

# **Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана**

**Отчёт по второму 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

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>5</b>
1.1	Цель проекта . . . . .	5
1.2	Задачи второго этапа проекта . . . . .	5
1.3	Актуальность . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Основная часть</b>	<b>6</b>
2.1	Модель НРР (Hardy–Pomeau–Pazzis) . . . . .	6
2.1.1	Основные характеристики модели НРР . . . . .	6
2.1.2	Математическое описание . . . . .	8
2.1.3	Недостатки модели НРР . . . . .	9
2.2	Модель FHP-I (Frisch–Hasslacher–Pomeau) . . . . .	9
2.2.1	Основные характеристики модели FHP-I . . . . .	9
2.2.2	Преимущества модели FHP-I . . . . .	10
2.2.3	Недостаток модели FHP-I . . . . .	11
2.3	Модель FHP-III . . . . .	11
2.3.1	Основные характеристики модели FHP-III . . . . .	11
2.3.2	Преимущества модели FHP-III . . . . .	13
2.3.3	Недостаток модели FHP-III . . . . .	13
2.4	Модель с 9 направлениями скорости . . . . .	15
2.4.1	Основные характеристики модели с 9 направлениями скорости . . . . .	15
2.4.2	Физические параметры . . . . .	17
2.4.3	Преимущества модели с 9 направлениями скорости . . . . .	17
2.4.4	Недостатки модели с 9 направлениями скорости . . . . .	18
2.5	Решеточное уравнение Больцмана (LBE, Lattice Boltzmann Equation) . . . . .	18
2.5.1	Основные характеристики LBE . . . . .	18
2.5.2	Преимущества LBE . . . . .	20
2.5.3	Недостатки LBE . . . . .	21
2.5.4	Применение LBE . . . . .	21
2.6	Модель с взаимодействием между частицами . . . . .	22
2.6.1	Основные характеристики модели с взаимодействием между частицами . . . . .	22
2.6.2	Алгоритм моделирования с взаимодействием . . . . .	23
2.6.3	Применение . . . . .	24
2.7	Модель с несколькими компонентами . . . . .	24
2.7.1	Основные характеристики модели с несколькими компонентами . . . . .	24

2.7.2	Алгоритм моделирования с несколькими компонентами .	25
2.7.3	Математическое описание . . . . .	26
2.7.4	Применение . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Заключительная часть</b>	<b>28</b>
3.1	Заключение . . . . .	28
3.2	Выводы . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Список литературы</b>	<b>29</b>

## Список иллюстраций

2.1	Примеры перемещений частиц в модели НРР . . . . .	7
2.2	Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели FHP-I(a), некоторые возможные столкновения с участием покоя- щихся частиц в модели FHP-III(б) . . . . .	14
2.3	Возможные направления движения частиц в модели с девятью направлениями . . . . .	16

# **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 ( $\Delta x$ ) и шаг времени ( $\Delta t$ ) 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 НРР 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. 2.1).

