

УДК 533.72

## СИСТЕМА ПРОГРАММНЫХ МОДУЛЕЙ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

О. И. Додулад<sup>1</sup>, Ю. Ю. Клосс<sup>2</sup>, В. В. Рябченков<sup>2</sup>, Ф. Г. Черемисин<sup>3</sup>

Описывается система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана, входящих в состав программно-моделирующей системы, предназначенной для решения широкого класса задач динамики разреженных газов. Приводятся основные методы и алгоритмы вычисления интеграла столкновений, особенности их программной реализации и технологии тестирования корректности моделирующей системы.

**Ключевые слова:** проблемно-моделирующая среда, кинетическое уравнение, численное моделирование.

### Введение.

В работе [1] представлено описание программно-моделирующей системы, предназначенной для решения широкого класса задач динамики разреженных газов. Программно-моделирующая система имеет достаточно сложную структуру, связанную с интерактивным вводом и выводом данных совокупностью программ-солверов, предназначенных для решения кинетического уравнения Больцмана. Программные солверы позволяют решать кинетическое уравнение для различных приложений в двумерной геометрии для оперативной оценки физических характеристик системы, в трехмерной геометрии с неструктурированными тетраэдрическими сетками для моделирования сложных систем произвольной геометрии. Кроме того, программные солверы могут эффективно использовать кластерные вычислительные системы на основе технологии MPI (Message Passing Interface) и графические процессоры на основе технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture).

Программно-моделирующая система базируется на консервативном методе дискретных ординат точного решения кинетического уравнения Больцмана [2]. В таком подходе общим для различных солверов переноса вещества является программный модуль, связанный с вычислением интеграла столкновений. В настоящей статье приводятся основные методы и алгоритмы вычисления интеграла столкновений, особенности их программной реализации и технологии тестирования корректности моделирующей системы.

**1. Описание метода.** Уравнение Больцмана для смеси газов имеет вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{p}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^N I[f_i, f_j],$$

где  $f_i$ ,  $m_i$  — функция распределения и масса молекул  $i$ -го сорта и  $I[f_i, f_j]$  — интеграл столкновений Больцмана.

Изменение функции распределения происходит благодаря двум физическим процессам: движению молекул и столкновению молекул друг с другом. Поэтому удобно представить схему численного решения уравнения Больцмана в виде последовательности более простых схем: схемы, аппроксимирующей уравнение переноса, и схемы, аппроксимирующей уравнение однородной релаксации:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^N I[f_i, f_j]. \quad (1)$$

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (МФТИ), факультет общей и прикладной физики, Институтский переулок, д. 9, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный; студент, e-mail: dodulad@list.ru

<sup>2</sup> Российский научный центр "Курчатовский институт" (РНЦ КИ), пл. Академика Курчатова, д. 1, 123182, Россия, Москва; Ю. Ю. Клосс, нач. лаборатории, e-mail: kloss@mnpt.kiae.ru; В. В. Рябченков, зам. нач. отдела, e-mail: rrv55@kiae.ru

<sup>3</sup> Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН (ВЦ РАН), ул. Вавилова, д. 40, 119333, Москва; гл. науч. сотр., e-mail: tcherem@ccas.ru

В дальнейшем нас будет интересовать уравнение (1), в котором оператор интеграла столкновений имеет вид

$$I[f_i, f_j](t, x, p) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f'_i f'_j - f_i f_j) g b d\varepsilon d^3 p_*,$$

где  $f_i = f_i(t, x, p)$ ,  $f_j = f_j(t, x, p_*)$ ,  $f'_i = f(t, x, p')$ ,  $f'_j = f(t, x, p'_*)$ ,  $p'$  и  $p'_*$  — импульсы молекул после столкновения,  $g = p_*/m_j - p/m_i$ ,  $b$  — прицельное расстояние сталкивающихся молекул,  $\varepsilon$  — наклон плоскости, в которой происходит столкновение.

В импульсном пространстве для каждого из компонентов газовой смеси выбирается область  $\Omega_i$  объема  $V_i$ , в которой строится сетка из  $N_i^\Xi$  равноотстоящих импульсных узлов  $\Xi = \{p_\gamma\}$ . Периоды сеток должны совпадать:  $h_i = h$ , это необходимо для консервативности численной схемы по импульсу. В качестве областей  $\Omega_i$  в большинстве задач разумнее выбирать шары некоего радиуса, который определяется так, чтобы функция распределения вне шара была пренебрежимо мала.

