©Бобков С. П., Чернявская А. С., Шергин В. В., 2019 **DOI:** 10.18255/1818-1015-2019-2-256-266 УДК 517.9

Анализ возможностей практического использования моделей решеточных газов

Бобков С.П., Чернявская А.С., Шергин В.В.

Поступила в редакцию 23 января 2019 После доработки 14 мая 2019 Принята к публикации 16 мая 2019

Аннотация. В последние годы для математического моделирования физико-химических процессов стали широко применяться дискретные подходы. Среди них исследователи выделяют методы, основанные на использовании клеточных автоматов. Привлекательность данных математических объектов обоснована прежде всего тем, что во многих случаях они существенно упрощают процедуры моделирования по сравнению с традиционными методами. В частности, при использовании моделей в виде систем дифференциальных уравнений с частными производными для анализа переноса субстанции, трудности возникают в случаях протекания процессов в неоднородных средах. Кроме того, в ряде случаев довольно проблематично осуществить корректную постановку граничных условий, если объект исследования имеет границы сложной формы. Также трудно использовать классические уравнения математической физики в условиях, когда невозможно игнорировать влиянии стохастических эффектов на протекание процесса. Дискретные подходы в значительной мере свободны от указанных недостатков. Рассматриваемые в статье модели решеточных газов являются одной из разновидностей клеточных автоматов. Несмотря на то, что первые работы по использованию решеточных моделей газов появились около сорока лет назад, они до настоящего времени не получили широкого распространения в среде исследователей естественнонаучных процессов. Тем не менее имеется много доказательств того, что решеточные газы достаточно успешно описывают целый ряд гидродинамических явлений, а полученные результаты не противоречат общепринятым взглядам на физическую природу процессов движения сплошных сред. Несмотря на появление значительного количества разновидностей моделей решеточных газов, при их использовании часто возникают вопросы, касающиеся режимов течения, при которых использование дискретных моделей будет корректным. Вторая проблема, обычно возникающая перед исследователями, использующими решеточные модели, – это масштабный переход от модельных дискретных параметров к общепринятым макроскопическим характеристикам течений. Здесь, прежде всего, имеются в виду такие физические величины, как скорость потока, вязкость и плотность среды и пр. Ситуация осложняется тем обстоятельством, что указанные параметры в решеточной модели являются безразмерными, а соответствующие реальные макроскопические показатели имеют размерность. В данной статье делается попытка предложить методику масштабного перехода, а также указать области практического использования некоторых моделей решеточных газов.

Ключевые слова: дискретный подход, решеточный газ, HPP, FHP и LBM модели

Для цитирования: Бобков С.П., Чернявская А.С., Шергин В.В., "Возможности использования моделей решеточных газов", *Моделирование и анализ информационных систем*, **26**:2 (2019), 256–266.

Об авторах:

Бобков Сергей Петрович, orcid.org/0000-0001-7315-1625, докт. техн. наук, профессор, Ивановский государственный химико-технологический университет

Шереметевский пр., 7, г. Иваново, 153000 Россия, e-mail: bsp@isuct.ru

Чернявская Анастасия Сергеевна, orcid.org/0000-0001-9717-9665, ассистент, Ивановский государственный химико-технологический университет Шереметевский пр., 7, г. Иваново, 153000 Россия, e-mail: gbonnefee@gmail.com

Шергин Владимир Владимирович, orcid.org/0000-0001-7315-1625, докт. экон. наук,

Ивановский государственный химико-технологический университет

Шереметевский пр., 7, г. Иваново, 153000 Россия, e-mail: shergin476ab@mail.ru

Введение

Основным математическим аппаратом для моделирования процессов движения жидкостей и газов традиционно считаются детерминированные континуальные модели в виде систем дифференциальных уравнений с частными производными. В них непрерывность времени и пространства обеспечивается использованием бесконечно малых величин. Упомянутые классические уравнения внесли неоценимый вклад в развитие теории и практики большинства технологических процессов. Однако в последние годы появились новые подходы к математическому моделированию физикохимических явлений и, прежде всего, использование для данных целей дискретных математических объектов. В отличие от классических уравнений здесь фигурируют физические конечно малые величины, то есть потоки и потенциалы переноса квантованы, а время и пространство – дискретны [1]. Одним из видов дискретных динамических моделей для исследования физических процессов являются клеточные автоматы [2,3].

