

УДК 519.6; 533.72

ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ МЕТОД ЧАСТИЦ-В-ЯЧЕЙКАХ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДИНАМИКИ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА. ЧАСТЬ I

Е. А. Малков¹, М. С. Иванов¹

Предлагается метод численного решения уравнения Больцмана, принадлежащий к семейству детерминированных методов частиц-в-ячейках, и представляются результаты расчетов одно-родной релаксации газа, выполненные с его помощью. Разработка подобного метода обусловлена возможностью представления интеграла столкновений в дивергентной форме.

Ключевые слова: динамика разреженного газа, уравнение Больцмана, численные методы.

1. Введение. Основным уравнением динамики разреженного газа является интегро-дифференциальное уравнение Больцмана для одночастичной функции распределения $f = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \text{St}(f). \quad (1)$$

В правой части уравнения стоит нелинейный интегральный оператор — интеграл столкновений

$$\text{St}(f) = \int_{R^3} d^3 v_1 \int_{S^2} d^2 n (f' f'_1 - f f_1) |\mathbf{V}| \sigma(V, \cos(\theta)),$$

$f = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$, $f_1 = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1)$, $f' = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}')$, $f'_1 = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}'_1)$, $\mathbf{v}' = \frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1}{2} + \frac{|\mathbf{V}|}{2} \mathbf{n}$, $\mathbf{v}'_1 = \frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1}{2} - \frac{|\mathbf{V}|}{2} \mathbf{n}$, $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$, \mathbf{n} — единичный вектор (параметр столкновения), задающий направление относительной скорости после столкновения, $\sigma = \sigma(V, \cos(\theta))$ — дифференциальное сечение рассеяния, θ — угол между векторами относительной скорости частиц до и после столкновения.

Вид уравнения (1) свидетельствует о предположениях, положенных в основу физической модели разреженных газов, о независимости и аддитивности процессов переноса в физическом пространстве, обусловленного пространственными градиентами функции распределения, и парных столкновений молекул, изменяющих их скорости.

Нелинейная структура и многомерность уравнения Больцмана представляют значительные трудности для его численного решения конечно-разностными методами. Альтернативой конечно-разностных методов решения уравнения Больцмана является метод прямого статистического моделирования (Direct Simulation Monte Carlo, DSMC), предложенный Г. Бердом [1] и развитый в работах О. М. Белоцерковского, В. Е. Яницкого, М. С. Иванова и С. В. Рогазинского [2–5]. Основная идея этого метода заключается в разбиении области течения разреженного газа на пространственные ячейки размером порядка длины свободного пробега и расщеплении задачи на два независимых физических процесса — свободно-молекулярный перенос $\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}$ и релаксацию $\frac{\partial f}{\partial t} = \text{St}(f)$.

Функция распределения представляется N модельными частицами. На первом этапе частицы смещаются на расстояние $\mathbf{v}\Delta t$, а на втором этапе скорости частиц вычисляются на основе розыгрыша столкновений по некоторому вероятностному сценарию. Описанная схема в главных чертах совпадает с универсальной схемой метода “частиц-в-ячейках” (Particles-In-Cells, PIC), содержащей *лагранжев этап* — перенос приписываемых частицам характеристик, не меняющихся вдоль траектории движения, и *эйлеров этап* — расчет несохраняющихся характеристик частиц, проводимый в каждой из отдельных ячеек эйлеровой сетки. Впервые метод “частиц-в-ячейках” был предложен Ф. Х. Харлоу [6] для решения задач газовой динамики, его математическое обоснование было дано позже в работе [7]. Методологическое родство метода прямого статистического моделирования с методами частиц-в-ячейках позволяет назвать его *статистическим методом “частиц-в-ячейках” для решения задач динамики разреженного газа* [2],

¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Институтская, 4/1, 630090, Новосибирск; Е. А. Малков, вед. науч. сотр., e-mail: malkov@itam.nsc.ru; М. С. Иванов, зав. лаб., e-mail: ivanov@itam.nsc.ru

учитывая вероятностный характер расчетов на эйлеровом этапе. В настоящей работе представляется *детерминированный метод “частиц-в-ячейках” для решения задач динамики разреженного газа*, сохраняющий преимущества методов частиц и не содержащий вероятностных алгоритмов. Разработка этого метода основана на дивергентной записи нелинейного уравнения Больцмана.

