

*На правах рукописи*

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Rogozin', is positioned in the upper right area of the page.

Рогозин Олег Анатольевич

**Численный и асимптотический анализ некоторых  
классических задач молекулярной газодинамики**

Специальность 01.02.05 —  
*«Механика жидкости, газа и плазмы»*

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2018

Работа выполнена в ФГУ «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» (ФИЦ ИУ РАН).

Научный руководитель: **Черемисин Феликс Григорьевич**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
ФГУ «Федеральный исследовательский центр  
«Информатика и управление» Российской акаде-  
мии наук»,  
главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты: **Кузнецов Михаил Михайлович**,  
доктор физико-математических наук, доцент,  
ГОУ ВО МО «Московский государственный об-  
ластной университет»,  
профессор кафедры теоретической физики;

**Горелов Сергей Львович**,  
доктор физико-математических наук, доцент,  
ФГУП «Центральный аэрогидродинамический ин-  
ститут имени профессора Н. Е. Жуковского»,  
ведущий научный сотрудник.

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский  
университет «Московский энергетический инсти-  
тут».

Защита состоится 19 апреля 2018 г. в 15 часов на заседании диссертационного  
совета Д 002.073.03 при ФИЦ ИУ РАН по адресу: 119333, г. Москва, ул. Вавилова,  
д. 40, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Вычислительного центра  
им. А. А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН по адресу: г. Москва, ул. Вавилова, д. 42,  
а также на сайте [http://www.frccsc.ru/diss-council/00207303/diss/list/rogozin\\_oa](http://www.frccsc.ru/diss-council/00207303/diss/list/rogozin_oa).

Автореферат разослан 16 февраля 2018 г.

Учёный секретарь  
диссертационного совета Д 002.073.03,  
доктор физико-математических наук



Безродных С. И.

## Общая характеристика работы

Молекулярная газодинамика — это динамика газа, построенная на основе кинетической теории. Под последней обычно понимают теорию неравновесных свойств газа. Ключевую роль при описании газа играет отношение длины свободного пробега молекул газа  $\ell$  к характерному размеру течения  $L$  — так называемое число Кнудсена  $\text{Kn} = \ell/L$ . В континуальном пределе ( $\text{Kn} \rightarrow 0$ ) обычно используют законы классической гидродинамики, основанной на модели сплошной среды, и только в случае конечных  $\text{Kn}$  учитывают молекулярную структуру газа. Таким образом, в литературе можно встретить разделение на континуальную гидрогазодинамику и динамику разреженного газа. Однако имеется достаточно широкий круг задач, для которых уравнения Навье—Стокса некорректно описывают поведение газа даже при  $\text{Kn} \rightarrow 0$ . Поэтому в настоящем исследовании используется термин *молекулярная газовая динамика*, подчёркивая тот факт, что методы и представления кинетической теории используются как для разреженного газа, так и для его континуального предела. Этот термин, по-видимому, впервые предложен в 1970 году М. Н. Коганом<sup>1</sup>, позже подхвачен Г. Бёрдом<sup>2</sup> и Ё. Соне<sup>3</sup>.

**Актуальность темы.** Становление молекулярной газодинамики можно связать с важными прикладными направлениями, возникшими в первой половине XX века. В частности, задача разделения изотопов стала импульсом для развития асимптотической теории и методов вычисления транспортных коэффициентов на основе кинетической теории. Динамика разреженного газа выделилась в отдельную науку благодаря активному освоению космоса. Первые исследования носили в основном экспериментальный характер, но в XXI веке преобладающую роль играет компьютерное моделирование, что говорит о зрелости теоретических представлений дисциплины. Неравновесное состояние газа описывается в общем случае шестимерной функцией распределения, её эволюция подчиняется уравнению Больцмана. Входящий в него нелинейный интеграл столкновений представляет собой нелокальный квадратичный оператор, что создаёт существенные трудности, как для математического, так и численного анализа. За последние три десятилетия строгая математическая теория пополнилась множеством фундаментальных результатов, а стремительный рост суперкомпьютерных мощностей, доступных исследователям и инженерам, спровоцировал системное развитие численных методов.

На сегодняшний день можно выделить несколько прикладных областей молекулярной газодинамики:

---

<sup>1</sup>Коган М. Н. Некоторые вопросы молекулярной газодинамики // Ученые записки ЦАГИ. 1971. Т. 2, № 1. С. 49—59.

<sup>2</sup>Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика / пер. с англ. А. И. Ерофеева, О. Г. Фридлендера, В. Е. Яницкого. М. : Мир, 1981. 319 с.

<sup>3</sup>Sone Y. Molecular gas dynamics: theory, techniques, and applications. Boston : Birkhäuser, 2007.

1. *Аэрокосмические исследования*. Движение аппаратов в верхних слоях атмосферы сопровождаются сильно неравновесными течениями и достаточно большими числами Кнудсена.
2. *Микроэлектромеханические системы (МЭМС)*. Эта относительно молодая отрасль обуславливает основную волну интереса к изучению разреженного газа в начале XXI века. В таких МЭМС как приводы, микро-турбины и газовые хроматографы возникают разреженные течения газа.
3. *Аэрозоли*. Процесс их образования, изменение их дисперсного состава описываются в рамках кинетической теории. Аэрозольные реакторы используются среди прочего для производства стекловолокна, кремниевых пластин и углеродного волокна. Наконец, конечная фаза существования атмосферных загрязнений — это также аэрозольные частицы.
4. *Вакуумные технологии*. Моделирование течений газа, когда число Кнудсена значительно меняется в пространственно-временных масштабах, представляет собой особенно трудную задачу, однако современный уровень развития вычислительных средств позволяет во многих случаях обходиться без дорогостоящих экспериментальных прототипов.

Таким образом, актуальность данного исследования обусловлена

- активным развитием прикладных областей,
- потребностью в высокоточных численных методах,
- быстрым ростом доступных вычислительных ресурсов.

**Объект исследования** — движение одноатомного газа различной степени разреженности. В исследовании одновременно изучается два предмета:

- методы численного и асимптотического анализа,
- физические свойства стационарных течений.

### **Степень разработанности темы.**

Формальная асимптотическая теория уравнения Больцмана была заложена с трудах Д. Гильберта<sup>4</sup>, С. Чепмена<sup>5</sup>, Д. Энскога<sup>6</sup>, позже развита Д. Барнеттом<sup>7</sup>, Х. Грэдом<sup>8</sup> и Ё. Соне<sup>9</sup>. Решение уравнения Больцмана для слаборежеженного газа допускает отделение гидродинамической части от существенно неравновесных пространственно-временных кинетических слоёв. Большой цикл работ Кинотской группы (Ё. Соне, К. Аоки, Ш. Таката, Т. Овада и др.) посвящён высоко-

<sup>4</sup>Hilbert D. Begründung der kinetischen Gastheorie // Mathematische Annalen. 1912. Т. 72, № 4. С. 562—577.

<sup>5</sup>Chapman S. On the law of distribution of molecular velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monatomic gas // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A. 1916. Vol. 216. P. 279—348.

<sup>6</sup>Enskog D. Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen : Dissertation / Enskog David. Upsala, 1917.

<sup>7</sup>Burnett D. The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas // P. London Math. Soc. 1935. Vol. 2, no. 1. P. 385—430.

<sup>8</sup>Grad H. Asymptotic theory of the Boltzmann equation // The physics of Fluids. 1963. Vol. 6, no. 2. P. 147—181.

<sup>9</sup>Sone Y. Kinetic theory and fluid dynamics. Boston : Birkhäuser, 2002.

точному численному анализу кнудсеновского слоя первого<sup>10</sup> и второго порядка<sup>11</sup> для диффузного отражения и газа твёрдых сфер. Различные системы гидродинамических уравнений могут быть получены в зависимости от способа асимптотического масштабирования. В частности, для медленных неизотермических течений справедливы уравнения Когана—Галкина—Фридендера (КГФ)<sup>12</sup>, содержащие некоторые ненавье—стоксовские члены.

Огромное множество исследований посвящено численному решению уравнения Больцмана. Среди них можно выделить три магистральных направления в зависимости от способа аппроксимации функции распределения скоростей:

- *методы прямого статистического моделирования (ПСМ)* строятся на основе некоторого случайного процесса марковского типа, способного аппроксимировать больцмановскую динамику;
- *методы дискретных скоростей* подразумевают фиксированный набор доступных молекулярных скоростей;
- *проекционные методы* используют разложение по базису в определённом функциональном пространстве.

