Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

Отчёт по второму этапу группового проекта

Содержание

# 1 Введение

## 1.1 Цель проекта

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

## 1.2 Задачи второго этапа проекта

1. Исследовать алгоритмы решения задачи

## 1.3 Актуальность

Моделирование газовых потоков и жидкостей традиционными методами требует значительных вычислительных ресурсов. В связи с этим, методы решеточных газов (LGA) и решеточного уравнения Больцмана (LBE) становятся все более актуальными. Они позволяют упростить вычисления, сохраняя при этом физическую достоверность, и находят применение в различных областях, от гидродинамики до биофизики. В данном докладе мы рассмотрим основные алгоритмы и модели, используемые для решения задач с применением LGA и LBE [1,2].

# 2 Основная часть

## 2.1 Модель HPP (Hardy–Pomeau–Pazzis)

Модель HPP (Hardy-Pomeau-Pazzis) — это базовая модель решеточных газов (LGA), используемая для моделирования гидродинамических явлений на микроскопическом уровне. Она представляет собой дискретную систему, где пространство и время дискретизованы, а частицы двигаются по узлам квадратной решетки [3].

### 2.1.1 Основные характеристики модели HPP

1. **Решетка**: используется двумерная квадратная решетка, где узлы расположены на одинаковом расстоянии друг от друга.
2. **Частицы**: в каждом узле решетки могут находиться частицы единичной массы. Каждая частица может двигаться в одном из четырех направлений: вверх, вниз, вправо или влево.
3. **Скорость**: все частицы имеют одинаковую скорость, направленную к соседнему узлу. Расстояние между узлами () и шаг времени () выбираются так, чтобы частица могла переместиться в соседний узел за один временной шаг.
4. **Принцип исключения**: в каждом узле может находиться не более одной частицы, движущейся в заданном направлении.
5. **Этапы эволюции**:
   * **Распространение (Streaming)**: частицы перемещаются в соседние узлы в соответствии со своими скоростями. За один шаг времени частица переходит в соседний узел в направлении своего движения.
   * **Столкновения (Collision)**: в узлах происходят столкновения частиц, при которых сохраняются количество частиц и полный импульс.
6. **Правила столкновений**: столкновения происходят таким образом, чтобы выполнялись законы сохранения. В модели HPP нетривиальные столкновения происходят, когда две частицы движутся навстречу друг другу (почти “лоб в лоб”). После столкновения частицы меняют направления движения на 90 градусов. Во всех остальных случаях столкновения считаются несущественными, и частицы продолжают двигаться в прежних направлениях (рис. [1](#fig:001)).

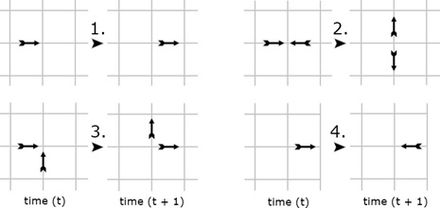


Figure 1: Примеры перемещений частиц в модели HPP

1. **Кодирование состояний**: состояние каждого узла решетки кодируется битами. Поскольку имеется четыре возможных направления движения, для кодирования состояния узла требуется четыре бита. Каждый бит соответствует одному из направлений: 0 — нет частицы, 1 — есть частица, движущаяся в этом направлении. Например, если частицы движутся вправо и вверх, состояние узла кодируется как 1100 в двоичном формате.

### 2.1.2 Математическое описание

Обозначим возможные направления скорости как $. Тогда:

Основные операции для работы с состояниями узлов:

1. **Добавление частицы**: добавление к состоянию частицы с направлением скорости :
2. **Проверка наличия частицы**: проверка, есть ли в состоянии частица с направлением скорости :

* Если результат не равен 0, то частица с направлением присутствует в узле [4].

### 2.1.3 Недостатки модели HPP

1. **Отсутствие симметрии**: квадратная решетка с четырьмя направлениями скорости недостаточно симметрична, что приводит к анизотропии в макроскопических свойствах.
2. **Нефизичное поведение**: модель HPP неточно описывает гидродинамические свойства жидкостей и газов.

Для устранения этих недостатков были разработаны более совершенные модели, такие как FHP (Frisch-Hasslacher-Pomeau) на треугольных решетках и модели с добавлением покоящихся частиц.

## 2.2 Модель FHP-I (Frisch-Hasslacher-Pomeau)

Модель FHP-I (Frisch-Hasslacher-Pomeau) — это улучшенная модель решеточных газов (LGA), разработанная для устранения недостатков модели HPP, связанных с недостаточной симметрией. В модели FHP-I используется треугольная сетка и шесть направлений скорости [4].

