Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

Отчёт по четвертому этапу группового проекта

Содержание

# 1 Введение

## 1.1 Цель проекта

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

## 1.2 Цель и задачи четвертого этапа проекта

**Главная цель:** провести комплексный анализ полученных результатов моделирования, оценить качество реализации модели HPP, обсудить итоги работы в команде и представить проект на защите.

**Задачи этапа:**

1. Анализировать результаты тестирования модели
2. Обсудить в команде итоги работы
3. Оценить качество реализации проекта, в частности, написанного кода
4. Подготовить материалы для защиты проекта
5. Провести самооценку деятельности

## 1.3 Актуальность

В современных научных и инженерных задачах моделирование сложных физических процессов становится всё более востребованным инструментом. Одной из таких задач является моделирование течения газа, где традиционные методы требуют значительных вычислительных ресурсов и часто оказываются непрактичными для задач большого масштаба или с высокой степенью детализации. В этом контексте решеточные методы (LGA и LBE) приобретают особую актуальность, так как позволяют упростить вычисления, сохраняя при этом физическую достоверность моделируемых процессов [1].

Наш проект был посвящён построению и анализу модели на основе решёточного уравнения Больцмана (модель HPP). Работа над проектом велась в составе команды №4 (Абакумова Олеся, Астраханцева Анастасия, Ганина Таисия, Ибатулина Дарья). Проект был разбит на три этапа, каждый из которых имел свои задачи и результаты. В данном отчёте подробно рассмотрим четвертый этап – коллективное обсуждение итогов и самооценку нашей деятельности.

# 2 Основная часть

## 2.1 Итоги трёх этапов проекта

### 2.1.1 **Этап 1. Теоретическое обоснование и формулировка задачи**

На этом этапе мы:

1. Изучили основные принципы решеточных моделей газа (LGA) и решеточного уравнения Больцмана (LBE).
2. Ознакомились с базовыми моделями: HPP, FHP-I, FHP-III, а также с расширенной моделью с 9 направлениями скорости.
3. Проанализировали физические свойства этих моделей: симметрию, анизотропию, возможность сохранения импульса и энергии, введение температуры.
4. Изучили область применимости этих моделей — от моделирования жидкостей до фазовых переходов и химических взаимодействий.

Этот этап дал нам прочную теоретическую основу для дальнейших шагов, позволив критически осмыслить достоинства и ограничения моделей, и выбрать для реализации наиболее подходящую — модель HPP.

### 2.1.2 **Этап 2. Изучение алгоритмов и структур данных**

На втором этапе:

1. Мы подробно проанализировали алгоритмы распространения и столкновения частиц в решеточных моделях.
2. Были рассмотрены способы кодирования состояний узлов с помощью битовых операций, что обеспечило компактность и быстродействие реализации.
3. Сравнили особенности моделей HPP, FHP-I, FHP-III и LBM, включая их алгоритмическую сложность, вычислительные затраты, физическую реалистичность.
4. Сделали обоснованный выбор в пользу модели HPP, как стартовой точки: она проще в реализации, но при этом позволяет продемонстрировать ключевые принципы решеточного моделирования.

### 2.1.3 **Этап 3. Реализация модели и проведение численных экспериментов**

На завершающем техническом этапе:

1. Мы реализовали модель HPP на языке Julia, выбрав его за высокую производительность, лаконичность и удобство для научных вычислений.

В коде предусмотрены функции для:

* создания решетки и добавления частиц;
* применения периодических граничных условий;
* реализации правил столкновений (лобовых и угловых);
* визуализации состояния системы;
* расчета макроскопических параметров (число частиц, импульс);
* автоматического запуска тестов и создания анимаций.

1. Было реализовано три тестовых сценария, проверяющих:

* корректность перемещения одной частицы;
* корректность лобового столкновения;
* поведение при угловом столкновении четырёх частиц.
* Созданы анимации (GIF), наглядно демонстрирующие ход моделирования, а также сохранение физических величин во времени [2].

## 2.2 Коллективная работа над проектом

### 2.2.1 Распределение ролей и организация взаимодействия

С самого начала работы над проектом мы договорились о чётком распределении ролей: \* Теоретический анализ (описание модели, её математических основ, анализ преимуществ и недостатков) - все участники, с последующим обсуждением на общем собрании. \* Программная реализация - основная ответственность легла на участников с наиболее сильными навыками программирования на Julia (но все члены команды участвовали в обсуждении архитектуры кода). \* Тестирование и визуализация - совместная работа: каждый предлагал тестовые сценарии, участвовал в анализе результатов и подготовке анимаций. \* Оформление отчёта и презентаций - по частям, с последующим коллективным редактированием. Регулярные встречи (очно и онлайн) позволяли быстро обмениваться идеями, выявлять ошибки и корректировать ход работы.

### 2.2.2 Коллективное обсуждение решений

Каждое важное решение принималось после обсуждения: - Как лучше реализовать периодические граничные условия? - Как структурировать код для удобства тестирования? - Какие тесты наиболее полно проверяют корректность модели? - Как визуализировать результаты, чтобы они были максимально наглядными? Обсуждение сопровождалось демонстрацией промежуточных результатов, разбором кода, анализом возникающих ошибок.