Система клеточных автоматов является совокупностью элементов, которые в каждый момент дискретного времени могут находиться в одном из возможных состояний. Обновление состояний элементов происходит, как правило, синхронно на каждом шаге модельного времени. Этот процесс происходит согласно локальным правилам переходов, причем новое состояние определяется предыдущими состояниями как рассматриваемого элемента, так и его ближайших соседей. Разновидностями клеточного автомата являются модели решеточных газов [4,5].При использовании различных моделей решеточных газов часто возникают вопросы, касающиеся режимов течения, при которых использование дискретных моделей будет корректным. Другая проблема состоит в обеспечении корректного масштабного перехода от модельных дискретных параметров к общепринятым макроскопическим характеристикам.

1. НРР и LBM модели решеточных газов

Известные модели решеточных газов строятся по следующим основным принципам. Исследуемое пространство разбивается на дискретные элементы некоторой пространственной решеткой. Сплошная среда представляется заполненной гипотетическими идеальными частицами, которые могут двигаться только в направлении узлов решетки. Вид пространственной решетки, а также правила перемещения и взаимодействия частиц на ней определяются конкретной принятой моделью.

Поскольку все модели решеточных газов используют дискретное пространство, их корректность контролируется выполнением законов сохранения массы, импульса

и энергии. Кроме того, на модель накладываются требования обеспечения изотропии пространства неочевидные при его дискретности.

Существует несколько разновидностей моделей решеточных газов.

Большая группа моделей предполагает рассмотрение движения отдельных частиц, заполняющих модельное пространство. При их использовании соблюдаются следующие допущения и ограничения [6]:

- 1. В каждый момент дискретного модельного времени частицы могут находиться только в узлах пространственной решетки.
- 2. Все частицы имеют одинаковую массу, равную единице.
- 3. Вектор скорости каждой частицы может быть направлен только в сторону одного из соседних узлов решетки.
- 4. Модуль вектора скорости частицы либо равен единице, либо равен нулю (если модель предполагает наличие частиц покоя).
- 5. В один и тот же момент времени в каждом узле решетки не могут находиться две и более частиц с одинаковыми векторами скорости.

Одной из первых была предложена модель HPP-газа, названная так по первым буквам фамилий авторов [7].



Рис. 1: Направления векторов скоростей частиц в некоторых моделях Fig. 1: The directions of particle velocity vectors in some models

Данная модель предполагает движение виртуальных частиц между узлами ортогональной решетки. Возможные направления векторов скоростей частиц для двухмерного пространства показаны на рисунке 1 слева.

Процесс моделирования поведения среды на каждом шаге по времени разбит на два этапа: перемещение частиц в соседние узлы (этап сдвига), соударение частиц в узлах (этап столкновения). Правила поведения частиц в узлах при столкновении устанавливаются такими, чтобы несмотря на изменения векторов скоростей частиц их количество и полный импульс сохранялись. Во всех случаях процесс моделирования поведения газа представляет собой получение последовательности массивов скоростей частиц в узлах соответствующей решетки в конкретные моменты дискретного времени [8].