Методы ПСМ в силу своей универсальности и простоты нашли широкое применение в прикладных областях, однако присущие им флуктуации иногда сильно ограничивают точность получаемых результатов. Проекционные методы, напротив, обладают наилучшим соотношением погрешности к размерности аппроксимационного пространства, но, как правило, в достаточно узком классе решений. Оказалось возможным добиться второго порядка точности в рамках метода дискретных скоростей, однако для этого потребовался длинный исторический путь.

Метод дискретных скоростей был впервые использован А. Нордсиком и Б. Хиксом<sup>13</sup>. Для вычисления интеграла столкновения они использовали кубатуры Монте-Карло с последующей консервативной коррекцией функции распределения. В дальнейшем метод дискретных скоростей развивался С. Йе-

---

<sup>10</sup>Ohwada T., Sone Y., Aoki K. Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Phys. Fluids A. 1989. Vol. 1, no. 9. P. 1588–1599; Sone Y., Ohwada T., Aoki K. Temperature jump and Knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall: Numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Phys. Fluids A. 1989. Vol. 1, no. 2. P. 363–370.

<sup>11</sup>Hattori M., Takata S. Second-order Knudsen-layer analysis for the generalized slip-flow theory I // Bull. Inst. Math. Acad. Sinica. 2015. Vol. 10. P. 423–448; Hattori M., Takata S. Second-order Knudsen-layer analysis for the generalized slip-flow theory II: curvature effects // J. Stat. Phys. 2015. Vol. 161, no. 4. P. 1010–1036; Ohwada T., Sone Y. Analysis of thermal stress slip flow and negative thermophoresis using the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Eur. J. Mech. B/Fluids. 1992. Vol. 11. P. 389–414.

<sup>12</sup>Коган М. Н., Галкин В. С., Фридендер О. Г. О напряжениях, возникающих в газах вследствие неоднородности температуры и концентраций. Новые типы свободной конвекции // Успехи физических наук. 1976. Т. 119. С. 111–125.

<sup>13</sup>Nordsieck A., Hicks B. L. Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral: tech. rep. / University of Illinois. Urbana, Illinois, 1966. R–307.

ном<sup>14</sup>, В. В. Аристовым и Ф. Г. Черемисиным<sup>15</sup>. Д. Гольдштейн, Б. Стёртевант и Дж. Бродуэлл первыми для решения уравнения Больцмана использовали кинетические модели газа, допускающие столкновения только в дискретном пространстве<sup>16</sup>. А. Пальчевский, Ж. Шнайдер и А. В. Бобылев показали, что, несмотря на присущие им *консервативность* и *энтропийность* на микроскопическом уровне<sup>17</sup>, теоретический порядок сходимости таких моделей к уравнению Больцмана сильно меньше единицы<sup>18</sup>. В. Панфёров и А. Гейнц показали, как специальная замена переменных позволяет улучшить сходимость, но лишь вплоть до первого порядка<sup>19</sup>. *Размазывание (mollification) столкновительного процесса* позволяет естественным образом решить проблему консервативной аппроксимации, избегая решения целочисленных уравнений:

- К. Бюе, С. Кордые и П. Дегон продемонстрировали, как с его помощью обеспечить консервативность на микроскопическом уровне (для столкновительного оператора целиком)<sup>20</sup>;
- Х. Бабовски построил простейшую схему с консервативностью на мезоскопическом уровне (для всей столкновительной сферы)<sup>21</sup>, его подход позже развил Д. Гёрш<sup>22</sup>;
- Ф. Г. Черемисин предложил новый класс методов, сохраняющих консервативность на микроскопическом уровне (для отдельной столкновительной пары)<sup>23</sup>.

Микроскопическая консервативность, достигнутая Ф. Г. Черемисиным, позволяет построить наиболее эффективную численную схему и может быть интерпретирована как проекционная процедура Петрова—Галёркина, в которой столкновительные инварианты образуют ортогональную оболочку. Кроме того, специальная процедура интерполяции функции распределения обеспечивает энтро-

<sup>14</sup>Yen S. M. Numerical solution of the nonlinear Boltzmann equation for nonequilibrium gas flow problems // Annu. Rev. Fluid Mech. 1984. Vol. 16, no. 1. P. 67–97.

<sup>15</sup>Аристов В. В., Черемисин Ф. Г. Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1980. Т. 20, № 1. С. 191—207.

<sup>16</sup>Goldstein D., Sturtevant B., Broadwell J. E. Investigations of the motion of discrete-velocity gases // Progress in Astronautics and Aeronautics. 1989. Vol. 117. P. 100–117.

<sup>17</sup> Каждое дискретное столкновение не уменьшает энтропию, сохраняет массу, импульс и кинетическую энергию.

<sup>18</sup>Palczewski A., Schneider J., Bobylev A. V. A consistency result for a discrete-velocity model of the Boltzmann equation // SIAM J. Numer. Anal. 1997. Vol. 34, no. 5. P. 1865–1883.

<sup>19</sup>Panferov V. A., Heintz A. G. A new consistent discrete-velocity model for the Boltzmann equation // Mathematical methods in the applied sciences. 2002. Vol. 25, no. 7. P. 571–593.

<sup>20</sup>Buet C., Cordier S., Degond P. Regularized Boltzmann operators // Comput. Math. with Appl. 1998. Vol. 35, no. 1/2. P. 55–74.

<sup>21</sup>Babovsky H. Discretization and numerical schemes for steady kinetic model equations // Comput. Math. with Appl. 1998. Vol. 35, no. 1/2. P. 29–40.

<sup>22</sup>Görsch D. Generalized discrete velocity models // Math. Models Methods Appl. Sci. 2002. Vol. 12, no. 01. P. 49–75.

<sup>23</sup>Черемисин Ф. Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. Т. 357, № 1. С. 1—4.

пийность метода<sup>24</sup>. Поэтому такой метод будем называть *консервативным проекционно-интерполяционным методом дискретных скоростей (КПИМДС)*.

Во многих прикладных задачах эффективная аппроксимация уравнения Больцмана требует существенно неоднородной дискретизации в скоростном пространстве. Неравномерные сетки активно используются как в методах дискретных скоростей<sup>25</sup>, так и проекционных<sup>26</sup>. КПИМДС на неравномерных сетках может быть построен с помощью техники *многоточечного проецирования*, впервые предложенной Ф. Варгизом<sup>27</sup>.

В настоящем исследовании выделены две основные цели:

1. Развитие КПИМДС для неравномерных сеток, его верификация в широком диапазоне неравновесности.
2. Численный анализ некоторых одномерных и медленных неизотермических течений разреженного газа на основе как уравнения Больцмана, так и соответствующих уравнений гидродинамического типа. Оценка области применимости последних при различных граничных условиях.

Для достижения указанных целей поставлены следующие задачи:

1. Анализ многоточечных проекционных шаблонов, необходимых для консервативного вычисления интеграла столкновений на неравномерных сетках.
2. Построение асимптотического решения второго порядка для пограничного слоя Прандтля для газа твёрдых сфер.
3. Сравнительный анализ численных решений задачи Куэтта в широком диапазоне параметров, получаемых с помощью КПИМДС и других общепризнанных методов.
4. Исследование сходимости численного решения уравнения Больцмана к асимптотическому для широкого класса течений между параллельными пластинами.
5. Исследование различных подходов к постановке граничных условий для уравнений КГФ, сравнительный анализ с решением уравнения Больцмана.
6. Параметрический анализ течений между некоаксиальными и эллиптическими цилиндрами в континуальном пределе.

---

<sup>24</sup>Черемисин Ф. Г. Решение уравнения Больцмана при переходе к гидродинамическому режиму течения // Доклады РАН. 2000. Т. 373, № 4. С. 483—486.

<sup>25</sup>Clarke P. [et al.]. A novel discrete velocity method for solving the Boltzmann equation including internal energy and non-uniform grids in velocity space // AIP Conference Proceedings. Vol. 1501. AIP. 2012. P. 373–380; Kolobov V. I., Arslanbekov R. R., Frolova A. A. Boltzmann solver with adaptive mesh in velocity space // AIP Conference Proceedings. Vol. 1333. AIP. 2011. P. 928–933.

