УДК 519.6; 533.72

ОБ ОДНОЙ СХЕМЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

Е. А. Малков[1], М. С. Иванов[1]

Приведена схема вычисления интеграла столкновений для расчетов течений разреженного газа с высокой точностью. Как показали тестовые численные расчеты, предлагаемая схема позволяет находить численные решения уравнения Больцмана в широком диапазоне скоростей потока, в том числе и в случае очень медленных течений.

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

1. Введение. В связи с развитием миниатюризации в различных областях техники становятся все более актуальными расчеты медленных течений разреженного газа. Статистические флуктуации и медленная сходимость методов прямого статистического моделирования, ПСМ-методов (DSMC-методов, Direct Simulation Monte Carlo), делают более предпочтительными при расчетах медленных течений прямые конечно-разностные методы решения уравнения Больцмана для одночастичной функции распределения в фазовом пространстве $f = f(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{v})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\,\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} = \mathrm{St}(f). \tag{1}$$

В правой части уравнения стоит нелинейный интегральный оператор — интеграл столкновений

$$\mathrm{St}(f) = \int\limits_{R^3} d^3 v_1 \int\limits_{S^2} d^2 n \big(f' f_1' - f f_1\big)\, |\boldsymbol{V}|\, \sigma\big(V, \cos(\theta)\big), \tag{2}$$

где

$$f = f(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}), \quad f_1 = f(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}_1);$$

$$f' = f\big(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}'\big), \quad f_1' = f\big(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}_1'\big); \tag{3}$$

$$\boldsymbol{v}' = \frac{\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}_1}{2} + \frac{|\boldsymbol{V}|}{2}\,\boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{v}_1' = \frac{\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}_1}{2} - \frac{|\boldsymbol{V}|}{2}\,\boldsymbol{n}; \tag{4}$$

$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_1$; $\boldsymbol{n}$ — единичный вектор (параметр столкновения), задающий направление относительной скорости после столкновения; $\sigma = \sigma\big(|\boldsymbol{v}|, \cos(\theta)\big)$ — дифференциальное сечение рассеяния; θ — угол между векторами относительной скорости частиц до и после столкновения. Основное влияние на точность численного решения уравнения (1) оказывают погрешности при вычислении интеграла столкновений (см., например, [1]). В настоящей статье рассматриваются некоторые приемы, позволившие существенно улучшить точность вычисления интеграла столкновений, что подтверждается приводимыми ниже расчетами однородной релаксации и медленного течения Куэтта. Эти приемы позволили также заметно уменьшить время выполнения вычислений интеграла столкновений.

2. Консервативные интерполяционные схемы вычисления интеграла столкновений. Соотношения (3) и (4) обеспечивают сохранение импульса и энергии в случае непрерывной области определения функции распределения. При сеточной аппроксимации скорости частиц после столкновения $\boldsymbol{v}$ и $\boldsymbol{v}'$ в общем случае не попадают в узлы расчетной сетки. Поскольку дискретная аппроксимация оператора столкновений (2) должна удовлетворять условиям сохранения массы, импульса и энергии, то таким же требованиям должна удовлетворять интерполяция значений подынтегрального выражения в (2). Запишем интеграл столкновений (2) в симметричном виде [2], удобном для построения консервативных схем его вычисления, сохраняющих массу, импульс и энергию:

$$I(\boldsymbol{v}) \equiv \mathrm{St}(f)(\boldsymbol{v}) = \frac{1}{2} \int\limits_{R^3 \times R^3} d^3 v_1 d^3 v_2 \int\limits_{S^2} d^2 n f(\boldsymbol{v}_1) f(\boldsymbol{v}_2) \Big[\delta\big(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_1'\big) + \delta\big(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_2'\big) - \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_1) - \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_2)\Big] |\boldsymbol{V}|\, \sigma. \tag{5}$$

---

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

Запишем сеточную аппроксимацию функции распределения в виде

$$f(\boldsymbol{v}) = \sum_{\alpha} f_\alpha \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_\alpha), \tag{6}$$

где α индексирует узел расчетной сетки в скоростном пространстве. Чтобы избежать громоздких выражений, не теряя при этом общности рассуждений, полагаем дифференциальное сечение рассеяния не зависящим от угла рассеяния. Пусть $\sigma_{\alpha\,\beta;\alpha'} = \dfrac{1}{4\pi}\,\widehat{\sigma}\big(|\boldsymbol{v}_\alpha - \boldsymbol{v}_\beta|\big)\,\delta(\boldsymbol{n} - \boldsymbol{n}_{\alpha'})\,w_{\alpha'}$ — дискретная аппроксимация дифференциального сечения рассеяния на сфере с диаметром $\boldsymbol{v}_\alpha - \boldsymbol{v}_\beta$. Единичные векторы $\boldsymbol{n}_{\alpha'}$ задают K узлов аппроксимации, являющихся узлами квадратуры на сфере, $w_{\alpha'}$ — веса узлов квадратуры (рис. 1). Тогда для дискретной функции распределения (6) интеграл столкновений запишется в следующем виде:

$$I(\boldsymbol{v}) = -\sum_{\alpha,\beta} f_\alpha f_\beta\, \widehat{\sigma}\big(|\boldsymbol{v}_\alpha - \boldsymbol{v}_\beta|\big)\Big\{\big[\delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_\alpha) + \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_\beta)\big] - \frac{1}{4\pi}\sum_{\alpha'}\big[\delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_{\alpha'}) + \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_{-\alpha'})\big]w_{\alpha'}\Big\}, \tag{7}$$

где $\boldsymbol{v}_{\alpha'} = \dfrac{\boldsymbol{v}_\alpha + \boldsymbol{v}_\beta}{2} + \dfrac{|\boldsymbol{V}|}{2}\,\boldsymbol{n}_{\alpha'}$, $\boldsymbol{v}_{-\alpha'} = \dfrac{\boldsymbol{v}_\alpha + \boldsymbol{v}_\beta}{2} - \dfrac{|\boldsymbol{V}|}{2}\,\boldsymbol{n}_{\alpha'}$.