Прежде чем перейти к последовательному изложению метода, приведем во введении некоторые наводящие соображения, основанные на аналогии с применением метода частиц-в-ячейках для расчетов задач динамики звездных систем [8]. Основными уравнениями динамики звездных систем, описываемой одночастичной функцией распределения $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$, являются бесстолкновительное кинетическое уравнение и уравнение Пуассона:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(t, \mathbf{r}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}} &= 4\pi G \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}, \end{aligned} \tag{2}$$

где $\mathbf{F} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{r}}$ — самосогласованное гравитирующее поле, определяемое пространственной плотностью массы. Левая часть уравнения (2) имеет вид лагранжевой производной в фазовом пространстве, а само уравнение выражает свойство сохранения фазовой плотности вдоль траекторий. Представление функции распределения модельными частицами, движущимися вдоль характеристик уравнения (2), является естественной процедурой при построении метода частиц-в-ячейках для бесстолкновительных систем (эйлеров этап заключается в решении уравнения Пуассона и вычислении гравитирующего поля $\mathbf{F}(t, \mathbf{r})$). Однако дискретизация функции распределения набором частиц возможна и тогда, когда кинетическое уравнение выражает дифференциальный закон сохранения массы (количества частиц или другой интегральной величины, в зависимости от нормировки функции распределения), т.е. тогда, когда оно может быть записано в дивергентном виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial f \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \tag{3}$$

где $\mathbf{F} = \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ и, вообще говоря, $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} \neq 0$. Возможность дискретизации функции распределения набором частиц для уравнений вида (3) рассматривается на эвристическом уровне в работе [9]. В следующем разделе приводится набросок строгого обоснования такой дискретизации (имеющегося, например, в [10]).

Таким образом, представление нелинейного столкновительного уравнения Больцмана в дивергентной форме позволяет применить для его численного решения схему “частиц-в-ячейках”. Следует отметить, что существуют заметные отличия представляемого здесь метода от традиционных детерминированных методов “частиц-в-ячейках” для решения задач физики плазмы и динамики звездных систем, а также от метода прямого статистического моделирования. Эти отличия обусловлены тем, что эйлерова сетка строится не только в физическом пространстве, но и в скоростном пространстве. Иными словами, в детерминированном методе “частиц-в-ячейках” для решения задач динамики разреженного газа рассматриваются ячейки фазового пространства.

2. Дивергентная форма уравнения Больцмана. Уравнение Больцмана в дивергентной форме имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{v}f)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial(\mathbf{Q})}{\partial \mathbf{v}} = 0, \tag{4}$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{v}} = -\text{St}(f, f), \tag{5}$$

где $\mathbf{Q}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{m} \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ — векторный поток молекул в скоростном пространстве. При такой записи уравнение Больцмана имеет вид дифференциального закона сохранения и описывает сжимаемый поток молекул в фазовом пространстве, движущихся под действием векторного поля с пространственной компонентой \mathbf{v} и компонентой в скоростном пространстве $\frac{1}{m} \mathbf{F}$. Изменение функции распределения $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ во времени можно трактовать как результат действия двух аддитивных процессов — переноса в физическом пространстве и переноса в пространстве скоростей, обусловленного изменением скорости частицы под действием коллективной силы \mathbf{F} . Запись уравнения (4) не предполагает конкретного вида столкновительного члена, поэтому можно говорить о *дивергентной форме кинетических уравнений*, имея в виду также и модельные кинетические уравнения. Впервые дивергентная форма нелинейного кинетического уравнения Больцмана была предложена в работе [9], где на ее основе были проведены качественные

аналитические исследования некоторых свойств решений уравнения Больцмана и модельных уравнений. Не так давно [11, 12] были независимо предложены различные дивергентные формы интеграла столкновений. На основе подхода, изложенного в работе [12], развивается бессеточный численный метод решения нелинейного уравнения Больцмана [13].

