Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

Групповой проект. Этап 1

Абакумова О.М., Астраханцева А.А., Ганина Т.С., Ибатулина Д.Э.

21 марта 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Вводная часть

Состав исследовательской команды

Студенты группы НФИбд-01/02-22:

- Абакумова Олеся Максимовна
- Астраханцева Анастасия Александровна
- Ганина Таисия Сергеевна
- Ибатулина Дарья Эдуардовна

Постановка проблемы

Моделирование газовых потоков и жидкостей традиционными методами, такими как уравнения Навье-Стокса, требует значительных вычислительных ресурсов.

Методы LGA и LBE предлагают альтернативу, упрощая вычисления при сохранении физической достоверности.

Актуальность

1. Исследования сложных многокомпонентных течений.
2. Течений с фазовыми переходами и химическими реакциями.
3. Создания высокопроизводительных параллельных алгоритмов.

Объект и предмет исследования

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

Цели и задачи

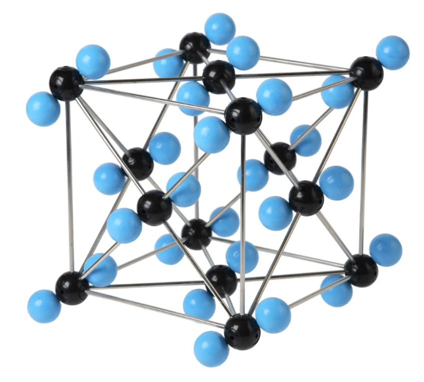
Цель работы

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

1. **Формулировка научной проблемы**
2. **Теоретическое описание задачи**
3. **Описание модели**

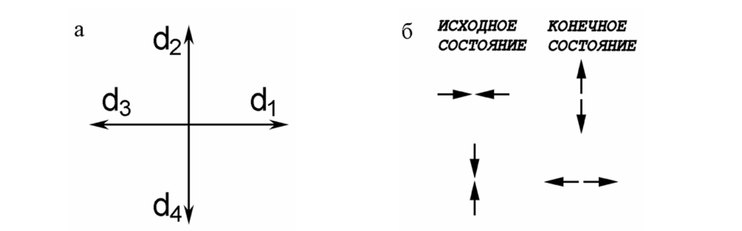
Основная часть

Квадратная решетка, в узлах - частицы единичной массы. Расстояние между узлами Δx и шаг по времени Δt принимаются за единицу. В каждом узле - не более одной частицы с данным направлением скорости.



Модель HPP (Hardy–Pomeau–Pazzis)

- Используется квадратная решетка.
- Частицы двигаются в соседние узлы.
- Соударения происходят с сохранением количества частиц и их полного импульса.
- Нетривиальные соударения: скорости частиц поворачиваются на 90 градусов.

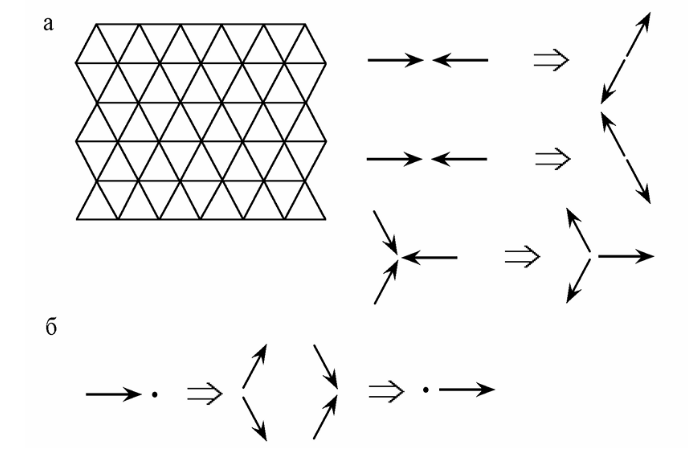


Кодирование состояний в HPP

- Наличие частицы с направлением скорости кодируется битом (0 — нет, 1 — есть).
- Состояние каждого узла записывается в четырех битах.
- Примеры операций:
  - Добавление к состоянию S частицы с направлением скорости d_k:
    S or $d_k \rightarrow S$
  - Проверка наличия в S частицы с направлением скорости d_k:
    if $(S$ and $d_k) \neq 0$
- Операции сводятся к целочисленной арифметике: высокая скорость, отсутствие ошибок.