**1.1. Метод численного интегрирования.** На введенной импульсной сетке функция распределения и интеграл столкновений определяются следующим образом [3]:

$$f_i(t, x, p) = \sum_{\gamma \in \Xi_i} f_\gamma(t, x) \delta(p - p_\gamma), \quad I_i(t, x, p) = \sum_{\gamma \in \Xi_i} I_\gamma(t, x) \delta(p - p_\gamma).$$

Воспользовавшись свойством симметрии интеграла столкновений, получаем

$$I_\gamma[f_i, f_j] = \frac{1}{4} \int \left( \delta(p - p_\gamma) + \delta(p_* - p_\gamma) - \delta(p' - p_\gamma) - \delta(p'_* - p_\gamma) \right) (f'_i f'_j - f_i f_j) g b d\varepsilon d^3 p d^3 p_*. \quad (2)$$

Полученный интеграл является восьмимерным, что усложняет его численное вычисление. Одним из подходов интегрирования является метод Монте-Карло, однако данный метод обладает медленной сходимостью при увеличении числа узлов интегрирования:  $O(1/\sqrt{N})$ . В связи с этим применяется метод интегрирования, основанный на регулярных сетках Коробова [4]. Ошибка интегрирования при их применении в среднем ведет себя как  $O(1/N)$ .

В этом случае сетка Коробова строится для  $p_{\alpha\nu}, p_{\beta\nu}, b_\nu, \varepsilon_\nu$  из  $N_\nu$  узлов в области  $\Omega_i \times \Omega_j \times [0, 2\pi] \times [0, b_m]$  так, что  $p_{\alpha\nu}, p_{\beta\nu}$  совпадают с узлами импульсных сеток  $\Xi_i, \Xi_j$ .

**1.2. Вычисление угла рассеяния.** В системе центра инерции относительная скорость сталкивающихся молекул поворачивается в плоскости столкновения на угол рассеяния  $\theta$ . Таким образом, зная угол рассеяния, нетрудно найти импульсы молекул после столкновения. Угол рассеяния  $\theta$ , в свою очередь, зависит от потенциала парного взаимодействия молекул  $U_{ij}(r_{ij})$ .

Как показывают исследования, наибольшая точность определения угла рассеяния, особенно при малых отклонениях, достигается непосредственным численным интегрированием уравнения движения

$$\mu \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = -\nabla U = -\frac{\partial U}{\partial r} \frac{r}{|r|}, \quad \mu = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j},$$

со следующими начальными условиями:

$$r|_{t=0} = \left( -\sqrt{r_{\text{cut}}^2 - b^2}, b \right), \quad \left. \frac{dr}{dt} \right|_{t=0} = (g, 0),$$

где  $r_{\text{cut}}$  — радиус обрезания потенциала взаимодействия.

В случае взаимодействия различных молекул параметры потенциала межкомпонентного взаимодействия определяются из комбинационных соотношений от параметров потенциала внутрикомпонентного взаимодействия [5].

**1.3. Аппроксимация импульсов после столкновения.** Импульсы после столкновения  $p'_{\alpha\nu}, p'_{\beta\nu}$  не лежат в узлах импульсной сетки, поэтому две последние  $\delta$ -функции в выражении (2) требуют преобразования:

$$\begin{aligned} \delta(p_{\alpha\nu} - p_\gamma) &= (1 - r_\nu) \delta(p_{\lambda\nu} - p_\gamma) + r_\nu \delta(p_{\lambda\nu + s_\nu} - p_\gamma), \\ \delta(p_{\beta\nu} - p_\gamma) &= (1 - r_\nu) \delta(p_{\mu\nu} - p_\gamma) + r_\nu \delta(p_{\mu\nu - s_\nu} - p_\gamma), \end{aligned}$$

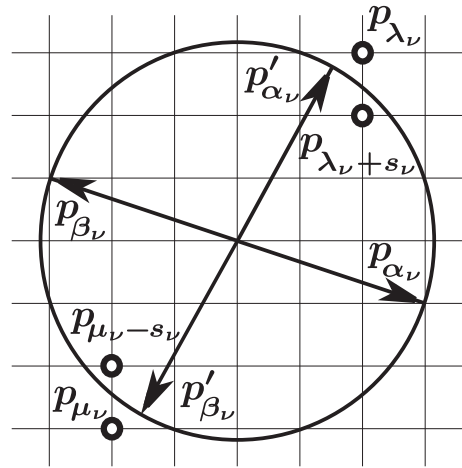


Рис. 1. Схема аппроксимации импульсов на сетке

где узлы  $p_{\lambda_\nu}$ ,  $p_{\lambda_\nu+s_\nu}$ ,  $p_{\mu_\nu}$ ,  $p_{\mu_\nu-s_\nu}$  и коэффициент  $r_\nu$  выбираются так, чтобы выполнялись законы сохранения импульса и энергии (закон сохранения вещества при данной замене уже выполняется). Коэффициент  $r_\nu$  находится из закона сохранения энергии:  $E_0 = (1 - r_\nu)E_1 + r_\nu E_2$ . Отсюда имеем

$$r_\nu = \frac{E_0 - E_1}{E_2 - E_1}, \quad (3)$$

где  $E_0 = \frac{p_{\alpha_\nu}^2}{2m_i} + \frac{p_{\beta_\nu}^2}{2m_j}$ ,  $E_1 = \frac{p_{\lambda_\nu}^2}{2m_i} + \frac{p_{\mu_\nu}^2}{2m_j}$  и  $E_2 = \frac{p_{\lambda_\nu+s_\nu}^2}{2m_i} + \frac{p_{\mu_\nu-s_\nu}^2}{2m_j}$ . Выбор узлов  $\lambda_\nu$ ,  $\lambda_\nu + s_\nu$  должен обеспечивать выполнение  $0 \leq r_\nu \leq 1$ . Сохранение импульса обеспечивается симметричным выбором аппроксимационных узлов (рис. 1).

