Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

Групповой проект. Этап 2

Команда №4 Абакумова О.М., Астраханцева А.А., Ганина Т.С., Ибатулина Д.Э.

11 апреля 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.

Рассмотрим основные алгоритмы и модели, используемые для решения задач с применением LGA и LBE.

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

Цель

Исследовать алгоритмы решения задачи с применением LGA и LBE.

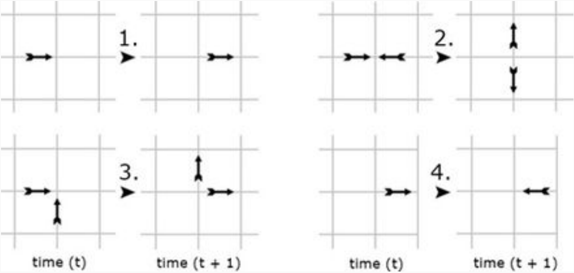
Основная часть

Модель HPP (Hardy–Pomeau–Pazzis). Описание

Модель HPP (Hardy-Pomeau-Pazzis) представляет собой дискретную систему, где пространство и время дискретизованы, а частицы двигаются по узлам квадратной решетки.

Основные характеристики

1. **Решетка**: Двумерная квадратная
2. **Частицы**: Единичной массы, 4 направления
3. **Скорость**: $\Delta x/\Delta t = 1$
4. **Принцип исключения**: ≤1 частица/направление
5. **Эволюция**: Распространение → Столкновения
6. **Столкновения**: Сохранение импульса, 90° поворот
7. **Кодирование**: 4-битный формат (1 бит/направление)



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

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

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.

Недостатки модели НРР

1. Отсутствие симметрии
2. Нефизичное поведение

Модель FHP-I. Описание

Модель FHP-I (Frisch-Hasslacher-Pomeau) — это улучшенная модель решеточных газов. Используется треугольная сетка и 6 направлений скорости.

Основные характеристики

1. **Решетка**: Двумерная треугольная сетка (6 направлений)
2. **Частицы**: Единичной массы, движение в 6 направлениях
3. **Скорость**: Аналогично HPP ($\Delta x/\Delta t = 1$)
4. **Принцип исключения**: ≤ 1 частица/направление
5. **Эволюция**:
    - Распространение → Столкновения
6. **Столкновения**:
    - 2-частичные (60° поворот)
    - 3-частичные (сохранение импульса)
7. **Кодирование**: 6-битный формат (1 бит/направление)

Преимущества и недостатки модели FHP-I

+: 1. Улучшенная симметрия

2. Реалистичное поведение

–: Сложность реализации

Модель FHP-III. Описание

Модель FHP-III — это расширение модели FHP-I. Происходит добавление покоящихся частиц.

Основные характеристики модели FHP-III

1. **Решетка**: 2D треугольная (6 направлений)
2. **Частицы**: Ед. массы; 6 движущихся + 1 покоящаяся
3. **Скорость**: Движущиеся - $\Delta x/\Delta t = 1$; покоящиеся - 0
4. **Принцип исключения**: ≤1 движущаяся/направление; ≤1 покоящаяся
5. **Эволюция**:
   - Распространение (движущиеся)
   - Столкновения (сохранение)
6. **Столкновения**:
   - 2 частицы → 60°
   - Частица + покой → изменение направления
   - Создание/уничтожение покоящейся
7. **Кодирование**: 7 бит (6 направлений + покой)

Сложность реализации

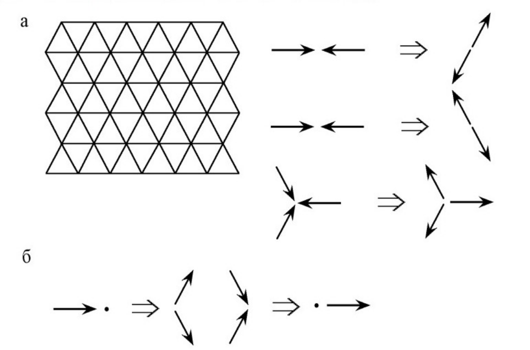
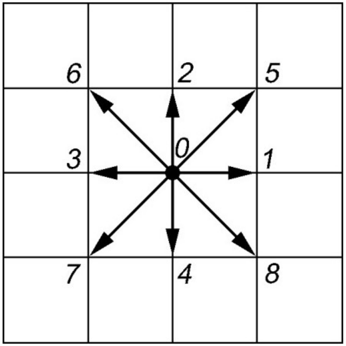


Рис. 1: Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели FHP-I(а), некоторые возможные столкновения с участием покоящихся частиц в модели FHP-III(б)

1. **Решетка**: 2D квадратная
2. **Частицы**: Движение по 8 направлениям + покой
3. **Скорость**: Горизонталь/вертикаль: $v_1 = 1$, Диагональ: $v_2 = \sqrt{2}$, Покой: 0
4. **Направления**: 4 (v_1), 4 (v_2): диагонали; 1 состояние покоя
5. **Эволюция**: Распространение, столкновения
6. **Столкновения**: Сохранение массы, импульса, энергии
7. **Кодирование**: 9 бит/узел (8 направлений + покой)



1. Плотность (ρ):

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

2. Полная энергия (E):

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

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

Преимущества и недостатки

Преимущества:

1. Изотропность
2. Возможность введения температуры
3. Более реалистичное поведение

Недостатки:

1. Сложность реализации
2. Вычислительные затраты

Решеточное уравнение Больцмана (LBE, Lattice Boltzmann Equation). Описание

Решеточное уравнение Больцмана (LBE) — метод моделирования гидродинамики, фазовых переходов и хим. реакций. В отличие от моделей решеточных газов (LGA), LBE — более точный и гибкий подход для моделирования сложных систем.

