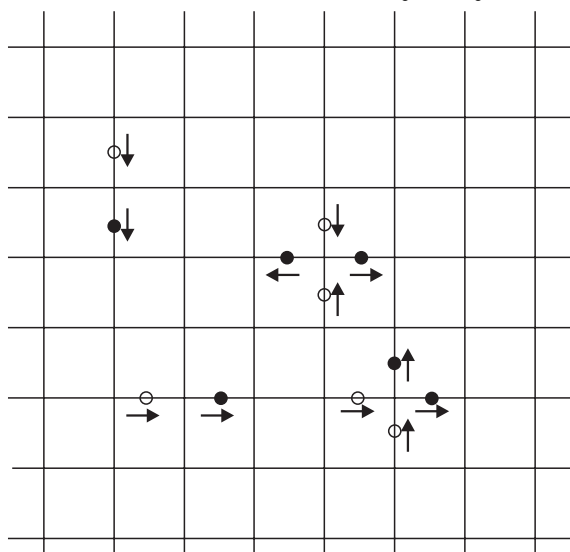


1985. november 19-én a *Washington Post* címlapon számolt be arról, hogy amerikai és francia kutatók egymással karöltve, egy új komputerizált módszert fejlesztettek ki gázok és folyadékok áramlásának modellezésére. A cikk nem kevesebbet állított, mint hogy a módszer segítségével egyszerű számítógépeken olyan számításokat lehet elvégezni, amelyek abban az időben csak szuperkomputereken voltak futtathatók, és amely felhasználásával az akkori amerikai csillag-háborús tervek fejlesztési talán felgyorsíthatók. Bár azt határozottan állíthatjuk, hogy a fent említett módszer, amely a *rácsgáz módszer* névre hallgat, nem játszott meghatározó szerepet a hidegháború gyors lezárásában, az alpmódszer gyökereiből kifejlődő egyik vadhajítás, a *rács- Boltzmann módszer*, a fizika számos területén jelentős eredmények eléréséhez segítette a módszer alkalmazóit. Az alábbiakban ezt igyekszünk röviden bemutatni.

Bár az első rácsgáz módszer, amelyet folyadékdinamikai folyamatok modellezésére szántak francia fejlesztői a 70-es években, még komoly problémákkal küzdött, kétségtelenül lefektette az alapokat a további fejlesztésekhez. A módszer végtelenül egyszerű volt, így algoritmusának „receptje” néhány sorban összefoglalható.

Először is fektessünk egy szabályos négyszögrácsot arra a geometriai tartományra, amelyben a folyadék áramlását modellezni szeretnénk. A rácspontokat összekötő rácselemekhez rendeljünk véletlenszerűen részecskecsomagokat, vagyis egy rácselelen vagy van, vagy nincs részecskecsomag. A csomagokat minden egyes lépésben mozgassuk a rácson, a rács alapján kijelölt irányba. Ha két részecske „frontálisan” ütközne egy adott rácsponthoz, akkor és csak akkor irányuk változzon meg: távolodjanak az ütközési ponttól addigi irányukkal 90 fokot bezáró szögben (*1. ábra*).

1. ábra. Részecskék mozgása az első rácsgáz modellben. Az üres kör ütközés előtti, a teli kör ütközés utáni állapotot reprezentál.