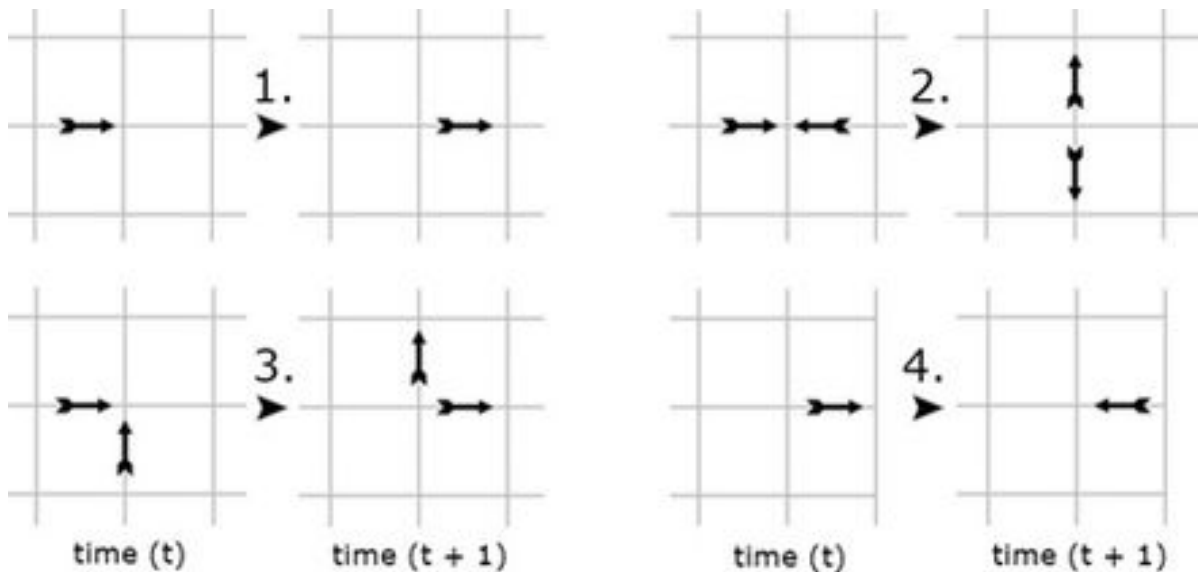


Рис. 2.1: Примеры перемещений частиц в модели НРР

7. **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  $d_1, d_2, d_3, d_4$ . Тогда:

- $d_1 = 0001_2 = 1$
- $d_2 = 0010_2 = 2$
- $d_3 = 0100_2 = 4$
- $d_4 = 1000_2 = 8$

Основные операции для работы с состояниями узлов:

1. **Добавление частицы:** добавление к состоянию  $S$  частицы с направлением скорости  $d_k$ :

$$S \text{ OR } d_k \rightarrow S$$

2. **Проверка наличия частицы:** проверка, есть ли в состоянии  $S$  частица с направлением скорости  $d_k$ :

$$\text{if } (S \text{ AND } d_k) \neq 0$$

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



### 2.1.3 Недостатки модели НРР

1. **Отсутствие симметрии:** квадратная решетка с четырьмя направлениями скорости недостаточно симметрична, что приводит к анизотропии в макроскопических свойствах.
2. **Нефизичное поведение:** модель НРР 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 НРР, 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 НРР, 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 НРР. 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 НРР.

### 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 НРР.

## 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. 2.2).

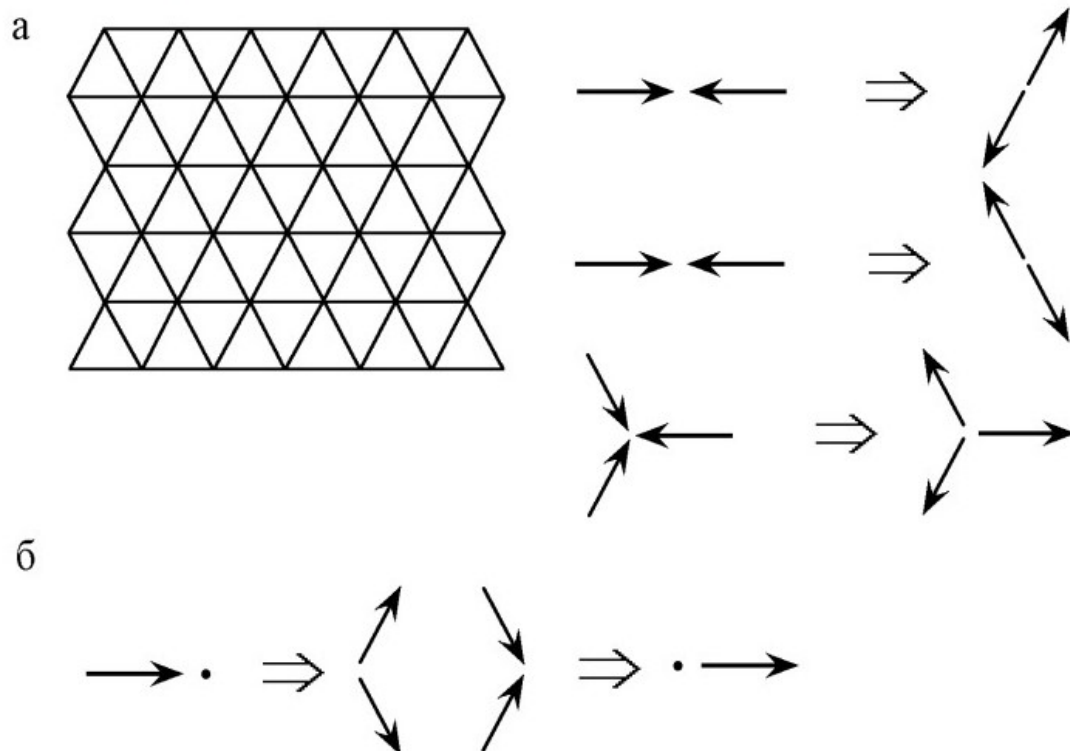


Рис. 2.2: Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели FHP-I(a), некоторые возможные столкновения с участием покоящихся частиц в модели FHP-III(б)

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 НРР.
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  $v_1 = 1$ .
  - Частицы, движущиеся по диагонали, имеют скорость  $v_2 = \sqrt{2}$ .
  - 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. 2.3).