Существуют разные подходы при выборе узлов квадратуры на сфере. В работе [3] предлагается в качестве узлов квадратуры выбирать точки пересечения сферы с узлами расчетной сетки. Недостатком такого подхода является то, что при малых величинах $|\boldsymbol{v}_\alpha - \boldsymbol{v}_\beta|$ таких пересечений становится слишком мало, чтобы обеспечить приемлемую точность вычисления интеграла столкновений. Преимущество — отсутствие проблемы интерполяции, распределение доли интеграла столкновений $\Delta I = f_\alpha f_\beta \sigma_{\alpha\,\beta;\alpha'} w_{\alpha'}$ в скоростном пространстве между узлами расчетной сетки, соседними с узлом квадратуры на сфере $\boldsymbol{v}_{\alpha'}$.

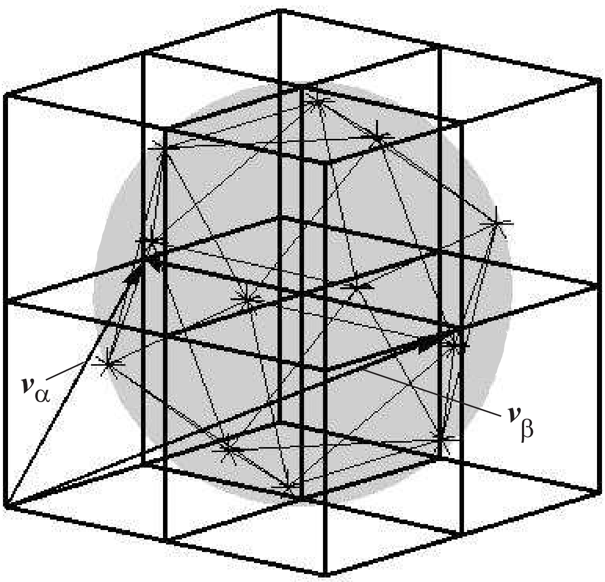

Рис. 1. Фрагмент расчетной сетки и узлы квадратуры на сфере

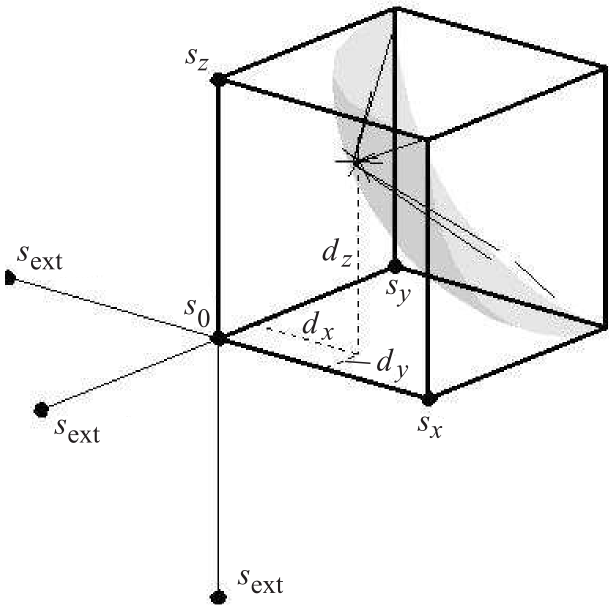

Рис. 2. Распределение массы в узлы скоростной сетки

В работе [4] была предложена процедура интерполяции в узлы скоростной расчетной сетки, сохраняющая не только массу и импульс, но и энергию. Тем самым были сняты ограничения на выбор узлов квадратуры на сфере. Отметим, что интерполяция с аналогичными свойствами ранее была предложена в работе [5], где соответствующий метод вычисления интеграла столкновений был назван консервативным проекционно-интерполяционным методом. На рис. 1 изображены узлы квадратуры на сфере (обозначенные крестиками) для одной пары узлов прямоугольной расчетной сетки. В качестве узлов квадратуры на сфере на этой иллюстрации выбраны вершины икосаэдра. При таком выборе узлов веса одинаковы и равны $w_{\alpha'} = 4\pi/16$. На рис. 2 отдельно изображен один из узлов квадратуры на сфере, являющийся по отношению к расчетной сетке в скоростном пространстве межузловой точкой.

Доля интеграла столкновений, связанная с узлом на сфере $\boldsymbol{v}_{\alpha'}$, распределяется в ближайший узел и соседние узлы расчетной сетки, обозначенные на рис. 2 жирными точками в соответствии со следующими формулами:

$$s_0 = 1 - d_x^2 - d_y^2 - d_z^2, \quad s_{\rm ext} = -\frac{1}{6}\left(d_x + d_y + d_z - d_x^2 - d_y^2 - d_z^2\right),$$

$$s_x = d_x + s_{\rm ext}, \quad s_y = d_y + s_{\rm ext}, \quad s_z = d_z + s_{\rm ext},$$

где s_0, s_x, s_y, s_z, $s_{\rm ext}$ — доли распределения массы по соответствующим узлам. Такая интерполяция в узлы расчетной сетки действительно приводит к консервативной схеме вычисления интеграла столкновений [4].