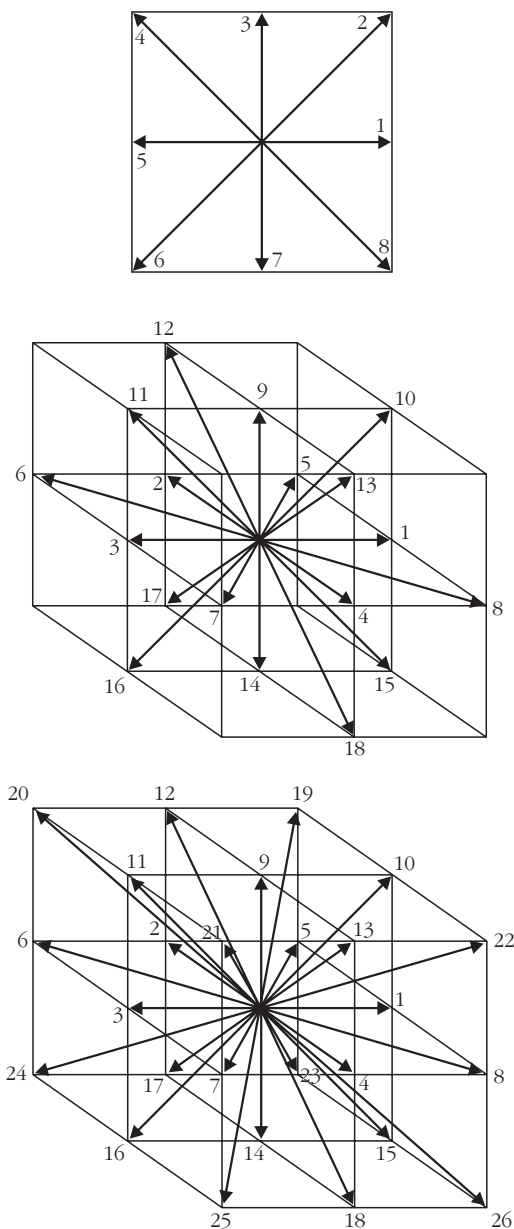


Nagyobb térrészeket figyelembe véve, és az abban található részecskék tömegét, impulzusát összegezve, makroszkopikus mennyiségeket származtathatunk, mint például a gáz tömege és impulzusa.

Mivel az nyilvánvaló, hogy a fent vázolt algoritmus lokálisan megőrzi a tömeget, impulzust és energiát, így ahhoz, hogy a módszert folyadékdinamikai számításokra tudjuk használni, a kérdés csupán az: mennyire tér el az algoritmus alapján származtatható makroszkopikus tömeg- és impulzusmegmaradási egyenlet a folyadékdinamikában jól bevált Navier–Stokes-egyenletektől. Ma már tudjuk a választ, miszerint az eltérés jelentős, és többek között a származtatás után kapott impulzusmegmaradási egyenlet feszültségtenzora nem izotróp. Emiatt a rács elhelyezkedése, és azon belül az, hogy a rácsvektorok milyen szöget zárnak be a kérdéses áramlási tartomány peremeivel – nem kívánatos módon – jelentősen befolyásolhatják a szimulációs eredményeket.

Több mint 10 évet kellett várni, amíg a fenti problémát francia és amerikai kutatók megoldották, és a *Washington Post* beszámolhatott az áttörésről. A megoldás roppant egyszerű volt: a négyszögletes rács helyett hexagonálisat kellett alkalmazni. Ez a rács már rendelkezik megfelelő mértékű forgatási invarianciával, és így a módszer fejlesztése, valamint alkalmazása a folyadékdinamikai problémák megoldására szárnyra kapott. Érdekességképpen megemlíjtjük, hogy a forgatási invariancia és az alkalmazható rácsok kérdésével a Mathematica programcsomag alapjait akkortájt lefektető *Stephen Wolfram* is igen intenzíven foglalkozott. És bár Wolfram a rácsgáz módszerre, mint egyfajta sejtautomatára tekintett, egyik dolgozata révén vált nyilvánvalóvá, hogy mely rácsok felhasználásával lehet eljutni a kívánt hidrodinamikai egyenletekhez.

Ezt követően újabb és újabb modellek jelentek meg. A determinisztikus ütközési szabályokat kiegészítették véletlenszerűséget is alkalmazó sztochasztikus szabályokkal, amelyek természetesen továbbra is alkalmazták a két ökölszabályt: a tömeget és impulzust lokálisan meg kell őrizni minden ütközés során. Sztochasztikus szabályok bevezetésével csökkenteni tudták a módszer alkalmazása esetén megfigyelhető úgynevezett gyanús megmaradásokat, amelyek például bizonyos determinisztikus szabályok alkalmazása esetén az impulzus soronkénti, illetve oszloponkénti megmaradásában testesültek meg. A módszer egyszerűsége, bináris természete, abszolút stabilitása sokak számára mind a mai napig elég vonzerőt biztosít ahhoz, hogy továbbfejlesszék, alkalmazzák azt. Ugyanakkor az a tény, hogy a makroszkopikus mennyiségek származtatása során kapott zaj redukciójához nagyszámú részecske mozgását kell nyomon követni, szinte természetes úton vezetett a 80-as évek végén egy új módszer kifejlesztéséhez, a rács-Boltzmann módszerhez.



2. ábra. A rács-Boltzmann módszer esetén gyakran alkalmazott két- és háromdimenziós elemi rácsok.

