УДК 37.523.9

Анализ возможностей применения решеточных моделей для исследования процессов в газах при пониженном давлении

С.П. Бобков, В.Л. Соколов
ФГБОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
г. Иваново, Российская Федерация
E-mail: bsp@isuct.ru

Авторское резюме

Состояние вопроса: Возможность теоретически рассчитывать коэффициенты переноса, основываясь только на микроскопических моделях газовой среды, является необходимым условием адекватного понимания происходящих в газе термодинамических процессов. Модель сплошной среды при всей ее распространенности и удобстве использования далеко не всегда адекватно отражает происходящие в газе процессы. В частности, это становится заметным при пониженных давлениях газа, когда число Кнудсена, характеризующее отношение длины свободного пробега молекул к характерному размеру задачи, становится соизмеримым с единицей. В связи с этим актуальным является исследование других моделей газа, в частности дискретных решеточных моделей, которые по мере развития средств компьютерной поддержки начинают играть все более значительную роль в моделировании газодинамических процессов.

Материалы и методы: Предлагаемый подход основан на двухмерной модели решеточного газа, в которой используется ортогональная решетка с постоянным шагом.

Результаты: Рассмотрена HPP-модель решеточного газа. Показано, что эта модель дает достаточно адекватные результаты при описании поведения реального газа в условиях среднего вакуума.

Выводы: Проведенные компьютерные эксперименты показали, что HPP-модель решеточного газа чрезвычайно проста и эффективна при компьютерной реализации и ее можно рекомендовать для исследования процессов в реальных газах при пониженном давлении. Созданное с использованием указанной модели программное приложение позволяет моделировать исследуемый процесс.

Ключевые слова: решеточный газ, клеточный автомат, имитационное моделирование потоков, HPP-модель, средний вакуум, столкновения частиц, число Кнудсена, длина свободного пробега, вектор состояния.

Analysis of lattice gas models applicability to the investigation of processes in gases under reduced pressure

S.P. Bobkov, V.L. Sokolov
Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russian Federation
E-mail: bsp@isuct.ru

Abstract

Background: The possibility of theoretical calculations of transfer coefficients based only on microscopic models of the gaseous medium is an essential requirement for an adequate understanding of thermodynamic processes in gas. The continuum model, despite its spread and ease of use, cannot always adequately reflect the processes occurring in gas. It is particularly noticeable under lowered gas pressure, when the Knudsen number, characterized by the ratio of free length of molecules to the characteristic size of the problem, becomes comparable to one. This makes it important to study other models of gas, in particular the discrete lattice models, which play a more and more significant role in dynamic process modeling as computer support tools develop.

Materials and methods: The proposed approach employs a two-dimensional lattice gas model containing an orthogonal lattice with a constant step.

Results: The HPP-model of lattice gas has been studied. It was shown to be adequate for representing the results of real gas behavior in the conditions of medium vacuum.

Conclusions: The conducted computer experiments showed that the HPP model is very simple and effective for computer implementation and can be recommended for studies of processes in real gases under reduced pressure. The software application based on this model can be used to simulate this process.

Key words: lattice gas, cellular automata, simulation of flows, HPP model, medium vacuum, particle collision, Knudsen number, free path length, state vector.

DOI: 10.17588/2072-2672.2015.4.058-063

Введение. Внедрение современных средств компьютерной техники в практику исследований позволило резко увеличить эффективность математического моделирования процессов переноса энергии и массы в раз-

личных средах. В настоящее время широкое распространение получают дискретные модели таких процессов. В частности, весьма интересные результаты получены при использовании стохастических дискретных моделей [1, 2].

Отдельным классом дискретных динамических моделей для исследования процессов переноса являются клеточные автоматы [3].

Клеточный автомат является совокупностью элементов, которые в каждый из моментов дискретного времени могут находиться в одном из возможных состояний. Обновление состояний происходит синхронно на каждом шаге модельного времени. Этот процесс происходит согласно локальным правилам, причем новое состояние определяется предыдущими состояниями как рассматриваемого элемента, так и его ближайших соседей. Разновидностями клеточного автомата являются модели решеточных газов.

Модели решеточных газов строятся по следующим основным принципам.

Газ в моделях представлен некоторыми гипотетическими идеальными частицами единичной массы, которые могут двигаться между узлами некоторой пространственной решетки. Газ обладает следующими общими свойствами:

1. В каждый момент модельного времени частицы могут находиться только в узлах решетки.