### 2.2.1 Основные характеристики модели FHP-I

1. **Решетка**: используется двумерная треугольная решетка, где каждый узел имеет шесть ближайших соседних узлов, расположенных под углами 60 градусов друг к другу.
2. **Частицы**: в каждом узле решетки могут находиться частицы единичной массы. Каждая частица может двигаться в одном из шести направлений к соседним узлам.
3. **Скорость**: все частицы имеют одинаковую скорость, направленную к соседнему узлу. Как и в модели HPP, расстояние между узлами и шаг времени выбираются так, чтобы частица могла переместиться в соседний узел за один временной шаг.
4. **Принцип исключения**: в каждом узле может находиться не более одной частицы, движущейся в заданном направлении.
5. **Этапы эволюции**:
   * **Распространение (Streaming)**: частицы перемещаются в соседние узлы в соответствии со своими скоростями.
   * **Столкновения (Collision)**: в узлах происходят столкновения частиц, при которых сохраняются количество частиц и полный импульс.
6. **Правила столкновений**: столкновения происходят таким образом, чтобы выполнялись законы сохранения. Важным аспектом модели FHP-I является наличие нескольких типов столкновений, обеспечивающих сохранение массы и импульса. Примеры столкновений:
   * Две частицы, движущиеся навстречу друг другу, могут изменить направление на 60 градусов.
   * Три частицы, движущиеся по трем направлениям, могут изменить направления так, чтобы общий импульс остался неизменным.
7. **Кодирование состояний**: состояние каждого узла решетки кодируется битами. Поскольку имеется шесть возможных направлений движения, для кодирования состояния узла требуется шесть битов. Каждый бит соответствует одному из направлений: 0 — нет частицы, 1 — есть частица, движущаяся в этом направлении [5].

### 2.2.2 Преимущества модели FHP-I

1. **Улучшенная симметрия**: треугольная решетка с шестью направлениями скорости обладает большей симметрией по сравнению с квадратной решеткой модели HPP. Это позволяет получить более точное описание гидродинамических свойств.
2. **Реалистичное поведение**: модель FHP-I более точно описывает гидродинамические свойства жидкостей и газов по сравнению с моделью HPP.

### 2.2.3 Недостаток модели FHP-I

**Сложность реализации**: треугольная решетка и более сложные правила столкновений делают реализацию модели FHP-I более сложной по сравнению с моделью HPP.

## 2.3 Модель FHP-III

Модель FHP-III — это расширение модели FHP-I, предназначенное для улучшения её физических свойств за счет добавления покоящихся частиц. Введение покоящихся частиц позволяет более точно моделировать гидродинамические явления и улучшить изотропность модели [6].

### 2.3.1 Основные характеристики модели FHP-III

1. **Решетка**: используется двумерная треугольная решетка, как и в модели FHP-I. Каждый узел имеет шесть ближайших соседних узлов, расположенных под углами 60 градусов друг к другу.
2. **Частицы**: в каждом узле решетки могут находиться частицы единичной массы. В отличие от FHP-I, в FHP-III добавлены покоящиеся частицы, которые не двигаются между узлами. Таким образом, у нас есть шесть движущихся частиц и покоящаяся частица.
3. **Скорость**: шесть движущихся частиц имеют одинаковую скорость, направленную к соседнему узлу. Покоящиеся частицы имеют нулевую скорость.
4. **Принцип исключения**: в каждом узле может находиться не более одной частицы, движущейся в заданном направлении, и не более одной покоящейся частицы.
5. **Этапы эволюции**:
   * **Распространение (Streaming)**: движущиеся частицы перемещаются в соседние узлы в соответствии со своими скоростями. Покоящиеся частицы остаются на месте.
   * **Столкновения (Collision)**: в узлах происходят столкновения частиц, при которых сохраняются количество частиц и полный импульс. В FHP-III добавляются новые правила столкновений, учитывающие покоящиеся частицы.
6. **Правила столкновений**: столкновения происходят таким образом, чтобы выполнялись законы сохранения. Некоторые примеры столкновений:
   * Две частицы, движущиеся навстречу друг другу, могут изменить направление на 60 градусов (как в FHP-I).
   * Частица может столкнуться с покоящейся частицей, изменив направление своего движения.
   * Покоящаяся частица может быть создана или уничтожена в результате столкновений.
7. **Кодирование состояний**: состояние каждого узла решетки кодируется битами. Поскольку имеется шесть возможных направлений движения и возможность наличия покоящейся частицы, для кодирования состояния узла требуется семь битов. Шесть битов соответствуют направлениям движения, а один бит — наличию покоящейся частицы [2].