A módszer alapötlete, hogy a részecskék szerepét vegyék át a rácsélekhez rendelt egyrészecske sűrűségfüggvények, az ütközési szabályok helyett pedig vezessünk be ütközési operátort, amely – akárcsak a szabályok – gondoskodik a tömeg és impulzus lokális megmaradásáról.

A módszer alkalmazása során tehát a sűrűségfüggvényeket a rácsél irányának megfelelően mozgatjuk egy lépésben egy rácséllal odébb, majd az ütközési operátornak és a pillanatnyi makroszkopikus állapotnak megfelelően az impulzust újra szétosztjuk. A makroszkopikus mennyiségek, mint például sűrűség és impulzus, a sűrűségfüggvények megfelelő momentumaiként számolhatók. Vagyis a rácsponthoz tartozó elemi térfogathoz rendelhető sűrűség egyszerűen a sűrűségfüggvények összege, míg az impulzus az adott térfogathoz rendelhető rácsélek irányának megfelelő

egységnyi sebességek és a hozzájuk tartozó sűrűségfüggvények szorzatának összege. Az alkalmazható rács természetesen ebben az esetben sem lehet tetzőleges. Két dimenzióban például, az impulzusegyenlet rotációs invarianciáját biztosítandó, leggyakrabban az úgynevezett kilencsebességes modellt alkalmazzuk, nyolc rácsélen mozgó és egy helyben maradó sűrűségfüggvénnyel. Három dimenzióban pedig a legjobban elterjedt megközelítések 19 és 27 sűrűségfüggvénnyel dolgoznak (2. ábra).

A fenti algoritmus röviden a rács-Boltzmann egyenlettel írható le:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

ahol  $f_i$  az  $i$ -edik rácsélhez rendelt sűrűségfüggvény, amely a  $\mathbf{c}_i$  rácsvektor irányában mozog egy adott lépés során, és amely az  $\Omega_i$  ütközési operátor alkalmazásán keresztül lép kölcsönhatásba a többi sűrűségfüggvénnyel.  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c}$  tulajdonképpen reprezentálja azon molekulák számát, amelyek a  $t$ -edik időpillanatban az  $\mathbf{x}$  pont  $d\mathbf{x}$  környezetében vannak, és sebességük a  $\mathbf{c}$  és  $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$  sebességintervallumba esik. Az (1) egyenlet jobb oldalán található ütközési operátor legegyszerűbb alakja az ütközést, mint egy egyszerű relaxációs folyamatot írja le (Bhatnagar–Gross–Krook vagy BGK operátor):

$$\Omega_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (2)$$

amelynek során a sűrűségfüggvények mindegyike egy adott  $f_i^{eq}$  egyensúlyi állapot felé tart.<sup>1</sup> Az egyensúlyi állapot a Maxwell–Boltzmann-féle eloszlás sűrűségfüggvényének megfelelő, egy adott diszkrét sebesség környezetében sorfejtett alakja, másodrendig megtartva a sorfejtés során kapott tagokat. Így az függ a lokális  $\rho$  sűrűségtől és  $\mathbf{u}$  sebességtől, amelyek, mint említettük, a sűrűségfüggvények momentumaiként számolhatók:

$$\rho = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t), \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t). \quad (3)$$

Az ütközés során alkalmazott  $\tau$  relaxációs paraméter határozza meg a modellezett folyadék viszkozitását. Megmutatható, hogy a rács-Boltzmann egyenletet (1) megoldva, a megfelelő momentumok (3) közelítik a közel összenyomhatatlan közegekre vonatkozó Navier–Stokes-egyenletek megoldását, amelyekben a nyomás az ideális gáz állapotegyenlete segítségével számolható. A megoldás hibái, akárcsak más numerikus megoldó módszerek esetén, a rács finomításával csökkenthetők.

Érdeemes megemlíteni, hogy a sűrűségfüggvények második momentumaként szintén származtathatjuk az adott rácsponthoz rendelhető  $e$  energiát:

$$\rho e = \sum_i \mathbf{c}_i^2 f_i(\mathbf{x}, t), \quad (4)$$

<sup>1</sup> A rács-Boltzmann módszer elnevezés helyett gyakran a rács-BGK elnevezést használjuk, amikor az ütközési operátort ilyen mértékben egyszerűsítjük.