3. Оптимальная квадратурная формула на сфере. Поскольку существует возможность консервативного распределения массы, импульса и энергии в узлы скоростной сетки, то существует определенная свобода выбора квадратурной формулы на сфере.

На основе анализа различных квадратур нами были найдены наиболее оптимальные формулы в отношении точности и скорости вычислений интеграла столкновений. При выборе квадратурной формулы на сфере были приняты во внимание следующие соображения. Узлы квадратуры разбиваются на диаметрально противоположные пары, а узловые веса различаются не слишком сильно, т.е. узловые области примерно одинаковы — квадратура максимально однородна. Для тестирования были выбраны несколько квадратурных формул, инвариантных по отношению к группам вращения правильных многогранников с инверсией [6, 7]. Это — формула икосаэдра с 12 узлами — вершинами икосаэдра (FI-12), формула октаэдра 5-го порядка алгебраической точности (квадратура дает точное значение интеграла для всех многочленов степени не выше 5) с 14 узлами (FO-14) и формула октаэдра 5-го порядка алгебраической точности с 26 узлами (FO-26). Дополнительно для сравнения проводилось тестирование квадратурной формулы, основанной на сетке сферических координат с узлами в центрах сферических прямоугольников, с 32 и 128 узлами (СП-32, 128). В табл. 1–4 приводятся характеристики упомянутых квадратур.

Таблица 1

Параметры квадратуры FO-14

Узлы	Веса/4π	Комментарии
$(\pm1,0,0),\ (0,\pm1,0),\ (0,0,\pm1)$	$1/15$	Вершины октаэдра
$(\pm1/\sqrt{3},\ \pm1/\sqrt{3},\ \pm1/\sqrt{3}\,)$	$3/40$	Центры граней

Таблица 2

Параметры квадратуры FO-26

Узлы	Веса/4π	Комментарии
$(\pm1,0,0),\ (0,\pm1,0),\ (0,0,\pm1)$	$1/21$	Вершины октаэдра
$(\pm1/\sqrt{3},\ \pm1/\sqrt{3},\ \pm1/\sqrt{3}\,)$	$9/280$	Центры граней
$(\pm1/\sqrt{2}, 0, \pm1/\sqrt{2})$, $(0,\ \pm1/\sqrt{2},\ \pm1/\sqrt{2})$, $(\pm1/\sqrt{2},\ \pm1/\sqrt{2},\ 0)$	$4/105$	Центры ребер октаэдра

Таблица 3

Параметры квадратуры FI-12

Узлы	Веса/4π	Комментарии
$(\pm X, 0, \pm Z)$, $(0, \pm Z, \pm X)$, $(\pm Z, \pm X, 0)$	$1/12$	Вершины икосаэдра: $\phi = (1+\sqrt{5}\,)/2$, $X = (1+\phi^2)^{-1/2}$, $Z = X\phi$

Таблица 4

Параметры квадратуры SC-$2nm$

Узлы	Веса/4π	Комментарии
$(\sin\theta_i\cos\phi_j$, $\sin\theta_i\cos\phi_j$, $\cos\theta_i)$	$\sin\theta_i$	$\phi_i = \pi\, i/n$, $i = 0, \ldots, 2n-1$, $\theta_j = \pi(j+0.5)/m$, $j = 0, \ldots, m$

Для проверки точности вычислений с различными квадратурами на сфере использовалось частное решение уравнения Больцмана для максвелловского газа. Дифференциальное сечение рассеяния максвелловских молекул с потенциалом взаимодействия $U(r) \sim 1/r^4$ обратно пропорционально величине относительной скорости молекул, поэтому произведение $g(\mu) = |\boldsymbol{V}|\,\sigma\big(|\boldsymbol{V}|, cos(\theta)\big)$, где $\mu = cos(\theta)$, в подынтегральном выражении интеграла столкновений (5) не зависит от относительной скорости, а зависит только от угла рассеяния. Для этого специального случая А. В. Бобылевым [8] и М. Круком совместно с Т. Т. Ву [9] было найдено точное решение уравнения Больцмана:

$$\begin{aligned} f(t,v) &= \frac{1}{(2\pi\tau)^{3/2}}\,\exp\!\left(-\frac{v^2}{2\tau}\right)\left[1+\frac{1-\tau}{\tau}\left(\frac{v^2}{2\tau}-\frac{3}{2}\right)\right], \\ \tau(t) &= 1-\xi e^{-\lambda t}, \quad \lambda = (\pi/2)\int\limits_{-1}^{1} g(\mu)\big(1-\mu^2\big)\,d\mu, \quad t \geqslant 0. \end{aligned} \tag{8}$$

Для проверки точности расчетов интеграла столкновений предполагается, что дифференциальное сечение рассеяния не зависит от угла рассеяния и $\xi = 0.4$. Тогда интеграл столкновений для функции (8) записывается в виде

$$\mathrm{St}^{(B)}(t,v) = \frac{e^{-t/6}}{15\tau(2\pi\tau)^{3/2}}\left(\frac{1}{\tau}-1\right)\exp\left(-\frac{v^2}{2\tau}\right)\left[\left(\frac{v^2}{2\tau}-\frac{3}{2}\right)^2+\frac{3}{2}-\frac{v^2}{\tau}\right]. \tag{9}$$

В табл. 5 приводится сравнение расчетного интеграла столкновений для функции (8) с точным интегралом столкновений (9) при $t = 0$. В колонке "Точность вычислений" представлены значения выражения

$$\epsilon = \sqrt{\frac{\sum\limits_{ijk}\left(\mathrm{St}_{ijk}-\mathrm{St}^{(B)}_{ijk}\right)^2}{\sum\limits_{ijk}\left(\mathrm{St}^{(B)}_{ijk}\right)^2}}. \tag{10}$$

Наилучшая точность в вычислении интеграла столкновений достигается при использовании квадратуры с 26 узлами, инвариантными относительно группы октаэдра.