Таким образом, моделируемая среда представляется эволюционирующим клеточным полем (массивом) $\Phi(t_k), k = 0, 1, ..., k_{end}$, в котором каждая клетка (узел) "j" задана вектором координат r_j , а ее состояние S_j представлено булевым вектором длины b – по числу возможных направлений векторов скорости. Каждый разряд вектора определяет наличие ($s_{ji} = 1$) или отсутствие ($s_{ji} = 0$) в клетке частицы, которая движется со скоростью c_i в сторону i-того соседа:

$$\Phi = \Phi(S_j, r_j, t_k)$$

Режим работы клеточного автомата – синхронный. На этапе сдвига все частицы перемещаются в соседние узлы в направлении соответствующих векторов скоростей. На этапе взаимодействия происходит изменение состояния элементарного автомата в соответствии с принятыми в конкретной модели правилами столкновения. При этом происходит замена одного состояния клетки на другое:

$$S_j = (s_{j1}, \dots, s_{jb}) \to S'_j(s'_{j1}, \dots, s'_{jb}).$$

Функция переходов $\varphi(X, S)$ состоит из композиции функций сдвига φ_1 и столкновения φ_2 , то есть:

$$\varphi(X,S) = (\varphi_2 \circ \varphi_1)(X,S).$$

Функция сдвига формально может быть представлена системой подстановок, определяющих изменение компонентов вектора состояний:

$$\varphi_1: \{s_l, r_j\} || \{\phi_l, r_j\} \to \{s'_l, r_j\}, l = 1, \dots, b,$$

где ϕ_l - компонент вектора состояний соответствующего соседнего узла.

Функция столкновения может быть формализована подстановкой, описывающей изменение состояния клетки при взаимодействии находящихся в ней частиц:

$$\varphi_2: \{s, r_j\} \to \{s', r_j\}.$$

Функция переходов $\varphi(X, S)$ должна обеспечивать выполнение законов сохранения. Выполнение закона сохранения массы обеспечивается равенством числа единичных компонентов векторов состояний S и S':

$$\sum_{i=1}^b s_i = \sum_{i=1}^b s'_i.$$

Для выполнения закона сохранения импульса необходимо, чтобы суммы векторов скоростей частиц в состояниях *S* и *S'* были одинаковы:

$$\sum_{i=1}^{b} c_i = \sum_{i=1}^{b} c'_i$$

Можно привести некоторые результаты моделирования течения сплошных сред с применением HPP-модели. В частности, на рисунке 2 представлены векторы скоростей потока сплошной среды в отдельных узлах решетки в установившемся режиме. Использовалась ортогональная решетка размером 800 на 200 узлов. На левой границе рассматриваемой области располагались узлы-источники, генерирующие появление частиц, вектор скорости которых направлен внутрь области. На правой границе были расположены узлы-стоки, которые поглощали попадающие в них частицы. Плотность среды (а в конечном итоге и давление) моделировалась величиной исходной относительной концентрации виртуальных частиц, которая для приведенного случая была равна 0,1. Для устранения статистического шума проводилось осреднение значений скорости в узлах по окрестности размером 10 узлов.

•									-*	-•	-+	+	-*-					
•	*				κ.		+	~		-	-	-	-	~	A			
	-*	*					, e	-	~	-		-	-		14			
*	-*	-			*	*	1990	1	~	-	\rightarrow	-	8	*	3	٠		
	-*	~	•		•	*	1	-	-	~	-	- 16-1	\mathbf{x}	•	1.00			
•	-	~	~		•	÷	1	~	~	, e	-	Υ.	~	×	2			
•	~	*	~		t	ł.	t	~	~	~	-	•	~	*	*	3	ж	
*	~	7	~	٠.	1	1	÷	1	~	1	÷	7	7	ъ	2	2	7	
•	*	7	~	-	1.	Υ.	ĴΤ.	t	-	1		2	~	7	7	7	7	
•	2	7	~	\square		χ.	7	7	1	÷.	÷	2	~	~		7	×	
•	×	× .				7	7	7	Ť.	<i>.</i>		÷.	*	7		ж		
۰.	× .	λ.			-	·	1	7	Ť.,	a -	1	÷.		~	7	7	×.	
÷.	×	-			_		-	7	7	~					7	×.	~	
ε.	× .	-	-	-	-		-	1	9					×.		~	×.	
	-+	-		-	-	-	-	÷.	× .				*	× .			~	
÷	-		\rightarrow	-	-			-+	÷ .			•		× 1		~	1	
•	\rightarrow		\rightarrow	-	\rightarrow		-	-*	ŵ.					14 i	×.	-	~	
•	-+	-	-	-+	-	-+		-+	÷ .				•	× 1	•	-	~	
*	-		-	-	-		-	-						Ψ.			*	
£		6.1							<i>a</i> –								-	

