

Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

Отчёт по первому этапу группового проекта

Команда №4: Абакумова Олеся Максимовна (НФИбд-02-22)

Астраханцева Анастасия Александровна (НФИбд-01-22)

Ганина Таисия Сергеевна (НФИбд-01-22)

Ибатулина Дарья Эдуардовна (НФИбд-01-22)

Содержание

1	Введение	4
1.1	Цель проекта	4
1.2	Задачи первого этапа проекта	4
1.3	Объект и предмет исследования	4
1.4	Постановка проблемы	5
1.5	Научная значимость	6
1.6	Общее описание	6
2	Основная часть	7
2.1	Решеточные газы (LGA)	7
2.1.1	Общее описание	7
2.2	Решеточное уравнение Больцмана (LBE)	12
2.2.1	Общее описание	12
2.2.2	Приложение. Явный вид функций f_k^{eq}	14
2.3	Модели LGA со взаимодействием между частицами	15
2.3.1	Общее описание	15
2.4	Модель LBE с внешними силами и фазовыми переходами	16
2.4.1	Действие внешних сил	16
2.4.2	Фазовые переходы	17
3	Заключительная часть	19
3.1	Заключение	19
3.2	Выводы	19
4	Список литературы	20

Список иллюстраций

2.1	Возможные направления скорости частиц в модели НРР (а) и возможные столкновения, в которых скорости частиц изменяются (б)	8
2.2	Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели FHP-I(а), некоторые возможные столкновения с участием покоящихся частиц в модели FHP-III(б)	10
2.3	Геометрия и примеры столкновений для квадратной решетки . .	11
2.4	Геометрия решетки и возможные векторы скорости	15

1 Введение

1.1 Цель проекта

Разработать и проанализировать модель на основе решеточного уравнения Больцмана для описания течений газа.

1.2 Задачи первого этапа проекта

1. **Формулировка научной проблемы:** определение ключевых аспектов проблемы и ее значимости.
2. **Теоретическое описание задачи:** формулировка теоретических основ модели.
3. **Описание модели:** разработка математической модели, отражающей основные физические процессы.

1.3 Объект и предмет исследования

- **Объект:** физические процессы в газах и жидкостях.
- **Предмет:** использование решеточных методов (LGA и LBE) для описания динамики частиц на дискретной сетке.

1.4 Постановка проблемы

Моделирование газовых потоков и жидкостей традиционными методами, такими как уравнения Навье-Стокса и методы конечных разностей, требует значительных вычислительных ресурсов и сложных алгоритмов. Методы решеточных газов (Lattice-Gas Automata, LGA) и решеточного уравнения Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) предлагают альтернативу, позволяя упростить вычисления при сохранении физической достоверности. Эти методы широко используются в различных областях [1]:

- **Гидродинамика:** моделирование течений жидкостей и газов.
- **Аэродинамика:** изучение воздушных потоков и аэродинамических свойств объектов.
- **Биофизика:** моделирование биологических систем и процессов.
- **Моделирование пористых материалов:** изучение свойств и поведения пористых сред.
- **Анимация визуальных эффектов:** создание реалистичных симуляций жидкостей и газов в кино и играх.

Применение методов актуально для:

1. **Исследования сложных многокомпонентных течений:** моделирование взаимодействия нескольких жидкостей или газов.
2. **Течений с фазовыми переходами и химическими реакциями:** изучение процессов, связанных с изменением состояния вещества или химическими реакциями.
3. **Создания высокопроизводительных параллельных алгоритмов:** разработка эффективных вычислительных методов для крупномасштабных симуляций.

1.5 Научная значимость

1. **Моделирование сложных систем:** решеточные методы позволяют описывать взаимодействие частиц и фазовые переходы, что важно для понимания поведения реальных систем.
2. **Высокая скорость вычислений:** дискретная природа моделей упрощает распараллеливание и ускоряет вычисления.
3. **Простота реализации:** алгоритмы не требуют сложных вычислительных схем, что делает их доступными для широкого круга исследователей и инженеров [2].