Таблица 5

Сравнение вычислений интеграла столкновений при использовании разных квадратур на сфере

Квадратура	Количество узлов	Точность вычислений
FI-12	12	0.250358
FO-14	14	0.235963
SC-16	16	0.282812
FO-26	26	0.205421
SC-128	128	0.206925

4. Пары узлов с одинаковыми параметрами интерполяции. Коэффициенты интерполяции s_0, s_x, s_y, s_z и $s_{\rm ext}$ узлов квадратурной сетки в соседние узлы расчетной сетки, а также значения дифференциального сечения рассеяния в случае изотропного рассеяния необязательно вычислять для каждой пары узлов расчетной сетки $\boldsymbol{v}_\alpha$, $\boldsymbol{v}_\beta$, $\alpha, \beta \in [0,I]\times[0,J]\times[0,K]$. Эти параметры одинаковы для всех пар узлов с одинаковым расстоянием между ними (с одинаковыми относительными скоростями), поэтому достаточно их вычислить для базовых пар узлов $\{\boldsymbol{v}_{0,0,0}, \boldsymbol{v}_{\rm ibase,jbase,kbase}\}$. Значения параметров, вычисленные для одной базовой пары узлов расчетной сетки в скоростном пространстве, используются в квадратурах для всех пар узлов, получаемых из данной базовой пары параллельным переносом, а также для сопряженных пар, изображенных на рис. 3. Нижеприведенный фрагмент кода демонстрирует вариант вычисления интеграла столкновений, организованного на основе описанного подхода. Заметим, что если дифференциальное сечение рассеяния представляет собой выражение с большой вычислительной сложностью, то следует цикл по ibase, jbase, kbase и iknot выполнить только один раз и вычисленные параметры сохранить в некоторой структуре данных для последующего считывания и использования во внутреннем цикле по ishift, jshift и kshift при расчете на шаге релаксации в каждой пространственной ячейке.

```
for(ibase=0;ibase<n;ibase++)
 for(jbase=0;jbase<n;jbase++)
  for(kbase=0;kbase<n;kbase++){
```

Для каждой базовой пары узлов расчетной сетки (0,0,0) и (ibase,jbase,kbase) вычисляются относительные скорости

```
      for(iknot=0;iknot<number_of_knots;iknot++){
```

Для каждого узла квадратуры на сфере вычисляются параметры интерполяции, ближайший узел расчетной сетки (icell,jcell,kcell) и веса с учетом сеточной аппроксимации дифференциального сечения рассеяния.

```
       //параллельные переносы каждой базовой пары узлов
       for(ishift=0;ishift<n-ibase;ishift++)
        for(jshift=0;jshift<n-jbase;jshift++)
          for(kshift=0;kshift<n-kbase;kshift++){
            //вычисляется доля интеграла столкновений
            mass=df[kshift+jshift*n+ishift*n*n]*
                 df[kshift+kbase+(jshift+jbase)*n+(ishift+ibase)*n*n]*weights[iknot];

            st[kshift+jshift*n+ishift*n*n]-=mass;
            st[kshift+kbase+(jshift+jbase)*n+(ishift+ibase)*n*n]-=mass;
```

```
        //если пара базовых узлов не лежит в одной координатной плоскости,
        //то дополнительно вычисляем вклад от сопряженных пар
        if(ibase&&jbase){
          dmass=df[kshift+jshift*n+(ishift+ibase)*n*n]*
                df[kshift+kbase+(jshift+jbase)*n+ishift*n*n]*weights[iknot];

         st[kshift+jshift*n+(ishift+ibase)*n*n]-=dmass;
         st[kshift+kbase+(jshift+jbase)*n+ishift*n*n]-=dmass;
         mass+=dmass;
         }
         if(ibase&&kbase){
           dmass=df[kshift+(jshift+jbase)*n+(ishift+ibase)*n*n]*
                 df[kshift+kbase+jshift*n+ishift*n*n]*weights[iknot];

         st[kshift+(jshift+jbase)*n+(ishift+ibase)*n*n]-=dmass;
         st[kshift+kbase+jshift*n+ishift*n*n]-=dmass;
         mass+=dmass;
         }

         if(jbase&&kbase){
           dmass=df[kshift+kbase+jshift*n+(ishift+ibase)*n*n]*
           df[kshift+(jshift+jbase)*n+ishift*n*n]*weights[iknot];

           st[kshift+kbase+jshift*n+(ishift+ibase)*n*n]-=dmass;
           st[kshift+(jshift+jbase)*n+ishift*n*n]-=dmass;
           mass+=dmass;
         }
       }
```

Масса mass распределяется в соседние (icell,jcell,kcell) узлы расчетной сетки

```
   }
```