és a megfelelő módszerrel a kapcsolódó energiamegmaradási egyenletet. Ahhoz azonban, hogy ez utóbbi a megfelelő alakú legyen, az egyensúlyi eloszlás sorfejtése során a tagokat negyedrendig kell megtartani. Vegyük észre: mivel a relaxációs folyamatot továbbra is egyetlen paraméterrel kontrollálhatjuk, így a BGK ütközési operátor alkalmazása esetén az impulzus- és energiaegyenletekben szereplő transzportegyütthatók (viszkózitás és hővezetési tényező) inherensen kapcsolódnak egymáshoz, megnehezítve, hogy a módszert kellő rugalmassággal alkalmazzuk tetszőleges paramétertartományban. Éppen ezért olyan szituációkban, ahol az energiamegmaradás figyelembevétele is igény, például hőátadás modellezése, általában más megoldást alkalmazunk a probléma kezelésére. Egy lehetséges alternatíva, hogy az energiaegyenletet mint a tömeg- és impulzusegyenlethez csatolt *makroszkopikus* egyenletet oldjuk meg. Figyelembe vehetjük például, hogy az energia a folyadék sebességével terjed, és viszkózitás révén a kinetikus energia belső energiává alakul. Ugyanakkor nem várjuk el, hogy az energia mezoszkopikus szinten, tehát az eloszlásfüggvények szintjén is megmaradjon.

Bár a rács-Boltzmann módszer a rács-gáz módszerek alapjaiból fejlődött ki, viszonylag hamar felismerték, hogy a módszer tulajdonképpen a folytonos Boltzmann-egyenlet egy speciálisan diszkretizált változatának is tekinthető. Mivel a sűrűségfüggvények mozgását egy rácsra korlátozzuk, továbbá egy lépés alatt azok csak egy rácstávolságnyi mozoghatnak, tulajdonképpen a sebességeteret diszkretizáljuk. A tér és idő diszkretizálását pedig magának a rácsnak és a diszkrét időlépéseknek alkalmazásával érjük el. Természetes tehát, hogy a fizika bizonyos területein, amelyeknél a Boltzmann-egyenlet alkalmazása sikerre vezetett, a rács-Boltzmann módszer szintén sikerrel kecsegtethet, mint a Boltzmann-egyenlet numerikus megoldó módszere. Éppen ezért az elmúlt húsz évben a módszert számos fizikai probléma megoldására sikerrel alkalmazták.

Bár a rács-Boltzmann módszer a rács-gáz módszerek alapjaiból fejlődött ki, viszonylag hamar felismerték, hogy a módszer tulajdonképpen a folytonos Boltzmann-egyenlet egy speciálisan diszkretizált változatának is tekinthető. Mivel a sűrűségfüggvények mozgását egy rácsra korlátozzuk, továbbá egy lépés alatt azok csak egy rácstávolságnyi mozoghatnak, tulajdonképpen a sebességeteret diszkretizáljuk. A tér és idő diszkretizálását pedig magának a rácsnak és a diszkrét időlépéseknek alkalmazásával érjük el. Természetes tehát, hogy a fizika bizonyos területein, amelyeknél a Boltzmann-egyenlet alkalmazása sikerre vezetett, a rács-Boltzmann módszer szintén sikerrel kecsegtethet, mint a Boltzmann-egyenlet numerikus megoldó módszere. Éppen ezért az elmúlt húsz évben a módszert számos fizikai probléma megoldására sikerrel alkalmazták.



3. ábra. Falról leváló buborék rács-Boltzmann szimulációja.

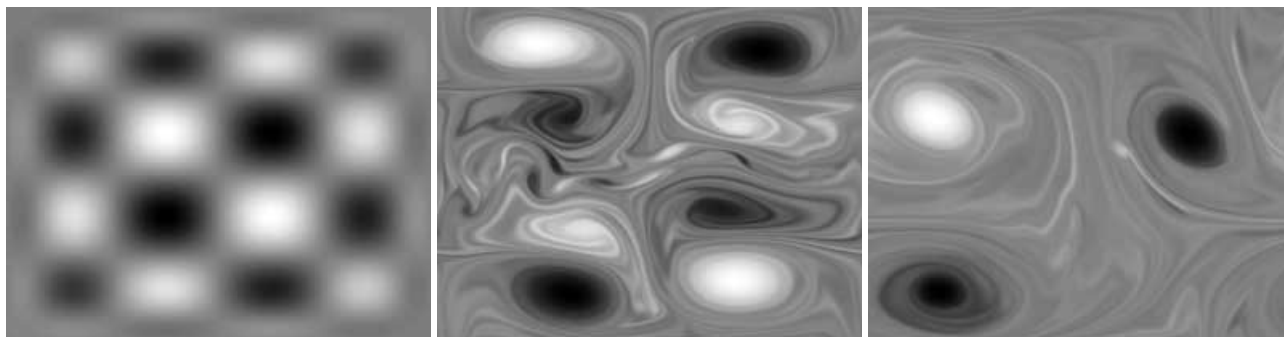
Véleményünk szerint egyik legígéretesebb alkalmazása a többfázisú (pl. víz és annak gőze) folyadék-dinamikai rendszerek modellezése, ahol más – jellemzően makroszkopikus – modellezési technikák rendre csődöt mondanak. Az alapmódszer többféleképpen kiterjeszhető kétfázisú rendszerek kezelésére, például vonzó és taszítóerőt modellezve a részecske-sűrűségfüggvények között. Ilyen erő alkalmazásával szinte tetszőleges – analitikusan leírható – állapotegyenlettel rendelkező folyadék modellezhető, és az abban előforduló fázisátalakulás tanulmányozható (3. ábra).