1.6 Общее описание

В отчете рассматриваются методы моделирования гидродинамических процессов на основе решеточных моделей: Lattice-Gas Automata (LGA) и Lattice Boltzmann Equation (LBE). Эти методы позволяют упростить вычисления и моделировать сложные явления, такие как течения жидкостей и газов, теплопередача и фазовые переходы.

2 Основная часть

2.1 Решеточные газы (LGA)

2.1.1 Общее описание

Рассматривается квадратная решетка, в узлах которой находятся частицы единичной массы. Расстояние между узлами Δx и шаг по времени Δt принимаются за единицу длины и времени соответственно. В каждом узле может быть не более одной частицы с данным направлением скорости (принцип исключения).

2.1.1.1 Модель HPP (Hardy–Pomeau–Pazzis)

- **Описание:**

- Используется квадратная решетка.
- Частицы могут двигаться в одном из соседних узлов (вверх, вниз, вправо, влево).
- Соударения происходят с сохранением количества частиц и их полного импульса.
- Нетривиальными являются соударения “почти лоб в лоб”, после которых скорости частиц поворачиваются на 90 градусов. В остальных случаях можно считать, что столкновения не произошло (частицы пролетели мимо друг друга).

* *Пояснение:* Столкновения “почти лоб в лоб” — это когда частицы летят навстречу друг другу по одной линии, а после столкновения

их траектории отклоняются на 90 градусов (рис. 2.1) [2].

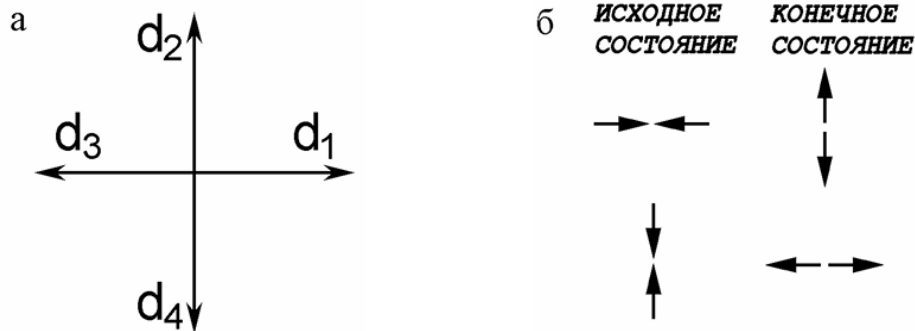


Рис. 2.1: Возможные направления скорости частиц в модели НРР (а) и возможные столкновения, в которых скорости частиц изменяются (б)

• **Кодирование состояний:**

- Наличие частицы, имеющей скорость по каждому направлению, может быть закодировано одним битом (0 — нет частицы, 1 — есть).
- Так можно записать состояние каждого узла в четырех битах.
- Примеры операций:
 - * Добавление к состоянию S частицы с направлением скорости d_k :
 $S \text{ or } d_k \rightarrow S$
 - * Проверка: есть ли в состоянии S частица с направлением скорости d_k :
 $d_k: \text{ if } (S \text{ and } d_k) \neq 0$
- Здесь or — двоичная побитовая операция “или”, а and — двоичная операция “и”.
 - * *Пояснение:* Операции or и and используются для манипулирования битами, что позволяет эффективно кодировать и обрабатывать состояния частиц.
- Все операции сводятся к целочисленной арифметике, это означает высокую скорость расчетов и отсутствие ошибок округления. Кроме того, все вычисления локальные, поэтому их можно выполнять параллельно.

- **Недостатки:**

- Квадратная сетка с 4 возможными направлениями скорости частиц недостаточно симметрична [3].

2.1.1.2 Модель FHP-I

- **Описание:**

- Используется треугольная сетка с 6 возможными направлениями скорости частиц в узле.
- Обладает большей симметрией по сравнению с моделью HPP.

2.1.1.3 Модель FHP-III

- **Описание:**

- Включает в себя покоящиеся частицы.
- Геометрия решетки и возможные столкновения частиц для моделей FHP-I, FHP-III представлены на рис. 2.2.