### 2.3.2 Преимущества модели FHP-III

1. **Улучшенная изотропность**: добавление покоящихся частиц улучшает изотропность модели, что позволяет получить более точное описание гидродинамических свойств.
2. **Более реалистичное поведение**: модель FHP-III более точно описывает гидродинамические свойства жидкостей и газов по сравнению с моделями HPP и FHP-I.

### 2.3.3 Недостаток модели FHP-III

**Сложность реализации**: добавление покоящихся частиц и новых правил столкновений делает реализацию модели FHP-III более сложной по сравнению с моделями HPP и FHP-I (рис. [2](#fig:002)).

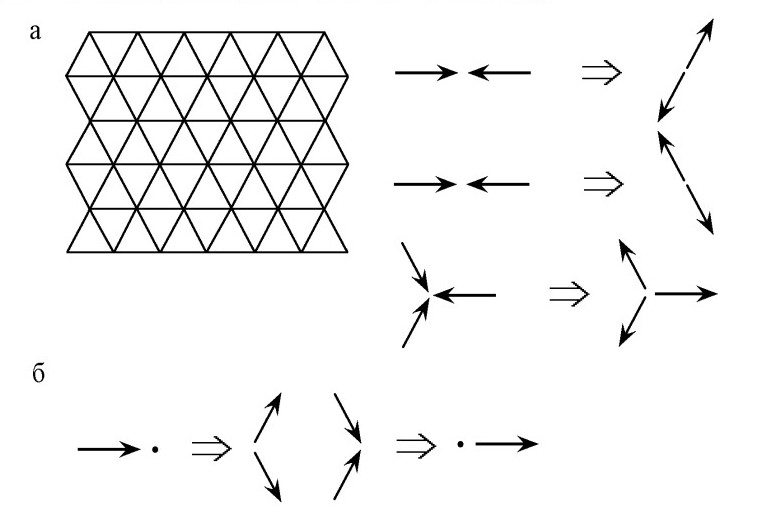


Figure 2: Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели FHP-I(а), некоторые возможные столкновения с участием покоящихся частиц в модели FHP-III(б)

Модель с 9 направлениями скорости является модификацией модели решеточных газов, предназначенной для улучшения изотропности и введения понятия температуры в систему. Она использует квадратную сетку, но расширяет возможные направления движения частиц, позволяя им перемещаться не только по горизонтали и вертикали, но и по диагонали. Кроме того, вводится понятие покоящихся частиц.

## 2.4 Модель с 9 направлениями скорости

### 2.4.1 Основные характеристики модели с 9 направлениями скорости

1. **Решетка**: используется двумерная квадратная решетка, как и в модели HPP.
2. **Частицы**: в каждом узле решетки могут находиться частицы, движущиеся в одном из восьми направлений (вверх, вниз, вправо, влево, и по четырем диагоналям), а также покоящиеся частицы.
3. **Скорость**:
   * Частицы, движущиеся по горизонтали и вертикали, имеют скорость .
   * Частицы, движущиеся по диагонали, имеют скорость .
   * Покоящиеся частицы имеют нулевую скорость.
4. **Направления движения**:
   * 4 направления с единичной скоростью: вправо, влево, вверх, вниз.
   * 4 направления с диагональной скоростью: вправо-вверх, вправо-вниз, влево-вверх, влево-вниз.
   * 1 состояние покоя (рис. [3](#fig:003)).