Для вычисления  $f'_{\alpha_\nu} f'_{\beta_\nu}$  предпочтительнее всего было бы использовать следующую интерполяцию:  $f'_{\alpha_\nu} f'_{\beta_\nu} = (f_{\lambda_\nu} f_{\mu_\nu})^{1-r_\nu} (f_{\lambda_\nu+s_\nu} f_{\mu_\nu-s_\nu})^{r_\nu}$ , которая обеспечивает равенство нулю интеграла столкновений для максвелловского распределения.

**1.4. Схема “непрерывного счета”.** Окончательно оператор интеграла столкновений приобретает вид

$$I_\gamma = \sum_{\nu=1}^{N_\nu} \sum_{l=0}^N \sum_{j=0}^N B \left[ (1 - r_\nu) (\delta_j^i \delta_\gamma^{\lambda_\nu} + \delta_l^i \delta_\gamma^{\mu_\nu}) + r_\nu (\delta_j^i \delta_\gamma^{\lambda_\nu+s_\nu} + \delta_l^i \delta_\gamma^{\mu_\nu-s_\nu}) - (\delta_j^i \delta_\gamma^{\alpha_\nu} + \delta_l^i \delta_\gamma^{\beta_\nu}) \right] \Delta_\nu, \quad (4)$$

где  $B = \frac{V_j \pi b_m^2 N_l^\Xi}{4N_\nu}$  и  $\Delta_\nu = (f_{\alpha_\nu} f_{\beta_\nu} - (f_{\lambda_\nu} f_{\mu_\nu})^{1-r_\nu} (f_{\lambda_\nu+s_\nu} f_{\mu_\nu-s_\nu})^{r_\nu}) g_\nu$ .

Для решения (1) применяется схема “непрерывного счета”. Сведем данное уравнение к интегральному уравнению  $f_\gamma(t + \tau) = f_\gamma(t) + \int_t^{t+\tau} I_\gamma dt$ . Подставляя сюда интеграл (4), получим

$$f_\gamma^\nu = f_\gamma^{\nu-1} + \tau \Delta_\nu, \quad (5)$$

где  $\Delta_\nu$  —  $\nu$ -й член суммы (4).

Благодаря использованию данной схемы совместно с процессом случайной перестановки узлов сетки Коробова достигается второй порядок малости ошибки по временному шагу.