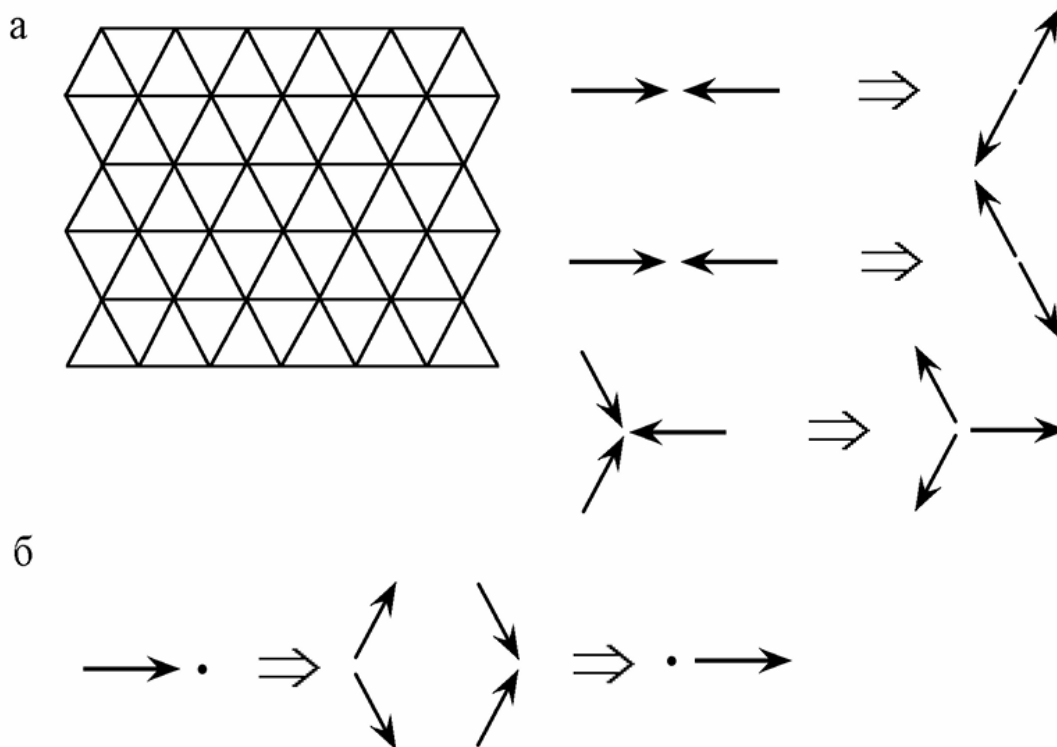


Рис. 2.2: Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели FHP-I(a), некоторые возможные столкновения с участием покоящихся частиц в модели FHP-III(б)

2.1.1.4 Квадратная решетка с движением по диагоналям

• Описание:

- Вводится возможность движения частиц по диагоналям (скорость $\sqrt{2}$).
- Вместе с покоящимися частицами получаем 9 направлений скорости.
- Так как модули скоростей различны, возможен нетривиальный закон сохранения энергии, и можно ввести температуру.

• Параметры:

- Число покоящихся частиц: n_0
- Число частиц с единичной скоростью: n_1
- Число частиц со скоростью $\sqrt{2}$: n_2

- Плотность: $\rho = n_0 + n_1 + n_2$
- Полная энергия: $E = P + \frac{\rho u^2}{2} = \sum_i n_i v_i^2 / 2 = n_1 / 2 + n_2$ (где P – давление)
- Температура: $T = \frac{P}{\rho}$

• **Возможности:**

- Моделирование течений с переменной температурой.
- Моделирование теплопередачи и выделения энергии.
- Легко задавать граничные условия любого вида (например, разворачивать скорости прилетевших частиц на угол 180 градусов на твердых границах) [1]. Несколько примеров столкновений, в том числе с выделением энергии, приведены на рис. 2.3.