Как и в [9], в настоящей статье делается предположение о безвихревом характере векторного поля \mathbf{Q} в скоростном пространстве. В этом случае его можно представить в виде градиента некоторого скалярного поля Φ : $\mathbf{Q} = -\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{v}}$. Тогда уравнение (5) сводится к уравнению Пуассона

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{v}} \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{v}} = \text{St}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (6)$$

Уравнение (6) решается в скоростном пространстве при фиксированных значениях времени в фиксированных точках физического пространства, соответственно мы опускаем запись зависимости функций от переменных t и \mathbf{r} , имеющих в данном контексте смысл параметров. Решение уравнения (6), удовлетворяющее естественному граничному условию $\Phi(\mathbf{v}) \rightarrow 0$ при $|\mathbf{v}| \rightarrow \infty$, имеет вид

$$\Phi(\mathbf{v}) = -\frac{1}{4\pi} \int_{R^3} \frac{\text{St}(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d^3v'. \quad (7)$$

Соответственно, $\mathbf{Q}(\mathbf{v}) = -\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{v}} = -\frac{1}{4\pi} \int_{R^3} \frac{\text{St}(\mathbf{v}')(\mathbf{v} - \mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|^3} d^3v'.$

3. Метод частиц-в-ячейках для решения уравнения Больцмана. Аппроксимируем функцию распределения в уравнении (4) суммой следующего вида:

$$f_d(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \sum_{p=1}^N n_p K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{R}_p(t), \mathbf{V}_p(t)). \quad (8)$$

В соответствии с идеологией метода частиц-в-ячейках отдельные слагаемые этой суммы можно интерпретировать как “частицы”, форма, размер и положение которых определяются функцией K , называемой ядром частицы, постоянные n_p задают “вес” частиц. Наряду с условием выполнения закона сохранения, которое при нормировке ядра $\int_{R^3 \times R^3} K d^3r d^3v = 1$ имеет вид

$$\int_{R^3 \times R^3} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3r d^3v = \sum_{p=0}^N n_p, \quad (9)$$

на функцию K накладываются дополнительные требования — ее неотрицательность и симметрия:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{R}, \mathbf{V}) = K(\mathbf{R}, \mathbf{V}, \mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad \frac{\partial K}{\partial \mathbf{R}} = -\frac{\partial K}{\partial \mathbf{r}}, \quad \frac{\partial K}{\partial \mathbf{V}} = -\frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}}. \quad (10)$$

Заметим, что функция K может быть негладкой, а лишь кусочно гладкой или даже обобщенной функцией, поэтому функция (8) может удовлетворять уравнению (4) лишь в слабом смысле. Запишем для нее условие слабого решения [14]:

$$\sum_{p=1}^N n_p \int \left\{ \phi \frac{\partial K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{R}_p(t), \mathbf{V}_p(t))}{\partial t} - K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{R}_p(t), \mathbf{V}_p(t)) \left[\mathbf{v} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})}{m} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}} \right] \right\} d^3r d^3v = 0,$$

где $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ — произвольная гладкая финитная функция. Беря по частям подынтегральные выражения, делая замену переменных $\mathbf{r}, \mathbf{v} \rightarrow \mathbf{R}_p, \mathbf{V}_p$ и используя свойства финитности пробных функций $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ и свойства ядра (10), получаем

$$\sum_{p=1}^N n_p \int K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{R}_p(t), \mathbf{V}_p(t)) \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{R}_p} \left[\frac{d\mathbf{R}_p}{dt} - \mathbf{V}_p(t) \right] + \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{V}_p} \left[\frac{d\mathbf{V}_p}{dt} - \frac{\mathbf{F}_p(t, \mathbf{R}_p, \mathbf{V}_p)}{m} \right] \right\} d^3R_p d^3V_p = 0. \quad (11)$$