A módszer szintén vonzó tulajdonsága, hogy különböző peremfeltételek modellezése egyszerű technikák alkalmazásával megoldható. Példaként talán a csúszásmentes falak modellezését érdemes kiemelni, hiszen talán ez a leggyakrabban fellépő probléma folyadék-dinamikai számítások esetén. Csúszásmentes falak esetén a fal mellett a folyadéksebesség zérus, amely könnyedén modellezhető a rács-Boltzmann módszer esetén a visszapattanás-szabállyal. Ebben az esetben a falat elérő sűrűségfüggvényt egyszerűen visszafordítjuk, és a következő lépésben abba az irányba mozgatjuk, ahonnan érkezett. Így két időlépésre átlagolva garantáljuk a fal melletti zérus impulzus kialakulását, és jó közelítéssel csúszásmentes falat tudunk modellezni.

Kétfázisú rendszerek esetén a falak nedvesítése szintén könnyedén modellezhető, bevezetve egy, a fal és folyadék között fellépő vonzó-, illetve taszítóerőt.

Az eddig elmondottak alapján kiviláglik a módszer talán legnagyobb erénye, miszerint olyan fizikai folyamatok modellezése esetén, amelyeknél a makroszkopikus megközelítés alkalmazása nehézségekbe ütközik, a rács-Boltzmann módszer mezoszkopikus termé-

4. ábra. Kétdimenziós lecsengő turbulencia rács-Boltzmann szimulációja. Bal oldalon a kezdeti sebességmezőhöz tartozó örvényesség látható. Középen látszik, hogy a sebességgradiensek hatására hogyan válik a kezdeti közel diszkrét spektrumú sebességmező folytonos spektrumú mezővé, az energia és entrópia (az örvényesség négyzetének integrálja, nem tévesztendő össze az entrópiával) kaskád következtében. Jobb oldalon a végállapot felé közeledve fogy az örvények száma, míg végül két egymással szemben forgó örvény marad a rendszerben (itt nem mutatjuk).



szete segíthet innovatív, részecskeszemléleten alapuló megoldást találni. Másrészt, olyan problémák esetén, ahol eddig csak a makroszkopikus mennyiségek megfigyelésére nyílt lehetőségünk, a rács-Boltzmann módszer lehetőséget nyújt mezoszkopikus mennyiségek megfigyelésére. A rács-Boltzmann módszerrel turbulens áramlásokat modellezve például (4. ábra) nemcsak a hidrodinamikai sebesség és annak különböző korrelációi, de a sűrűségfüggvények maguk, azok egyensúlyi és nem-egyensúlyi része és a köztük megfigyelhető korrelációk is származtathatók, tanulmányozhatók. Reményeink szerint ez utóbbi tény segíthet olyan folyamatok mélyebb megértésében, amelyek esetén a tiszta makroszkopikus megközelítés eddig nem vezetett sikerre.