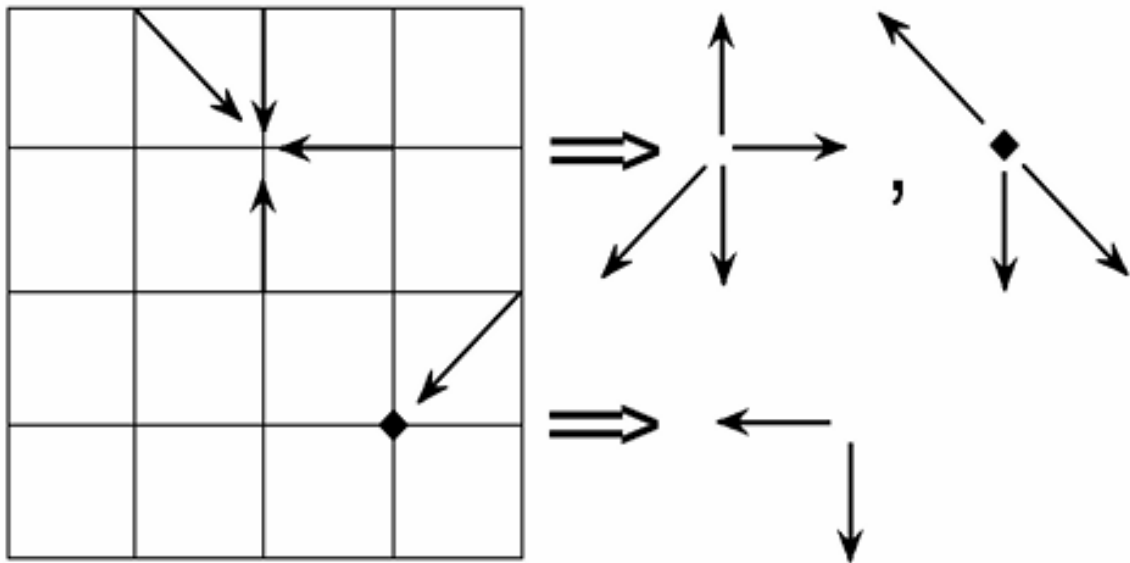


Рис. 2.3: Геометрия и примеры столкновений для квадратной решетки

2.2 Решеточное уравнение Больцмана (LBE)

2.2.1 Общее описание

Метод LBE позволяет устранить статистический шум, возникающий из-за случайности в модели LGA. Эволюция системы описывается уравнением Больцмана:

$$f_k(x + c_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Omega_k(x, t), \text{ где:}$$

- f_k — одночастичная функция распределения.
- c_k — скорость частиц.
- Ω_k — столкновительный член.
 - *Пояснение:* Это уравнение описывает, как меняется распределение частиц со временем и в пространстве. Левая часть описывает перенос частиц, а правая — изменения из-за столкновений [4].
- **Условие:**
 - Скорости частиц c_k должны удовлетворять условию $c_k \Delta t = e_k$, где e_k — векторы, соединяющие узел с соседними. Обычно принимается $\Delta t = 1$.
 - * *Пояснение:* Это условие гарантирует, что частицы перемещаются из одного узла в другой за один временной шаг.
- **Макроскопические параметры:**
 - Плотность: $\rho = \sum_k f_k$
 - Скорость: $\rho u = \sum_k f_k c_k$
 - * *Пояснение:* Эти формулы позволяют связать микроскопические параметры (функцию распределения) с макроскопическими (плотность и скорость).
- **Столкновительный член:**

- Описывает релаксацию системы к равновесному состоянию: $\Omega_k = \frac{1}{\tau}(f_k^{eq} - f_k)$, где f_k^{eq} — равновесные функции распределения.
- Равновесные функции распределения зависят от плотности и скорости вещества в узле, чтобы выполнялись законы сохранения массы и импульса в столкновениях, то есть $\rho = \sum_k f_k^{eq}$, $\rho u = \sum_k f_k^{eq} c_k$.
 - * *Пояснение:* Столкновительный член моделирует, как частицы стремятся к равновесному состоянию, а равновесные функции распределения определяют это состояние.

• **Кинетическая температура:**

- $\theta = \frac{kT}{m}$ (в энергетических единицах) задается уравнением $\rho\theta = \sum_k f_k^{eq}(c_k - u)^2/2$.
 - * *Пояснение:* Кинетическая температура характеризует среднюю кинетическую энергию частиц.
- Часто масса LBE частиц принимается за единицу, $m = 1$.