<sup>26</sup>Heintz A., Kowalczyk P., Grzhibovskis R. Fast numerical method for the Boltzmann equation on non-uniform grids // J. Comput. Phys. 2008. Vol. 227, no. 13. P. 6681–6695; Wu L., Reese J. M., Zhang Y. Solving the Boltzmann equation deterministically by the fast spectral method: application to gas microflows // J. Fluid Mech. 2014. Vol. 746. P. 53–84.

<sup>27</sup>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. 2007. P. 225–232.

Задачи 1–5 позволяют достичь первой цели, задачи 2–6 раскрывают содержание второй цели.

### **Научная новизна:**

1. КПИМДС применяется для существенно неравномерных сеток в пространстве скоростей для достижения высокой точности.
2. Нелинейная асимптотическая теория используется для верификации численного метода решения уравнения Больцмана.
3. Уравнения КГФ решаются с граничными условиями, содержащими члены отличные от теплового скольжения.
4. Рассматриваются неизученные ранее эффекты и свойства известных течений разреженного газа.

### **Теоретическая и практическая значимость:**

1. Результаты анализа нелинейной задачи Куэтта могут служить эталоном для верификации других численных методов.
2. Предложенная методология численного анализа медленных неизотермических течений существенно расширяет возможности их компьютерного моделирования.

**Методология и методы исследования.** В качестве математической модели неравновесного газа используется кинетическая теория, высокий уровень развития которой позволяет настоящему исследованию обходиться без эмпирической базы. Методологическая база включает специальные математические и вычислительные методы:

- асимптотические методы нелинейной теории возмущения;
- численные методы интегрирования систем дифференциальных уравнений в частных производных, специальные численные методы вычислительной гидродинамики;
- численные методы многомерного интегрирования;
- квадратурные методы решения интегральных уравнений;
- проекционные методы решения операторных уравнений;
- вариационное исчисление.

В работе использован широкий спектр современных компьютерных технологий и программных комплексов, включая

- системы компьютерной алгебры (SymPy<sup>28</sup>),
- генерацию расчётных сеток (gmsh<sup>29</sup>),
- организацию параллельных вычислений (MPI<sup>30</sup>),
- инструментарий вычислительной гидродинамики (OpenFOAM<sup>31</sup>),

---

<sup>28</sup> Joyner D. [et al.]. Open source computer algebra systems: SymPy // ACM Communications in Computer Algebra. 2012. Vol. 45, no. 3/4. P. 225–234.

<sup>29</sup> Geuzaine C., Remacle J.-F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities // Int. J. Numer. Methods Eng. 2009. Vol. 79, no. 11. P. 1309–1331.

<sup>30</sup> Gropp W., Lusk E., Skjellum A. Using MPI: portable parallel programming with the message-passing interface. Vol. 1. MIT press, 1999. 350 p.

<sup>31</sup> Weller H. G. [et al.]. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques // Comput. Phys. 1998. Vol. 12, no. 6. P. 620–631.



- визуализацию полей (matplotlib<sup>32</sup>).

Численные решения уравнений КГФ и Больцмана получены с помощью соответствующих авторских кодов:

- солвера на основе алгоритма SIMPLE<sup>33</sup> snitSimpleFoam [3],
- программного комплекса анализа газокинетических процессов [4; 5].

В соответствии с результатами решения поставленных задач выдвигаются **основные положения, выносимые на защиту:**

1. Для многоточечных проекционных шаблонов выявлены критерии, минимизирующие требования к мощности множества кубатурных точек [2].
2. С точностью 8–10 знаков вычислены неизвестные ранее транспортные коэффициенты для газа твёрдых сфер, необходимые для вычисления тензора напряжений и вектора потока тепла в пограничном слое Прандтля [2].
3. Получено решение плоской задачи Куэтта для широкого диапазона чисел Кнудсена вплоть до гиперзвуковых скоростей. Абсолютная погрешность первых 13-ти моментов функции распределения не выше  $10^{-4}$  [2].
4. Продемонстрировано, что КПИМДС на неравномерных прямоугольных сетках — надёжный инструмент для высокоточного анализа нелинейных плоских кинетических слоёв. Отклонение от асимптотического решения не более  $10^{-4}$  для нелинейных течений между параллельными пластинами с температурой, распределённой а) константно [2], б) синусоидально [1].
5. На численных примерах показано, что использование совместимых граничных условий первого и второго порядка для уравнений КГФ существенно улучшает точность асимптотического решения. Исследованы, в том числе, граничные условия, учитывающие кривизну граничной поверхности [1].
6. На основе численного параметрического анализа некоторых нелинейных течений газа между равномерно нагретыми телами в континуальном пределе было обнаружено, что обтекаемые тела притягиваются подобно электрически заряженным телам [3].

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается следующими обстоятельствами:

1. Кинетическое уравнение Больцмана выводится из первых принципов и содержит минимальное количество дополнительных допущений. В настоящем исследовании повсеместно используется газ твёрдых сфер и граничные условия полного диффузного отражения. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что эти модели достаточно адек-

---

<sup>32</sup>Hunter J. D. Matplotlib: A 2D graphics environment // Computing In Science & Engineering. 2007. Vol. 9, no. 3. P. 90–95.

<sup>33</sup>Caretto L. S., Curr R. M., Spalding D. B. Two numerical methods for three-dimensional boundary layers // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 1972. Vol. 1, no. 1. P. 39–57.

ватно отражают реальные кинетические процессы в широком диапазоне неравновесности.

2. Проводится систематический сравнительный анализ результатов, полученных с помощью КПИМДС, прямого статистического моделирования и асимптотического анализа уравнения Больцмана.
3. Проводится анализ сходимости численных методов на основе множества решений на разностных сетках различной мелкости.
4. Верификация используемых солверов и систем обработки данных выполнена на тестовых задачах, решение которых с высокой точностью представлено в литературе. Результаты находятся в полном соответствии с результатами, полученными другими авторами.

**Апробация работы.** Результаты диссертации докладывались лично соискателем на

- семинаре сектора кинетической теории отдела механики ВЦ ФИЦ ИУ РАН (Москва, 2016),
- 2 Международном симпозиуме по аэродинамике, охватывающем различные режимы течений (Маньян, Китай, 2017),
- Всероссийской конференции по аэрогидродинамике, посвященной 100-летию со дня рождения С. В. Валландера (Санкт-Петербург, 2017).

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 5 печатных изданиях, рекомендованных ВАК.

**Объём и структура работы.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и одного приложения. Полный объём диссертации составляет 147 страниц, включая 52 рисунка и 6 таблиц. Список литературы содержит 260 наименований.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность избранной темы, устанавливается степень её разработанности, ставятся цели и задачи диссертационного исследования, раскрывается научная новизна, определяются методологические основания исследования, теоретическая и практическая значимость полученных автором результатов, формулируются положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** состоит из 3 частей и посвящена основному математическому аппарату молекулярной газодинамики. **Первая часть** излагает основы кинетического описания газа, включая уравнение Больцмана, его свойства, методы упрощения столкновительного члена и граничные условия. Освещается место кинетической теории в механике жидкости, газа и плазмы, её границы применимости и связь с классической механикой.

Вторая часть содержит короткий обзор современных достижений математической теории задачи Коши. Избегая точных формулировок, изложены в доступной форме основные результаты, справедливые как для предельно общих решений в лебеговом пространстве  $L^1$ , так и на основе нелинейной теории возму-

щения в  $L^2(M^{-1})$ . Освещены вопросы, имеющие первостепенную важность для понимания бoльцмановской динамики, такие как существование и единственность решения, эволюция полиномиальных моментов, устойчивость и сходимость к равновесию в зависимости от молекулярного потенциала.

В третьей части внимание уделено асимптотической теории слабopазреженного газа. Описывается методика декомпозиции кинетического решения при малых числах Кнудсена в виде суммы  $f = f_H + f_K$ , где  $f_H$  — гидродинамическая часть,  $f_K$  — поправка слоя Кнудсена. Такое разложение единственно, поскольку гидродинамическое решение получается из разложения Гильберта в степенной ряд по Кн, а неравновесная часть решения убывает быстрее любой степени Кн. Кроме классической линейной асимптотической теории, рассматриваются отдельные нелинейные разделы, непосредственно применяемые для задач, рассмотренных в настоящем исследовании (положение 4).