Из произвольности пробной функции $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ следует, что разложение (8) аппроксимирует решение уравнения (4), если выполняются условия, имеющие вид уравнений динамической системы в фазовом пространстве (“уравнений движения частиц”):

$$\frac{d\mathbf{R}_p}{dt} = \mathbf{V}_p, \quad \frac{d\mathbf{V}_p}{dt} = \frac{1}{m} \mathbf{F}_p(t, \mathbf{R}_p, \mathbf{V}_p). \tag{12}$$

Одна из основных идей метода частиц-в-ячейках заключается во введении эйлеровой сетки в фазовом пространстве, в узлах которой рассчитывается силовое поле $\mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$, с последующей его интерполяцией в места расположения частиц в физическом и скоростном пространствах. Чтобы рассчитать силу в узлах расчетной сетки, надо вычислить значения функции распределения в этих узлах. Это достигается процедурой интерполяции “частиц-на-сетку”, по-другому называемой “раздачей” [8]. В нашем случае в узлы раздается количество молекул (или их доля, в зависимости от нормировки), ассоциируемых с p -й частицей, равное весу n_p в разложении (8).

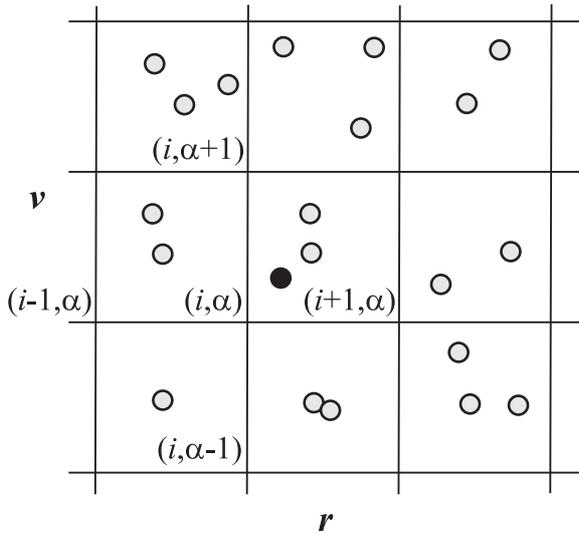


Рис. 1. Расчетная сетка в фазовом пространстве

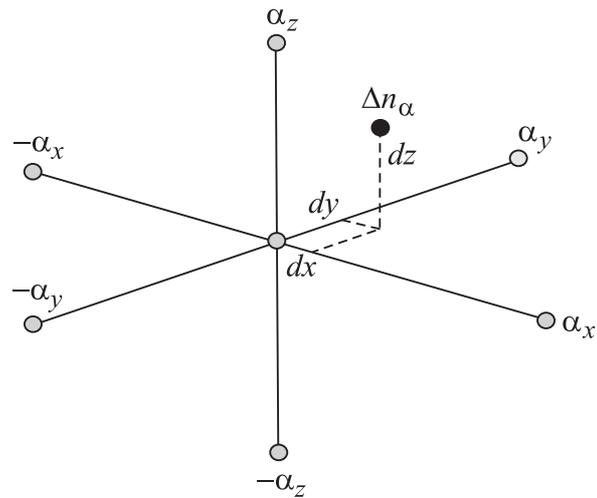


Рис. 2. Интерполяция частиц в скоростном пространстве

На рис. 1 приведено условное изображение расчетной сетки в фазовом пространстве с узлами, помеченными парой индексов (I, α) , где I индексирует узлы в физическом пространстве (в общем случае трехмерном), а α – в трехмерном скоростном пространстве. Пусть вес частицы, помеченной на рисунке черным цветом, равен n_p . Используя модель ближайшего соседа (Nearest Grid Point, NGP [8]), можно приписать этот вес узлу (I, α) или же, используя модели частица-в-ячейках (PIC), облако-в-ячейках (Cloud-In-Cells, CIC) и другие способы интерполяции, распределить этот вес между узлами в физическом пространстве так, что $\sum_I \Delta n_{I,\alpha} = n_p$. Далее, каждую долю $\Delta n_{I,\alpha}$ при фиксированном индексе I раздаем в узлы скоростной сетки (I, α) , $(I, \alpha + 1)$, $(I, \alpha - 1)$ и так далее в зависимости от способа интерполяции. При этом необходимо, чтобы после проведения этой процедуры не только выполнялся закон сохранения (9), но и сохранялись бы и количество движения, и энергия.