• **Преимущества:**

- Хорошо описывает течения вязкой жидкости в пределе малых скоростей (число Маха $M = u/c_s \ll 1$).
 - * *Пояснение:* Число Маха — отношение скорости потока к скорости звука.
- Время релаксации τ определяет кинематическую вязкость $\nu = (\tau - 1/2)c_s^2 \Delta t$.
- На твердых границах можно просто разворачивать скорости прилетевших частиц, моделируя непроницаемые стенки без проскальзывания.
 - * *Пояснение:* Граничные условия задаются простым отражением скорости, что упрощает моделирование [2].

2.2.2 Приложение. Явный вид функций f_k^{eq}

Обычно равновесные функции распределения выбираются в максвелловском виде:

$$f_k^{eq} \sim \exp(-(c_k - u)^2/2\theta).$$

В изотермических моделях достаточно разложить экспоненту в ряд с точностью до членов порядка u^2 , используя приближенную формулу $e^x = 1 + x/1! + x^2/2! + \dots$. В результате получаем:

$$f_k^{eq} = w_k \rho \left(1 + \frac{c_k \cdot u}{\theta} + \frac{(c_k \cdot u)^2}{2\theta^2} - \frac{u^2}{2\theta} \right).$$

Коэффициенты $w_k \sim \exp(-c_k^2/2\theta)$ зависят только от модуля $|c_k|$.

• Примеры:

– Одномерная модель:

- * $c_0 = 0, \quad c_{-1} = -h/\Delta t, \quad c_1 = h/\Delta t$
- * $\theta = \frac{1}{3}(h/\Delta t)^2, \quad w_0 = \frac{2}{3}, \quad w_{\pm 1} = \frac{1}{6}$
- * $f_0^{eq} = \frac{2}{3}\rho(1 - \frac{3}{2}\tilde{u}^2), \quad f_{\pm 1}^{eq} = \frac{1}{6}\rho(1 \pm 3\tilde{u} + 3\tilde{u}^2)$
- * Здесь $\tilde{u} = u\Delta t/h$ – безразмерная скорость вещества.

– Двумерная модель на квадратной сетке с 9 направлениями (рис. 2.4):

- * $c_0 = (0, 0)$
- * $c_k = \frac{h}{\Delta t}(\cos(k\pi/2), \sin(k\pi/2))$ для $k = 1 \dots 4$
- * $c_k = \frac{\sqrt{2}h}{\Delta t}(\cos((k+1/2)\pi/2), \sin((k+1/2)\pi/2))$ для $k = 5 \dots 8$
- * $\theta = \frac{1}{3}(h/\Delta t)^2, \quad w_0 = \frac{4}{9}, \quad w_{1-4} = \frac{1}{9}, \quad w_{5-8} = \frac{1}{36}$
- * $f_0^{eq} = w_0\rho(1 - d\tilde{u}^2)$
- * $f_1^{eq} = w_1\rho(1 + a\tilde{u}_x + b\tilde{u}_x^2 - d\tilde{u}^2)$
- * ...
- * $f_8^{eq} = w_8\rho(1 + a(\tilde{u}_x - \tilde{u}_y) + b(\tilde{u}_x - \tilde{u}_y)^2 - d\tilde{u}^2)$
- * где $a = \frac{(\Delta t/h)^2}{\theta} = 3, \quad b = \frac{(\Delta t/h)^4}{2\theta^2} = \frac{9}{2}, \quad d = \frac{(\Delta t/h)^2}{2\theta} = \frac{3}{2}$

Далее для простоты будем опускать значок «~» у переменной u [1].