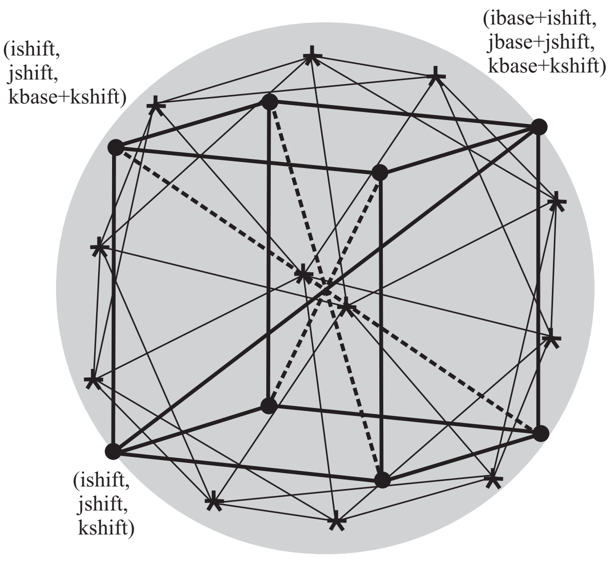

Рис. 3. Базовая пара узлов расчетной сетки (вершины отрезка сплошной линии) с сопряженными узлами (вершины отрезков пунктирных линий) и узлы квадратуры на сфере (обозначены звездочками)

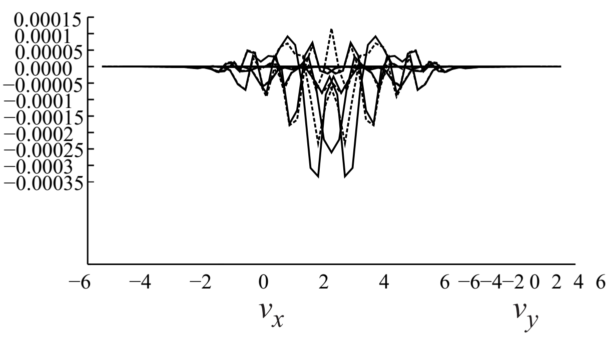

Рис. 4. Расчетные интегралы столкновений максвелловской функции и функции Бобылева (8) при $t = 10$

5. Коррекция интеграла столкновений. Метод вычисления интеграла столкновений, количество и расположение узлов квадратуры и конечные размеры расчетной области влияют на точность вычисления интеграла столкновений, при этом для функций, близких к максвелловскому распределению, величина ошибок, обусловленных этими факторами, может превышать типичные значения истинного интеграла столкновений. Такая ситуация иллюстрируется на рис. 4, где показаны центральные сечения расчетных интегралов столкновений максвелловской функции (сплошная линия) и функции распределения Бобылева (8) (штриховая линия) при $t = 10$, когда отличие последней от функции Максвелла чрезвычайно мало [8]. В связи с этим для улучшения точности расчетов интеграла столкновений предлагается использовать корректировку вычисленных значений интеграла столкновений, основанную на следующем замечании. Оператор столкновений обращает функцию Максвелла в нулевую функцию, поэтому очевидное требование заключается в том, чтобы сеточный оператор столкновений обращал в нуль сеточную функцию Максвелла. Для выполнения этого требования мы используем следующую процедуру:

— вычисляется интеграл столкновений в соответствии с выбранной сеточной аппроксимацией оператора столкновений;

— вычисляются первые и вторые моменты функции распределения;

— вычисляется интеграл столкновений для сеточной функции Максвелла с параметрами, соответствующими найденным моментам;

— разность вычисленных таким образом интегралов столкновений принимается за искомый интеграл столкновений.

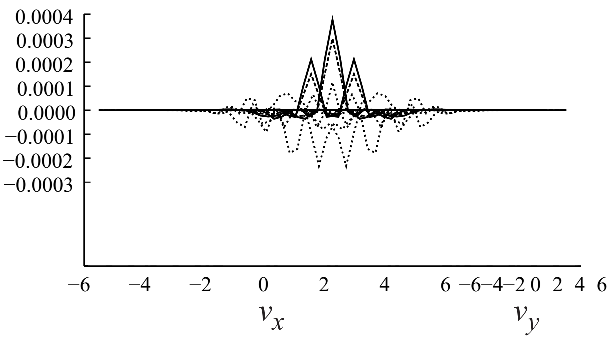

Рис. 5. Скорректированный расчетный интеграл столкновений решения Бобылева (8) при $t = 10$

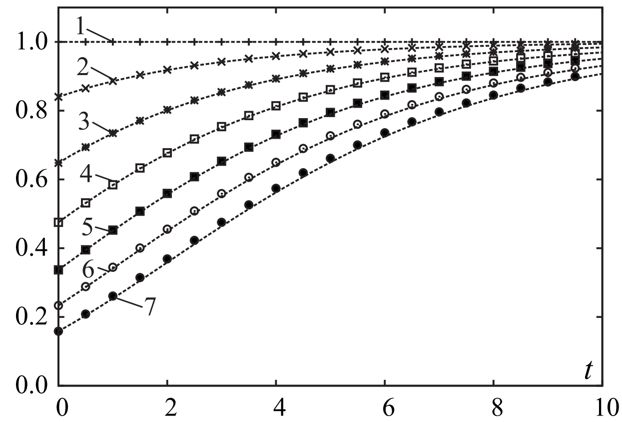

Рис. 6. Однородная релаксация газа максвелловских молекул. Расчетные моменты функции распределения (пунктирные линии — теоретические кривые): 1) $< v^2 > /3$, 2) $< v^4 > /15$, 3) $< v^6 > /105$, 4) $< v^8 > /945$, 5) $< v^{10} > /10395$, 6) $< v^{12} > /135135$, 7) $< v^{14} > /2027025$

На рис. 5 изображены центральные сечения скорректированного интеграла столкновений для функции распределения Бобылева при $t = 10$ (штриховая линия), центральное сечение этого же интеграла без корректировки (пунктирная линия) и точного интеграла столкновений, полученного на основании аналитического решения Бобылева (9) (сплошная линия). В табл. 6 приведена оцененная по формуле (10) точность вычислений интеграла столкновений, проведенных без процедуры коррекции и с коррекцией. Как видно из этой таблицы и рис. 4 и 5, предлагаемая корректировка позволяет правильно вычислять интеграл столкновений для функций распределения, мало отличающихся от равновесных.

