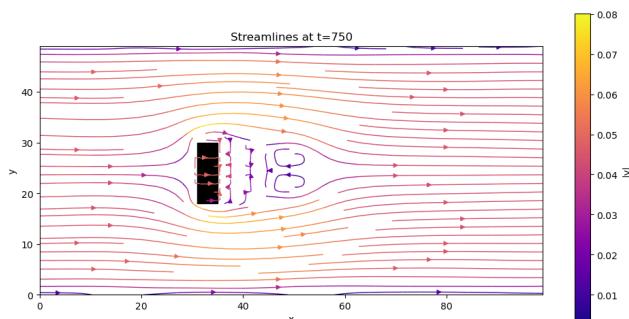
Rezultati

Simuliral sem tok tekočine za različna Reynoldsova števila in različno postavljene ovire. Gostota se v simulacijah ni spremenjala zato je nisem posebej obravnaval, osredotočil sem se predvsem na vizualizacijo velikosti hitrostnega vektorja na posameznih točkah na mreži. Za vsako simulacijo bi lahko počakal na ekvilibracijo, a se mi zdi bolj zanimivo spremljati tudi začetne spremenjanje toka da pride do ravnotežnega stanja. Večina rezultat je naloženih kot gif datoteke na naslovu: [LBM](#)

Ugotovil sem da je simulacija stabilna le za relaksacijski čas več od 0.515, zato sem Re in U kombiniral do take vrednosti. Začel sem z nizkimi Re števili in jih postopno zviševal. To so datoteke poimenovane RexxxHxxUxxx.gif. Pri nizkih Re številih je shema nekoliko napačna, saj način vsiljevanja gravitacije preveč relaksira sistem in hitrost povsod postane enaka. Med samo ekvilibracijo pa je razvidna povečana hitrost ob ovirah, vrtinci se za oviro ne tvorijo. Z višanjem Re shema postane boljša in simulacija se ustali na profilu s povečano hitrostjo ob oviri. Za oviro se začnejo tvoriti tudi vrtinci. Pri zelo velikih Re pa zaradi periodičnih robnih pogojev pride na začetku do zanimivega odboja in profila, potem se ustali, nakar pa shema propade. Propad sheme je verjetno zaradi načina vsiljevanja gravitacije ali pa preveč enostavnih robnih pogojev na oviri. Pri Re 1000 se lepo vidi nastanek vrtincev in stabilno ravovesno stanje. Pri Re 1000 sem naredil še nekaj posnetkov tokovnic.

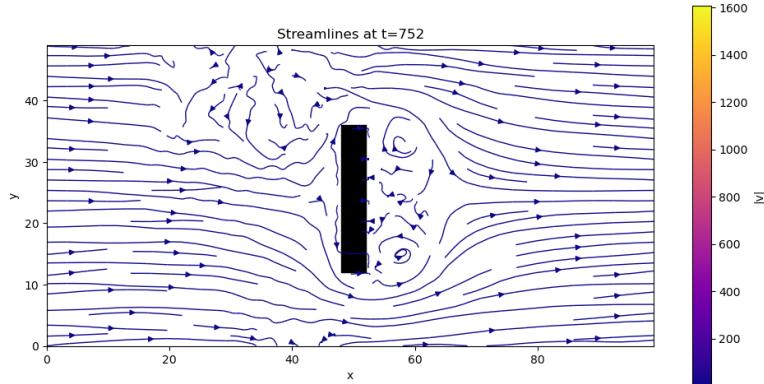


Graf 1. Začetek tvorjenja vrtinca pri Re=1000

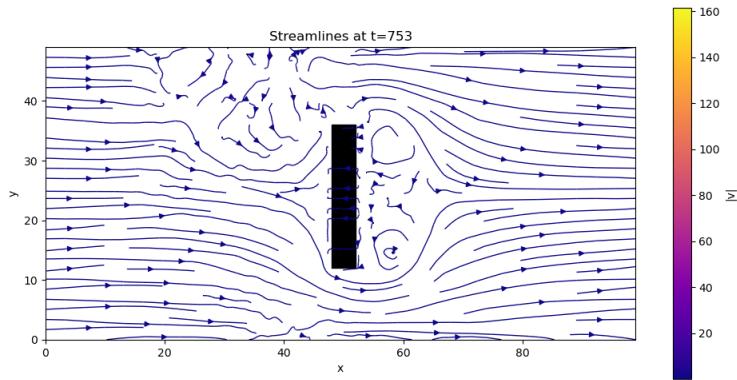


Graf 2. Tvorba vrtinca za oviro pri Re=1000

Profil postane zelo urejen, za oviro pa nastane vrtinec, kar je izkustveno pričakovano obnašanje za tak sistem. V nadaljevanju se vrtinčenje začne še na drugih mestih, kar pa nisem prepričan ali je pravilno ali ne. Najverjetneje za spodnji primer ni, ker hitrost močno naraste nad mejo stabilnosti. Porast hitrosti pa lahko pripisemo tudi turbulentnemu obnašanju, ki se v naslednjem časovnem okviru ustali. Magnituda hitrosti se močno zmanjša.