Заметим, что в традиционном методе частиц-в-ячейках, применяемом в физике плазмы и звездной динамике, когда используется эйлерова сетка в физическом, а не в фазовом пространстве, это требование выполнить невозможно [15]. В расчетах мы использовали интерполяцию, предложенную в работе [16] для консервативной коррекции вычислений интеграла столкновений (отметим, что впервые интерполяция с такими свойствами для коррекции вычислений интеграла столкновений была предложена в работе [17]). Рисунок 2 иллюстрирует эту семиточечную интерполяцию в скоростном пространстве. Пусть (dx, dy, dz) – вектор положения частицы в скоростном пространстве с началом координат, выбранным в ближайшем к частице узле с индексом α . Тогда доля $\Delta n_{I,\alpha}$ распределится между узлами $-\alpha_x, \alpha_x, -\alpha_y, \alpha_y, -\alpha_z, \alpha_z$ и ближайшим узлом следующим образом:

$$\begin{aligned} s(-\alpha_x) &= -(dx + dy + dz - dx^2 - dy^2 - dz^2)/6.0, & s(-\alpha_y) &= -(dx + dy + dz - dx^2 - dy^2 - dz^2)/6.0, \\ s(-\alpha_z) &= -(dx + dy + dz - dx^2 - dy^2 - dz^2)/6.0, & s(\alpha_x) &= dx + s(-\alpha_x), \\ s(\alpha_y) &= dy + s(-\alpha_y), & s(\alpha_z) &= dz + s(-\alpha_z), & s(0) &= 1 - dx^2 - dy^2 - dz^2. \end{aligned}$$

При такой раздаче сохраняется не только масса, но и импульс и энергия. Чтобы получить значение фазовой плотности в узлах расчетной сетки, делим распределенные доли частиц на объем фазовой ячейки.

После процедуры интерполяции “частицы–сетка” вычисляем интеграл столкновений в узлах расчетной сетки. В расчетах мы использовали два подхода к вычислению интеграла столкновений — на основе адаптивного метода Монте-Карло [18] оценки многомерных интегралов (при этом значения функции распределения в межузловых точках находились трилинейной интерполяцией) и на основе коррекции интеграла столкновений, предложенной в работе [16].

Следующий этап численного решения уравнения Больцмана предлагаемым методом частиц-в-ячейках заключается в вычислении выражения (7), сеточная аппроксимация в скоростном пространстве которого имеет следующий вид:

$$\Phi_\alpha = -\frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha'} \frac{St_{\alpha'}}{h_v \sqrt{(\alpha_x - \alpha'_x)^2 + (\alpha_y - \alpha'_y)^2 + (\alpha_z - \alpha'_z)^2}}. \tag{13}$$

