

На правах рукописи



Быковских Дмитрий Александрович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА КНУДСЕНА
В ТРЕХМЕРНОЙ ОБЛАСТИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО**

Специальность: 1.2.2. Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Сургут – 2022

Работа выполнена на кафедре прикладной математики Бюджетного учреждения высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа – Югры «Сургутский государственный университет»

Научный руководитель:

Галкин Валерий Алексеевич, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры прикладной математики, Бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа – Югры «Сургутский государственный университет»

Официальные оппоненты:

Лаврентьев Михаил Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, заместитель директора по научной работе, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматизации и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск)

Пятков Сергей Григорьевич, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры цифровых технологий, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Югорский государственный университет» (г. Ханты-Мансийск)

Ведущая организация:

Тюменский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (г. Тюмень)

Защита состоится «21» июня 2022 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета 24.2.418.03 при ФГАОУ ВО «Тюменский государственный университет» по адресу: 625003, г. Тюмень, ул. Перекопская, 15а, ауд. 410.

Тел.: +7 (982) 182-63-61

E-mail: dmitriy.bykovskih@gmail.com

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-библиотечном центре ФГАОУ ВО «ТюмГУ» и на сайте:

<https://diss.utmn.ru/sovets/diss-sovet-212-274-14/zashchita/1108644/>

Автореферат разослан «__» _____ 2022 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета
24.2.418.03, к.т.н., доцент

А. А. Оленников

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Исследование и анализ параметров течения невзаимодействующих друг с другом частиц газа в трехмерной области с подвижными и неподвижными границами имеет важное прикладное значение в задачах, связанных с управлением высокотехнологичными процессами и созданием передовых разработок в современных отраслях промышленности.

Первоначально движение такого вида частиц, именуемых газом Кнудсена, было связано с исследованием околокосмического пространства и созданием специальных технических устройств с высоким вакуумом. С появлением и развитием атомной энергетики возник ряд новых задач, в которых требуется учитывать специальные локальные зоны, так называемые области фокусировки, в которых при сжатии нейтронного газа происходит неограниченный рост энергии в определенный момент или короткий промежуток времени. Например, при расчете надежности конструкций атомных реакторов необходимо учитывать кумулятивные эффекты, возникающие при движении тепловых нейтронов в тяжелой жидкости с изменяющимися с течением времени границами в трехмерной области.

Все большую популярность набирают исследования, связанные с фильтрацией газа в пористых средах. Как правило, для получения более точной информации о рассматриваемой пористой среде приходится проводить исследования, уменьшая размеры исследуемого объекта. Например, в нефтегазовой отрасли с целью повышения эффективности добычи из пластов трудноизвлекаемых запасов углеводородов исследуются свойства и структура кернов с характерным их размером всего несколько десятков миллиметров. Также уделяется внимание эффекту Клинкенберга, связанному с изменением коэффициента проницаемости при исследовании стационарного и нестационарного течения газа в микроканалах керна в случае, когда средняя длина свободного пробега частиц становится соизмерима со средним размером порового пространства. В энергетике и металлургии проводятся исследования переносов фононов с целью получения улучшенных термоэлектрических характеристик в совокупности с низкой теплопроводностью для наноматериалов, имеющих пористую структуру.

При решении газодинамических задач важным этапом является численное исследование математических моделей. Оптимальным выбором для численного исследования течения газа Кнудсена в области с подвижными и неподвижными границами является использование метода Монте-Карло, преимущество которого заключается в следующем. С одной стороны, рассчитывая траектории движения статистически большого числа частиц в изменяющейся во времени области, можно легко

вычислить макроскопические параметры течения газа. С другой стороны, поскольку бессеточный метод обладает высоким уровнем параллелизма, то построенные на его основе и реализованные в виде комплекса программ параллельные алгоритмы позволят эффективно задействовать вычислительные ресурсы современных высокопроизводительных вычислительных систем.

Отыскание класса точных решений в области газовой динамики является более сложной задачей по сравнению с численным исследованием. Поиск нового класса точных решений для течения газа Кнудсена в области с подвижными и неподвижными границами позволит расширить набор уже существующих решений (течение газа с границами, не изменяющими первоначального распределения; течение Куэтта; течение Пуазейля и др.), которые можно использовать для верификации комплекса программ.

Степень разработанности темы исследований. Обзор математических моделей и методов решения задач динамики разреженного газа, представленный в первой главе, показывает, что существует потребность в развитии бессеточных методов Монте-Карло, применяемых для моделирования течения газа Кнудсена. Моделирование нестационарного течения газа Кнудсена осложняется в случае, когда течение протекает в трехмерной изменяющейся во времени области. При моделировании течения газа методом Монте-Карло требуется статистически большое количество частиц, поэтому необходимо разработать эффективные алгоритмы расчета траекторий движения частиц газа, учитывающие взаимодействие с подвижными границами, и реализовать в виде комплекса программ для высокопроизводительных вычислительных систем. При этом существует потребность в разработке точных решений течения кнудсеновского газа с подвижными границами для верификации комплекса программ.