Таблица 6

Влияние коррекции на точность вычисления интеграла столкновений

Точность вычислений без корректировки	3.99534
Точность вычислений после корректировки	0.438941

Приведенная схема вычисления интеграла столкновений была опробована при расчете однородной релаксации газа максвелловских молекул и медленного течения Куэтта разреженного газа твердых шаров.

6. Расчет однородной релаксации максвелловского газа. Для расчета однородной релаксации максвелловского газа в качестве начальной функции распределения бралась функция (8) при $\xi = 0.4$ и использовалась явная разностная схема $f_{ijk}^{n+1} = f_{ijk}^n + \tau I_{ijk}$, где f_{ijk}^n — сеточная аппроксимация функции распределения на n-м временно́м слое и I_{ijk} — сеточная аппроксимация интеграла столкновений (5), определяемая по предлагаемой в настоящей работе схеме. Размер расчетной области в скоростном пространстве имеет вид $\left(-6\sqrt{< v^2 >}, 6\sqrt{< v^2 >}\right)^3$, размерность разностной сетки $32 \times 32 \times 32$, шаг по времени $\tau = 0.01$. Для однородной релаксации максвелловского газа с любой начальной функцией распределения в работе [10] найдены точные выражения, описывающие изменение со временем моментов функции распределения любого порядка. В частности, зависимость нормализованных четных моментов сферически-симметричной функции распределения (8) имеет следующий вид:

$$z_0 = z_1 = 1, \quad z_n(t) = \frac{1}{(2n+1)!!} \int f(v,t) v^{2n}\, d^3v = \left(1 - \theta e^{-\lambda t}\right)^{n-1} \left[1 + (n-1)\theta e^{-\lambda t}\right], \quad n = 2, \dots . \tag{11}$$

На рис. 6 приведено сравнение моментов высокого порядка (вплоть до 14-го порядка) расчетной функции распределения с теоретическими моментами (11). Как видно, предлагаемая схема вычисления интеграла столкновений обеспечивает высокую точность при расчетах однородной релаксации. Отметим, что численное решение уравнения Больцмана прямым разностным методом с такой точностью получено впервые.

7. Расчеты течения Куэтта. Для проверки алгоритмов вычисления интеграла столкновений также проводились расчеты течения Куэтта для двух случаев движения параллельной пластины: “быстрого“, когда скорость движения пластины равна тепловой скорости, и “медленного”, когда функция распределения скоростей в каждой точке между пластинами мало отличалась от максвелловской. Выбирались следующие параметры задачи: температуры пластин $T_1 = T_2 = 1$, расстояние между пластинами равно 1, левая пластина покоится, правая движется со скоростью $W = 1.0\sqrt{2T_1}$ (“быстрое” течение) или $W = 0.1\sqrt{2T_1}$ (“медленное” течение) в направлении оси Oz (ось Ox перпендикулярна пластинам). Постоянная Больцмана и массы молекул полагаются равными единице. Модель столкновений — твердые шары. Число Кнудсена полагалось равным 0.1. Использовалась схема с расщеплением по физическим процессам с чередованием расчетов однородной релаксации в каждой пространственной ячейке и бесстолкновительного переноса в физическом пространстве. Узлы расчетной области:

$$\left\{\begin{matrix} vmin + (i+0.5)h_v, \\ vmin + (j+0.5)h_v, \\ vmin + (k+0.5)h_v, \\ (l+0.5)h \end{matrix}\right\}_{i,j,k\in[0,I-1],\, l\in[0,L-1]},$$

где $h_v = (vmax - vmin)/I$ — шаг сетки в скоростном пространстве, $h = 1.0/L$ — шаг расчетной сетки физическом пространстве.

Для этапа свободномолекулярного переноса использовалась схема первого порядка аппроксимации по пространству с конечными разностями вверх-по-потоку. Пусть τ — шаг по времени. Тогда для внутренних точек $l \in (0, L-1)$ при $u = vmin + (i+0.5)h_v$ схема имеет вид

$$f^{n+1}_{ijk;l} = f^n_{ijk;l} + \frac{\tau u}{h} \begin{cases} f^n_{ijk;l-1} - f^n_{ijk;l}, & u \geqslant 0, \\ f^n_{ijk;l} - f^n_{ijk;l+1}, & u < 0. \end{cases}$$

Схема устойчива, если выполняется условие Куранта–Фридрихса–Леви $\tau\ \max\bigl(|u|\bigr)_i \leqslant h$.

На твердой границе предполагается полное диффузное отражение, т.е. скорости отраженных от пластин молекул подчиняются распределению Максвелла $f^{(M)}(\boldsymbol{v}) = \dfrac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}}\, e^{-|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V}|^2/2T}$ с параметрами средней скорости $\boldsymbol{V}$ и температуры T, соответствующими скорости и температуре пластины. Третий параметр максвелловского распределения, плотность ρ, находится из условия сохранения массы — набегающий на пластину поток равен по величине отраженному потоку:

$$\int\limits_{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}<0} \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\, f_\Gamma(v)\, d^3v = - \int\limits_{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\geqslant 0} \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\, f^{(M)}(v)\, d^3v,$$

где $\boldsymbol{n}$ — нормаль к границе.