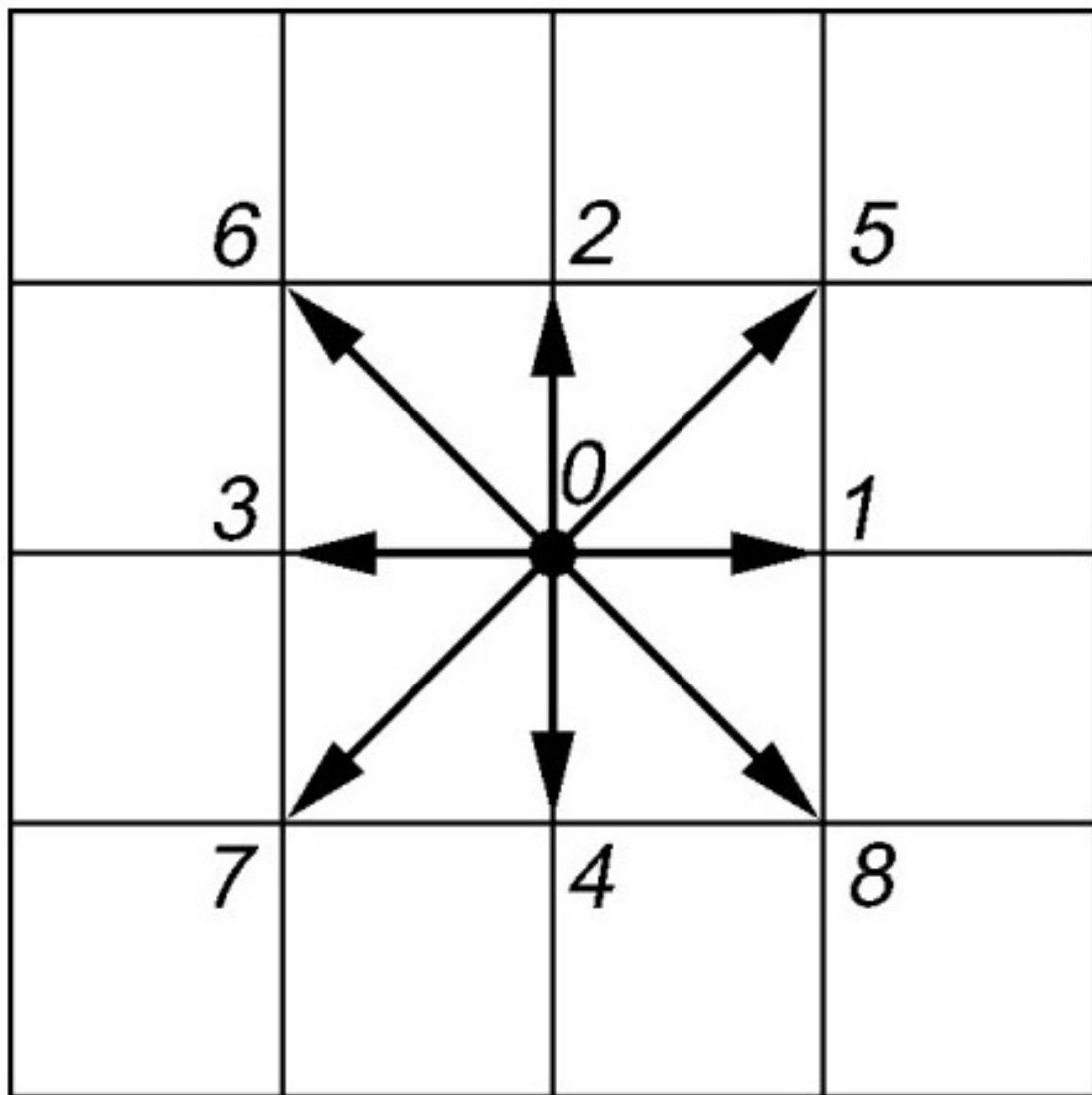


Рис. 2.3: Возможные направления движения частиц в модели с девятью направлениями

##### 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, импульс и энергия.



6. **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.
7. **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 ( $\rho$ ):

$$\rho = n_0 + n_1 + n_2$$

- $n_0$  — число покоящихся частиц.
- $n_1$  — число частиц с единичной скоростью.
- $n_2$  — число частиц со скоростью  $\sqrt{2}$ .