Целью диссертационной работы является разработка алгоритмов расчета движения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными и неподвижными границами методом Монте-Карло; создание комплекса проблемно-ориентированных программ, позволяющего визуализировать моделируемые процессы, для современных высокопроизводительных вычислительных систем и его верификация; проведение вычислительных экспериментов по исследованию задачи фильтрации газа в пористой среде.

Задачи работы

1. Разработать метод и алгоритмы расчета движения кнудсеновского газа в трехмерной изменяющейся во времени области.
2. Разработать тестовые задачи с подвижными границами для верификации комплекса проблемно-ориентированных программ.

3. Разработать, отладить и протестировать комплекс проблемно-ориентированных программ для численного решения задач кинетики идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве, позволяющий визуализировать динамику процессов.

4. Выполнить распараллеливание и оптимизацию программного кода для проведения расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах.

5. Провести численное исследование задачи фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде.

6. Осуществить анализ полученных результатов расчета.

Научная новизна

1. Впервые найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей.

2. На основе метода Монте-Карло разработаны вычислительный метод и алгоритмы расчета течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами. Эффективность метода и алгоритмов подтверждена численными экспериментами.

3. Создан комплекс программ для проведения вычислительных экспериментов по моделированию течения идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве методом Монте-Карло с применением технологий параллельных вычислений. Получены новые численные решения задачи фильтрации для идеального бесстолкновительного газа в пористой среде.

4. Выполнено сравнение численных расчетов работы комплекса проблемно-ориентированных программ с аналитическими решениями задач газовой динамики.

К теоретической значимости относится класс точных решений, найденный для модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерной области, который может быть использован для верификации комплекса программ.

Практическая значимость заключается в разработке эффективных алгоритмов расчета течения газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами, основанных на методе Монте-Карло. Созданный комплекс программ может быть использован для эффективного решения инженерно-технических задач, требующих моделирования процессов газовой динамики с использованием высокопроизводительных вычислительных систем. Результаты диссертационной работы имеют практическое значение для исследования проблем динамики разреженного газа, статистической физики, нефтегазовой отрасли, атомной и промышленной энергетики и оптики.

Методология и методы исследования включают методы математического и статистического моделирования (метод Монте-Карло), параллельного программирования для высокопроизводительных вычислительных систем, теории вероятностей и математической статистики. Для выполнения поставленной цели применялся подход, основанный на:

- 1) построении математической модели течения газа Кнудсена;
- 2) разработке метода моделирования течения идеального бесстолкновительного газа в трехмерной изменяющейся во времени области;
- 3) разработке алгоритмов решения задачи;
- 4) реализации алгоритмов в виде комплекса программ;
- 5) проведении вычислительных экспериментов с последующим анализом результатов.

Положения, выносимые на защиту

1. Найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия кнудсеновского газа в трехмерной области с подвижной границей.

2. Разработаны и реализованы вычислительный метод и алгоритмы, предназначенные для математического моделирования нестационарного течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами, в виде комплекса программ с применением технологий параллельных вычислений. Эффективность метода, алгоритмов и комплекса программ подтверждена численными экспериментами.

3. Разработанные вычислительный метод и алгоритмы реализованы в виде комплекса проблемно-ориентированных программ для математического моделирования течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами. Получены результаты численного исследования задачи фильтрации кнудсеновского газа в пористой среде, установлена линейная зависимость между скоростью течения и скоростью фильтрации для идеального бесстолкновительного газа.

4. Разработанный проблемно-ориентированный комплекс программ верифицирован путем сравнения численных расчетов с найденными точными решениями математической модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей.

Степень достоверности результатов. Достоверность полученных результатов работы обеспечивается использованием математической модели идеального бесстолкновительного газа, основанной на фундаментальных законах сохранения массы, импульса и энергии; моделированием методом Монте-Карло и проведением тестовых расчетов на задачах газовой динамики, показывающих степень близости численного решения к аналитическому в зависимости от количества частиц, участвующих в вычислительном эксперименте.

Апробация результатов. Основные результаты работы были представлены на: Всероссийских научно-практических конференциях

«Север России: стратегии и перспективы развития» (Сургут, 2015, 2016); Международных конференциях «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященных дню рождения великого русского математика академика П. Л. Чебышева (Сургут, 2016, 2019); Всероссийской конференции молодых ученых «Наука и инновации XXI века» (Сургут, 2016); Всероссийских конференциях «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики», посвященных памяти К. И. Бабенко (Абрау-Дюрсо, Новороссийск, 2016, 2018); Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2018); Международной научной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (Академгородок, Новосибирск, 2019); Международной научной конференции «Математические идеи П.Л. Чебышева и их приложения к современным проблемам естествознания», приуроченной к 200-летию со дня рождения великого русского математика, академика П. Л. Чебышева (Обнинск, 2021).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 20 научных работах [1–20], из них: 5 статей изданы в журналах, рекомендованных ВАК для публикации научных результатов [1–5]; 3 публикации в сборниках научных статей [6–8]; 10 публикаций представлены в сборниках трудов и тезисах докладов конференций [9–18]; 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [19; 20].