Végül, de nem utolsósorban, érdemes megemlíteni, hogy a módszernek ugyancsak nagy előnye az egyszerűsége. A 3. és 4. ábrán látható szimulációk például egy mindössze 400-500 soros számítógépprogrammal megvalósíthatók. A műveletek mindegyike lokális, így egy feladat megoldása párhuzamos számí-

tógép-architektúrán is gond nélkül kivitelezhető. Ráadásul a párhuzamosítás rendkívül effektív tud lenni. Számos gyakorlati esetben például lineáris gyorsulás érhető el, vagyis kétszer annyi gépen ugyanaz a feladat feleannyi idő alatt végezhető el. Ugyanakkor nem győzzük hangsúlyozni, hogy bár maga a módszer egyszerűen megvalósítható, a módszer mögött rejlő bizonyítás, amely segítségével a makroszkopikus egyenletekig eljuthatunk, közel sem tekinthető könnyen emészthetőnek. Éppen ezért gyakran találkozhatunk az irodalomban az alapmódszer olyan jellegű célirányos „megspékelésével”, amely bár első ránézésre fizikailag indokoltnak tűnik, egyszerű teszteken kiváló eredményeket produkál, mégis a módszer részletes analízisén elvérzik. Ennek ellenére úgy gondoljuk, hogy a módszer bemutatása helyet követel magának a fizika oktatásában is. Részecskeszemlélete gyors és könnyű befogadhatóságot, közelsége a Boltzmann-egyenlethez a statisztikus fizika alapvető fogalmainak gyakorlati alkalmazását, egyszerűsége a számítógépes kísérletezés lehetőségét biztosítja.

## NEVEK ÉS HÍRNEVEK

### Herzberg, Jahn, Renner, Teller és az elektron-rezgési kölcsönhatások

Hargittai Magdolna, Hargittai István

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
Magyar Tudományok Akadémia

*Teller Ede* neve nagyon sok, a kémiában és a fizikában számon tartott „hatásban” szerepel. Példaként említhetők a BET-egyenlet, a Jahn–Teller-hatás és Renner–Teller-hatás, a Teller–Redlich-szabály, a Herzberg–Teller-hatás, vagy a Landau–Teller-modell. Teller hírneve mégsem elsősorban ennek köszönhető. Az ezekben a kifejezésekben vele társuló nevek viselői közül némelyikről sokat tudunk, másokról alig valamit. Teller a jelek szerint a BET (Brunauer–Emmet–Teller) egyenletet tartotta közülük a legjelentősebbnek, amire az is utal, hogy szerinte ezért az eredményéért kaphatott volna Nobel-díjat. A BET-egyenletet valóban sokan és sokat használják, de az eredeti megfogalmazásán kívül ennek az egyenletnek nem volt mozgalmas „élete”, noha még maga Teller is foglalkozott a továbbfejlesztésével. A Jahn–Teller-hatás [1] ezzel szemben az elmúlt évtizedek során nagyon sok további kutatásnak lett tárgya és kiindulópontja. Ezek közül a legjelentősebb a magashőmérsékletű szupravezetés felfedezése [2]. A hatás az elektron-rezgési (*vibronic*) kölcsönhatások közé tartozik, amelyek a korszerű molekulafizikában és szerkezeti kémiában egyre nagyobb szerepet játszanak. A Jahn–Teller-hatás mellett ide tartozik a Renner–Teller-hatás is. Feltűnő, hogy Teller ismertsége mellett *Jahn* és *Renner* mennyire ismeretlen maradt. Ezzel a rövid dolgozattal adózunk emléküknél.

A Jahn–Teller-hatás eredeti megfogalmazása szerint nemlineáris szimmetrikus elfajult elektronállapotú (vagyis elektronokkal csak részben betöltött pályákkal rendelkező) molekulák nem stabilak, és ezért szimmetrikus szerkezetük torzul. A torzulás megszünteti az elektronszerkezet elfajultságát és stabil – bár kevésbé szimmetrikus – szerkezet jön létre. Egyszerűbben megfogalmazva, az ilyen molekulákban nincs összhang az atommag-konfiguráció magas szimmetriája és az elektronsűrűség-eloszlás alacsonyabb szimmetriája között. Ez azt eredményezi, hogy az atommagok egy része elmozdul eredeti helyzetéből és olyan konfiguráció alakul ki, amelyben az atommag-konfiguráció és az elektronsűrűség-eloszlás szimmetriája már megfelel egymásnak. A molekula így alacsonyabb szimmetriájú lesz, mint amilyen szimmetriát várhatnánk pusztán a molekula szerkezeti képlete alapján.

A Jahn–Teller-hatás a molekula elektronszerkezete és rezgőmozgása közötti kapcsolatot fejezi ki, és ezért a jól ismert és széles körben érvényes Born–Oppenheimer-közelítés a Jahn–Teller-rendszerekre elveszti érvényességét. A Born–Oppenheimer-közelítés szerint a molekula elektronszerkezete és rezgőmozgása egymástól jól elkülöníthető annak köszönhetően, hogy az atommagok sokkal lassabban mozognak,