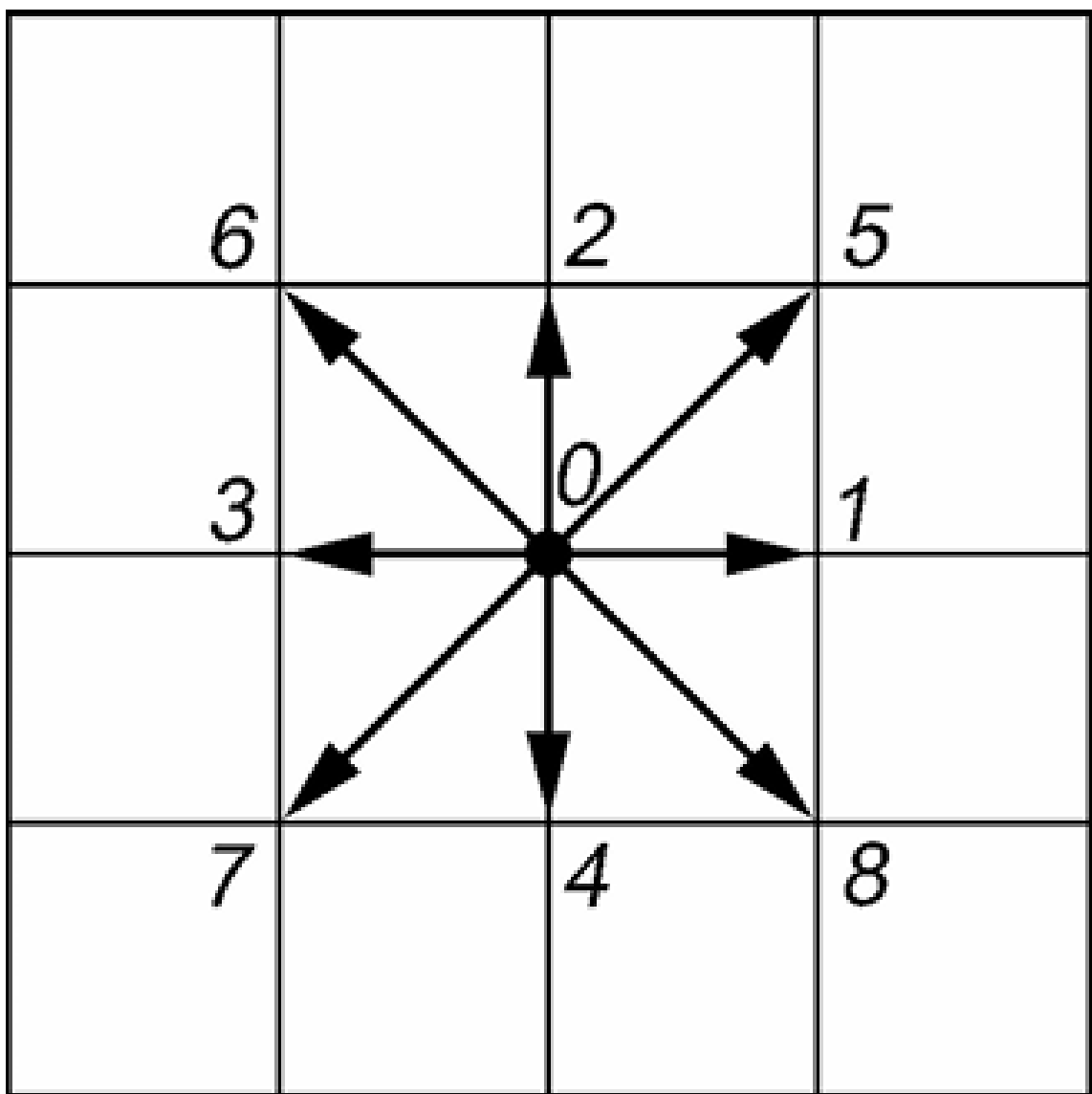


Рис. 2.4: Геометрия решетки и возможные векторы скорости

2.3 Модели LGA со взаимодействием между частицами

2.3.1 Общее описание

Приведенные выше модели описывают скорее газ, чем жидкость. В жидкости между частицами существуют силы взаимодействия, проявлением которых

являются поверхностное натяжение, а также фазовые переходы жидкость-газ.

- **Несмешивающиеся решеточные газы**

- Вводится отталкивание между частицами разного типа (например, “синими” и “красными”).
- При достаточной силе отталкивания происходит разделение веществ.
- Это достигается перераспределением цвета частиц после столкновений так, чтобы красные частицы в основном направлялись в узлы с преобладанием красного цвета и наоборот.

- **Модель LGA с переходом “жидкость-газ”**

- Вводится притяжение между частицами, находящимися на некотором расстоянии.
- Импульсы частиц поворачиваются друг к другу, если это возможно, с учетом закона сохранения импульса согласно третьему закону Ньютона.
- При достаточно большой длине взаимодействия в некотором диапазоне плотностей возможно сосуществование плотной (жидкой) и разреженной (газообразной) фаз [3].