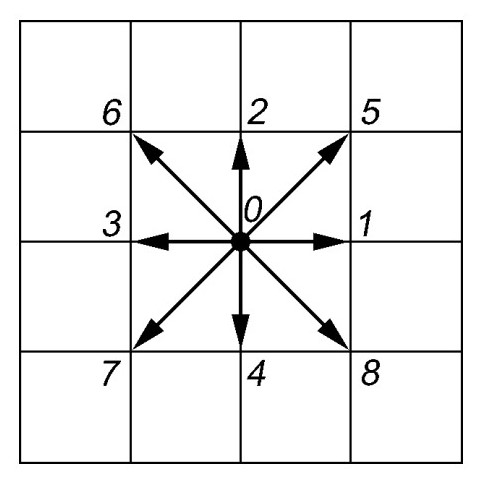


Figure 3: Возможные направления движения частиц в модели с девятью направлениями

1. **Этапы эволюции**:
   * **Распространение (Streaming)**: частицы перемещаются в соседние узлы в соответствии со своими скоростями.
   * **Столкновения (Collision)**: в узлах происходят столкновения частиц, при которых сохраняются количество частиц, импульс и энергия.
2. **Правила столкновений**: правила столкновений должны обеспечивать сохранение массы, импульса и энергии. Это достигается за счет более сложных правил столкновений по сравнению с моделями HPP и FHP.
3. **Кодирование состояний**: состояние каждого узла решетки кодируется битами. Поскольку имеется 9 возможных состояний (8 направлений движения и состояние покоя), для кодирования состояния узла требуется 9 битов.

### 2.4.2 Физические параметры

В модели с 9 направлениями скорости можно определить макроскопические параметры, такие как плотность, полная энергия и температура.

1. **Плотность** ():
   * — число покоящихся частиц.
   * — число частиц с единичной скоростью.
   * — число частиц со скоростью .
2. **Полная энергия** ():
   * — давление.
   * — макроскопическая скорость.
3. **Температура** ():

### 2.4.3 Преимущества модели с 9 направлениями скорости

1. **Изотропность**: добавление диагональных направлений движения улучшает изотропность модели по сравнению с моделью HPP.
2. **Возможность введения температуры**: наличие различных скоростей позволяет ввести понятие температуры, что важно для моделирования тепловых процессов.
3. **Более реалистичное поведение**: модель с 9 направлениями скорости более точно описывает гидродинамические свойства жидкостей и газов по сравнению с более простыми моделями.

### 2.4.4 Недостатки модели с 9 направлениями скорости

1. **Сложность реализации**: добавление новых направлений движения и покоящихся частиц усложняет реализацию модели по сравнению с моделями HPP и FHP.
2. **Вычислительные затраты**: большее число состояний и более сложные правила столкновений увеличивают вычислительные затраты [1].

## 2.5 Решеточное уравнение Больцмана (LBE, Lattice Boltzmann Equation)

Решеточное уравнение Больцмана (LBE) — это вычислительный метод, используемый для моделирования широкого спектра физических процессов, включая гидродинамику, фазовые переходы и химические реакции. LBE является более общим подходом по сравнению с моделями решеточных газов (LGA), такими как HPP, FHP-I и FHP-III, и предоставляет более точное и гибкое средство моделирования сложных систем [1,2].

### 2.5.1 Основные характеристики LBE

1. **Дискретизация пространства и времени**: LBE, как и LGA, дискретизует пространство и время. Пространство представляется в виде решетки (обычно квадратной или треугольной), а время разбивается на дискретные шаги.
2. **Функция распределения**: в отличие от LGA, где отслеживаются отдельные частицы, LBE работает с функцией распределения , которая описывает вероятность нахождения частиц в узле в момент времени , движущихся в направлении .
3. **Скорости**: частицы могут двигаться в нескольких дискретных направлениях , определяемых геометрией решетки.
4. **Основное уравнение**: эволюция системы описывается уравнением:
   * — одночастичная функция распределения.
   * — скорость частиц.
   * — столкновительный член, описывающий изменения функции распределения из-за столкновений частиц.
5. **Столкновительный член**: описывает, как частицы взаимодействуют друг с другом. Наиболее часто используется модель BGK (Bhatnagar-Gross-Krook):
   * — время релаксации, характеризующее скорость приближения системы к равновесию.
   * — равновесная функция распределения, описывающая состояние системы в равновесии.
6. **Равновесная функция распределения**: обычно выбирается в виде разложения по полиномам Эрмита или в другом подходящем виде, чтобы обеспечить выполнение законов сохранения. Например, для модели D2Q9 (двумерная модель с 9 скоростями) равновесная функция распределения может быть записана как:
   * — весовые коэффициенты, зависящие от направления скорости.
   * — плотность.
   * — макроскопическая скорость.
   * — скорость звука в решеточной модели.
7. **Макроскопические параметры**: макроскопические параметры, такие как плотность и скорость, вычисляются через функции распределения:

### 2.5.2 Преимущества LBE

1. **Гибкость**: LBE может быть использован для моделирования широкого спектра физических явлений, включая гидродинамику, теплопередачу, фазовые переходы, химические реакции и многофазные потоки.
2. **Эффективность**: LBE обладает хорошей параллелизуемостью, что позволяет эффективно использовать многопроцессорные системы для моделирования больших систем.
3. **Точность**: LBE обеспечивает более точное описание гидродинамических свойств по сравнению с более простыми моделями LGA.
4. **Простота реализации граничных условий**: LBE позволяет легко реализовывать сложные граничные условия.

