Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

Групповой проект. Этап 4

Команда №4 Абакумова О.М., Астраханцева А.А., Ганина Т.С., Ибатулина Д.Э. 21 мая 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.

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

Основная часть

Итоги первого этапа проекта

- 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.

Итоги второго этапа проекта

- 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.

Итоги третьего этапа проекта

- 1. Мы реализовали модель HPP на языке Julia.
- 2. 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.

Распределение ролей и организация взаимодействия

- Теоретический анализ все участники, с последующим обсуждением на общем собрании.
- Программная реализация основная ответственность легла на участников с наиболее сильными навыками программирования на Julia.
- Тестирование и визуализация совместная работа.
- Оформление отчёта и презентаций по частям, с последующим коллективным редактированием.

Коллективное обсуждение решений

- 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?

Программная реализация

- Параметры модели
- Создание сетки
- Добавление частиц
- Периодические граничные условия
- Обработка столкновений
- Распространение частиц
- Подсчёт числа частиц и импульса
- Визуализация
- Тесты

Объяснение выбора архитектуры

- Периодические граничные условия выбраны для проверки корректности распространения частиц
- Разделение на функции повышает читаемость и удобство тестирования
- Визуализация позволяет не только проверить корректность работы кода, но и наглядно продемонстрировать физический смысл происходящих процессов

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 НРР. 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.

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). Для более точного моделирования реальных жидкостей и газов требуются более сложные модели (например, FHP).

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).

Корректность реализации физических принципов

- 1. Периодические граничные условия
- 2. Столкновения частиц
- 3. Сохранение числа частиц и импульса

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.

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.

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.

Обработка ошибок и валидация данных

- Используются <code>@assert</code> для проверки корректности координат частиц и направлений при добавлении в сетку.
- Это предотвращает появление некорректных состояний и облегчает отладку.

Документированность

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

Ограничения и честная самооценка

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

Обсуждение трудностей и путей их решения

- Сложности с граничными условиями
- Проверка корректности столкновений
- Временные ограничения

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.

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.

Выводы и рекомендации

- 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.

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.

Заключительная часть

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.

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. Чащин Г.С. Метод решёточных уравнений Больцмана // Препринты. 2021. № 99. 31 с..
- 3. Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O. Time evolution of a two-dimensional classical lattice system // Physical Review Letters. 1973. Vol. 31, № 5. P. 276–279. DOI: 10.1103/PhysRevLett.31.276
- 4. Succi, Sauro. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Oxford University Press, 2001.