В процессе работы автор принимал участие в следующих проектах, связанных с темой диссертации: грант РФФИ №18-01-00343 А; грант РФФИ №18-47-860004 р_а.

Личный вклад автора заключается в разработке алгоритмов и их реализации в виде комплекса проблемно-ориентированных программ, включая отладку и тестирование, и проведении вычислительных экспериментов. Автор самостоятельно отыскал класс точных решений задачи об адиабатическом сжатии газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей. В совместных исследованиях автор принимал участие во всех этапах работы: в постановках задач, в выборе и формулировке математической модели, в создании численного метода и анализе полученных результатов. В совместных работах научному руководителю д.ф.-м.н. В. А. Галкину принадлежит первоначальная постановка задач, определение направлений исследований и интерпретация полученных результатов, выбор тестовых задач для верификации комплекса программ.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и двух приложений. Объем диссертации составляет 116 страниц, включая 28 рисунков и 17 таблиц. Список литературы содержит 143 наименования.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении сформулированы цели и задачи; изложена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы; описаны методы исследований; обосновано соответствие диссертации паспорту научной специальности 1.2.2; отражен личный вклад автора.

В первой главе представлен обзор исследований задач течения газа с наличием границ и задач из смежных областей. **В параграфе 1.2** выделены некоторые точные решения задач газа Кнудсена с подвижными и неподвижными границами. **В параграфе 1.3** приведен обзор методов решения задач динамики разреженного газа. Представлено краткое описание методов Монте-Карло, применяемых для моделирования течения разреженного газа, включая их назначение, преимущества и недостатки. **Параграф 1.4** посвящен проблемам и способам адаптации алгоритмов и программ, связанных с эффективным использованием современных высокопроизводительных вычислительных систем.

Вторая глава посвящена описанию разработанного вычислительного метода Монте-Карло, предназначенного для моделирования течения газа Кнудсена в трехмерной изменяющейся во времени области. **В параграфе 2.1** рассматривается модель газа Кнудсена с подвижными границами. Движение частиц газа Кнудсена описывается уравнением Лиувилля:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = 0,$$

где f – функция распределения; t – время; \mathbf{v} – скорость молекул.

В пункте 2.1.1 определена одночастичная функция распределения, показана ее связь с макроскопическими величинами. **В пункте 2.1.2** рассматриваются граничные условия. Граница состоит из конечного объединения C^1 -гладких поверхностей $\partial G_j(t, \mathbf{x})$, где $j = \overline{1, M}$. В работе рассмотрено зеркальное упругое отражение частиц газа от абсолютно гладкой поверхности (рисунок 1). Масса границы условно много больше массы частицы. В этом случае модель взаимодействия газа с движущейся поверхностью имеет следующий вид:

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v} - 2\mathbf{n}(\mathbf{v} - \mathbf{u}, \mathbf{n})),$$

где \mathbf{x} – координаты местоположения молекул; \mathbf{n} – единичный вектор нормали к поверхности в точке $\mathbf{x} \in \partial G(t, \mathbf{x})$ в момент времени t ; \mathbf{u} – скорость подвижной границы. **В пункте 2.1.3** описано обезразмеривание физических величин.

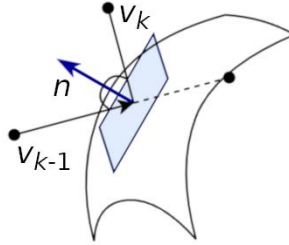


Рисунок 1. Схема взаимодействия частицы с границей:

\mathbf{v}_{k-1} – скорость частицы до столкновения; \mathbf{v}_k – скорость частицы после k -го столкновения с границей; \mathbf{n} – единичная нормаль к поверхности границы в точке столкновения частицы с границей

В параграфе 2.2 описан разработанный бессеточный метод, основанный на методе Монте-Карло и предназначенный для моделирования течения идеального бесстолкновительного газа в трехмерной области с подвижными границами. Разработанный метод условно делится на расчет траектории движения частиц газа и расчет статистических оценок макроскопических параметров. **В пункте 2.2.1** представлены формулы расчета траектории движения частиц в пространстве с учетом многократного взаимодействия с подвижными границами. Пусть частица на временном шаге Δt взаимодействует с границами K раз, тогда шаг Δt разбивается на $(K + 1)$ полуинтервалов. Пусть для определенности в моменты времени $t_1 < t_2 < \dots < t_k < \dots < t_K$ частица взаимодействует с одной из границ один раз. Тогда $(t_{K+1} - t_0) = \Delta t$, а расчет траектории движения частицы вычисляется с помощью следующих формул:

$$\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} + \sum_{k=0}^K \mathbf{v}_k^{(i+1)} (t_{k+1} - t_k),$$

$$\mathbf{v}_k^{(i+1)} = \begin{cases} \mathbf{v}^{(i)}, & k = 0 \\ \mathbf{v}_{k-1}^{(i+1)} - 2\mathbf{n}_{j(k)} (\mathbf{v}_{k-1}^{(i+1)} - \mathbf{u}_{j(k)}, \mathbf{n}_{j(k)}), & k = \overline{1, K}, \end{cases}$$