## 2.3 Программная реализация

### 2.3.1 Выбор языка и инструментов

Мы выбрали язык Julia за его высокую скорость, лаконичность и развитые средства для научных вычислений и визуализации. Для графиков использовалась библиотека Plots с бэкендом GR.

### 2.3.2 Архитектура кода

* Параметры модели (размеры решётки, направления движения частиц, цвета для визуализации) задаются в начале, что облегчает настройку и масштабирование модели.
* Создание сетки: реализована функция для создания булевой 3D-матрицы, где третье измерение отвечает за направления движения частиц.
* Добавление частиц: отдельная функция с проверкой корректности координат и направления.
* Периодические граничные условия: реализованы через фиктивные узлы по краям решётки и копирование значений с противоположных физических границ.
* Обработка столкновений: реализована по строгим правилам HPP, с учётом только физически осмысленных столкновений (лобовых и под прямым углом).
* Распространение частиц: реализовано через создание новой сетки и перенос частиц согласно их направлениям.
* Подсчёт числа частиц и импульса: отдельные функции для контроля сохранения физических величин.
* Визуализация: функция для отрисовки состояния решётки с цветными стрелками, показывающими направления движения частиц.
* Тесты: три ключевых сценария - одиночная частица, лобовое столкновение, столкновение под прямым углом. Для каждого теста создаётся анимация (GIF) [3].

### 2.3.3 Объяснение выбора архитектуры

* Периодические граничные условия выбраны для проверки корректности распространения частиц: частица, вышедшая за одну границу, должна появляться с противоположной стороны, что важно для моделирования “бесконечных” сред.
* Разделение на функции повышает читаемость и удобство тестирования.
* Визуализация позволяет не только проверить корректность работы кода, но и наглядно продемонстрировать физический смысл происходящих процессов [2].

## 2.4 Анализ результатов: что получилось и почему

### 2.4.1 Корректность работы модели

* Тест 1 (одна частица): частица движется по прямой, корректно “переходит” через границы, возвращаясь с противоположной стороны. Число частиц и импульс сохраняются.
* Тест 2 (лобовое столкновение): две частицы встречаются, после столкновения меняют направления строго по правилам HPP. Сохраняются число частиц и импульс.
* Тест 3 (столкновение под прямым углом): четыре частицы встречаются в одной точке, после столкновения разлетаются в новые направления. Все законы сохранения выполняются [1].

### 2.4.2 Визуализация

Для каждого теста были созданы анимации, позволяющие шаг за шагом наблюдать за эволюцией системы. Это позволило:

1. Убедиться в правильности работы алгоритма.
2. Наглядно продемонстрировать физические процессы (распространение, столкновения, сохранение числа частиц и импульса).

### 2.4.3 Достижения и ограничения

* Достижения: реализована полностью работоспособная модель HPP, все физические законы выполняются, тесты проходят успешно, визуализация информативна.
* Ограничения: модель HPP обладает известными недостатками (анизотропия, нефизичное поведение на макроуровне), о чём мы честно говорим в отчёте. Для более точного моделирования реальных жидкостей и газов требуются более сложные модели (например, FHP).

## 2.5 Качество работы кода: подробный разбор

1. Структурированность, читаемость и модульность

Код организован в виде отдельных функций, каждая из которых отвечает за свою задачу:

* создание сетки (create\_grid),
* добавление частицы (add\_particle!),
* применение граничных условий (apply\_periodic\_boundaries!),
* обработка столкновений (collide!),
* распространение частиц (propagate!),
* подсчёт числа частиц (count\_particles),
* вычисление импульса (calculate\_momentum),
* визуализация (plot\_grid),
* запуск тестов (run\_all\_tests).

Преимущества такого подхода:

* Код легко читать и поддерживать.
* Каждая функция имеет чётко определённую ответственность.
* Можно быстро находить и исправлять ошибки, а также расширять функционал.

1. Корректность реализации физических принципов

2.1. Периодические граничные условия

* Реализованы через фиктивные узлы по краям сетки и копирование значений с противоположных физических границ.
* Проверка на одной частице (Тест 1) показывает: частица, выходя за одну границу, корректно появляется с противоположной стороны.
* Это подтверждает правильную реализацию периодичности, что критически важно для моделирования “бесконечной” среды.

2.2. Столкновения частиц

* В функции collide! реализованы два типа столкновений: лобовое (две частицы навстречу) и под прямым углом (четыре частицы).
* Логика соответствует теории HPP: направления меняются строго по правилам, обеспечивается сохранение числа частиц и импульса.
* Тесты 2 и 3 (лобовое и угловое столкновения) показывают: после столкновения частицы разлетаются в правильных направлениях.

2.3. Сохранение числа частиц и импульса - На каждом шаге моделирования в тестах вычисляются и выводятся общее число частиц и суммарный импульс. - В анимациях и текстовых аннотациях видно, что эти величины сохраняются, что говорит о физической корректности кода.