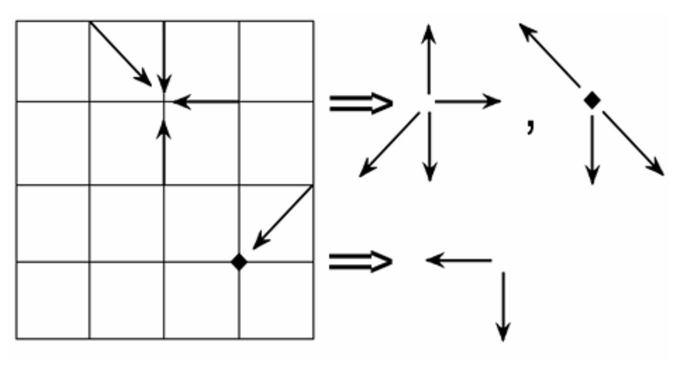
Модели FHP-I, FHP-III

- **FHP-I**: Используется треугольная сетка с 6 направлениями скорости.
  - Обладает большей симметрией по сравнению с моделью HPP.
- **FHP-III**: Включает в себя покоящиеся частицы.



Квадратная решетка с движением по диагоналям (1)

- Движение по диагоналям (скорость $\sqrt{2}$).
- 9 направлений скорости.
- Возможен ЗСЭ, можно ввести температуру.
- Параметры:
    - Число покоящихся частиц: n_0
    - Число частиц с единичной скоростью: n_1
    - Число частиц со скоростью $\sqrt{2}$: n_2



Квадратная решетка с движением по диагоналям (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: $T = \frac{P}{\rho}$

Решеточное уравнение Больцмана (LBE)

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

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

- f_k – одночастичная функция распределения.
- c_k – скорость частиц.
- Ω_k – столкновительный член.

1. Скорости частиц c_k должны удовлетворять условию $c_k \Delta t = e_k$, где e_k — векторы, соединяющие узел с соседними. Обычно принимается $\Delta t = 1$.
2. Макроскопические параметры:
    - Плотность: $\rho = \sum_k f_k$
    - Скорость: $\rho u = \sum_k f_k c_k$
3. Столкновительный член:
    - $\Omega_k = \frac{1}{\tau}(f_k^{eq} - f_k)$, где f_k^{eq} — равновесные функции распределения.

Преимущества LBE

- Хорошо описывает течения вязкой жидкости в пределе малых скоростей (число Маха $M = u/c_s \ll 1$).
- 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.

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:

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

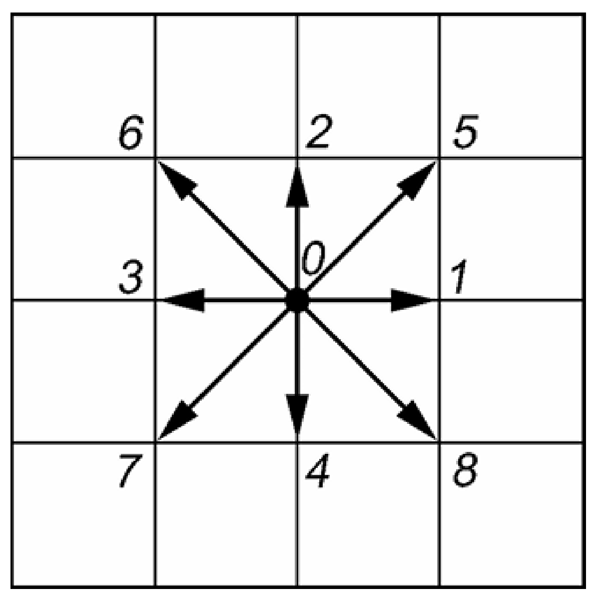
Коэффициенты $w_k \sim \exp(-c_k^2/2\theta)$ зависят только от модуля $|c_k|$.