где \mathbf{v}_k – скорость частицы после k -го взаимодействия с границей;

$\sum_{k=0}^K (t_{k+1} - t_k) = \sum_{k=0}^K \Delta t_k = \Delta t$ – временной шаг; K – число столкновений частицы с границами; $\mathbf{u}_{j(k)}$ – скорость j -й границы в момент времени t_k на $(i + 1)$ -ом шаге; $\mathbf{n}_{j(k)}$ – нормаль к поверхности j -й границы в точке столкновения в момент времени t_k на $(i + 1)$ -м шаге.

Граница области состоит из набора гладких поверхностей (границ). Каждая поверхность определяется уравнением 2-го порядка в трехмерном пространстве:

$$S(x_1, x_2, x_3) = Ax_1^2 + Ex_2^2 + Hx_3^2 + Bx_1x_2 + Fx_2x_3 + Cx_1x_3 + Dx_1 + Gx_2 + Ix_3 + J = 0,$$

где A, B, \dots, J – коэффициенты уравнения.

Каждая граница может двигаться в пространстве. Движение границы на всем моделируемом промежутке времени можно описать непрерывной кусочно-линейной функцией при условии, что на временном промежутке $[0, \Delta t]$ скорость границы постоянная. При переходе в систему координат, где выбранная граница становится неподвижной на этом временном промежутке, и подстановке уравнения траектории движения частицы в уравнение поверхности получается квадратное уравнение относительно t , из которого определяется наименьший возможный момент времени, связанный с точкой пересечения траектории движения частицы и поверхности границы.

В пункте 2.2.2 вводятся статистические оценки макроскопических величин, позволяющие оценить значения макроскопических величин, поскольку при моделировании течения газа количество частиц конечно. Значения этих величин вычисляются с помощью локальных параметров частиц, принадлежащих некоторой выделенной части моделируемой области, называемой элементарной областью, в определенный момент времени, по следующим формулам:

$$\hat{\rho}(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{NV} \sum_{\substack{j|j \in \{0, N\}, \\ \mathbf{x}^j \in D(\mathbf{x}, \mathbf{h})}} m^j,$$

$$\hat{\mathbf{v}}(t, \mathbf{x}) \cong \begin{cases} 1/(\hat{\rho}NV) \sum_{\substack{j|j \in \{0, N\}, \\ \mathbf{x}^j \in D(\mathbf{x}, \mathbf{h})}} \mathbf{v}^j m^j, & \hat{\rho} > 0 \\ 0, & \hat{\rho} = 0 \end{cases},$$

$$\hat{e}(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{2(N-1)} \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{\substack{j|j \in \{0, N\}, \\ \mathbf{x}^j \in D(\mathbf{x}, \mathbf{h})}} (v_i^j)^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{\substack{j|j \in \{0, N\}, \\ \mathbf{x}^j \in D(\mathbf{x}, \mathbf{h})}} v_i^j \right)^2 \right],$$

$$\hat{T}(t, \mathbf{x}) = \frac{2}{3R} \hat{e},$$

$$\hat{p}(t, \mathbf{x}) = \frac{2}{3} \hat{\rho} \hat{e},$$

где V – объем элементарной области; $D(\mathbf{x}, \mathbf{h})$ – элементарная область размером \mathbf{h} ; m^j – масса j -й частицы; v_i^j – i -я компонента скорости j -й частицы; R – газовая постоянная.

В конце главы (**пункт 2.2.3**) рассмотрены способы, позволяющие оценить погрешности полученных результатов, такие как правило трех сигм, статистическая флуктуация и сравнение численного решения с аналитическим.

Третья глава посвящена разработанному проблемно-ориентированному комплексу программ. В **параграфе 3.1** описана реализация модели идеального бесстолкновительного газа в виде комплекса программ. В **пункте 3.1.1** приведена схема работы комплекса программ (рисунок 2), включая подробное описание каждого этапа.

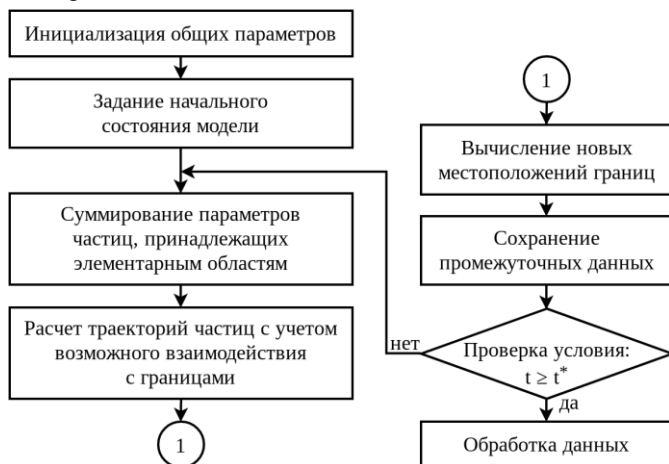


Рисунок 2. Общая схема работы комплекса программ

Такая реализация комплекса программ позволяет решать следующие задачи: запуск множества параллельных программ для расчета траекторий движения частиц; повышение точности расчетов за счет добавления новых частиц в эксперимент; распределение нагрузки между вычислительными узлами.