Выражение (13) имеет вид свертки, и для его вычисления можно применить теорему о свертке. Тогда вычисление последовательности (13) сводится к получению дискретного фурье-образа последовательности $\hat{\Phi}_\beta = \sqrt{LMN} \hat{St}_\beta \hat{G}_\beta$ и обратному фурье-преобразованию, примененному к $\hat{\Phi}_\beta$. Здесь L, M, N — размерности регулярной сетки в скоростном пространстве, \hat{St}_β — фурье-образ сеточной аппроксимации интеграла столкновений, \hat{G}_β — фурье-образ последовательности $G_\beta = -\frac{1}{\sqrt{\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2}}$. Сеточную аппроксимацию векторного поля

$F(t, r, v)$ находим с использованием конечных разностей. Благодаря высокой эффективности метода быстрого преобразования Фурье время вычисления силового поля пренебрежимо мало по сравнению со временем вычисления интеграла столкновений, поэтому можно считать, что с точки зрения вычислительных затрат его расчет почти ничего не стоит. В расчетах мы использовали пакет FFTW (Fastest Fourier Transform in the West) [19] для реализации быстрого фурье-преобразования.

На последнем этапе расчетного цикла решения уравнения Больцмана методом частиц-в-ячейках численно интегрируется система уравнений движения (12), при этом значение $F_p(t, R_p, V_p)$ находится путем интерполяции сеточной векторной функции $F_{I,\alpha}$ в точке фазового пространства (R_p, V_p) . Промежуток интегрирования τ (а не шаг интегрирования) системы (12) является временным шагом всей расчетной схемы, выбираемым таким образом, чтобы длина фазовых траекторий на одном этом шаге не превышала размеров фазовой ячейки.

Подводя итог описанию метода частиц-в-ячейках для решения уравнения Больцмана, приведем диаграмму (рис. 3), представляющую алгоритм расчета задач динамики разреженного газа (ДРГ) этим методом.

4. Пример расчета детерминированным методом частиц-в-ячейках. Основные трудности предлагаемого метода связаны с расчетами, касающимися скоростного пространства, поэтому на первом этапе была выбрана тестовая задача расчета однородной релаксации. Именно, были проведены расчеты однородной релаксации газа максвелловских молекул с начальной функцией распределения, соответствующей точному решению Бобылева [20]:

$$f(t, v) = \frac{1}{(2\pi\tau)^{3/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2\tau}\right) \left[1 + \frac{1-\tau}{\tau} \left(\frac{v^2}{2\tau} - \frac{3}{2}\right)\right], \quad \tau(t) = 1 - \frac{2}{5} e^{-t/6}, \quad t \geq 0, \tag{14}$$

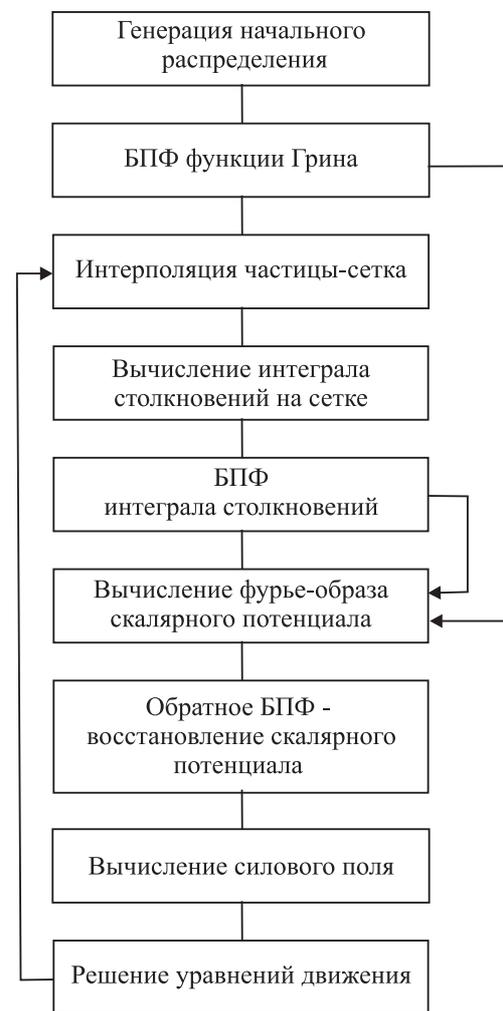


Рис. 3. Диаграмма расчета ДРГ методом частиц-в-ячейках

при $t = 0$. В случае однородной релаксации уравнения задачи имеют вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{F}f/m)}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad \mathbf{F}f = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}},$$