Рис. 2: Поток HPP-газа между параллельными стенками при наличии двух препятствий

Fig. 2: HPP gas flow between parallel walls, with two obstacles

Анализ полученных данных показывает, что в целом картина течения достаточно адекватна реальным представлениям. В частности, можно заметить уменьшение скорости потока у стенок, образование застойных зон и областей повышенной скорости потока при обтекании препятствий.

Продолжением и развитием дискретного подхода к моделированию течений сплошной среды стала модель, в которой используются совершенно иные представления о пространственной решетке и частицах. Модель LBM (Lattice Boltzmann Method), основана на использовании дискретного аналога уравнения Больцмана. В ней исследуется не поведение каждой частицы в отдельности, а функция распределения плотности вероятности частиц по координатам и по скоростям [9–11].

Предыдущая модель решетчатого газа, HPP, содержит много упрощений. Один из наиболее значимых недостатков состоит в том, что частицы, движущиеся по схеме столкновений, имеют большую длину свободного пробега. Данные модели хорошо подходят для моделирования газа. Но даже когда длина свободного пробега сводится к одной клетке, это не всегда дает возможность успешно моделировать жидкость [12]. В LBM понятие конкретной частицы заменили плотностью распределения частиц, а столкновения описываются оператором столкновений.

Модель LBM для 2D пространства предусматривает девять направлений скорости, которые показаны на рисунке 1 справа (модуль вектора скорости c_0 равен нулю – частицы неподвижны). Поскольку рассматривается не непосредственное движение частиц, а их распределение, то симметрия дискретного пространства достигается путем введения определенных коэффициентов в плотность распределения. Так же, как и в модели HPP, здесь используются узлы-стенки и узлы-источники (стоки) частиц.

Итерацию клеточного автомата, функционирующего по методу LBM, можно записать следующим образом:

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t+1) - f_i(\mathbf{r}, t) = \Omega_i(f), \tag{1}$$

где f_i – плотность распределения частиц в направлении вектора \mathbf{c}_i, \mathbf{r} – координата ячейки, t – время, Ω_I – оператор столкновений.

Выражение (1) является дискретным аналогом уравнения Больцмана, что было доказано [12].

Оператор столкновений вычисляется следующим образом:

$$\Omega_i(f) = -\frac{1}{\tau} \left[f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \right],$$

где τ – время релаксации; f_i^{eq} – функция равновесного распределения, зависящая от локальной скорости и плотности среды.

Время релаксации связано с вязкостью жидкости *v* следующей формулой [13]:

$$\nu = \frac{\tau - 0, 5}{3}.$$

Равновесная функция f_i^{eq} вычисляется следующим образом:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + 3\mathbf{c}_i \mathbf{u} + \frac{9}{2} (\mathbf{c}_i \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2 \right],$$

где w_i – специальные множители; ρ и u – локальная плотность и скорость потока для ячейки соответственно.

Специальные множители выбираются таким образом, чтобы получаемые моменты импульса соответствовали моментам импульса по распределению Максвелла-Больцмана [10, 14].

Локальная плотность потока для ячейки вычисляется как сумма значений плотности распределения по всем скоростным каналам:

$$\rho = \sum f_i(\mathbf{r}, t).$$

Вектор локальной скорости для ячейки потока:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{r}, t)$$

Результат моделирования потока в объекте с неподвижными препятствиями, полученный с использованием метода LBM, показан на рисунке 3. Здесь была принята решетка размером 1000 × 500. Поскольку данный метод использует плотность распределения, то величина скорости на фрагменте слева закодирована оттенками черного цвета (увеличение скорости – увеличение густоты цвета). Фрагмент справа представляет распределение скоростей в сечении А-А. Поток движется слева направо.