В **пункте 3.1.2** описаны оптимизации программного кода, позволяющие эффективно задействовать вычислительные ресурсы центрального процессора, такие как многоуровневая декомпозиция данных; векторизация вычислений, связанная прежде всего с расчетом траекторий движения частиц с учетом возможного взаимодействия с подвижными

границами (рисунок 3); перенос «медленных» операций (деление, извлечение корня) внутрь редко выполняющихся ветвей оператора ветвления, быстрое извлечение обратного корня, используемое при нормализации векторов, и другие.



Рисунок 3. Схема расчета траектории движения частиц с учетом их возможного взаимодействия с подвижными границами

В параграфе 3.2 рассматривается тестовая задача, связанная с моделированием движения встречных пучков газа, для которой известно аналитическое решение. **В пункте 3.2.1** представлено описание математической модели, аналитическое решение и постановка вычислительной задачи. **В пункте 3.2.2** представлены результаты тестирования комплекса программ. Выполнена оценка погрешностей статистических оценок макроскопических величин при различном числе частиц N в вычислительном эксперименте и количестве испытаний n . На рисунках 4 и 5 представлено сравнение результатов численного моделирования с аналитическим решением. Из анализа графиков видно, что с увеличением числа частиц приближенное решение F_{num} стремится к аналитическому F_{an} . Это справедливо как при увеличении числа частиц в эксперименте N , так и при увеличении числа испытаний n с последующим усреднением величин \bar{F} .

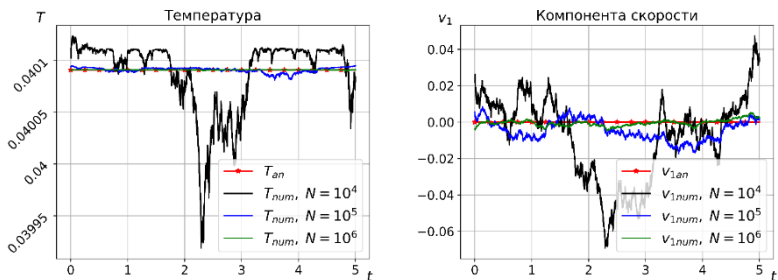


Рисунок 4. Графики изменения аналитического решения F_{an} и статистических оценок макроскопических параметров F_{num} при различном числе частиц N в эксперименте в зависимости от времени t

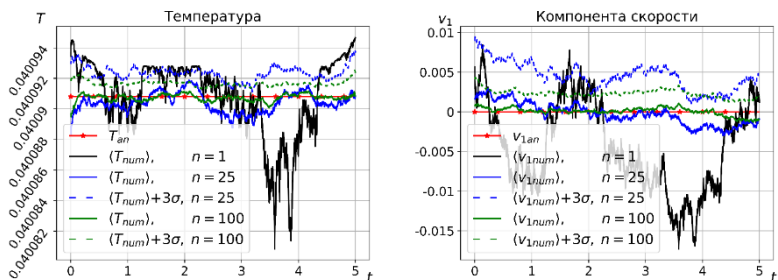


Рисунок 5. Графики аналитического решения F_{an} , статистических оценок макроскопических параметров \bar{F} и верхней границы доверительного интервала $\bar{F} + 3\sigma$ (правило трех сигм) при $N = 10^5$ и различном числе испытаний n в зависимости от времени t

В таблице 1 представлена оценка максимальной абсолютной погрешности Δ_F статистических оценок макроскопических параметров. В таблице 2 представлена оценка максимальной величины $\sigma_F = \hat{s}_F / \sqrt{n}$, где \hat{s}_F – среднеквадратичное отклонение. Анализ данных в таблицах показывает, что для уменьшения погрешности статистических оценок макроскопических величин на порядок необходимо увеличить число частиц в эксперименте или независимых испытаний на два порядка.

При моделировании тестовой задачи о движении встречных пучков газа достигнута производительность, равная 49% от пиковой на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 (240 GFlops DP для 10 ядер).