### 2.5.3 Недостатки LBE

1. **Ограничения по скорости**: LBE обычно работает хорошо для низкоскоростных течений. Для моделирования высокоскоростных течений требуются специальные модификации.
2. **Вычислительные затраты**: LBE требует больше вычислительных ресурсов по сравнению с простыми моделями LGA [1].

### 2.5.4 Применение LBE

LBE находит широкое применение в различных областях науки и техники, включая:

1. **Гидродинамика**: моделирование течений жидкостей и газов в сложных геометриях.
2. **Аэродинамика**: моделирование обтекания тел потоками воздуха.
3. **Пористые среды**: моделирование течений в пористых материалах.
4. **Медицина**: моделирование кровотока в сосудах.
5. **Химическая инженерия**: моделирование химических реакций в растворах.
6. **Моделирование фазовых переходов**: моделирование процессов конденсации, испарения и кристаллизации.

Модель с взаимодействием между частицами используется для моделирования фазовых переходов и разделения фаз. В этой модели к обычным алгоритмам решеточных газов или решеточного уравнения Больцмана добавляются силы, действующие между частицами, находящимися в разных узлах решетки.

## 2.6 Модель с взаимодействием между частицами

### 2.6.1 Основные характеристики модели с взаимодействием между частицами

1. **Взаимодействие между частицами**: для описания жидкостей и газов вводятся силы взаимодействия между частицами. Эти силы могут быть как отталкивающими (для моделирования разделения веществ), так и притягивающими (для моделирования фазовых переходов жидкость-газ).
2. **Типы взаимодействий**:
   * **Отталкивание**: используется для моделирования разделения смеси веществ на компоненты. Частицы разных компонентов отталкиваются друг от друга, что приводит к их разделению.
   * **Притяжение**: используется для моделирования фазовых переходов, таких как конденсация пара в жидкость или вскипание перегретой жидкости. Частицы притягиваются друг к другу, образуя кластеры или капли.
3. **Влияние внешних сил**: внешние силы могут быть учтены через изменение скорости частиц:
   * — изменение скорости.
   * — внешняя сила.
   * — шаг времени.
   * — плотность.

* Уравнение Больцмана модифицируется добавкой:
* где:
  + — изменение функции распределения, вызванное внешней силой.
  + — равновесная функция распределения.

1. **Моделирование фазовых переходов**: фазовые переходы моделируются через силы притяжения между соседними узлами:
   * — сила, действующая на узел .
   * — функция, зависящая от плотности в узле .
   * — константа, определяющая силу притяжения.
   * — вектор, указывающий направление к соседнему узлу.

### 2.6.2 Алгоритм моделирования с взаимодействием

1. **Инициализация**:
   * Создание решетки (квадратной или треугольной).
   * Установка начальных условий (плотность, скорость, температура).
   * Определение параметров взаимодействия (сила притяжения или отталкивания).
2. **Распространение (Streaming)**: частицы перемещаются в соседние узлы в соответствии со своими скоростями.
3. **Вычисление сил взаимодействия**: для каждого узла вычисляется сила, действующая на него со стороны соседних узлов.
4. **Столкновения (Collision)**: в узлах происходят столкновения частиц, при которых сохраняются количество частиц, импульс и энергия. Учитывается влияние сил взаимодействия на изменение скоростей частиц.
5. **Обновление скоростей**: скорости частиц изменяются под действием сил взаимодействия и внешних сил.
6. **Повторение шагов 2-5**: процесс повторяется до достижения стационарного состояния или заданного времени моделирования.

### 2.6.3 Применение

* **Моделирование конденсации и испарения**: позволяет изучать процессы образования капель из пересыщенного пара и вскипания перегретой жидкости.
* **Разделение фаз (спинодальная декомпозиция)**: моделирование разделения смеси на фазы с разными свойствами.
* **Моделирование многофазных потоков**: изучение течений, в которых одновременно присутствуют несколько фаз (например, жидкость и газ) [4].

## 2.7 Модель с несколькими компонентами

Модель с несколькими компонентами используется для моделирования смесей веществ и химических реакций. В этой модели каждый компонент представлен своим набором частиц или функций распределения, и учитываются взаимодействия между различными компонентами [1].