Рис. 3: Модель потока сплошной среды, полученная методом LBM Fig. 3: Continuous flow model obtained by the LBM method

Данная картина потока весьма реалистична. Можно увидеть торможение среды у неподвижных поверхностей, наличие застойных зон. В целом, полученные результаты позволяют рекомендовать использование дискретных моделей для исследования течений жидкости или газа. Однако для более корректной проверки результатов моделирования желательно указать привычные (макроскопические) параметры рассматриваемых потоков.

2. Переход от модельных параметров процесса к реальным

Все более широкое использование решеточных моделей приводит к возникновению проблемы установления полноты соответствия (адекватности) дискретных и классических континуальных описаний потоков сплошной среды. Рассмотрим сложности, которые при этом возникают. Все модели решеточных газов рассматривают процессы, протекающие с гипотетическими частицами в идеализированном мире, где время и пространство дискретны, а основные параметры могут принимать значения только из некоторого конечного разрешенного множества. В то же время традиционно течения жидкостей и газов изучались в реальных физических условиях непрерывного времени и пространства. Следовательно, необходимо найти возможность перехода от виртуальных переменных решеточного мира к действительным физическим величинам, которые имеют смысл в макроскопических объемах реальных веществ. Следует учитывать, что в решеточном дискретном пространстве рассматриваются параметры процесса, которые являются безразмерными. На самом деле, в решеточных моделях длина измеряется количеством шагов решетки, а величина шага единична и не имеет размерности. Модельное время тоже изменяется фиксированными безразмерными единичными шагами. Отсюда следует, что скорость частиц, модельная кинематическая вязкость и ряд других параметров также не имеют размерности. В то же время в реальном пространстве рассматриваемые физические величины имеют размерность. Такая ситуация усложняет решение вопроса установления соответствия модельных и реальных процессов.

Для перехода от безразмерных модельных значений параметров к размерным

физическим значениям можно использовать следующие зависимости, в которых индекс "mod" указывает на принадлежность параметра к модельному решеточному пространству:

$$L = \frac{1}{m} \cdot L_{mod},\tag{2}$$

$$t = \frac{1}{s} \cdot t_{mod}, \quad u = \frac{s}{m} \cdot u_{mod}, \quad \nu = \frac{s}{m^2} \cdot \nu_{mod}, \tag{3}$$

где *m* - число ячеек, содержащееся в одном метре, *s* - число модельных шагов по времени в секунду.

При использовании приведенных выше зависимостей наибольшую сложность вызывает определение модельного значения кинематической вязкости. Существует несколько подходов определения данного параметра. В литературе можно встретить выражения для расчета модельной вязкости, полученные с использованием преобразований Галилея при переходе от модельного пространства к реальному [15]. В целом, можно привести следующее уравнение, выведенное в предположении об изотропии пространства и учитывающее его дискретность. Для двухмерного пространства оно имеет вид:

$$\nu_{mod} = \frac{1}{2bd(1-2d)},\tag{4}$$

где *b* – количество направлений векторов скорости частиц; *d* – средняя плотность частиц в расчете на одно направление скорости.

Для установления аналогий между реальными и модельными процессами течения сплошных сред можно использовать элементы теории подобия, в частности, применяя критерий гидродинамического подобия Рейнольдса (*Re*). Удобство его использования обусловлено тем, что поведение жидкостей и газов зависит не столько от их реальных свойств (плотности, вязкости, скорости и пр.), сколько от соотношения указанных величин. Справедливо предположить, что модельные безразмерные потоки на решетке будут подобны реальным потокам в случае их геометрического подобия и равенства критериев Рейнольдса. Если записать критерий Рейнольдса для реальной и модельной сред, получим:

$$Re = \frac{uL}{\nu}, \quad Re_{mod} = \frac{u_{mod}L_{mod}}{\nu_{mod}}.$$
(5)

Поскольку в гидравлически подобных системах $Re = Re_{mod}$, то можно записать следующее:

$$\frac{u}{u_{mod}} = \frac{\nu}{\nu_{mod}} \cdot \frac{L_{mod}}{L}.$$
(6)