### 2. Полная энергия ( $E$ ):

$$E = P + \frac{\rho u^2}{2} = \sum_i n_i \frac{v_i^2}{2} = \frac{n_1}{2} + n_2$$

- $P$  — давление.
- $u$  — макроскопическая скорость.

### 3. Температура ( $T$ ): $T = \frac{P}{\rho}$

## 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 находящихся 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, дискретизирует 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  $f_k(x, t)$ , которая описывает вероятность нахождения частиц в узле  $x$  в момент времени  $t$ , движущихся в направлении  $k$ .
3. **Скорости:** частицы могут двигаться в нескольких дискретных направлениях  $c_k$ , определяемых геометрией решетки.
4. **Основное уравнение:** эволюция системы описывается уравнением:

$$f_k(x + c_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Omega_k(x, t)$$

- $f_k(x, t)$  — одночастичная функция распределения.
  - $c_k$  — скорость частиц.
  - $\Omega_k(x, t)$  — 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):

$$\Omega_k = \frac{1}{\tau}(f_k^{eq} - f_k)$$

- $\tau$  — время релаксации, характеризующее скорость приближения системы к равновесию.
  - $f_k^{eq}$  — 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:

$$f_k^{eq} = w_k \rho \left[ 1 + \frac{c_k \cdot u}{c_s^2} + \frac{(c_k \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2} \right]$$

- $w_k$  — весовые коэффициенты, зависящие от направления скорости.
- $\rho$  — плотность.
- $u$  — макроскопическая скорость.
- $c_s$  — скорость звука в решеточной модели.

7. **Макроскопические параметры:** макроскопические параметры, такие как плотность и скорость, вычисляются через функции распределения:

$$\rho = \sum_k f_k$$

$$\rho u = \sum_k f_k c_k$$

## 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:

$$\Delta u = \frac{F \Delta t}{\rho}$$

- $\Delta u$  — изменение скорости.
- $F$  — внешняя сила.
- $\Delta t$  — шаг времени.
- $\rho$  — плотность.

Уравнение Больцмана модифицируется добавкой:

$$f_k(x + c_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Omega_k(x, t) + \Delta f_k$$

где:

$$\Delta f_k = f_k^{eq}(\rho, u + \Delta u) - f_k^{eq}(\rho, u)$$

- $\Delta f_k$  — изменение функции распределения, вызванное внешней силой.
- $f_k^{eq}$  — равновесная функция распределения.

4. **Моделирование фазовых переходов:** фазовые переходы моделируются через силы притяжения между соседними узлами:

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

- $F(x)$  — сила, действующая на узел  $x$ .
- $\psi(\rho(x))$  — функция, зависящая от плотности в узле  $x$ .
- $G_k > 0$  — константа, определяющая силу притяжения.
- $e_k$  — 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  $f_{k,i}(x, t)$ , где  $i$  — 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:

$$f_{k,i}(x + c_k \Delta t, t + \Delta t) = f_{k,i}(x, t) + \Omega_{k,i}(x, t)$$

- $f_{k,i}(x, t)$  — функция распределения для компонента  $i$  в узле  $x$  в момент времени  $t$ .
- $c_k$  — скорость частиц.
- $\Omega_{k,i}(x, t)$  — 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:

$$\Omega_{k,i} = \Omega_{k,i}^{collision} + \Omega_{k,i}^{reaction}$$

## 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 Заключение

### 3.1 Заключение

Модели решеточных газов ( $LGA$ ) и решеточное уравнение Больцмана ( $LBE$ ) 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.  $HPP$  — простая базовая модель,  $FHP - I$  и  $FHP - III$  улучшают симметрию и изотропность, а модель с 9 направлениями скорости позволяет вводить понятие температуры.  $LBE$  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 алгоритмов, 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 уравнений 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. Чашин Г.С. Метод решеточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений: 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.