1. **Дискретизация**: Пространство и время дискретизируются (решетка + шаги).
2. **Функция распределения**: Вместо частиц используется функция распределения $f_k(x,t)$.
3. **Скорости**: Дискретные направления скоростей c_k.
4. **Основное уравнение**: $f_k(x + c_k\Delta t, t + \Delta t) = f_k(x,t) + \Omega_k(x,t)$
5. **Столкновительный член (BGK)**: $\Omega_k = \frac{1}{\tau}(f_k^{eq} - f_k)$
6. **Равновесная функция (D2Q9)**: $f_k^{eq} = w_k\rho\left[1 + \frac{c_k \cdot u}{c_s^2} + \frac{(c_k \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2}\right]$
7. **Макроскопические параметры**: $\rho = \sum_k f_k$, $\rho u = \sum_k f_k c_k$

Преимущества и недостатки LBE

Преимущества:

1. Гибкость
2. Эффективность
3. Точность
4. Простота реализации граничных условий

Недостатки:

1. Ограничения по скорости
2. Вычислительные затраты

Применение

1. Гидродинамика
2. Аэродинамика
3. Пористые среды
4. Медицина
5. Химическая инженерия
6. Моделирование фазовых переходов

1. Взаимодействие между частицами

2. Типы взаимодействий: Отталкивание; Притяжение

3. Влияние внешних сил: $\Delta u = \frac{F\Delta t}{\rho}$

Уравнение Больцмана модифицируется добавкой:

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

4. Моделирование фазовых переходов $F(x) = \psi(\rho(x)) \sum_k G_k e_k \psi(\rho(x + e_k))$

Алгоритм моделирования с взаимодействием

1. **Инициализация**:
    - Решетка (квадрат/треугольник)
    - Начальные условия (плотность, скорость, температура)
    - Параметры взаимодействия
2. **Распространение**: Перемещение частиц
3. **Вычисление сил**: Расчет взаимодействия между узлами
4. **Столкновения**: Учет сил взаимодействия
5. **Обновление скоростей**: Изменение скоростей под действием сил
6. **Повторение**: Шаги 2-5 до стационарного состояния

Применение

- Конденсация/испарение
- Разделение фаз
- Многофазные потоки

Модель с несколькими компонентами. Характеристики

1. **Несколько типов частиц**: Разные компоненты смеси
2. **Функции распределения**: $f_{k,i}(x,t)$ для каждого компонента
3. **Взаимодействия**: Силы между компонентами
4. **Химические реакции**: Превращения частиц
5. **Уравнения эволюции**: Учитывают гидродинамику и реакции

Алгоритм

1. **Инициализация**:
   - Решетка
   - Начальные условия (плотность, скорость, концентрация)
   - Параметры взаимодействия
   - Правила реакций
2. **Распространение**: Перемещение частиц
3. **Вычисление сил**: Взаимодействие между компонентами
4. **Столкновения**: Учет сил
5. **Химические реакции**: Изменение количества частиц
6. **Обновление скоростей**: Под действием сил
7. **Повторение**: Шаги 2-6 до стационарности

Для LBE с несколькими компонентами уравнение эволюции выглядит следующим образом:

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

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

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

Применение:

- Смешивание жидкостей
- Разделение веществ
- Моделирование реакций
- Реакция-диффузия

Заключительная часть

Заключение

Модели решеточных газов (LGA) и решеточное уравнение Больцмана (LBE) – эффективные инструменты для моделирования газовых потоков, требующие меньше ресурсов.

Разные модели применимы для разных задач:

- HPP - базовая модель
- $FHP-I$ и $FHP-III$ - улучшенная симметрия.
- 9 направлений - позволяет ввести температуру.
- LBE - наиболее гибкий подход.

Выбор алгоритма зависит от требований к точности, ресурсов и специфики задачи.

Выводы

В ходе второго этапа проекта сделано теоретическое описание алгоритмов для моделирования решеточного уравнения Больцмана.

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 LBE // 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 // Препринты. 2021. № 99. 31 с..
5. Frisch, Uriel, Brosl Hasslacher, and Yves Pomeau. “Lattice Gas Automata for the Navier-Stokes Equation.” Phys. Rev. Lett. 56, no. 14 (1986): 1505-1508.
6. Succi, Sauro. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Oxford University Press, 2001.