$$\Phi(\mathbf{v}) = -\frac{1}{4\pi} \int_{R^3} \frac{\text{St}(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d^3v', \quad \text{St}(f) = \int_{R^3} d^3v_1 \int_{S^2} d^2n (f'f'_1 - ff_1) |\mathbf{V}| \sigma(V, \cos(\theta)),$$

а уравнения движения частиц — вид $\frac{d\mathbf{V}_p}{dt} = \frac{1}{m} \mathbf{F}_p(t, \mathbf{V}_p)$. В отличие от общего случая в расчетном цикле отсутствует только интерполяция в узлы сетки физического пространства.

В настоящей статье представляются результаты расчетов со следующими вычислительными параметрами: размеры расчетной области в скоростном пространстве $[-6, 6]^3$, расчетная сетка $32 \times 32 \times 32$, временной шаг расчетного цикла $\tau = 0.05$, количество частиц в одной ячейке в среднем равняется 256.

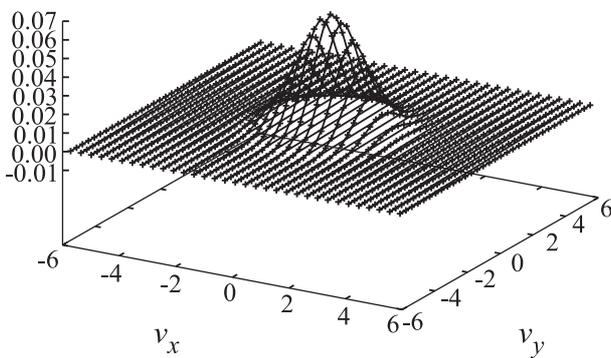


Рис. 4. Расчетная (крестики) и точная (сплошные линии) функции распределения при $t = 6$

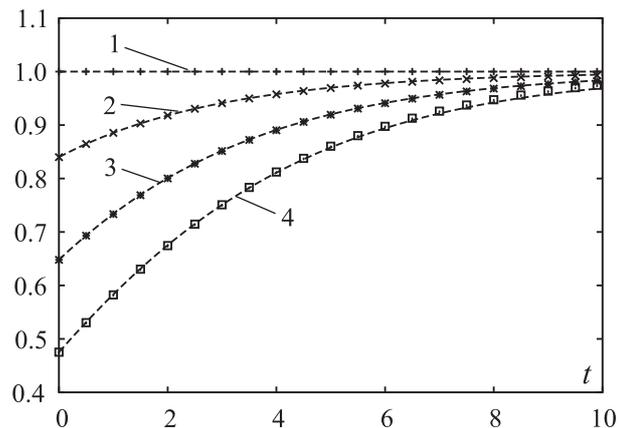


Рис. 5. Нормализованные моменты расчетной функции распределения: 1) $\langle v^2 \rangle / 3$, 2) $\langle v^4 \rangle / 15$, 3) $\langle v^6 \rangle / 105$, 4) $\langle v^8 \rangle / 945$

На рис. 4 представлена расчетная функция распределения и точная функция распределения (14) при $t = 6$. Изображенные на рисунке графики центральных сечений этих функций распределения ($v_z = 0$) визуально не различимы. В качестве критерия оценки близости расчетной функции распределения к теоретической можно использовать их моменты высокого порядка $\langle v^{2n} \rangle = 4\pi \int_0^\infty f(t, v) v^{2+2n} dv$.