Выражения (2)-(6) позволяют осуществлять переход от модельных параметров процесса к реальным (физическим) и обратно. Рассмотрим реальные условия, соответствующие потоку HPP-газа, изображенному выше на рисунке 2. Вычислительные эксперименты позволили установить, что средняя скорость среды в ядре потока была равна 0,3 м/с. Примем, что физической средой является воздух при нормальных условиях, который движется между параллельными стенками, расположенными на расстоянии 10 мм. Расчеты показывают, что для указанного случая реальная средняя скорость среды равна 0,013 м/с. Число Рейнольдса в данных условиях – 9,4.

Рассчитанные физические условия для потока, показанного на рисунке 3, следующие. Моделировалось течение воды при расстоянии между стенками, равном 50 мм. Средняя скорость потока составила 0,15 м/с, число Рейнольдса – 250.

Нами был также рассмотрен другой путь перехода от модельных параметров к реальным. Он состоит в следующем. Поскольку модель HPP рассматривает движение частиц между узлами решетки и их столкновения, можно при имитации процесса подсчитать модельную длину свободного пробега частиц и число их столкновений в течение шага дискретного времени. Далее по заданному характерному линейному размеру с помощью уравнения (6) нетрудно определить реальную (физическую) длину свободного пробега. Найденная таким образом физическая величина позволяет по справочным данным найти реальное давление конкретного газа и его кинематическую вязкость.

Обобщая результаты экспериментов с моделью HPP, проведенных при изменении плотности в диапазоне 0,02 ÷ 0,16, можно указать, что реальное давление газа в опытах составляло 8÷ 80 Па, что соответствует области среднего вакуума. При этом во всех сериях опытов значение числа Рейнольдса лежало в диапазоне от 4 до 45, что для сплошной среды должно указывать на ламинарный режим течения. Пониженное давление газа требует привлечения для анализа его течения не только числа Рейнольдса, но и числа Кнудсена (Kn), которое составляло от 0,14 до 0,01. В то же время известно, что при $10^{-3} < \text{Kn} < 1$, реализуются режимы течения промежуточные между свободномолекулярным и континуальным поведением газа [16]. Рассматривая именно промежуточный режим течения, можно утверждать, что использованная в вычислительных экспериментах HPP модель решеточного газа может давать достаточно адекватные результаты, по крайней мере, для газов при пониженном давлении.

Заключение

Проведенный анализ поведения моделей решеточных газов показал следующее. Модели, рассматривающие столкновения частиц (HPP) применимы для описания течений газов при относительно невысоких значениях числа Рейнольдса, особенно при пониженном давлении. Для исследования течений реальных жидкостей более приемлемой может быть модель, использующая метод LBM.

Список литературы

- [1] Wolfram S., A new kind of science, Wolfram media Champaign, IL, 2002.
- [2] Toffoli T., Margolus N., Cellular Automata Machines: a new environment for modeling, Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 1987.
- [3] Бандман О. Л., "Клеточно-автоматные модели пространственной динамики", Системная информатика, 10 (2006), 59–113; [Bandman O. L., "Kletochno-avtomatnye modeli prostranstvennoj dinamiki", Sistemnaya informatika, 10 (2006), 59–113, (in Russian).]
- [4] Wolfram S., "Cellular automaton fluids 1: Basic theory", Stat. Phys., 45:3-4 (1986), 471– 526.
- [5] Clavin P. et al, "Simulation of free boundaries in flow system by lattice-gas models", Journal of Fluid Mechanics, 188 (1988), 437–464.