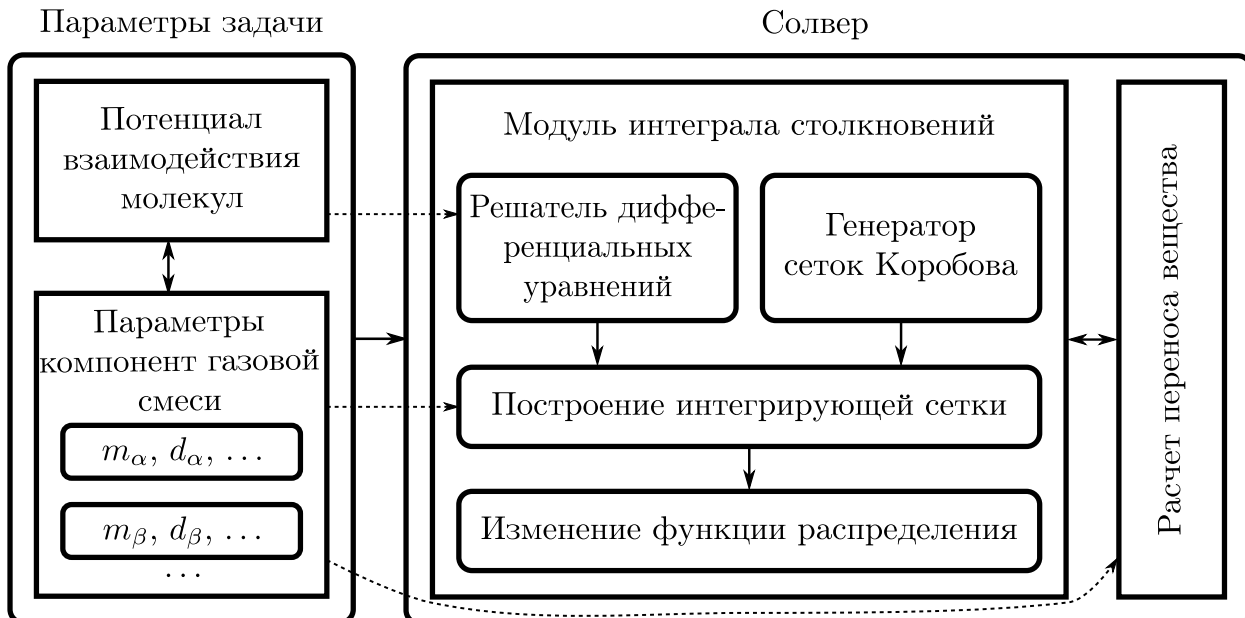


Рис. 2. Модуль интеграла столкновений и его взаимосвязи

**2. Программная реализация.** Расщепление численной схемы решения уравнения Больцмана позволяет отделить часть, ответственную за интеграл столкновений, в отдельный модуль. Схема модуля интеграла столкновений и его взаимосвязей показана на рис. 2.

Взаимодействие модуля с другими частями программно-моделирующей системы происходит в процессе его инициализации и в течение итерационного счета функции распределения. При инициализации модуля задаются параметры, постоянные на всем протяжении расчета, такие как численные параметры и параметры газа (потенциал взаимодействия молекул, свойства компонентов газа). Итерационный процесс выполняется согласно схеме, представленной на рис. 3.

Далее рассматриваются процессы, происходящие внутри модуля интеграла столкновений.

**2.1. Построение расчетной сетки.** Под расчетной сеткой здесь понимается набор величин в выражении (5), не зависящих от функции распределения. Это набор из индексов импульсов, коэффициентов вклада и множителей каждого слагаемого:  $\alpha_\nu, \beta_\nu, \lambda_\nu, \lambda_\nu + s_\nu, \mu_\nu, \mu_\nu - s_\nu, r_\nu, c_\nu$  для  $\nu = 1, \dots, N_\nu$ . Таким образом, результатом рассматриваемого процесса является построение расчетной сетки по заданным параметрам сталкивающихся молекул (масса, потенциал взаимодействия, параметры, связанные с представлением данных), которая в дальнейшем будет использоваться при непосредственном применении оператора интеграла столкновений — изменении функции распределения.

Данный процесс является довольно ресурсоемким, поэтому генерируется одна расчетная сетка для всех пространственных узлов (рис. 3).

Блок-схема алгоритма генерации расчетной сетки показана на рис. 4. Основой является цикл по набору из импульсов сталкивающихся молекул, прицельным расстояниям и наклонам плоскости столкновения:

$$p_{\alpha_\nu}, p_{\beta_\nu}, b_\nu, \varepsilon_\nu, \quad (6)$$

где  $\nu = 1, \dots, N$ . Этот набор получается из восьмимерной сетки Коробова. Так, например, выражение для прицельного расстояния имеет вид  $b_\nu = b_{\max} \left\{ \frac{a_b \nu}{N} + b_{\text{rand}} \right\}$ , где  $a_b$  — соответствующий оптимальный коэффициент Коробова, фигурные скобки обозначают взятие дробной части. Случайное смещение всей сетки Коробова  $b_{\text{rand}}$  не портит ее качества, и таким образом осуществляется генерация различных на каждом новом временном шаге сеток, что препятствует появлению паразитных интегралов движения.

Для нахождения импульсов после столкновения  $p'_{\alpha_\nu}, p'_{\beta_\nu}$  помимо элемента из набора (6) необходимо знать о потенциале взаимодействия сталкивающихся молекул, а именно знать зависимость  $\theta = \theta(b, g)$ , которая, как показано выше, в общем случае является интегральной. За разрешение данной зависимости отвечает модуль решения систем дифференциальных уравнений. Данный процесс является затратным по времени счета, поэтому применяется следующий подход. На этапе инициализации заранее просчитывается сеточная зависимость  $\theta^{ij} = \theta(b^i, g^j)$ , а далее непрерывная зависимость  $\theta(b, g)$  получается путем интерполяции.

Другим важным моментом является реализация выбора аппроксимационных узлов, при этом должно выполняться условие  $E_1 < E_0 < E_2$ . Как показывают тесты, наилучшим является случай, когда  $E_1$  и  $E_2$  максимально близко подходят к  $E_0$ . Рассмотрим разность

$$\begin{aligned} E_0 - E_1 &= \frac{p'^2_\alpha}{2m_i} + \frac{p'^2_\beta}{2m_j} - \frac{p^2_\lambda}{2m_i} - \frac{p^2_\mu}{2m_j} = \\ &= \frac{(-p' + m_i u)^2}{2m_i} + \frac{(p' + m_j u)^2}{2m_j} - \frac{(-p'_1 + m_i u)^2}{2m_i} - \frac{(p'_1 + m_j u)^2}{2m_j} = \frac{p'^2 - p'^2_1}{2\mu}. \end{aligned}$$