Во-первых, это *одномерные течения* при числах Маха порядка единицы. Вплоть до членов второго порядка они описываются уравнениями Навье—Стокса

$$\frac{d}{dy} \left( \Gamma_1 \frac{dv_H}{dy} \right) = O(k^2), \quad \Gamma_1 \left( \frac{dv_H}{dy} \right)^2 + \frac{5}{4} \frac{d}{dy} \left( \Gamma_2 \frac{dT_H}{dy} \right) = O(k^2),$$

где  $\Gamma_i(T_H)$  — транспортные коэффициенты,  $v_H$  и  $T_H$  — скорость и температура газа соответственно, а  $k = \text{Kn} \sqrt{\pi}/2$ . В силу симметрии задачи  $dp_H/dy = O(k^2)$ . Неоднородность давления  $p_H$  может быть вычислена из уравнения

$$\frac{3p_H}{2} \frac{dp_H}{dy} + \frac{d}{dy} \left[ \Gamma_3 \frac{d^2 T_H}{dy^2} + \Gamma_7 \left( \frac{dT_H}{dy} \right)^2 \right] + \frac{d}{dy} \left[ (\Gamma_8 - 2\Gamma_9) \left( \frac{dv_H}{dy} \right)^2 \right] = O(k^3).$$

Поперечный тепловой поток подчиняется закону Фурье

$$q_{yH} = -\frac{5}{4} \Gamma_2 \frac{dT_H}{dy} k + O(k^3),$$

а его продольная гидродинамическая часть появляется только во втором порядке:

$$q_{xH} = \frac{T_H}{p_H} \left( \frac{\Gamma_3}{2} \frac{d^2 v_H}{dy^2} + 4\Gamma_{10} \frac{dT_H}{dy} \frac{dv_H}{dy} \right) k^2 + O(k^3).$$

Тензор давлений существенно анизотропный в нелинейном режиме:

$$p_{xxH} - p_{yyH} = \frac{1}{p_H} \left[ 2\Gamma_9 \left( \frac{dv_H}{dy} \right)^2 - \Gamma_3 \frac{d^2 T_H}{dy^2} - \Gamma_7 \left( \frac{dT_0}{dy} \right)^2 \right] k^2 + O(k^3),$$

$$p_{zzH} - p_{yyH} = \frac{2\Gamma_8}{p_H} \left( \frac{dv_H}{dy} \right)^2 k^2 + O(k^3).$$

Для степенного потенциала можно записать

$$\Gamma_{1,2}(T) = \gamma_{1,2}T^s, \quad \Gamma_{3,8,9}(T) = \gamma_{3,8,9}T^{2s}, \\ \Gamma_7(T) = \Gamma'_3 - \gamma_7T^{2s-1}, \quad \Gamma_{10}(T) = \gamma_{10}T^{2s-1}.$$

Газу твёрдых сфер соответствует  $s = 1/2$ , а максвелловскому  $s = 1$ .

Во-вторых, это *медленные неизотермические течения* при числах Рейнольдса порядка единицы. Они описываются уравнениями КГФ:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{u_{iH1}}{T_{H0}} \right) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{u_{iH1}u_{jH1}}{T_{H0}} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \Gamma_1 \left( \frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{jH1}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{kH1}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] \\ &- \left[ \frac{\Gamma_7}{\Gamma_2} \frac{u_{jH1}}{T_{H0}} \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} + \frac{\Gamma_2^2}{4} \frac{d}{dT_{H0}} \left( \frac{\Gamma_7}{\Gamma_2^2} \right) \left( \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)^2 \right] \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial p_{H2}^\dagger}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_i} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_2 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_i} \right), \end{aligned}$$

где  $u_{iH1} = p_0 v_{i1}$  и

$$p_{H2}^\dagger = p_0 p_{H2} + \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \Gamma_3 \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_k} \right) - \frac{\Gamma_7}{6} \left( \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_k} \right)^2.$$

Индексы соответствуют степенному разложению  $h = h_0 + h_1 k + h_2 k^2 + \dots$ . На равномерно нагретое тело со стороны газа действует сила

$$p_0 \oint_S F_{i2} dS = - \oint_S p_{H2}^\dagger n_i dS + \Gamma_1 \oint_S \frac{\partial u_{iH1}}{\partial x_j} n_j dS + \frac{\Gamma_7}{2} \oint_S \left( \frac{\partial T_{H0}}{\partial x_j} \right)^2 n_i dS.$$

Рассматриваются граничные условия первого и второго порядка, включая члены, содержащие тензор кривизны поверхности.

**Вторая глава** состоит из 2 частей и посвящена численным методам. Первая часть содержит обзор, классификацию и сравнительный анализ основных подходов к дискретной аппроксимации уравнения Больцмана. Основное внимание уделено решению пространственно-однородной задачи и схемам с операторным расщеплением по физическим процессам (свободный перенос и столкновения).

Во второй части излагается основной численный метод, позволяющий достигнуть второго порядка точности для функции распределения  $f$  во всём семимерном пространстве: по времени  $t$ , по физическим  $x_i$  и скоростным  $\zeta_i$  координатам. Для этого используются симметричное расщепление, TVD-схемы для

аппроксимации *бесстолкновительного уравнения Больцмана*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \zeta_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$$

и КПИМДС для решения *пространственно-однородного уравнения Больцмана*

$$\frac{\partial f}{\partial t} = J(f), \quad J(f) = \int_{\mathbb{R}^d \times S^{d-1}} (f' f'_* - f f_*) B d\Omega(\alpha) d\zeta_*.$$

Столкновительный интеграл  $J(f)$  записан с использованием следующих обозначений:

$$\begin{aligned} f &= f(\zeta), \quad f_* = f(\zeta_*), \quad f' = f(\zeta'), \quad f'_* = f(\zeta'_*), \\ \zeta'_i &= \zeta_i + \alpha_i \alpha_j (\zeta_{j*} - \zeta_j), \quad \zeta'_{i*} = \zeta_{i*} - \alpha_i \alpha_j (\zeta_{j*} - \zeta_j). \end{aligned}$$

Пусть неравномерная сетка с узлами  $\zeta_\gamma$  и весами  $w_\gamma$  даёт кубатуру

$$\int F(\zeta) d\zeta \approx \sum_{\gamma \in \Gamma} F_\gamma w_\gamma = \sum_{\gamma \in \Gamma} \hat{F}_\gamma, \quad F_\gamma = F(\zeta_\gamma), \quad \sum_{\gamma \in \Gamma} w_\gamma = V_\Gamma,$$

тогда столкновительный интеграл, записанный в симметризованном виде

$$J(f_\gamma) = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^{2d} \times S^{d-1}} (\delta_\gamma + \delta_{*\gamma} - \delta'_\gamma - \delta'_{*\gamma}) (f' f'_* - f f_*) B d\Omega(\alpha) d\zeta d\zeta_*,$$

где  $\delta_\gamma = \delta(\zeta - \zeta_\gamma)$  — дельта-функция в  $\mathbb{R}^d$ , аппроксимируется суммой

$$\hat{J}_\gamma = \frac{\pi V_\Gamma^2}{\sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_\nu w_{*\nu}} \sum_{\nu \in \mathcal{N}} (\delta_{\gamma\nu} + \delta_{*\gamma\nu} - \delta'_{\gamma\nu} - \delta'_{*\gamma\nu}) \left( \frac{w_\nu w_{*\nu}}{w'_\nu w'_{*\nu}} \hat{f}'_\nu \hat{f}'_{*\nu} - \hat{f}_\nu \hat{f}_{*\nu} \right) B_\nu,$$

где  $\delta_{\gamma\nu}$  — символ Крёнекера. Множество кубатурных точек  $\{\zeta_\nu, \zeta_{*\nu}, \alpha_\nu\}_{\nu \in \mathcal{N}}$  определяется соответствующим методом численного интегрирования. В настоящем исследовании используются оптимальные правила Коробова<sup>34</sup>. Штрихованные величины требуют определения, поскольку скорости после столкновения  $\zeta'_\nu$  и  $\zeta'_{*\nu}$  в общем случае не попадают в узлы сетки. Если их заменить на ближайшие сеточные скорости  $\zeta_{\lambda_\nu}$  и  $\zeta_{\mu_\nu}$ , то  $\hat{J}_\gamma$  потеряет консервативность и энтропийность. Для решения этих проблем используются две специальные процедуры.

Проекционная процедура может быть записана через разложение вида

$$\delta'_{\gamma\nu} = \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda_\nu, a} \delta_{\lambda_\nu + s_a, \gamma},$$

<sup>34</sup> Коробов Н. М. Теоретикочисловые методы в приближенном анализе. М. : Физматгиз, 1963. 224 с.