Для этапа релаксации использовалась явная схема $f^{n+1}_{ijk;l} = f^n_{ijk;l} + \tau I_{ijk;l}$, где $I_{ijk;l}$ — сеточная аппроксимация интеграла столкновений (5).

На рис. 7–9 результаты контрольных расчетов быстрого и медленного течений, выполненные без процедуры корректировки значений интеграла столкновений, сравниваются с результатами расчетов методом прямого статистического моделирования, которые потребовали в этом случае на порядок больше времени вычислений. Как видно на этих рисунках, для “быстрого” течения результаты расчетов обоими методами хорошо согласуются, тогда как для медленного течения расчеты разностным методом без процедуры коррекции дают неудовлетворительный профиль плотности (при удовлетворительном профиле скорости в направлении движения пластины).

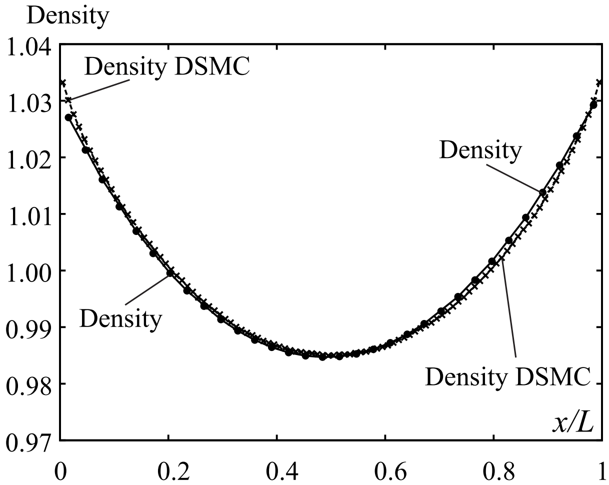

Рис. 7. Плотность (без коррекции), $W = 1$

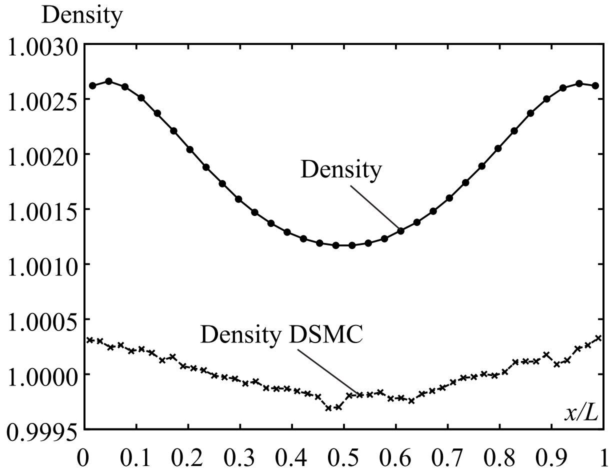

Рис. 8. Плотность (без коррекции), $W = 0.1$

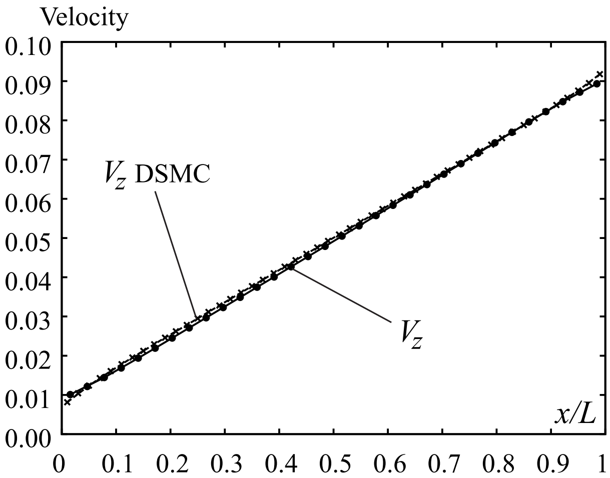

Рис. 9. Скорость в направлении, параллельном пластинам (без коррекции), $W = 0.1$