2. Вектор скорости каждой частицы может быть направлен только в сторону одного из соседних узлов решетки.

3. В один и тот же момент времени в каждом узле решетки не может находиться более одной частицы с одинаковыми векторами скорости.

Вид пространственной решетки, а также правила перемещения и взаимодействия частиц на ней определяются конкретной принятой моделью.

В настоящее время существует несколько разновидностей моделей решеточных газов. Наиболее простой из них можно считать модель НРР, которая названа так по первым буквам фамилий ее авторов [4]. В данной модели рассматривается двухмерное течение газа на ортогональной пространственной решетке с постоянным шагом.

Исследования с помощью модели НРР показали, что она во многих случаях дает достаточно адекватные результаты, но в целом ее поведение отличается от поведения реальных жидкостей. В то же время, будучи весьма простой и удовлетворяющей требованиям законов сохранения, НРР-модель послужила основой для получения других моделей. Совершенствование моделей решеточных газов шло по пути их существенного изменения. Так, в модели FHP-1 процесс рассматривается на гексагональной решетке. Далее в моделях стали изменяться общие свойства решеточного газа: были введены в рассмотрение неподвижные частицы; добавлены дополнительные правила поведения частиц при столкновениях; увеличено число направлений векторов скоростей; предложены манипуляции с массой или количеством

гипотетических частиц в узлах решетки (модели FHP-III, FCHC, FHP-MP и др.) [5, 6, 7].

Анализ использования существующих моделей решеточных газов показал, что во всех случаях повышение адекватности модели достигается путем ее существенного усложнения, что неизбежно приводит к ухудшению экономичности модели. В то же время основная критика НРР-модели касалась ее непригодности для описания поведения вязких жидкостей в смысле не согласованности поведения модельного газа в макроскопическом пределе с уравнением Навье-Стокса. В этой связи возникла идея проверки возможности использования НРР-модели для описания поведения газов в условиях пониженного давления.

Модель НРР. В данной модели используется ортогональная пространственная решетка с шагом h . В соответствии с общими свойствами решеточных газов, в узлах решетки могут находиться частицы единичной массы. Каждая из частиц может иметь скорость c_i , направленную в один из соседних узлов, причем такую, что за один шаг по времени Δt она может переместиться только в данный соседний узел. При этом в отдельном узле не может быть двух и более частиц с одинаковой скоростью. Схема решетки и возможные направления скорости частиц в НРР модели представлены на рис. 1.

Рис. 1. Схема решетки и векторы скорости модели НРР

Векторы скорости частиц модели НРР можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned} c_{1,3} &= (\pm 1, 0), \\ c_{2,4} &= (0, \pm 1). \end{aligned} \quad (1)$$

Развитие процесса поведения газа на каждом шаге по времени происходит в два этапа. Первый этап – перемещение частицы в соседние узлы (этап сдвига). Второй этап – соударение частиц в узлах (этап столкновения).

Для НРР-модели принимаются следующие правила поведения частиц в узлах:

1. Если в какой-либо узел решетки одновременно попадают две частицы с разных сторон, то они сталкиваются.

2. При столкновении должно сохраняться количество частиц и их полный импульс.

Нетрудно показать, что для выполнения этих правил столкновения частиц должны происходить «лоб в лоб». При этом после столкновения скорости частиц должны развернуться на 90° . В остальных случаях можно считать,

что столкновения не происходит, т.е. частицы пролетают мимо друг друга.

Направления векторов скорости частиц до и после столкновений показаны на рис. 2.

Рис. 2. Столкновения частиц в модели НРР: а – до столкновения; б – после столкновения

Процесс моделирования представляет собой получение последовательности массивов скоростей частиц в узлах решетки в конкретный момент дискретного времени. Граничные условия в модели задаются следующим образом. Кроме основных узлов, которые описывают процесс внутри моделируемой области, в рассмотрение вводятся *узлы-стенки*. Их поведение отличается от поведения основных узлов, но только на этапе столкновения частиц. При попадании частицы в узел-стенку происходит ее отражение с изменением значения скорости на противоположное (непроникаемая стенка без проскальзывания) (рис. 3).