где  $\lambda_\nu + s_a \in \Gamma$ . Оно может быть получено с помощью метода Петрова—Галёркина

$$\int \psi_s(\zeta_\gamma) \left( \delta(\zeta'_\gamma - \zeta_\gamma) - \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda_\nu, a} \delta(\zeta_{\lambda_\nu + s_a} - \zeta_\gamma) \right) d\zeta_\gamma = 0.$$

*Консервативность* КПИМДС достигается, когда  $\{\psi_s\}$  содержит все инварианты столкновений:  $\psi_0 = 1, \psi_i = \zeta_i, \psi_4 = \zeta_i^2$ . Множество правил смещения  $\mathcal{S} = \{s_a : a \in \Lambda, r_{\lambda_\nu, a} \neq 0\}$  называется проекционным шаблоном.

Интерполяционная процедура в достаточно общем виде может быть записана через среднее взвешенное по Колмогорову:

$$\hat{f}'_\nu = \varphi_f^{-1} \left( \sum_{a \in \Lambda} q_{\lambda_\nu, a} \varphi_f \left( \hat{f}_{\lambda_\nu + s_a} \right) \right), \quad w'_\nu = \varphi_w^{-1} \left( \sum_{a \in \Lambda} p_{\lambda_\nu, a} \varphi_w \left( w_{\lambda_\nu + s_a} \right) \right).$$

*Энтропийность* КПИМДС достигается через среднее геометрическое:

$$\varphi_{f, w}(x) = \ln(x), \quad \varphi_{f, w}^{-1}(x) = \exp(x), \quad p_{\lambda_\nu, a} = q_{\lambda_\nu, a} = r_{\lambda_\nu, a}.$$

Аналогичные соотношения справедливы для  $\delta'_{*\gamma\nu}$ ,  $\hat{f}'_{*\nu}$  и  $w'_{*\nu}$ .

На основе кубатурной формулы вида

$$\hat{f}_\gamma^n = \sum_{j=1}^N \hat{\Delta}_\gamma^{n+(j-1)/N}$$

строится численная схема решения задачи Коши *в дробных шагах*

$$\hat{f}_\gamma^{n+j/N} = \hat{f}_\gamma^{n+(j-1)/N} + \frac{\Delta t}{N} \hat{\Delta}_\gamma^{n+(j-1)/N} \quad (j = 1, \dots, N), \quad \Delta t = t_{n+1} - t_n.$$

Каждый  $j$ -ый шаг сохраняет массу, импульс, кинетическую энергию и не уменьшает энтропию при сохранении *положительности*.

Даются конструктивные оценки на минимальное количество кубатурных точек, обеспечивающее  $\hat{f}_\gamma^{n+j/N} > 0$  (положение 1). Если все проекционные веса  $r_{\lambda_\nu, a}$  положительны, то достаточно

$$N > A \hat{f}_{\max} \varepsilon_f^2 \varepsilon_w^2,$$

где

$$A = \frac{\pi \Delta t V_\Gamma^2 N B_{\max}}{\sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_{\alpha_\nu} w_{\beta_\nu}}, \quad B_{\max} = \max_{\gamma, \sigma \in \Gamma} B(\alpha, \zeta_\gamma, \zeta_\sigma) = O(\zeta_{\max}), \quad \zeta_{\max} = \max_{\gamma \in \Gamma} |\zeta_\gamma|,$$

$$\hat{f}_{\max} = \max_{\gamma \in \Gamma} \hat{f}_\gamma, \quad \varepsilon_f = \max_{\substack{s_a, s_b \in \mathcal{S} \\ \gamma \in \Gamma}} \frac{\hat{f}_{\gamma+s_a}}{\hat{f}_{\gamma+s_b}}, \quad \varepsilon_w = \max_{\gamma, \sigma \in \Gamma} \frac{w_\gamma}{w_\sigma}.$$

Если же проекционные веса принимают отрицательные значения, то оценка значительно ухудшается:

$$N > A \hat{f}_{\max} \bar{r}_{\max} \max_{\gamma, \sigma \in \Gamma} \frac{\hat{f}_{\gamma}}{\hat{f}_{\sigma}}, \quad \bar{r}_{\max} = \max_{\gamma \in \Gamma, a \in \Lambda} (-r_{\gamma, a}).$$

Величина  $\varepsilon_f$  уменьшается при измельчении сетки в областях с высоким градиентом и при уменьшении диаметра проекционного шаблона

$$R_S = \max_{\substack{s_a, s_b \in \mathcal{S} \\ \gamma \in \Gamma}} |\zeta_{\gamma+s_a} - \zeta_{\gamma+s_b}|.$$

Таким образом, чтобы смягчить оценку на  $N$ , необходимо уменьшать  $|\Gamma|$ ,  $\zeta_{\max}$ ,  $\varepsilon_w$  скоростной сетки и  $R_S$ ,  $\bar{r}_{\max}$  проекционного шаблона. На равномерной сетке консервативность может быть достигнута с помощью двухточечного шаблона с  $\bar{r}_{\max} = 0$ ; для пяти- и семиточечной схем  $\bar{r}_{\max} = 1/8$ .

Из приведённых оценок видно, что сохранение положительности для всех дробных шагов приводит в общем случае к огромным  $N$ , поэтому в настоящем исследовании используется *схема с фильтрацией* кубатурного множества

$$\hat{J}_{\gamma} = \sum_{\nu \in \mathcal{N} \setminus \mathcal{M}} \hat{\Delta}_{\gamma\nu},$$

где  $\mathcal{M}$  — множество кубатурных точек, нарушающих условие положительности. Для достижения желаемой точности контролируется малость величины

$$\frac{\pi V_{\Gamma}^2}{\rho \sum_{\nu \in \mathcal{N}} w_{\nu} w_{*\nu}} \sum_{\nu \in \mathcal{M}} \left| \hat{f}_{\lambda_{\nu}} \hat{f}_{\mu_{\nu}} - \hat{f}_{\nu} \hat{f}_{*\nu} \right| B_{\nu},$$

где  $\rho = \int f d\zeta$  — плотность газа.

**Третья глава** содержит результаты численного и асимптотического анализа некоторых классических задач молекулярной газодинамики для одноатомного газа твёрдых сфер. В качестве граничных условий на твёрдой поверхности везде используется полное диффузное отражение.

В первой части рассматривается плоское течение Куэтта для широкого диапазона чисел Кнудсена (от  $10^{-2}$  до  $10^2$ ) и чисел Маха (от 0 до 5). Разреженный газ заключён между двумя параллельными пластинами, движущимися со скоростями  $v_x(y = \pm 1/2) = \pm \Delta v/2$ . Основная сложность численного анализа задачи связана с сингулярным поведением решения возле твёрдых пластин.

Во-первых, вследствие граничных условий функция распределения терпит разрыв вдоль плоскости  $\zeta_i n_i = 0$  непосредственно на граничной поверхности с нормалью  $n_i$ , направленной в сторону газа. Этот разрыв не проникает внутрь области с газом, однако резкий перепад решения возле  $\zeta_i n_i = 0$  требует сильного

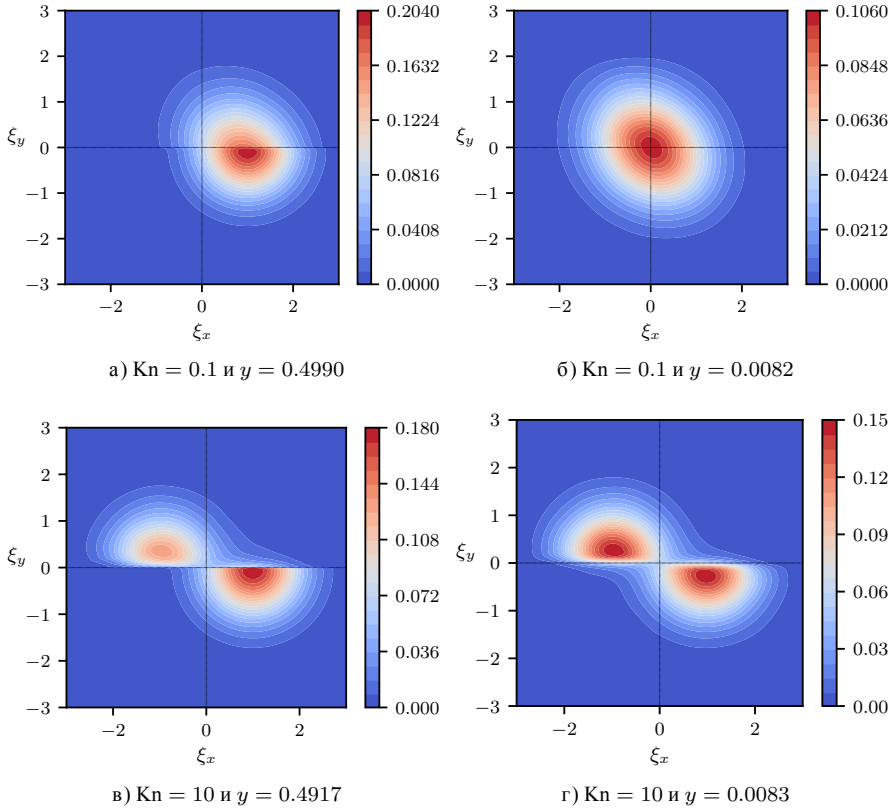


Рис. 1 — Изолинии функции распределения при  $\Delta v = 2$ . Показано сечение  $\zeta_z = 0.1665$ .