1. Гибкость и расширяемость

* Размер сетки, направления движения, цвета для визуализации задаются в начале через константы, что позволяет легко менять параметры модели.
* Код легко масштабируется: можно увеличивать размеры сетки, добавлять новые сценарии тестирования, менять правила столкновений.

1. Визуализация и наглядность

* Для каждого теста создаются анимации (GIF), где визуально отображается движение и столкновения частиц, а также аннотируются число частиц и импульс.
* Использование разных цветов для направлений делает анимации понятными даже без глубокого погружения в код.
* Визуализация помогает не только анализировать корректность, но и презентовать результаты на защите.

1. Тестируемость и автоматизация проверки

В коде реализованы отдельные функции для трёх ключевых тестов:

* одна частица (проверка распространения и граничных условий),
* две частицы (лобовое столкновение),
* четыре частицы (столкновение под прямым углом).

Функция run\_all\_tests позволяет запускать все тесты последовательно, что удобно для автоматической проверки и демонстрации.

1. Обработка ошибок и валидация данных

* Используются @assert для проверки корректности координат частиц и направлений при добавлении в сетку.
* Это предотвращает появление некорректных состояний и облегчает отладку.

1. Документированность

* В отчёте приведены подробные комментарии к каждой функции, объясняющие смысл и работу каждого блока кода.
* Описаны все используемые параметры и логика работы алгоритма.

1. Ограничения и честная самооценка

* В отчёте честно указаны ограничения самой модели HPP (анизотропия, нефизичность на макроуровне), а не только кода.
* Это говорит о критическом отношении к результату и понимании границ применимости [3].

## 2.6 Коллективное обсуждение итогов и самооценка деятельности

### 2.6.1 Обсуждение трудностей и путей их решения

* Сложности с граничными условиями: на этапе реализации периодических границ возникли ошибки, которые были обнаружены при коллективном просмотре анимаций и исправлены после обсуждения.
* Проверка корректности столкновений: не сразу удалось реализовать все случаи столкновений, потребовалось несколько итераций и обсуждений.
* Временные ограничения: благодаря командной работе и чёткому плану удалось уложиться в сроки.

### 2.6.2 Индивидуальный и командный вклад

* Каждый участник внёс вклад в теорию, программирование, тестирование и оформление отчёта.
* Совместная работа позволила каждому освоить новые навыки: кто-то углубился в программирование на Julia, кто-то - в физику решеточных моделей, кто-то - в визуализацию данных.
* В процессе обсуждений и совместного поиска решений повысился уровень взаимопонимания и доверия в команде.

### 2.6.3 Самооценка

* Цели этапа полностью достигнуты: реализована модель, проведено тестирование, оформлен подробный отчёт.
* Качество реализации: код структурирован, документирован, легко расширяется для новых задач.
* Командная работа: эффективное распределение задач, взаимопомощь, своевременное решение проблем.
* Личные достижения: каждый участник повысил свою квалификацию в области научного моделирования и командной работы.

## 2.7 Выводы и рекомендации

Работа над проектом позволила нам:

* Освоить современные методы моделирования физических процессов.
* Получить опыт командной работы, научиться планировать и реализовывать сложные проекты.
* Научиться анализировать и визуализировать результаты моделирования.
* Критически оценивать свои достижения и ограничения [4].

**Наш проект продемонстрировал, что даже относительно простые решеточные модели позволяют точно и эффективно описывать поведение газов на микроскопическом уровне. Мы прошли путь от теории к практике, реализовав рабочую систему и подтвердив её корректность с помощью численных экспериментов.**

Возможное продолжение работы:

* Модернизация модели: переход от HPP к FHP-III, чтобы устранить анизотропию и повысить физическую достоверность.
* Добавление термодинамики: переход к модели с 9 направлениями и введение температуры.
* Моделирование фазовых переходов: добавление сил взаимодействия между частицами.
* Переход к LBE: для описания вязких течений и сложных граничных условий.
* Параллелизация: реализация на GPU с помощью CUDA.jl для повышения производительности [4].

# 3 Заключительная часть

## 3.1 Заключение

Проект был реализован на высоком уровне благодаря слаженной работе команды, глубокому анализу теории и тщательному тестированию программной реализации. Каждый участник внёс значимый вклад, а коллективное обсуждение позволило не только добиться отличного результата, но и получить ценный опыт научного сотрудничества.

# 4 Список литературы

1. Медведев Д.А.и.др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2010. С. 101.

2. Чащин Г.С. [Метод решёточных уравнений Больцмана: моделирование изотермических низкоскоростных течений](https://doi.org/10.20948/prepr-2021-99): 99. Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2021.

3. Hardy J., Pomeau Y., Pazzis O. de. [Time evolution of a two-dimensional classical lattice system](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.31.276) // Physical Review Letters. 1973. Т. 31, № 5. С. 276–279.

4. Succi S. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Oxford University Press, 2001.