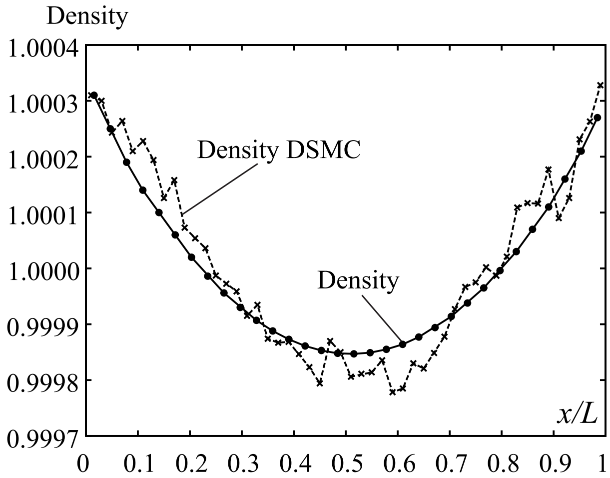

Рис. 10. Плотность, $W = 0.1$

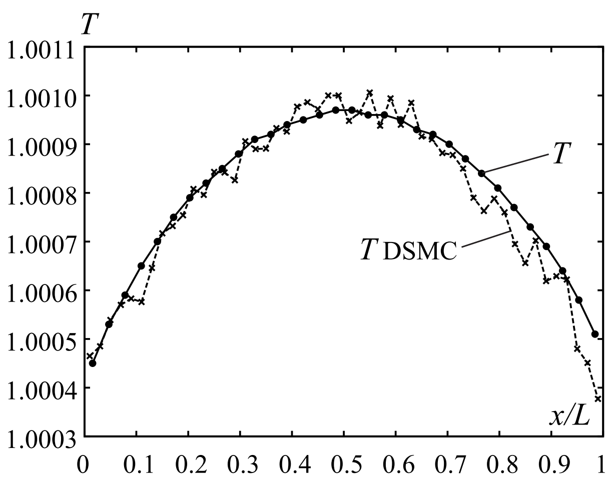

Рис. 11. Температура, $W = 0.1$

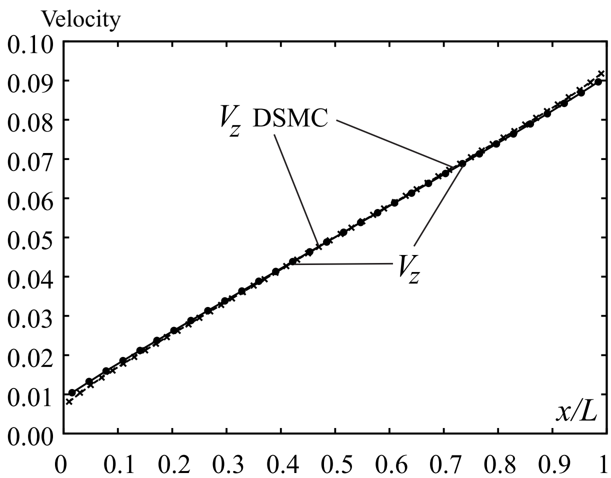

Рис. 12. Скорость в направлении, параллельном пластинам, $W = 0.1$

На рис. 10–13 приводится сравнение результатов расчетов на основании решения уравнения Больцмана, когда используется процедура коррекции значений интеграла столкновений с результатами расчетов методом прямого статистического моделирования. Приведенные на рисунках профили газодинамических величин находятся в хорошем согласии. Таким образом, можно сделать заключение о правильности описанной процедуры коррекции значений интеграла столкновений и необходимости ее применения для медленных течений разреженного газа.

8. Заключение. Проведенные расчеты однородной релаксации максвелловского газа и течений Куэтта газа твердых шаров подтверждают эффективность предложенной в работе схемы вычисления интеграла столкновений, включающей в себя:

— выбор оптимальной квадратурной формулы на сфере;

— вычисление параметров столкновений и коэффициентов интерполяции массы в межузловых точках только для базовых n^3 (здесь n — размерность сетки в скоростном пространстве) пар узлов, а не для всех $n^3\big(n^3-1\big)/2$ пар;

— консервативную корректировку значений интеграла столкновений, приводящую к занулению численного интеграла столкновений от сеточной аппроксимации равновесной функции распределения.

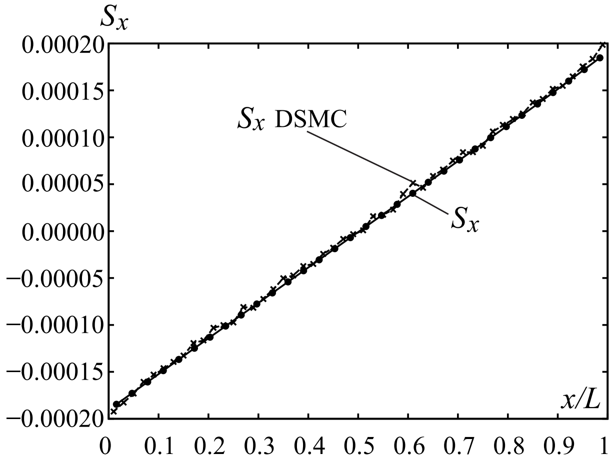

Рис. 13. Тепловой поток по нормали к пластинам, $W = 0.1$

Проведенные расчеты однородной релаксации максвелловского газа также показали, что интерполяция в узлы расчетной сетки, предложенная в работе [4], сохраняющая массу, импульс и энергию, не искажает моменты функции распределения высокого порядка.

Авторы благодарят А. А. Шевырина за проведение расчетов методом прямого статистического моделирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Рябченков В.В., Черемисин Ф.Г.* Система программных модулей для вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2011. **12**, № 1. 44–51.
2. *Cercigniani C.* Mathematical methods in kinetic theory. New York: Plenum Press, 1969.
3. *Tan Z., Varghese P.L.* The $\Delta-\epsilon$ method for the Boltzmann equation // J. Comp. Phys. 1994. **110**, N 2. 327–340.
4. *Varghese P.L.* Arbitrary post-collision velocities in a discrete velocity scheme for the Boltzmann equation // Proc. of the 25th Intern. Symposium on Rarefied Gas Dynamics / Ed. by M. S. Ivanov and A. K. Rebrov. Novosibirsk, 225–232.
5. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. **357**, № 1. 53–56.
6. *Попов А.С.* Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра с инверсией // Сиб. журн. вычисл. матем. 2005. **8**, № 2. 143–148.
7. *Попов А.С.* Поиск наилучших кубатурных формул для сферы, инвариантных относительно группы вращений октаэдра // Сиб. журн. вычисл. матем. 2002. **5**, № 4. 367–372.
8. *Бобылев А.В.* О некоторых свойствах уравнения Больцмана для максвелловских молекул. Препринт № 51. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР, 1975.
9. *Kruk M., Wu T.T.* Exact solutions of Boltzmann equation // Phys. Fluids. 1977. **20**. 1589–1595.
10. *Bobylev A.V., Rjasanov S.* Numerical solution of the Boltzmann equation using fully conservative difference scheme based on the Fast Fourier Transform // Transport Theory Statist. Physics. 2000. **29**. 289–310.

Поступила в редакцию
27.12.2011