измельчения скоростной сетки (рис. 1). Кроме того, оно необходимо для разрешения логарифмической сингулярности вида<sup>35</sup>

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta_i} n_i = C \ln \zeta_i n_i + O(1), \quad (\zeta_i n_i < 0).$$

Погрешность решения на равномерной сетке при том же количестве узлов разрастается при увеличении числа Кнудсена.

Во-вторых, для малых чисел Кнудсена требуется измельчение физической сетки вблизи пластин, поскольку<sup>36</sup>

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} n_i = \frac{C}{\text{Kn}} \ln \frac{(x_i - x_{Bi}) n_i}{\text{Kn}} + O(1),$$

<sup>35</sup>Chen I.-K. [et al.]. Singularity of the Velocity Distribution Function in Molecular Velocity Space // Commun. Math. Phys. 2016. Vol. 341, no. 1.

<sup>36</sup>Chen I.-K., Liu T.-P., Takata S. Boundary Singularity for Thermal Transpiration Problem of the Linearized Boltzmann Equation. // Archive for Rational Mechanics & Analysis. 2014. Vol. 212, no. 2.



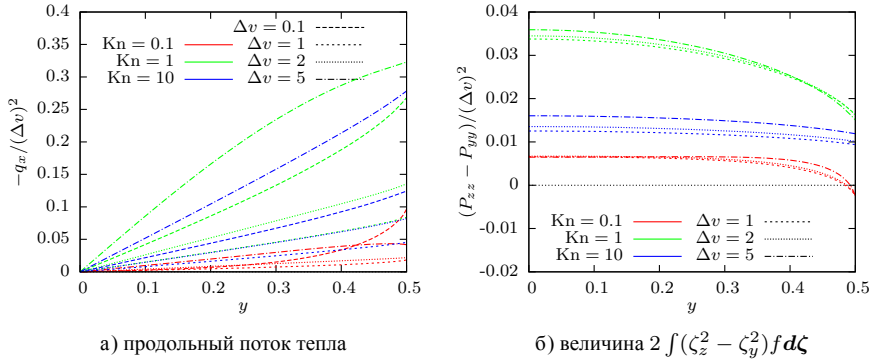


Рис. 2 — Профили некоторых моментов функции распределения.

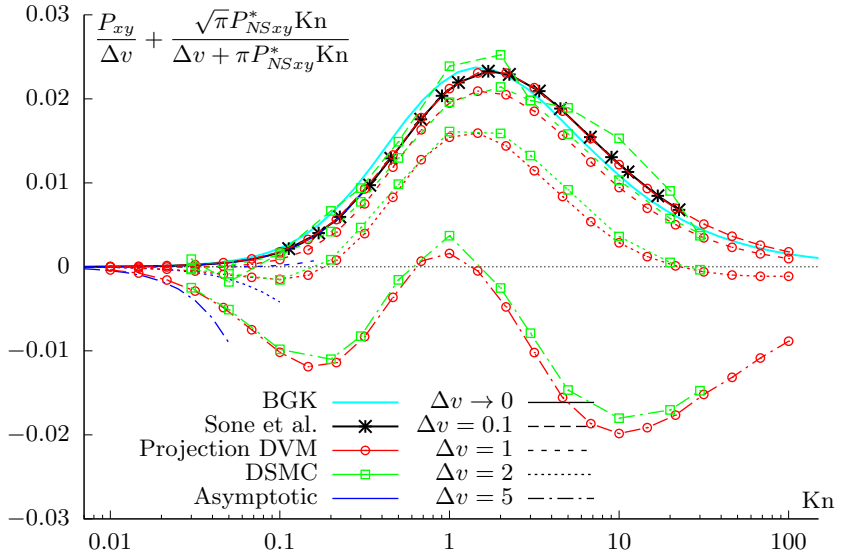
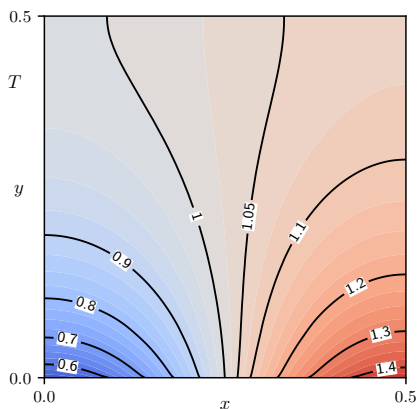


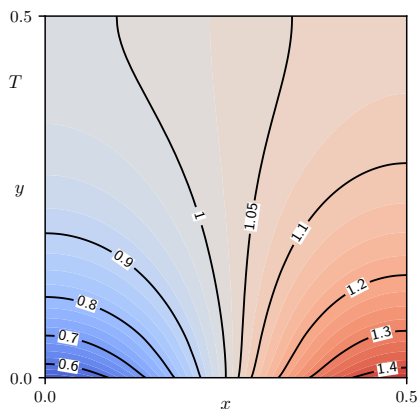
Рис. 3 — Зависимость сдвигового напряжения от числа Кнудсена.  $P_{NSxy}^*$  соответствует решению уравнений Навье—Стокса с граничными условиями без скольжения. Показаны решения модельного уравнения Крукса—Веландера —, линейаризованного уравнения Больцмана —\*, КПИМДС —, ПСМ — и асимптотическое решение —.

где  $x_{Bi}$  — координата граничной поверхности.

Вычисляются профили первых тринадцати моментов функции распределения для различных чисел Кнудсена и Маха. На рис. 2а показано, как кривизна профиля продольного теплового потока меняет знак по мере роста числа Маха. Рис. 26 демонстрирует степень анизотропичности тензора давлений. На рис. 3

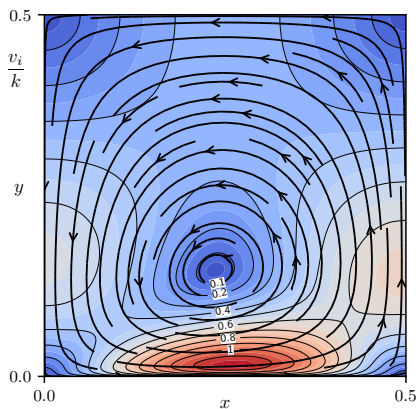


а) уравнения КГФ с граничными условиями второго порядка

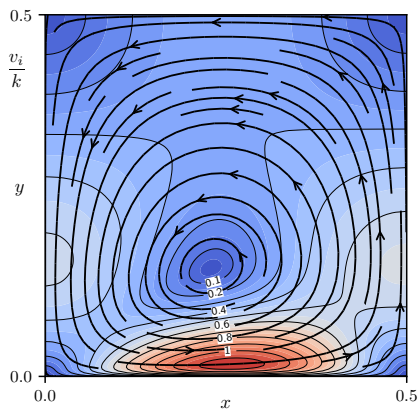


б) уравнение Больцмана

Рис. 4 — Изотермические линии для  $\text{Kn} = 0.01$



а) уравнения КГФ с граничными условиями второго порядка



б) уравнение Больцмана

Рис. 5 — Стационарное поле скоростей для  $\text{Kn} = 0.01$ ; изолинии соответствуют модулю.

проводится сравнение полученных результатов с другими методами. Все данные согласуются между собой в пределах точности (положения 3 и 4).