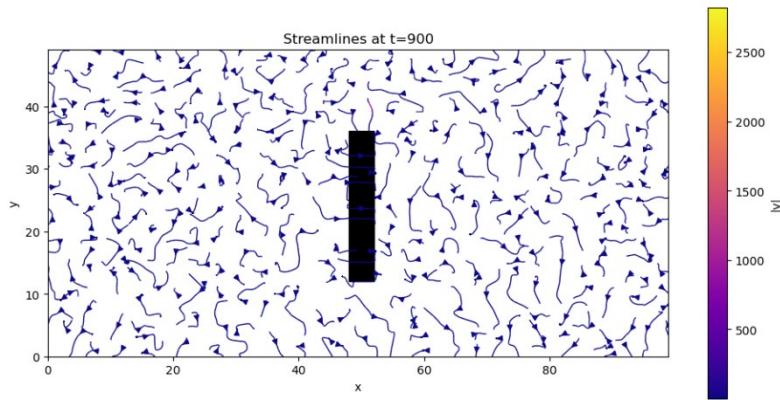


Graf 3. Tvorba novega vrtinca pri $Re=1000$



Graf 4. Vrtinec se ustaljuje pri $Re=1000$

Na koncu pa simulacija vseeno uide, shema ni dovolj močna da se povsem ustali po nastanku vrtinca sredi kanala.



Graf 5. Shema pobegne pri $Re=1000$

Nato sem simuliral še različno velike ovire, te so poimenovane kot oviraX.gif za debelino ovire X in mini_ovira za različno velike ovire. Pri najmanjši oviri pride do zelo zanimivega toka, verjetno zaradi periodičnih robnih pogojev, se pa sistem ustali. Enako se zgodi tudi, v primeru da ovira ni

na sredini. Pri oviri, ki zaseda le četrtino kanala tudi pride do povečanja hitrosti ob oviri in vrtinca za oviro. Večanje debeline ovire nima pretiranega vpliva na profil. Ob oviri je povečana hitrost, ki se lepo umiri za oviro.

Nazadnje sem preveril še vpliv položaja ovire, to so datoteke poimenovane z_xYY_ovira. Ovira na vhodu povzroči večje vrtinčenje po kanalu. Preveril sem tudi za položaj ovire na tretjini kanala, tudi v tem primeru pride do povečanega vrtinčenja. Profil je tudi nekoliko drugačen, tok ima dlje časa večjo hitrost kot v primeru ovire na sredini. Podobno se zgodi z oviro na četrtini kanala, le da je v tem primeru spet več vrtincev. V mapi so tudi tokovnice za oviro na tretjini (x3e3_). Iz teh se lepo vidi nastanek vrtinca za oviro.

2. naloga

V literaturi poiščite kemijsko reakcijo, ki se jo da opisati s celičnim avtomatom ter jo preučite s to metodo.

Metode

Belousov-Zhabotinskyjeva reakcija je znana po tem, da v določenih pogojih generira oscilacije in prostorsko valovito obnašanje zaradi nelinearne dinamike oksidacijsko-reduktijskih procesov, ki vključujejo kompleksne mehanizme povratnih zank. Za reševanje z metodo celičnega avtomata lahko uporabimo model "Hodgepodge machine". Osnova modela temelji na diskretni mreži celic, kjer je vsaka celica v enem od $R+1$ možnih stanj, od popolnoma "zdrave" (0) do popolnoma "bolne" (R). Kako model opisuje BZ reakcijo in katalitsko reakcijo vodika na platini je bolj podrobno opisano v članku, po katerem sem povzel model (<https://www.jstor.org/stable/24989205>) . V članku so opisana naslednja pravila za potek simulacije:

Zdrava celica, $s=0$, postane okužena glede na število okuženih, A, in bolnih, B sosedov:

$$s' = \left\lfloor \frac{A}{k_1} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{B}{k_2} \right\rfloor$$

kjer sta k_1 in k_2 parametra, ki določata občutljivost celice na okužene oziroma bolne sosede.

Okužena celica ($0 < s < R$) napreduje v okužbi:

$$s' = \left\lfloor \frac{S}{A+1} \right\rfloor + g$$

kjer je S vsota stanj vseh sosednjih celic in g parameter, ki določa hitrost okužbe.

Bolna celica ($s=R$) se ob naslednjem koraku pozdravi:

$$s' = 0$$

Metafora okužbe v modelu lahko predstavlja zasičenost katalizatorskih delcev z vmesnimi produkti reakcije. Kemijska valovanja nastanejo zaradi lokalnih oscilacij v koncentracijah reaktantov in katalizatorjev, ki se v modelu izražajo kot prostorsko razporejene vrednosti stanj celic. Interakcije med sosedji simulirajo difuzijo toplotne ali premik reaktantov.

Model sem implementiral na preprosti 2D mreži, vsaka celica ima 8 sosedov. Nisem uporabil periodičnih robnih pogojev.

Rezultati

Tudi za to nalogo sem naredil gif datoteke, ki prikazujejo potek simulacije na mreži. Spreminjal sem hitrost okužbe in parametra za vpliv sosedov. Vsi so naloženi na [LBM1](#).

Datoteke so poimenovane čas-r-k1-k2-g.gif. Primerjal sem vpliv možnih stanj, R, na potek reakcije. Za pogoje $k_1=2$ in $k_2=3$ ter $g=10$ pri $R=20$ pride do oscilacij, pri $R=50$ pa se sistem že popolnoma relaksira. To se zgodi, ker je preveč stanj in se vsa okužijo preden pride se začnejo relaksirati. V modelu adsorbcije vodika se ves adsorbira in začne reagirati, pride do nasičenja nobena reakcija pa se ne zaključi preden pride do nasičenja. Iz poskusov sem ugotovil da mora biti g vsaj polovica sistemu dostopnih stanj, da pride do oscilatornega obnašanja. Preizkusili sem različne vrednosti g (20, 25, 30, 40). V vseh je na začetku naključna razporeditev stanj, ki hitro ugasnejo, nakar pride do spiralnih vzorcev. Pride torej do oscilatornega obnašanja, ki ga želimo modelirati. Širjenje pa dobro simulira difuzijski efekt. S parametromi k_1 in k_2 je nekoliko težje ujeti stabilnost oz. osciliranje, zato nisem priložil nobenih prikazov tega.