Равновесные функции распределения для сетки с 9 направлениями

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

где $a = \frac{(\Delta t/h)^2}{\theta} = 3, \quad b = \frac{(\Delta t/h)^4}{2\theta^2} = \frac{9}{2}, \quad d = \frac{(\Delta t/h)^2}{2\theta} = \frac{3}{2}$

Двумерная модель на квадратной сетке с 9 направлениями



Модели LGA со взаимодействием между частицами

- Несмешивающиеся решеточные газы:
    - Вводится отталкивание между частицами разного типа (например, “синими” и “красными”).
    - При достаточной силе отталкивания происходит разделение веществ.
- Модель LGA с переходом “жидкость-газ”:
    - Вводится притяжение между частицами на некотором расстоянии.
    - Импульсы частиц поворачиваются друг к другу, если это возможно.
    - При достаточно большой длине взаимодействия возможно сосуществование плотной и разреженной фаз.

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: $f_k(x + c_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Omega_k(x, t) + \Delta f_k$. Добавка равна разнице равновесных функций распределения при одной и той же плотности, но с разными скоростями: $\Delta f_k = f_k^{eq}(\rho, u + \Delta u) - f_k^{eq}(\rho, u)$.

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

Модель LBE с внешними силами и фазовыми переходами. Фазовые переходы

Жидкость $\leftrightarrow$ Газ Твердое тело $\leftrightarrow$ Жидкость

Сила взаимодействия между частицами в соседних узлах:
$F(x) = \psi(\rho(x)) \sum_k G_k e_k \psi(\rho(x + e_k))$, где:

- $G_k > 0$: притяжение
- $G_k < 0$: отталкивание
- G_k выбираются для изотропии силы
- $\psi(\rho)$: “эффективная плотность”

Пример: квадратная сетка

$G_{1-4} = G_0 > 0, G_{5-8} = \frac{G_0}{4}$

- Уравнение состояния: $P = \rho\theta - \alpha G_0 \psi^2(\rho)$
- Эффективная плотность: $\Phi(\rho, T) = \sqrt{\rho\theta - P(\rho, T)}$
- Сила, действующая на вещество. Одномерный случай: $F(x) = \Phi(x)[\Phi(x+1) - \Phi(x-1)]$
- Сила, действующая на вещество. Двумерный случай: $F(x) = \frac{2}{3}\Phi(x)\sum_k \frac{G_k}{G_0}\Phi(x+e_k)e_k$

Смешивание или разделение двух разных веществ.

$f_{k,s}$ - функции распределения для каждого вещества (s = 1 или 2).

- Столкновительный член $\Omega_{k,s} = \frac{f_{k,s} - f^{eq}_{k,s}(\rho_s, u)}{\tau_s}$
- Плотности и скорости каждого вещества $\rho_s = \sum_k f_{k,s}$ $\rho_s u_s = \sum_k f_{k,s} c_k$
- Общая плотность и скорость $\rho = \rho_1 + \rho_2$ $u = \frac{\sum_s \frac{\rho_s u_s}{\tau_s}}{\sum_s \frac{\rho_s}{\tau_s}}$

Хим. реакции - процессы превращения одних веществ в другие.

Общая 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 с учетом сил:
  $f_k(x + c_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Omega_k(x, t) + \Delta f_k$
- Добавка к функциям распределения $\Delta f_k = f_k^{eq}(\rho, u + \Delta u) - f_k^{eq}(\rho, u)$
- Физическая скорость вещества $u^* = \frac{u + (u + \Delta u)}{2} = u + \frac{\Delta u}{2}$

Заключение

Выводы

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

Список литературы

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 уравнениях 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. Чащин Г.С. Метод решёточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 99. 31 с..