Во второй части рассматривается течение между пластинами с синусоидальным распределением температур. На рис. 4 и 5 видно, что при  $\text{Kn} = 0.01$  асимптотическое решение с хорошей точностью воспроизводит кинетическое решение, полученное КПИМДС (положение 4). На рис. 6 видно, что такой результат достигнут, главным образом, благодаря граничным условиям, учитыва-

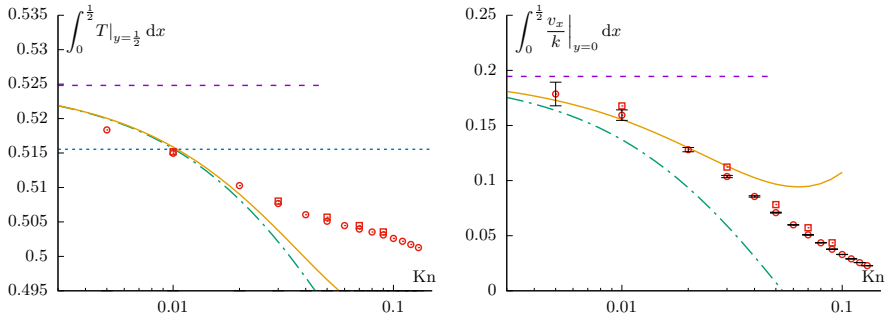


Рис. 6 — Некоторые граничные интегралы в зависимости от числа Кнудсена, полученные разными методами: уравнение теплопроводности  $\cdots$ , уравнения КГФ с граничными условиями ведущего порядка (только тепловое скольжение)  $---$ , первого  $-.-$  и второго  $---$  порядков, уравнение Больцмана на равномерной сетке  $\circ$  и неравномерной  $\square$ . Планка  $y$   $\circ$  соответствует абсолютной погрешности  $3 \cdot 10^{-4}$ .

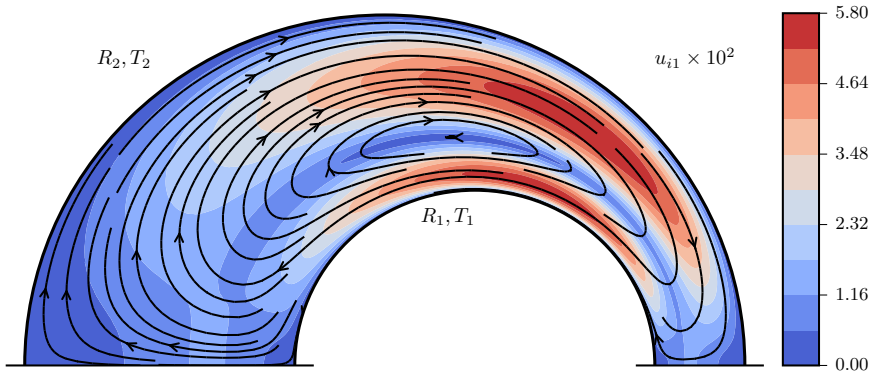


Рис. 7 — Поле скоростей  $u_{i1}$  между двумя некоаксиальными цилиндрами при  $T_1 = 1$  и  $T_2 = 5$ ; изолинии соответствуют модулю.

ющим тепловое скольжение, скачки скорости и температуры первого порядка. Сравниваются решения, полученные на различных скоростных сетках.

В третьей части рассматривается течение газа между равномерно нагретыми некоаксиальными цилиндрами и сферами в континуальном пределе. На рис. 7 изображено *нелинейное термострессовое течение*, возникающее между поверхностями с температурами  $T_1 = 1$  и  $T_2 = 1 + \tau$ . Оси цилиндров смещены вдоль оси  $x$  на расстояние  $d$ . На рис. 8 показана зависимость силы течения от разницы температур, а на рис. 9 распределение отдельных компонент действующей силы.

Сила взаимодействия между цилиндрами, оказывается, подобна электростатической (положение 6). В частности, для степенного молекулярного потен-

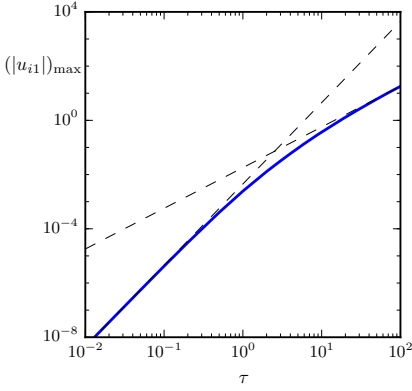


Рис. 8 — Максимальное значение  $u_{i1}$  при  $d = 0.5$ . Пропорционально  $\tau^3$  при  $\tau \rightarrow 0$  и  $\tau^{3/2}$  при  $\tau \rightarrow \infty$ .

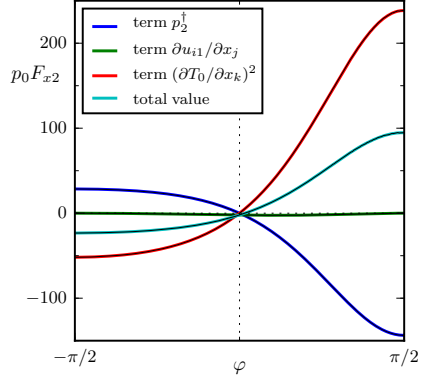
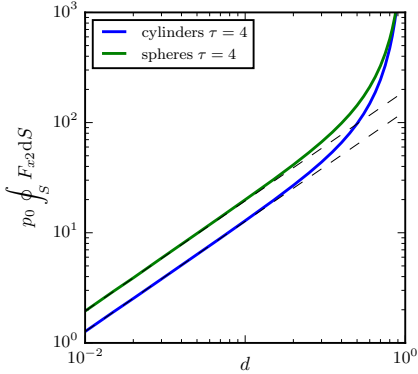
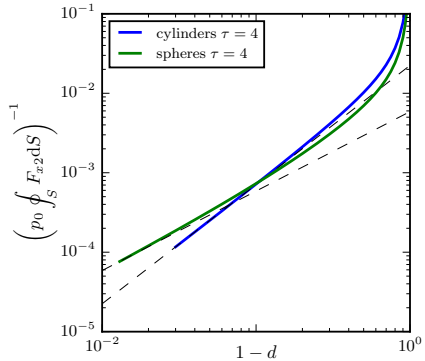


Рис. 9 — Профили компонент действующей силы  $F_{x2}$  вдоль поверхности внутреннего цилиндра в полярных координатах при  $d = 0.5$  и  $\tau = 4$ .  $\varphi = -\pi/2$  соответствует точке  $x = d - 1$ ,  $\varphi = \pi/2$  соответствует точке  $x = d + 1$ .



а) пунктирные линии соответствуют линейной зависимости



б) пунктирные линии соответствуют линейной зависимости для сфер и степени 3/2 для цилиндров

Рис. 10 — Сила притяжения между цилиндрами (сферами) в зависимости от расстояния между их осями  $d$ .

циала можно записать

$$p_0 \oint_S F_{x2} dS = \frac{\delta C}{\delta d} (T_2^s - T_1^s) (T_2^{1+s} - T_1^{1+s}),$$

где  $C$  — аналог электрической ёмкости. Для цилиндров и сфер,<sup>37</sup>

$$C_{\text{cyl}} \propto \frac{1}{\theta}, \quad C_{\text{sph}} \propto \sum_{n=1}^{\infty} \frac{R_1 R_2 \operatorname{sh} \theta}{R_2 \operatorname{sh} n\theta - R_1 \operatorname{sh}(n-1)\theta}, \quad \operatorname{ch} \theta = \frac{R_1^2 + R_2^2 - d^2}{2R_1 R_2}.$$

На рис. 10 показаны соответствующие силы, вычисленные из уравнений КГФ.

В четвёртой части рассматривается течение между коаксиальными эллиптическими цилиндрами, нагретыми до температур  $T_0 = 1$  и  $T_1 = 5$ . На рис. 11 можно сравнить решение уравнения Больцмана с асимптотическим. На рис. 11а отчётливо видны а) нелинейное термострессовое течение  $O(\text{Kn})$  во всём объёме, б) термострессовое скольжение  $O(\text{Kn}^2)$  возле граничных поверхностей. Однако в области, где градиент температуры сравним с  $\text{Kn}^{-1}$ , гидродинамическое описание неприменимо.