- [6] Frish U., Hasslacher B., Pomeau Y., "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation", *Physical Review Letters*, 56:14 (1986), 1505–1508.
- [7] Hardy J., de Pazzis O., Pomeau Y., "Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions", *Physical Review*, **13**:5 (1976), 1949–1961.
- [8] Бандман О. Л., "Дискретное моделирование физико-химических процессов", Прикладная дискретная математика, 3 (2009), 33–49; [Bandman O. L., "Diskretnoe modelirovanie fiziko-himicheskih processov", Prikladnaya diskretnaya matematika, 3 (2009), 33–49, (in Russian).]
- [9] Wolfram S., "Statistical mechanics of cellular automata", Reviews of Modern Physics, 5:3 (1983), 601-644.
- [10] Wolf-Gladrow D., Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction, Springer, 2005.
- [11] Chopard B. et al., "Cellular automata and lattice Boltzmann techniques: an approach to model and simulate complex systems", Advances in Complex Systems, 5:2 (2002), 103–246.
- [12] Shan X., Chen H., "Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation", *Phys. Rev. E*, 49:4 (1994), 2941–2948.
- [13] He X., Luo L., "Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation", *Phys. Rev. E*, 56:6 (1997), 6811–6817.
- [14] Nourgaliev R. R et al., "The lattice Boltzmann equation method: Theoretical interpretation, numerics and implications", Int. J. Multiphase Flow, 29:1 (2003), 117–169.
- [15] Frish U., Crutchfild J. P., Hasslacher B., "Lattice Gas hydrodynamics in two and three dimensions", Complex Systems, 1 (1987), 649–707.
- [16] Абрамович Г.Н., Прикладная газовая динамика. Часть 2, М.:Наука, 1991; [Abramovich G.N., Prikladnaya gasovaya dinamika. Chastj 2, М.: Nauka, 1991, (in Russian).]

Bobkov S. P., Chernyavskaya A. S, Shergin V. V., "Analysis of Practical Applications of Lattice Gas Models", *Modeling and Analysis of Information Systems*, **26**:2 (2019), 256–266.

DOI: 10.18255/1818-1015-2019-2-256-266

Abstract. In recent years, discrete approaches have been widely used in mathematical modeling of physicochemical processes. Cellular automata-based methods greatly simplify modeling procedures in many cases. In particular, this is important when using models in the form of partial differential equations systems to analyze the transfer of a substance in inhomogeneous media. In some cases, it is quite difficult to set the boundary conditions correctly if the object of study has boundaries of complex shape. It is also difficult to use mathematical physics classical equations if one cannot neglect the influence of stochastic effects on the process flow. The lattice gas models considered in the article are one of the types of cellular automata. Until now they have not been widely adopted, despite the fact that the first works on their use appeared about forty years ago. It is known, however, that lattice gases successfully describe a number of hydrodynamic phenomena, and the results obtained do not contradict the generally accepted views on the physical nature of continuous media motion processes. When using models of lattice gases, there are often questions about the correctness of the use of discrete models in various flow regimes. The second problem is a large-scale transition from model discrete parameters to generally accepted macroscopic characteristics of flows, such as flow velocity, viscosity and density of the medium, etc. It is also necessary to take into account that the indicated parameters in the lattice model are dimensionless, and the corresponding real macroscopic parameters have dimension. In this paper, an attempt is made to propose a method of large-scale transition, as well as to indicate the areas of practical use of some models of lattice gases.

Keywords: discrete approach, lattice gas, HPP, FHP and LBM models

On the authors:

Sergey P. Bobkov, orcid.org/0000-0001-7315-1625, PhD,
P.G. Ivanovo State University of Chemistry and Technology,
7 Sheremetevsky str., Ivanovo 153000, Russia, e-mail: bsp@isuct.ru

Anastasiya S. Chernyavskaya, orcid.org/0000-0001-9717-9665, assistant, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, 7 Sheremetevsky str., Ivanovo 153000, Russia, e-mail: olga@mail.ru

T Sheremetevský str., Ivanovo 155000, Itussia, e-man. orga@man.re

Vladimir V. Shergin, orcid.org/0000-0001-9518-8058, PhD,

Ivanovo State University of Chemistry and Technology, 7 Sheremetevsky str., Ivanovo 153000, Russia, e-mail: shergin476ab@mail.ru