Рис. 3. Столкновения частицы со стенкой в модели НРР: а – до столкновения; б – после столкновения

Помимо узлов-стенок, в модели можно рассматривать и *узлы-источники* частиц. В них с некоторой вероятностью могут появляться частицы с определенными направлениями вектора скорости. Такой прием позволяет моделировать источники потока газа. Изменение давления можно моделировать, меняя среднюю концентрацию частиц в исследуемом пространстве.

Рассмотрим представление НРР-модели в терминах теории клеточных автоматов. Здесь газ представлен клеточным массивом, в котором состояние $\mathbf{s}$ каждой клетки (узла) представлено булевым вектором длиной 4, поскольку каждая клетка (узел) имеет 4-х соседей: $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_4)$. Каждый разряд вектора определяет наличие ($s_i = 1$) или отсутствие ($s_i = 0$) в клетке частицы, которая движется со скоростью c_i в сторону i -го соседа.

Функция переходов элементарного автомата внутренних клеток строится исходя из следующих соображений.

На этапе сдвига происходит изменение одного из разрядов вектора состояний, т. е. перемещение частицы. На этапе столкновения происходит изменение нескольких разрядов вектора состояний, чтобы направление движения частицы изменилось в соответствии с правилами функционирования модели. То есть при этом происходит замена одного состояния клетки $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_4)$ на другое $\mathbf{s}' = (s'_1, \dots, s'_4)$. Режим работы клеточного автомата – синхронный.

Для стенок и источников можно также соответствующим образом построить функции переходов. Функция переходов внутренних клеток должна обеспечивать выполнение законов сохранения массы и импульса:

$$\sum_{i=1}^4 s_i = \sum_{i=1}^4 s'_i \quad \sum_{i=1}^4 c_i = \sum_{i=1}^4 c'_i. \quad (2)$$

Следует учитывать, что в узлах-стенках происходит нарушение закона сохранения импульса из-за взаимодействия частицы со стенкой, а наличие узлов-источников нарушает закон сохранения количества частиц (массы).

Моделирование двумерной диффузии. В качестве достаточно наглядного примера возможностей НРР-модели решеточного газа рассмотрим наиболее простую модель диффузии, которая отображает процесс выравнивания концентрации вещества в пространстве путем хаотического движения частиц.

Рассматривался клеточный массив размера 800×800 узлов решетки. В исходном состоянии в центре массива имелась квадратная область, насыщенная частицами в количестве 40000 шт. На периферии массива частицы отсутствовали. Эволюция процесса проходила в соответствии с изложенными выше правилами. На рис. 4 показан результат моделирования за 1600 шагов дискретного времени. Число шагов проставлено под соответствующим изображением. Анализ полученных результатов показывает, что по мере развития процесса плотная квадратная область сначала превращается в размытую, а затем частицы заполняют уже все пространство достаточно равномерно. Можно указать, что полученная картина вполне соответствует физическим представлениям о реальном процессе диффузии.

Переход к реальным физическим условиям. Модели решеточных газов рассматривают процессы, протекающие с гипотетическими частицами в идеализированном дискретном пространстве. Значительно больший интерес представляет рассмотрение поведения изучаемой среды в реальных условиях. Поэтому необходимо найти возможность перейти от виртуальных переменных решеточного мира к действительным физическим величинам, которые имеют смысл в макроскопических объемах реальных веществ.

Рис. 4. Изменение состояния клеточного массива

При установлении связи между модельными параметрами процесса и их реальными аналогами следует помнить, что в реальном пространстве рассматриваемые физические величины (длина, скорость и пр.) имеют размерность. В то же время в решеточном дискретном пространстве с единичной длиной решетки и единичной скоростью все величины являются безразмерными. Это касается и модельной кинематической вязкости, которая тоже безразмерна, поскольку выражается через единичную длину и единичную скорость.

Для перехода от безразмерных модельных значений параметров к размерным физическим значениям требуется определить соответствующие коэффициенты перехода. Рассмотрим их получение с использованием идей, предложенных рядом авторов [6].

Пусть моделируется решеточный газ в двухмерном пространстве с линейным размером l_{mod} . При этом объект имеет следующие реальные физические параметры: характерный линейный размер – l м; кинематическая вязкость среды – ν м²/с. Тогда размерные коэффициенты перехода получаются, соответственно, следующими:

- для длины $k_l = l/l_{mod}$, м;
- для вязкости $k_\nu = \nu/\nu_{mod}$, м²/с;
- для скорости $k_u = k_l/k_\nu$, м/с;
- для времени $k_t = k_l^2/k_\nu$, с,

где индекс *mod* указывает на принадлежность параметра к модельному решеточному пространству.