На рис. 5 представлены нормализованные моменты $\langle v^{2n} \rangle_N = \langle v^{2n} \rangle / (2n + 1)!!$ расчетной функции распределения Бобылева [20] 2-го, 4-го, 6-го и 8-го порядков и их теоретические значения (пунктирные линии).

5. Заключение. Главный результат проведенных тестовых расчетов заключается в том, что предлагаемый модифицированный метод частиц-в-ячейках для численного моделирования динамики разреженного газа и его программная реализация приводят к адекватным результатам при расчетах однородной релаксации. Дополнительно было показано, что процедура внесения поправок при вычислении интеграла столкновений, предложенная в работе [16] с целью сохранения количества движения и энергии, не искажает эволюцию моментов функции распределения высокого порядка. Эти результаты позволяют приступить к решению неоднородных задач высокой размерности со сложной геометрией, которые должны проявить возможности метода в полной мере.

Мы благодарим В.Л. Савельева, чьи работы стимулировали наш интерес к использованию дивергентной формы уравнения Больцмана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
2. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод “частиц в ячейках” для решения задач динамики разреженного газа. 1 // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 1975. **15**, № 5. 1195–1208.
3. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М: Наука, 1984.

4. *Иванов М.С., Рогазинский С.В.* Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа. Новосибирск: Изд. ВЦ СО АН СССР, 1988.
5. *Иванов М.С., Рогазинский С.В.* Экономичные схемы статистического моделирования течений разреженного газа // Матем. моделирование. 1989. **1**, № 7. 130–145.
6. *Harlow F.H., Dickman D.O., Harris D.E., Martin R.E.* Two-dimensional hydrodynamic calculations. Los Alamos Scientific Lab. Rep. NLA-2301. Los Alamos, 1959.
7. *Яненко Н.Н., Анучина Н.Н., Петренко В.Е., Шокин Ю.И.* О методах расчета задач газовой динамики с большими деформациями // Числ. методы механ. сплошной среды. 1970. **1**. 40–62.
8. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
9. *Филиппов Б.В., Христинич В.Б.* Кинетические уравнения динамики разреженного газа в дивергентной форме // Динамические процессы в газах и плазме. Физическая механика. Вып. 4. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980. 7–18.
10. *Богомолов С.В.* Метод частиц. Несжимаемая жидкость // Матем. моделирование. 2003. **15**, № 1. 46–58.
11. *Villani S.* Conservative forms of Boltzmann's collision operator: Landau revisited // Math. Mod. An. Num. 1999. **33**, N 1. 209–227.
12. *Saveliev V.L., Nanbu K.* Collision group and renormalization of the Boltzmann collision integral // Phys. Rev. E. 2002. **65**, N 5. 1–9.
13. *Saveliev V.L., Filko S.A.* Kinetic force method for numerical modeling 3D-relaxation in homogeneous rarefied gas // AIP Conf. Proc. December 31, 2008. **1084**. 513–518.
14. *Рихтмайер Р.* Принципы современной математической физики. М.: Мир, 1982.
15. *Langdon A.B.* Effects of the spatial grid in simulation plasma // J. Comp. Phys. 1970. **6**. 247–267.
16. *Varghese P.L.* Arbitrary post-collision velocities in a discrete velocity scheme for the Boltzmann equation in rarefied gas dynamics // Proc. of the 25th Int. Symp. / Ed. by M. S. Ivanov and A. K. Rebrov. Novosibirsk, 2007. 227–232.
17. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. **357**, № 1. 53–56.
18. *Lepage G.P.* VEGAS: An adaptive multi-dimensional integration program. Cornell Preprint CLNS 80-447, March 1980. Ithaca: Cornell Univ. Press, 1980.
19. FFTW library (<http://www.fftw.org/>).
20. *Бобылев А.В.* Точные решения нелинейного уравнения Больцмана и теория релаксации максвелловского газа // Теор. и матем. физика. 1984. **60**, № 2. 280–309.

Поступила в редакцию
05.09.2011