2.4 Модель LBE с внешними силами и фазовыми переходами

2.4.1 Действие внешних сил

- **Моделирование сил, действующих на вещество.**

- Природа сил может быть самой разной (например, электрические силы, сила тяжести, силы межмолекулярного взаимодействия и т.д.).
- Суммарная сила, действующая на вещество в узле, равна F .

- Действие силы в течение шага по времени Δt приводит к изменению скорости: $\Delta u = \frac{F\Delta t}{\rho}$.
- Решеточное уравнение Больцмана принимает вид: $f_k(x + c_k\Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Omega_k(x, t) + \Delta f_k$. То есть, после действия оператора столкновений (в котором используется скорость u), необходимо учесть изменение функций распределения Δf_k под действием сил. Эта добавка равна разнице равновесных функций распределения при одной и той же плотности, но с разными скоростями: $\Delta f_k = f_k^{eq}(\rho, u + \Delta u) - f_k^{eq}(\rho, u)$.

• **Порядок учета действия сил:**

1. Вычислить промежуточные значения функций распределения:

$$f_k^*(x, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Delta f_k.$$
2. Применить оператор столкновений: $f_k(x, t + \Delta t) = f_k^*(x, t + \Delta t) + (f_k^{eq}(u + \Delta u) - f_k^*(x, t + \Delta t))/\tau$.

• **Физическая скорость вещества:**

- $u^* = \frac{u + (u + \Delta u)}{2} = u + \frac{\Delta u}{2}$.
 - * На каждом шаге по времени в каждом узле существуют два значения скорости — до и после действия сил.
 - * В случае действия сил физическая скорость вещества равна их среднему арифметическому.

2.4.2 Фазовые переходы

- Достаточно простой способ моделирования фазовых переходов жидкость – пар.
- Между частицами, находящимися в соседних узлах, задается сила взаимодействия:

$$F(x) = \psi(\rho(x)) \sum_k G_k e_k \psi(\rho(x + e_k)).$$

- Значения коэффициентов $G_k > 0$ соответствуют притяжению между соседними узлами, что необходимо для сосуществования жидкой фазы и паровой фазы. В обратном случае при $G_k < 0$ — отталкивание.
- G_k выбираются таким образом, чтобы сила была достаточно изотропной (чтобы, например, капли получались круглыми).
- При использовании модели LBE на квадратной сетке сила взаимодействия между узлами, расположенными по диагонали на расстоянии $\sqrt{2}$, должна быть в 4 раза меньше, чем между ближайшими соседями, то есть $G_{1-4} = G_0 > 0$, а $G_{5-8} = \frac{G_0}{4}$.
- «Эффективная плотность» $\psi(\rho)$ может выбираться достаточно произвольно.
- Введение такого взаимодействия приводит к уравнению состояния, которое связывает давление, плотность и температуру [3].

3 Заключение

3.1 Заключение

Методы решеточных газов и решеточного уравнения Больцмана предоставляют мощный инструмент для моделирования сложных физических процессов, включая гидродинамику, теплопередачу и фазовые переходы. Их простота и возможность параллельных вычислений делают их перспективными для изучения широкого класса задач в физике и инженерии. Модели LGA позволяют упростить расчеты и учитывать сложные взаимодействия между частицами, а метод LBE позволяет устранить статистический шум и моделировать макроскопические параметры вещества.

3.2 Выводы

Во время выполнения первого этапа группового проекта мы сделали теоретическое описание решеточного уравнения Больцмана и определили задачи дальнейшего исследования.

4 Список литературы

1. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. // Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2010. 101 с.
2. Куперштох А.Л. Моделирование течений с границами раздела жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестник НГУ. Сер. Математика, механика и информатика. 2005. Т. 5, № 3. с. 29–42.
3. Chen S., Lee M., Zhao K. H., Doolen G. D. A lattice gas model with temperature // Physica D. 1989. V. 37. p. 42–59.
4. Чашин Г.С. Метод решёточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 99. 31 с..