Аналогично можно получить, что  $E_2 - E_1 = \frac{p'^2_2 - p'^2_1}{2\mu}$ , где  $p'_1$  и  $p'_2$  импульсы  $i$ -молекулы относительно центра масс. Это позволяет выбирать аппроксимационные импульсы для одной молекулы, а аппрокси-

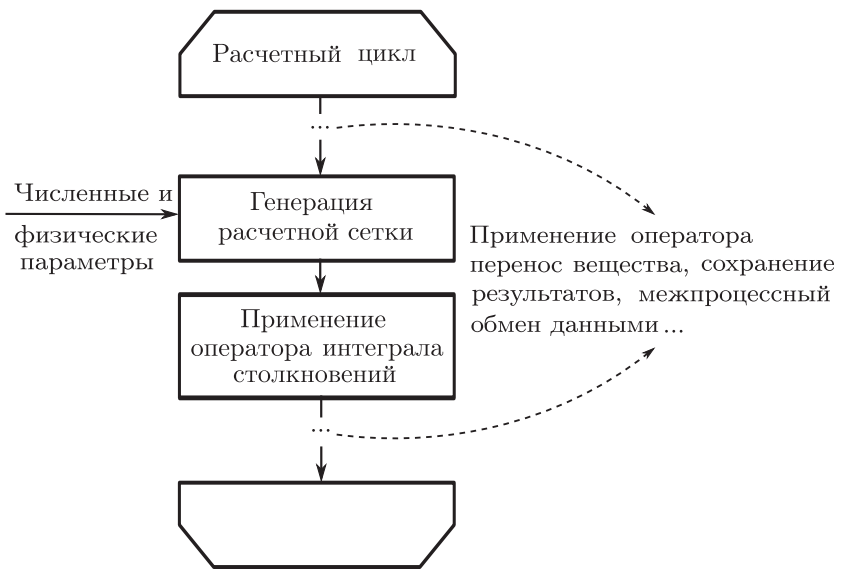


Рис. 3. Блок-схема работы модуля интеграла столкновений

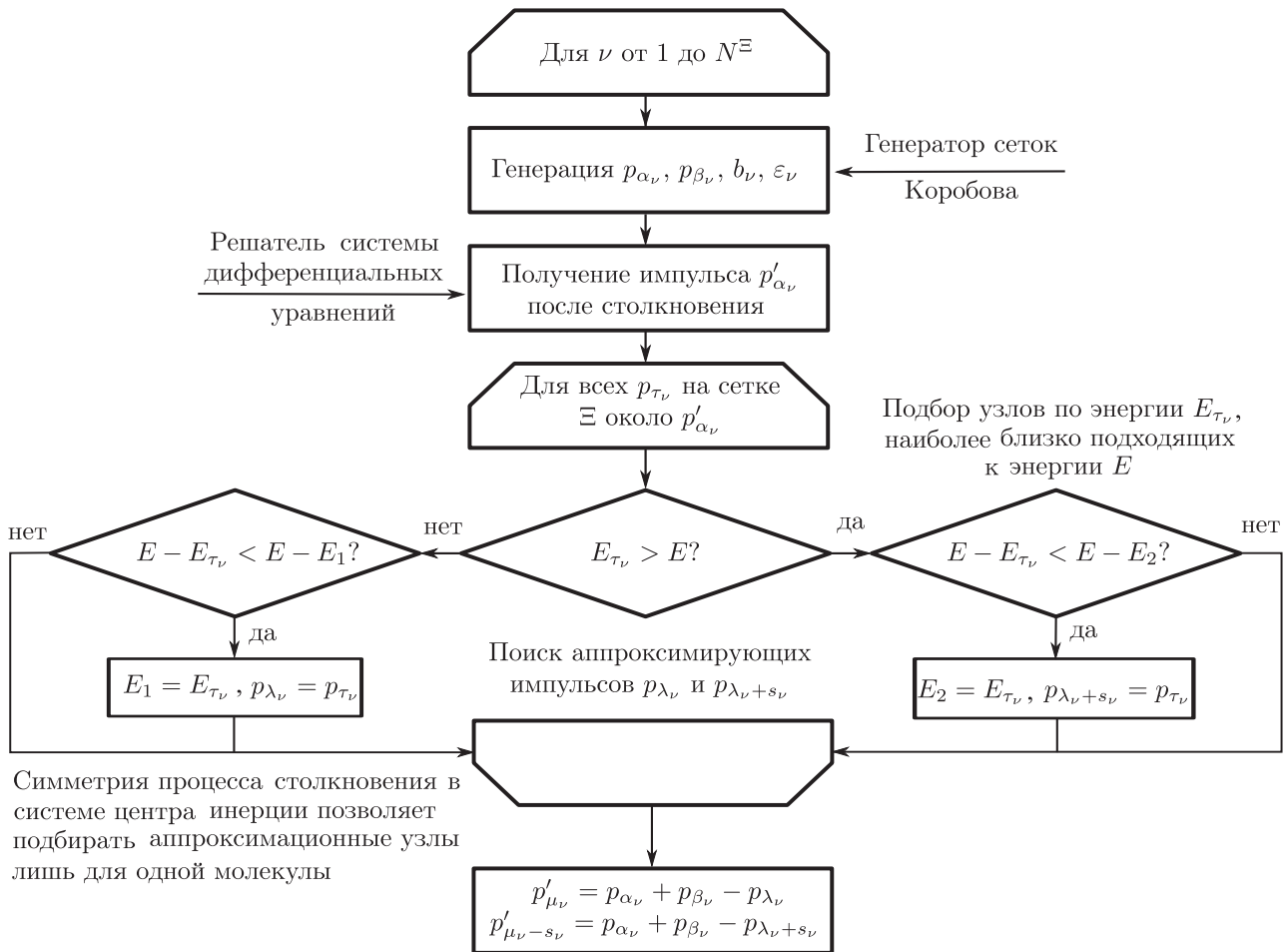


Рис. 4. Блок-схема алгоритма генерации расчетной сетки

мационные импульсы для второй молекулы получать из соображения консервативности. Подборка осуществляется путем перебора восьми узлов сетки около импульса  $p_\alpha$ . После получения аппроксимационных узлов коэффициент вкладов  $r$  и множитель  $s$  вычисляются согласно выражениям (3) и (4), таким образом получается полный набор необходимых величин.

Конечно, существует вероятность, что среди упомянутых восьми узлов не окажется двух подходящих узлов, однако эта вероятность достаточно мала, что позволяет отбрасывать такие столкновения.

Как упоминалось выше, важным моментом достижения второго порядка точности вычисления интеграла столкновений является случайное перемешивание сетки. Код использованного алгоритма перемешивания имеет следующий вид:

```
for (i = n-1; i > 0; ++i)
    swap(a[i], a[rand(i)]);
```

**2.2. Изменение функции распределения.** Итак, после построения расчетной сетки производится само вычисление функции распределения на следующем шаге согласно схеме “непрерывного счета” (5). Так как в схеме нет необходимости хранить функцию распределения на предыдущем временном шаге, происходит непосредственное изменение  $f_\gamma$ . Данный процесс выполняется для всех пространственных узлов, поэтому число операций равно  $O(MN_\nu)$ , где  $M$  — число пространственных узлов. Сложность итерации переноса —  $O(MN_p)$ , где  $N_p$  — число узлов в импульсной сетке, которое зачастую намного меньше  $N_\nu$ . Рассматриваемый процесс занимает большую часть времени расчета, что, как следствие, требует его тщательной оптимизации.

Ресурсоемкой операцией является возведение в степень в выражении  $(f_{\lambda_\nu} f_{\mu_\nu})^{1-r_\nu} (f_{\lambda_\nu + s_\nu} f_{\mu_\nu - s_\nu})^{r_\nu}$ .