Таблица 1

Оценка максимальной абсолютной погрешности Δ_F
статистических оценок макроскопических величин
при различном числе частиц N и испытаний n

N	n	Δ_{v_i}	Δ_ρ	Δ_T	Δ_p
10^5	10^2	$1.30 \cdot 10^{-3}$	$3.53 \cdot 10^{-4}$	$1.33 \cdot 10^{-6}$	$1.18 \cdot 10^{-4}$
10^7	1	$1.31 \cdot 10^{-3}$	$3.53 \cdot 10^{-4}$	$3.69 \cdot 10^{-8}$	$1.18 \cdot 10^{-4}$
10^5	10^4	$1.85 \cdot 10^{-4}$	$3.20 \cdot 10^{-5}$	$7.52 \cdot 10^{-8}$	$1.06 \cdot 10^{-5}$
10^7	10^2	$1.85 \cdot 10^{-4}$	$3.20 \cdot 10^{-5}$	$1.28 \cdot 10^{-8}$	$1.07 \cdot 10^{-5}$
10^9	1	$1.85 \cdot 10^{-4}$	$3.20 \cdot 10^{-5}$	$1.17 \cdot 10^{-9}$	$1.07 \cdot 10^{-5}$

Таблица 2

Оценка максимальной величины σ_F
при различном числе частиц N и испытаний n

N	n	σ_{v_i}	σ_ρ	σ_T	σ_p
10^5	10^2	$1.15 \cdot 10^{-3}$	$1.45 \cdot 10^{-4}$	$7.94 \cdot 10^{-7}$	$4.83 \cdot 10^{-5}$
10^5	10^4	$1.01 \cdot 10^{-4}$	$1.28 \cdot 10^{-5}$	$5.71 \cdot 10^{-8}$	$4.27 \cdot 10^{-6}$
10^7	10^2	$1.02 \cdot 10^{-4}$	$1.49 \cdot 10^{-5}$	$5.53 \cdot 10^{-9}$	$4.98 \cdot 10^{-6}$

Четвертая глава посвящена математическому и численному исследованию адиабатического сжатия газа Кнудсена в одномерной и трехмерной областях. В параграфе 4.1 рассматривается задача об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в одномерном пространстве. В пункте 4.1.1 представлена постановка вычислительной задачи. При $t = 0$ на интервале (a_0, b_0) равномерно распределены частицы с плотностью $\rho_0 = const$. Скорость каждой частицы $|v_0| = const$, а направление определяется случайным образом с равномерным распределением. Правая граница неподвижна $b = b_0$, а левая граница движется вправо со скоростью $u \in (0, v_0]$. Местоположение левой границы определяется как $a(t) = a_0 + ut$.

В пункте 4.1.2 представлено построение аналитического решения. Идея нахождения класса точных решений заключается в том, что, зная функцию распределения для каждой группы частиц и их скорости, можно вычислить макроскопические величины, такие как плотность, скорость, температура и давление. Этот класс решений существует

и единственен в силу теоремы Лиувилля о сохранении объема в фазовом пространстве.

При $t = 0$ первая группа частиц имеет скорость $v^{(1)} = v_0$ и функцию распределения $f^{(1)}$, а вторая – скорость $v^{(2)} = -v_0$ и функцию распределения $f^{(2)}$:

$$f^{(1)}(0, x) = f^{(2)}(0, x) = 0.5\rho_0 I_{(a(0), b)}(x) / l(0),$$

где $I_{(a(0), b)}(x) = \begin{cases} 1, & x \in (a(0), b) \\ 0, & x \notin (a(0), b) \end{cases}$ – ступенчатая функция.

Таким образом, частицы объединены в группы с одинаковой скоростью. Скорость и функция распределения для s -й группы частиц имеют вид:

$$v^{(s)} = \begin{cases} -v^{(s-1)}, & s - \text{четный} \\ -v^{(s-1)} + 2u, & s - \text{нечетный} \end{cases}$$

Плотность распределения для s -й группы молекул с течением времени определяется

$$f^{(s)}(t, x) = 0.5\rho_0 Q^{(s)}(t, x),$$

где $Q^{(s)}(t, x) = I_{(a^{(s)}(t), b^{(s)}(t))}(t, x) / l(0)$;

$$I_{(a^{(s)}(t), b^{(s)}(t))}(t, x) = \begin{cases} 1, & x \in (a^{(s)}(t), b^{(s)}(t)) \\ 0, & x \notin (a^{(s)}(t), b^{(s)}(t)) \end{cases};$$

$$a^{(s)}(t) = s(\text{mod } 2) \left[I_{[\tau^{(s-1)}, \tau^{(s)}]}(t) \cdot a(t) + I_{[\tau^{(s-1)}, \tau^{(s)}]}(t) \cdot (a(\tau^{(s-1)}) + (t - \tau^{(s-1)})v^{(s)}) \right] + \\ + (s+1)(\text{mod } 2) \left[I_{[t^{(s-1)}, t^{(s)}]}(t) \cdot (b + (t - t^{(s-1)})v^{(s)}) + I_{[t^{(s-1)}, t^{(s)}]}(t) \cdot a(t) \right];$$

$$b^{(s)}(t) = s(\text{mod } 2) \left[I_{[t^{(s-1)}, t^{(s)}]}(t) \cdot (a(t^{(s-1)}) + (t - t^{(s-1)})v^{(s)}) + I_{[t^{(s-1)}, t^{(s)}]}(t) \cdot b \right] + \\ + (s+1)(\text{mod } 2) \left[I_{[t^{(s-1)}, \tau^{(s-1)}]}(t) \cdot b + I_{[t^{(s-1)}, \tau^{(s)}]}(t) \cdot (b + (t - \tau^{(s-1)})v^{(s)}) \right];$$

$t^{(s)}$ и $\tau^{(s)}$ – моменты времени возникновения первой и исчезновения последних частиц в s -й группе соответственно.