Теперь легко вычислить соответствующие физические значения:

- реальное время $t = k_t t_{mod}$, с;

- реальная скорость $u = k_u u_{mod}$, м/с.

При вычислении коэффициентов перехода по зависимостям (3) наибольшую сложность вызывает определение модельного значения кинематической вязкости.

Модельная вязкость зависит от структуры пространства и может быть вычислена путем учета градиентов векторов скоростей, влияющих на величину внутреннего трения. В литературе можно встретить выражения для расчета модельной вязкости, полученные с использованием преобразований Галилея при переходе от модельного пространства к реальному [8]. В целом, можно привести следующее уравнение, выведенное в предположении об изотропии про-

странства и учитывающее его дискретность. Для двухмерного пространства и единичной скорости частиц оно имеет вид

$$\nu_{mod} = \frac{1}{2bd(1-2d)}, \quad (6)$$

где b – длина вектора состояний (количество направлений векторов скорости частиц); d – средняя плотность частиц в расчете на одно направление скорости.

Последняя величина находится следующим образом:

$$d = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=0}^b s_i}{b}, \quad (7)$$

где N – общее количество узлов решетки.

Адекватность описанного подхода была проверена серией модельных экспериментов. Во всех случаях исследовался клеточный массив размера 800×800, который имитировал реальный объект размера 0,01×0,01 м. Массив заполнялся частицами случайным образом. При этом в каждой серии опытов число частиц в объекте (средняя концентрация частиц) было разным. Тем самым моделировалось различное давление модельного газа. Моделирующая программа позволяла подсчитывать число столкновений частиц и длину их свободного пробега за шаг дискретного времени. Данные величины впоследствии усреднялись. Полученные данные использовались для вычисления коэффициентов перехода. Далее рассчитывалась реальная (физическая) длина свободного пробега, которая позволяла определить реальное давление газа. Учитывая, что каждому конкретному значению давления соответствует своя величина реальной кинематической вязкости, было нетрудно определить и этот физический параметр газа по справочной информации. С другой стороны, реальное значение вязкости можно подсчитать по уже найденным значениям длины свободного пробега частиц и их скорости, используя фундаментальные уравнения кинетической теории газов. Сравнивая значения данного параметра, полученные разными путями, можно в первом приближении оценить адекватность используемой модели газа.

Результаты модельных экспериментов сведены в таблицу. Анализ представленных данных показывает следующее. Во всех сериях опытов давление газа (8÷80 Па) лежит в области среднего вакуума.

Результаты модельных экспериментов

Номер серии опытов	Модельные величины			Число Кнудсена, Кп	Физические величины			
	Концентрация частиц	Частота соударений	Длина свободного пробега		Длина свободного пробега, мм	Давление, Па	Кинематическая вязкость, м ² /с	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0,0024	13,7	113,3	0,14	1,416	8	0,175	0,05
2	0,0075	112,5	42,91	0,05	0,536	10	0,14	0,045
3	0,0204	695	18,75	0,02	0,234	44	0,031	0,012
4	0,0694	4280	10,38	0,012	0,130	71	0,019	0,013
5	0,1594	11000	9,285	0,011	0,116	76	0,018	0,025

Число Кнудсена, рассчитанное как отношение средней длины свободного пробега частиц молекул между столкновениями к характерному размеру пространства, во всех рассмотренных случаях меньше единицы. Известно, что при $K_n \ll 1$ справедливо основное предположение гидроаэромеханики о сплошности среды, но если $K_n \gg 1$, поведение газа можно исследовать, не рассматривая столкновений частиц между собой, а учитывая лишь их удары о поверхность стенок. В наших опытах $10^{-3} < K_n < 1$, т. е. реализуются различные промежуточные режимы между свободномолекулярным и континуальным поведением газа [9].

Подсчитанные коэффициенты перехода позволили оценить реальные значения времени и скорости частиц. Так, подсчитанная скорость частиц составила от 200 до 400 м/с, что вполне согласуется с величиной ренальной скорости молекул газа. Величина модельного шага по времени оказалась близка к значению $0,5 \cdot 10^{-7}$ с.