Для ускорения вычисления операции возведения в степень данная операция реализована с использованием набора инструкций SSE и SSE2 (Streaming SIMD Extensions).

Из-за отсутствия прямой инструкции возведения в степень данная операция сводится к операциям ло-

гарифма по основанию 2 и возведения 2 в степень:  $x^y = 2^{y \log_2 x}$ , которые реализуются с учетом машинного представления чисел.

Рассмотрим операцию логарифма для одинарной точности. Числа с плавающей точкой хранятся в форме мантиссы и экспоненты. Пусть  $x = m 2^e$ . Тогда  $\log_2 x = \log_2(m 2^e) = e + \log_2 m$ . Экспонента из машинного представления чисел может быть получена по формуле  $e = ((\hat{x} \wedge (0x7F80000)_{16}) \lll 23) - 127$ , где “ $\lll$ ” — оператор сдвига; мантисса в интервале  $[1, 2)$  — по формуле  $m = (\hat{x} \wedge (0x7FFFF)_{16}) \vee 1.0$ . Знаком “ $\hat{\phantom{x}}$ ” обозначены машинные представления чисел. Значение  $\log_2 m$  вычисляется путем представления в виде ряда по степеням  $\frac{m-1}{m+1}$ . Первые четыре члена ряда аппроксимируют точное значение с относительной ошибкой менее  $10^{-5}$ .

Операция возведения в степень сводится к логическим операциям, операциям сдвига, сложения, вычитания, умножения и деления. За счет векторизации расчета и несущественной потери точности достигается прирост производительности до четырех раз по сравнению с использованием стандартной функции возведения в степень.

**3. Технологии тестирования.** Применение модуля в реальных задачах требует его предварительного тщательного тестирования. Первостепенными проверками являются проверка на консервативность и проверка на обеспечение максвелловского распределения в задаче релаксации. Помимо них тестирование также проводилось на задачах медленных течений: обеспечение верных коэффициентов теплопроводности и вязкости моделируемых газов в приближении сплошной среды, а также сверхзвуковых: получение структуры плоской ударной волны.