**Приложение** состоит из одной части, излагающей основные определения и специальные численные методы, необходимые для вычисления неизвестных ранее транспортных коэффициентов для газа твёрдых сфер. Наибольшая точность достигнута после сведения неоднородного линеаризованного уравнения Больцмана к одномерным интегральным уравнениям Фредгольма, которые решены классическим методом квадратур с применением асимптотического анализа и экстраполяции Ричардсона (положение 2):

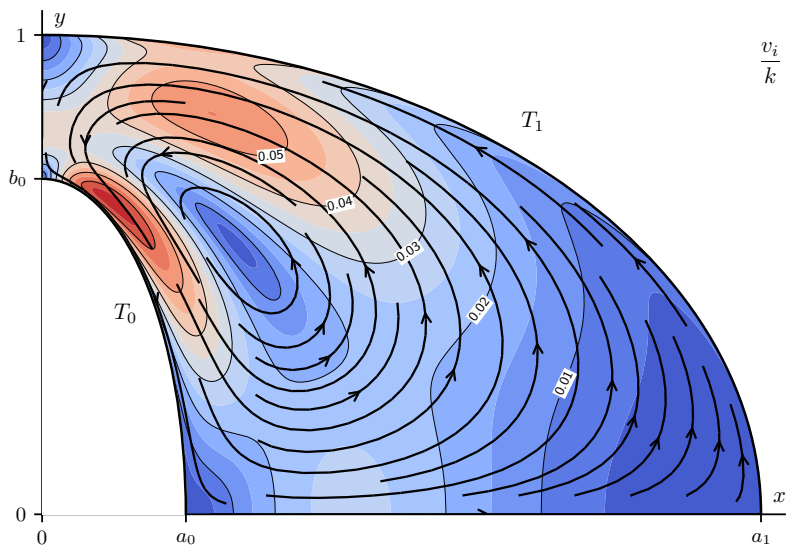
$$\gamma_8 = 1.495941968, \quad \gamma_9 = 1.636073459, \quad \gamma_{10} = 2.449780.$$

В **заключении** приведены основные выводы и рекомендации:

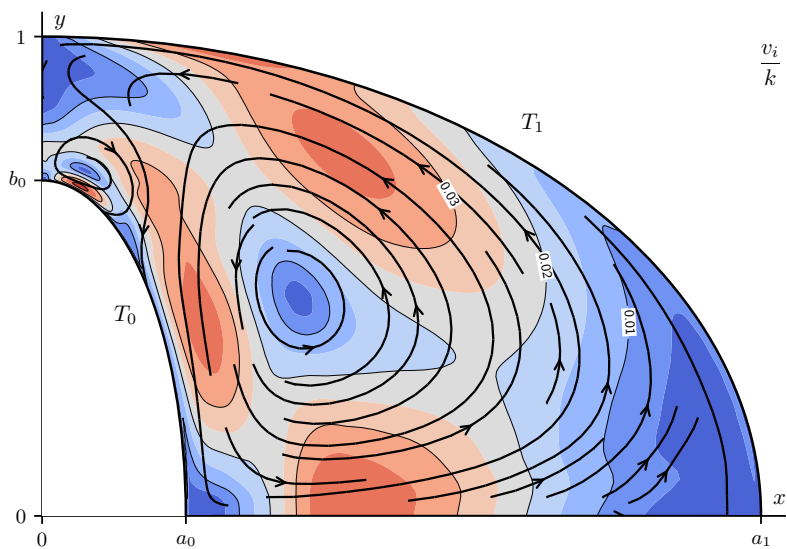
1. Рассмотрены классические задачи молекулярной газовой динамики, такие как течения между параллельными пластинами, некоаксиальными цилиндрами и сферами, эллиптическими цилиндрами. Полученные решения обладают высокой точностью, верифицированы и могут считаться эталонными. Их детальный анализ обнаружил ряд новых физических эффектов. Некоторые из них практически недоступны для ПСМ, что служит веским основанием к дальнейшему развитию численных методов решения уравнения Больцмана.

2. Обобщение КПИМДС для неравномерных сеток приводит к дополнительным вычислительным трудностям. В частности, усложняется алгоритм консервативного проецирования в интеграле столкновений, повышаются требования к мощности множества кубатурных точек, что в целом приводит к увеличению вычислительных затрат. Кроме того, на неравномерной сетке, в общем случае, снижается точность кубатур функций близких к максвелловским. Тем не менее в настоящем исследовании на численных примерах продемонстрировано,

<sup>37</sup>Смйт В. Электростатика и электродинамика. М. : ИЛ, 1954. 390 с.



а) уравнения КГФ с граничными условиями второго порядка



б) уравнение Больцмана

Рис. 11 — Стационарное поле скоростей при  $\text{Kn} = 0.02$ : изолинии соответствуют модулю, кривые со стрелками изображают направление.

как в рамках КПИМДС неравномерная прямоугольная сетка позволяет достичь высокой точности и эффективности а) для детального разрешения плоских кинетических слоёв, б) для медленных, но сильно неизотермических течений. Настоящая область применения метода значительно шире, включая гиперзвуковые течения и задачи при очень больших числах Кнудсена. Неравномерные сетки позволяют эффективно аппроксимировать как большой объём скоростного пространства в первом случае, так и высокие градиенты функции распределения во втором.

3. Важной задачей математического анализа КПИМДС остаётся вопрос сходимости и особенно влияния проекционного шаблона на её скорость. Неравномерные сетки неизбежно приводят к отрицательным проекционным весам, которые могут стать причиной аномальных численных флуктуаций решения. Эта проблема требует детального анализа.

4. Асимптотическая теория уравнения Больцмана для малых чисел Кнудсена играет важнейшую роль в моделировании разреженного газа. С её помощью можно получить не только значения транспортных коэффициентов из знания молекулярного потенциала, но также истинные граничные условия для гидродинамических уравнений и, что немаловажно, корректно описать существенно неравновесное поведение газа в слое Кнудсена. На численных примерах было показано, как использование граничных условий первого и второго порядка позволяет улучшить точность и качество асимптотического решения. В настоящем исследовании применение асимптотической теории оказалось ещё шире. Главным образом, она послужила надёжным инструментом верификации численного метода решения уравнения Больцмана. Кроме того, использование асимптотического решения в качестве начального приближения позволило значительно ускорить решение стационарных задач с малыми числами Кнудсена.

5. Гидродинамическое описание газа может оказаться некорректным на масштабах существенно больше длины свободного пробега, если градиенты макроскопических величин в некоторых областях сравнимы с обратным числом Кнудсена. Достоверно описать поведение газа в этих существенно неравновесных областях возможно только в рамках кинетического подхода. Подобная ситуация встречается во многих реальных задачах. В настоящем исследовании было продемонстрировано кардинальное изменение картины медленного неизотермического течения при больших градиентах температуры.

6. Медленные неизотермические течения представляют интерес в набирающей обороты индустрии МЭМС. В настоящем исследовании показано, что численное решение уравнения Больцмана в континуальном пределе сходится к решению уравнений КГФ с соответствующими граничными условиями, которые, таким образом, верно учитывают влияние сильных температурных неоднородностей на процессы переноса в слаборазреженном газе.

## Публикации автора по теме диссертации

*В изданиях из списка ВАК РФ*

1. *Рогозин О. А.* Медленные неізотермические течения: численный и асимптотический анализ уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2017. — Т. 57, № 7. — С. 1205—1229.
2. *Rogozin O.* Numerical analysis of the nonlinear plane Couette-flow problem of a rarefied gas for hard-sphere molecules // Eur. J. Mech. B/Fluids. — 2016. — Vol. 60. — P. 148–163.
3. *Rogozin O.* Computer simulation of slightly rarefied gas flows driven by significant temperature variations and their continuum limit // Theor. Comput. Fluid Dyn. — 2014. — Vol. 28, no. 6. — P. 573–587.
4. *Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Мартынов Д. В., Рогозин О. А., Рябченков В. В., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В.* Проблемно-моделирующая среда для расчётов и анализа газокинетических процессов // Нано- и микросистемная техника. — 2011. — № 2. — С. 12—17.
5. *Anikin Yu. A., Derbakova E. P., Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Martynov D. V., Rogozin O. A., Shuvalov P. V., Tcheremissine F. G.* Computing of gas flows in micro- and nanoscale channels on the base of the Boltzmann kinetic equation // Procedia Comput. Sci. — 2010. — Vol. 1, no. 1. — P. 735–744.



*Рогозин Олег Анатольевич*

Численный и асимптотический анализ некоторых классических задач молекулярной  
газодинамики

Автореф. дис. на соискание учёной степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать 13.02.18. Заказ № 13667  
Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.  
Типография НИУ ВШЭ  
125319, Москва, Кочновский проезд, 3