### 2.7.1 Основные характеристики модели с несколькими компонентами

1. **Несколько типов частиц**: в системе присутствует несколько видов частиц, каждый из которых соответствует определенному компоненту смеси.
2. **Функции распределения для каждого компонента**: если используется подход LBE, то для каждого компонента определяется своя функция распределения , где — индекс компонента.
3. **Взаимодействия между компонентами**: учитываются силы взаимодействия между различными компонентами смеси. Эти силы могут быть как отталкивающими (для моделирования разделения фаз), так и притягивающими (для моделирования образования соединений).
4. **Химические реакции**: в модели могут быть реализованы химические реакции между компонентами. Для этого вводятся правила, определяющие, как и с какой вероятностью частицы разных компонентов могут превращаться друг в друга.
5. **Уравнения эволюции**: эволюция системы описывается набором уравнений, учитывающих как гидродинамические процессы, так и химические реакции.

### 2.7.2 Алгоритм моделирования с несколькими компонентами

1. **Инициализация**:
   * Создание решетки (квадратной или треугольной).
   * Установка начальных условий (плотность, скорость, концентрация каждого компонента).
   * Определение параметров взаимодействия между компонентами.
   * Задание правил химических реакций (если они есть).
2. **Распространение (Streaming)**: частицы каждого компонента перемещаются в соседние узлы в соответствии со своими скоростями.
3. **Вычисление сил взаимодействия**: для каждого узла вычисляются силы, действующие на частицы каждого компонента со стороны других компонентов.
4. **Столкновения (Collision)**: в узлах происходят столкновения частиц, при которых сохраняются количество частиц, импульс и энергия для каждого компонента. Учитывается влияние сил взаимодействия на изменение скоростей частиц.
5. **Химические реакции**: в узлах происходят химические реакции между компонентами в соответствии с заданными правилами. В результате этих реакций изменяется количество частиц каждого компонента.
6. **Обновление скоростей**: скорости частиц каждого компонента изменяются под действием сил взаимодействия и внешних сил.
7. **Повторение шагов 2-6**: процесс повторяется до достижения стационарного состояния или заданного времени моделирования [5].

### 2.7.3 Математическое описание

Для LBE с несколькими компонентами уравнение эволюции выглядит следующим образом:

* — функция распределения для компонента в узле в момент времени .
* — скорость частиц.
* — столкновительный член, описывающий изменения функции распределения из-за столкновений и химических реакций.

Столкновительный член может включать в себя как релаксацию к равновесию, так и члены, описывающие химические реакции:

### 2.7.4 Применение

* **Моделирование смешивания жидкостей**: позволяет изучать процессы смешивания различных жидкостей и газов.
* **Разделение веществ**: моделирование разделения смеси на компоненты (например, разделение нефти на фракции).
* **Моделирование химических реакций**: изучение кинетики химических реакций в растворах и газах.
* **Реакция-диффузия**: моделирование процессов, в которых химические реакции сочетаются с диффузией веществ [4].

# 3 Заключительная часть

## 3.1 Заключение

Модели решеточных газов и решеточное уравнение Больцмана представляют собой эффективные инструменты для моделирования газовых потоков, требующие меньше вычислительных ресурсов по сравнению с традиционными методами.

Различные модели обладают разными характеристиками и применимы для разных задач. — простая базовая модель, и улучшают симметрию и изотропность, а модель с 9 направлениями скорости позволяет вводить понятие температуры. является наиболее общим и гибким подходом.

Выбор конкретного алгоритма зависит от требований к точности, вычислительным ресурсам и специфике решаемой задачи.

## 3.2 Выводы

Во время выполнения второго этапа группового проекта мы сделали теоретическое описание алгоитмов, которые могут быть использованы для моделирования решеточного уравнения Больцмана.

# 4 Список литературы

1. Медведев Д.А., др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2010. С. 101.

2. Куперштох А.Л. Моделирование течений с границами раздела жидкость-пар методом решеточных уравнениях Больцмана // Вестник НГУ. Сер. Математика, механика и информатика. 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.

3. Chen S. и др. A lattice gas model with temperature // Physica D. 1989. Т. 37. С. 42–59.

4. Чащин Г.С. [Метод решеточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений](https://doi.org/10.20948/prepr-2021-99): 99. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2021. С. 31.

5. Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y. Lattice Gas Automata for the Navier-Stokes Equation // Phys. Rev. Lett. 1986. Т. 56, № 14. С. 1505–1508.

6. Succi S. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Oxford University Press, 2001.