**3.1. Теплопроводность и вязкость.** Постановка задачи теплопроводности следующая. Рассматривается газ между двумя стенками, температура которых  $T_1$  и  $T_2$  поддерживается постоянной. Согласно уравнениям сплошной среды, поток тепла между стенками пропорционален градиенту температуры  $q = \kappa \nabla T$ , откуда определяется коэффициент теплопроводности  $\kappa$  и производится его сравнение с аналитически рассчитанным значением для потенциала твердых сфер диаметра  $d$  [6]:  $\kappa = \frac{75}{64\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{T}}{d^2}$ .

Простейшей задачей определения коэффициента вязкости является плоская задача вытекания газа из сосуда с изначально повышенным давлением в другой сосуд по трубке. Здесь согласно уравнениям Навье–Стокса вторая производная профиля продольной скорости в трубке связана с разницей давлений в сосудах следующим образом:  $\Delta p = -\nu l \frac{d^2 v_x}{dy^2}$ , где  $l$  — длина трубки. Аналитическое значение коэффициента вязкости для потенциала твердых сфер определяется так:  $\nu = \frac{5}{16\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{mT}}{d^2}$ . Для обеих задач на грубых сетках различие составляет менее 5%, что говорит об успешной проверке на задачах медленных течений.

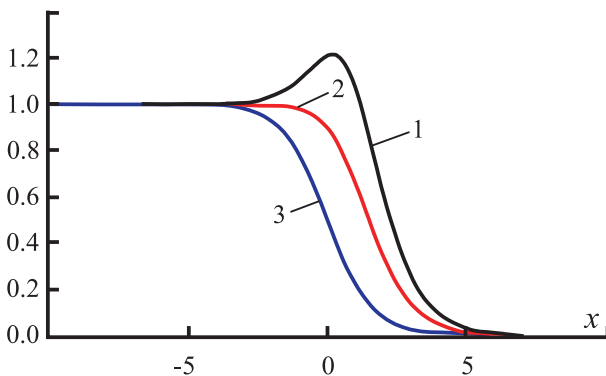


Рис. 5. Структура плоской ударной волны в простом газе: 1)  $T_x$ , 2)  $T$ , 3)  $n$

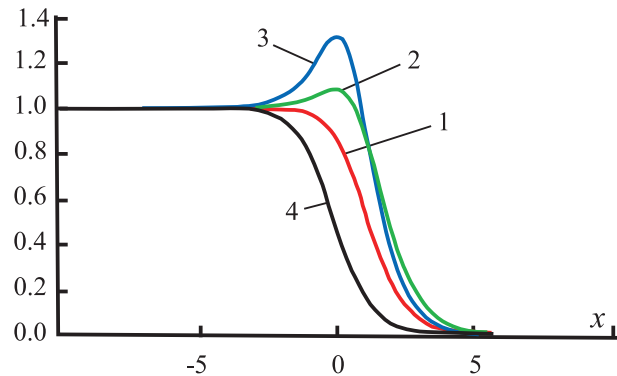


Рис. 6. Структура плоской ударной волны в газе смеси молекул  $m_1/m_2 = 1/2$ : 1)  $T$ , 2)  $T_x^\alpha$ , 3)  $T_x^\beta$ , 4)  $n$

**3.2. Структура плоской ударной волны.** Важной задачей исследования сверхзвуковых течений является задача об определении структуры плоской ударной волны. Моделирование ударной волны проводилось в системе отсчета, связанной с фронтом ударной волны, в такой области, на границе которой можно предположить, что выполняется максвелловское распределение. Макропараметры газа — температура  $T$ , концентрация  $n$  и скорость  $v$  — на границе связаны условиями Рэнкина–Гюгонио для заданного

числа Маха  $M$ :

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{(\gamma + 1)M^2}{(\gamma - 1)M^2 + 2}, \quad \frac{T_2}{T_1} = \frac{(2\gamma M^2 - (\gamma - 1))((\gamma - 1)M^2 + 2)}{(\gamma + 1)^2 M^2}.$$

В случае одноатомного газа без внутренних степеней свободы имеем  $\gamma = 5/3$ .

Результаты моделирования приведены на рис. 5 и 6 для  $M = 3$  при использовании потенциала Леннарда–Джонса для простого газа и смеси молекул с отношением масс  $m_1/m_2 = 1/2$ . Они согласуются с результатами расчетов других авторов, проводивших расчет тем же методом [8] и другим методом [9], а также с экспериментальными данными [10].

**3.3. Примеры моделирования.** На рис. 7 представлен результат моделирования двумерного одноступенчатого насоса Кнудсена. Данное устройство состоит из двух одинаковых резервуаров, соединенных последовательно узким и широким каналами, к которым приложены противоположные градиенты температур.

Консервативность метода решения уравнения Больцмана позволяет получить стационарное распределение макроскопических потоков газа, что требует проведения порядка  $10^5$  итераций. Устойчивость метода в отношении влияния статистических шумов позволяет отслеживать медленные течения, появляющиеся благодаря эффекту теплового скольжения. Моделирование двумерной задачи с приемлемой точностью обычно занимает несколько часов на одной рабочей станции (4 ядра по 3 ГГц).