Наконец, сравнивая справочные и расчетные значения кинематической вязкости (см. таблицу, колонки 8 и 9), можно заметить, что они различаются. Однако это числа одного порядка, что вполне приемлемо при использовании уравнений динамики разреженных газов.

Заключение

Проведенные компьютерные эксперименты показали, что НРР-модель решеточного газа может давать достаточно адекватные результаты. Учитывая, что данная модель чрезвычайно проста и эффективна в компьютерной реализации, можно рекомендовать ее для описания поведения реального газа в условиях среднего вакуума.

Список литературы

1. Berthiaux H., Mizonov V., Zhukov V. Application of the theory of Markov chains to model different processes in particle technology // Powder Technology. – 2005. – 157. – P. 128–137.

2. Чернявская А.С., Бобков С.П. Моделирование процесса теплопереноса в движущейся жидкости // Вестник ИГЭУ. – 2014. – Вып. 4. – С. 53–57.

3. Бобков С.П. Моделирование основных процессов переноса с использованием клеточных автоматов // Известия вузов. Химия и химическая технология. – 2009. – Т. 52, вып. 3. – С. 109–114.

4. Hardy J., de Pazzis O., Pomeau Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions // Physical Review. – 1976. – Vol. 13, N 5. – P. 1949–1961.

5. Wylie B. Cellular Automaton Lattice-Gas Hydrodynamics on a Parallel Supercomputer // 8th Technical Meeting. occam User Group, IOS. Amsterdam, March 1988. – Amsterdam, 1988. – P. 205–214.

6. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика: сб. науч. тр. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. – Вып. 10. – С. 59–111.

7. Медведев Ю.Г. Многочастичная клеточно-автоматная модель потока жидкости FHP-MP // Вестник Томского государственного университета. Сер. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2009. – №1(6). – С. 33–40.

8. Frish U., Crutchfield J.P., Hasslacher B. Lattice Gashydrodynamic sin two and three dimensions // Complex Systems. – 1987. – Vol. 1. – P. 649–707.

9. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. – М.: Наука, 1967. – 440 с.

References

1. Berthiaux, H., Mizonov, V., Zhukov, V. Application of the theory of Markov chains to model different processes in particle technology. Powder Technology, 2005, 157, pp. 128–137.

2. Chernyavskaya, A.S., Bobkov, S.P. Modelirovanie protsesssa teploperenosa v dvizhushcheyasya zhidkosti [Simulation of heat transfer in a moving fluid]. Vestnik IGEU, 2014, issue 4, pp. 53–57.

3. Bobkov, S.P. Modelirovanie osnovnykh protsessov perenosa s ispol'zovaniem kletochnykh avtomatov [Simulation of basic transport processes by cellular automata]. Izvestiya vuzov. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya, 2009, vol. 52, issue 3, pp. 109–114.

4. Hardy, J., de Pazzis, O., Pomeau, Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions. Physical Review, 1976, vol. 13, no. 5, pp. 1949–1961.

5. Wylie, B. Cellular Automaton Lattice Gas Hydrodynamics on a Parallel Supercomputer. 8th Technical Meeting. occam User Group, IOS. Amsterdam, 1988, pp. 205–214.

6. Bandman, O.L. Kletochno-avtomatnye modeli prostranstvennoy dinamiki [Cellular automata models of spatial dynamics]. Sbornik nauchnykh trudov «Sistemnaya informatika» [Scientific Collection of Papers «System informatics»]. Novosibirsk: SO RAN, 2006, issue 10, pp. 59–111.

7. Medvedev, Yu.G. Mnogochastichnaya kletochno-avtomatnaya model' potoka zhidkosti FHP-MP [Multiparticle cellular automata model of fluid flow FHP-MP]. Vestnik

Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya «Upravlenie, vychislitel'naya tekhnika i informatika», 2009, no. 1(6), pp. 33–40.

8. Frish, U., Crutchfield, J.P., Hasslacher, B. Lattice Gashydrodynamic sin two and three dimensions. Complex Systems, 1987, vol. 1, pp. 649–707.

9. Kogan, M.H. *Dinamika razrezhennogo gaza* [Dynamics of rarefied gas]. Moscow, Nauka, 1967. 440 p.

Бобков Сергей Петрович,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой информационных технологий,
e-mail: bsp@isuct.ru

Соколов Владимир Леонидович,
ФГБОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
аспирант,
e-mail: Sokolov2211@gmail.com