Несмотря на сложности, возникающие при расчете высокоскоростных течений разреженного газа, в связи с образованием областей значительного сжатия газа на масштабах длины свободного пробега и застойных зон низкой плотности за препятствием, метод хорошо себя проявил при решении указанных задач. На рис. 8 показано распределение скорости и температуры газа после прохождения ударной волны через решетку.

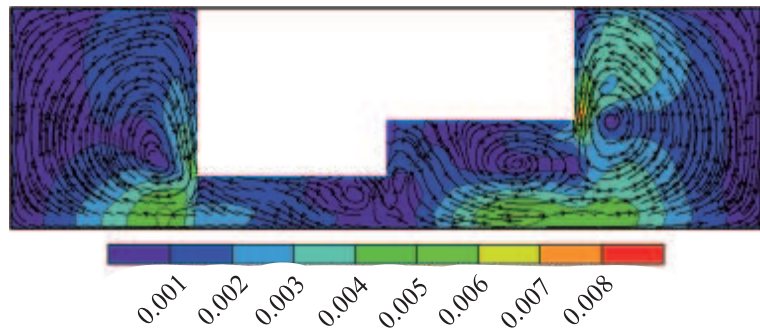


Рис. 7. Стационарное распределение макроскопических потоков газа

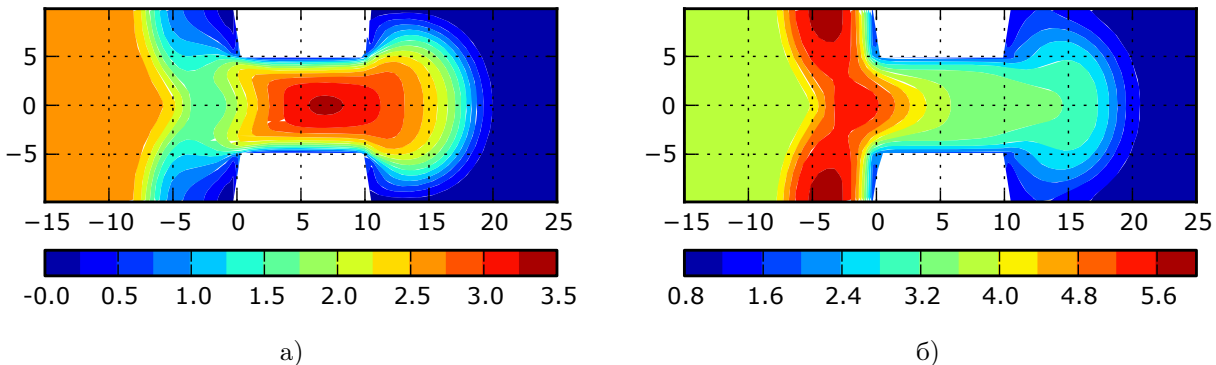


Рис. 8. Распределение скорости (а) и температуры газа (б) после прохождения ударной волны через решетку

**4. Заключение.** Рассмотренный модуль расчета интеграла столкновений успешно применяется для моделирования широкого класса задач динамики разреженных газов [11–13].

Дальнейшими направлениями развития модуля являются расширение базы потенциалов взаимодействия молекул, реализация вычисления интеграла столкновения в цилиндрической системе координат, обобщение модуля для расчета газа с внутренними степенями свободы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Rogozin О.А., Рябченков В.В., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В. Проблемно-моделирующая среда для расчета и анализа газокинетических процессов (в печати).

2. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. **357**, № 1. 53–56.
3. Черемисин Ф.Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 2006. **46**, № 2. 329–343.
4. Коробов Н.М. Теоретико-числовые методы в приближенном анализе. М.: Физматгиз, 1963.
5. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Иностранная литература, 1960.
6. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2007.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2007.
8. Josyula E., Vedula P., Bailey W.F. Kinetic solution of shock structure in a non-reactive gas mixture // Proc. 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting. Orlando, 2010. 1–16.
9. Ohwada T. Structure of normal shock waves: direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Phys. Fluids A. 1993. **5**, N 1. 217–234.
10. Alsmeyer H. Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // J. Fluid. Mech. 1976. **74**, N 3. 497–513.
11. Аникин Ю.А., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г. Компьютерное моделирование и анализ эксперимента Кнудсена 1910 года // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 8. 6–14.
12. Клосс Ю.Ю., Rogozin O.A., Черемисин Ф.Г. Компьютерное моделирование многоступенчатого микронасоса Кнудсена в плоской геометрии // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 6. 24–32.
13. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г. Падение ударной волны на плоскую преграду, содержащую микрощели // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. **10** (<http://www.chemphys.edu.ru/media/files/2009-12-21-001.pdf>).

Поступила в редакцию  
02.10.2010

---