В пункте 4.1.3 представлены результаты моделирования с использованием разработанного комплекса программ. Проведены серии вычислительных экспериментов при различном числе частиц N и скоростях границы u . Из графиков видно, что с увеличением числа частиц в эксперименте приближенное решение стремится к точному (рисунок 6).

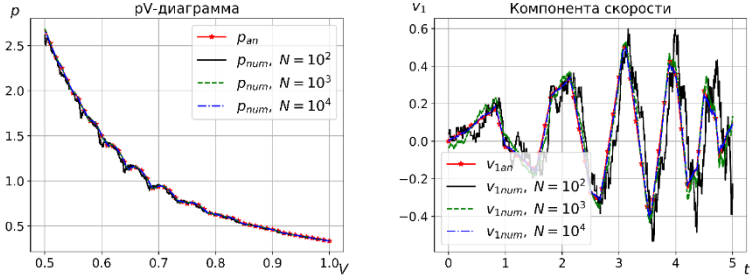


Рисунок 6. Графики аналитического решения F_{an} и статистических оценок макроскопических параметров F_{num} при различном числе частиц N в эксперименте в зависимости от объема V или от времени t при $u = 0.1$

В параграфе 4.2 аналогичным образом исследуется модель адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерном пространстве. **В пункте 4.2.1** рассматривается постановка вычислительной задачи. При $t = 0$ в кубе размером $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3]$ равномерно распределены частицы с полностью $\rho_0 = const$. Вектор скорости каждой частицы определяется случайным образом с равномерным распределением на единичной сфере. Куб ограничен плоскостями (гранями), одна из которых движется внутрь, уменьшая объем области, со скоростью $\mathbf{u} = (u_1, 0, 0)$, где $u_1 \in (0, 1]$.

В пункте 4.2.2 описано построение класса точных решений. Функция распределения в начальный и произвольный момент времени имеет вид:

$$f(0, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = f_x(0, \mathbf{x}) \cdot f_v(0, \mathbf{v}) = \rho_0 \prod_{i=1}^3 \left[\frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i) \right] \cdot \int_{-1}^1 \frac{1}{2\pi} dv_j \int_{-\sqrt{1-v_j^2}}^{\sqrt{1-v_j^2}} \frac{1}{2} \frac{dv_k}{\sqrt{1-v_j^2 - v_k^2}},$$

$$\begin{aligned} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) f_{11}(t, x_1, v_1) f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1) f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2) = \\ &= \rho_0 \prod_{i=2}^3 \left[\frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i) \right] \sum_{s=1}^n \left[Q^{(s)}(t, x_1) I_{(c_1^{(s)}, d_1^{(s)})}(v_1) \right] f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1) f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2), \end{aligned}$$

где $f_x(\mathbf{x}, t)$ – плотность распределения частиц по пространственным координатам; $f_v(\mathbf{v}, t)$ – плотность распределения частиц по скоростям;

$f_2(x_2)$, $f_3(x_3)$ и $f_{11}(t, x_1, v_1)$ – частные плотности распределения; $f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1)$ и $f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2)$ – условные плотности распределения;

$Q^{(s)}(t, x_1)$ и $I_{(c_1^{(s)}, d_1^{(s)})}(v_1)$ – функции, которые рассчитываются аналогично формулам пункта 4.1.2.

С помощью условной плотности распределения и предположений, основанных на начальном распределении частиц в фазовом пространстве, законах сохранения и зеркального отражения, решение трехмерной задачи сводится к решению одномерной. Получены формулы расчета макроскопических величин:

$$\begin{aligned} \rho(t, \mathbf{x}) &= \int_{R_3} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \rho_0 \prod_{i=2}^3 \left[\frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i) \right] \int_{R_1} \sum_{s=1}^n \left[Q^{(s)}(t, x_1) I_{(c_1^{(s)}, d_1^{(s)})}(v_1) \right] dv_1, \\ \bar{v}_1(t, \mathbf{x}) &= \int_{R_3} v_1 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \\ &= \rho_0 \prod_{i=2}^3 \left[\frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i) \right] \int_{R_1} v_1 \sum_{s=1}^n \left[Q^{(s)}(t, x_1) I_{(c_1^{(s)}, d_1^{(s)})}(v_1) \right] dv_1 / \rho(t, \mathbf{x}), \\ \bar{v}_2(t, \mathbf{x}) &= \int_{R_3} v_2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} v_2 \frac{1}{2} I_{(-1,1)}(v_2) dv_2, \\ \bar{v}_3(t, \mathbf{x}) &= \int_{R_3} v_3 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} v_3 \frac{1}{2} I_{(-1,1)}(v_3) dv_3, \\ e(t, \mathbf{x}) &= \frac{1}{2\rho(t, \mathbf{x})} \int_{R_3} (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}})^2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\rho_0}{\rho(t, \mathbf{x})} \prod_{i=2}^3 \left[\frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i) \right] \int_{R_1} (v_1 - \bar{v}_1(t, \mathbf{x}))^2 \sum_{s=1}^n \left[Q^{(s)}(t, x_1) I_{(c_1^{(s)}, d_1^{(s)})}(v_1) \right] dv_1 + \right. \\ &\quad \left. + \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} (v_2 - \bar{v}_2(t, \mathbf{x}))^2 \frac{1}{2} I_{(-1,1)}(v_2) dv_2 + \right. \\ &\quad \left. + \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} (v_3 - \bar{v}_3(t, \mathbf{x}))^2 \frac{1}{2} I_{(-1,1)}(v_3) dv_3 \right], \\ \text{где } \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) &= \begin{cases} 1, & \rho(t, \mathbf{x}) > 0 \\ 0, & \rho(t, \mathbf{x}) = 0 \end{cases}. \end{aligned}$$

В пункте 4.2.3 представлены результаты вычислительных экспериментов при различном числе частиц N и скоростях границы u . Выполнено качественное и количественное сравнение точного решения с численными результатами. Рисунок 7 иллюстрирует графики изменений компоненты скорости вдоль оси x с течением времени и адиабаты в зависимости от объема при $u_1 = 0.1$.

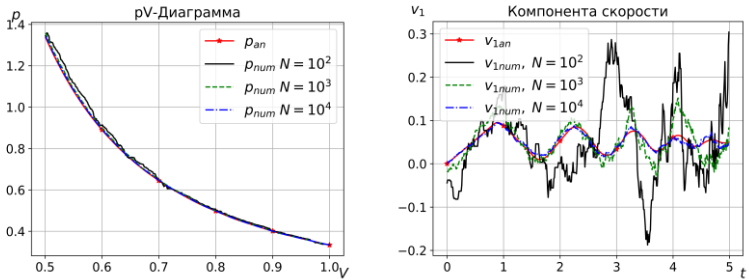


Рисунок 7. Графики аналитического решения F_{an} и статистических оценок макроскопических параметров F_{num} при различном числе частиц N в эксперименте в зависимости от объема V или от времени t при $u_1 = 0.1$

В таблице 3 представлена оценка максимальных абсолютной и относительной погрешностей статистических оценок макроскопических параметров. Анализ результатов демонстрирует, что для уменьшения погрешности статистических оценок макроскопических величин на порядок необходимо увеличить число частиц в эксперименте на два порядка.

Таблица 3

Оценка максимальных абсолютной Δ_F и относительной погрешностей δ_F при $u_1 = 0.1$ и различном числе частиц N

N	Δ_{v_1}	Δ_T	Δ_p	δ_{v_1}	δ_T	δ_p
10^4	$1.85 \cdot 10^{-2}$	$4.05 \cdot 10^{-4}$	$6.70 \cdot 10^{-3}$	$1.18 \cdot 10^2$	$5.07 \cdot 10^{-1}$	$5.07 \cdot 10^{-1}$
10^6	$2.07 \cdot 10^{-3}$	$2.26 \cdot 10^{-5}$	$3.65 \cdot 10^{-4}$	$2.67 \cdot 10^1$	$2.93 \cdot 10^{-2}$	$2.93 \cdot 10^{-2}$
10^8	$2.79 \cdot 10^{-4}$	$3.86 \cdot 10^{-6}$	$6.29 \cdot 10^{-5}$	$7.90 \cdot 10^{-1}$	$4.92 \cdot 10^{-3}$	$4.92 \cdot 10^{-3}$

При моделировании задачи об адиабатическом сжатии газа с подвижной границей достигнута производительность, равная 39% от пиковой на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2.

В пятой главе представлено численное исследование задачи фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде с помощью разработанного комплекса программ.

В параграфе 5.1 рассмотрен коэффициент фильтрации газа в пористой среде, входящий в закон Дарси для идеального газа в пористой среде, имеющий вид:

$$u = -\frac{k}{\mu} \frac{p_1^2 - p_0^2}{2p_1 l},$$

где u – скорость фильтрации газа; k – проницаемость среды; μ – динамическая вязкость среды; p_0 – давление газа на входе; p_1 – давление газа на выходе; l – длина фильтрующей части пористой среды.

В параграфе 5.2 представлена постановка вычислительной задачи, описаны 3 конфигурации пористой среды и используемые в вычислительных экспериментах расчетные формулы, связанные с коэффициентом фильтрации. Параграф 5.3 посвящен численным экспериментам по исследованию зависимости скорости течения и скорости фильтрации газа Кнудсена для трех конфигураций пористой среды. На рисунке 8 представлена визуализация течения газа для 3-й конфигурации пористой среды. Желтым цветом выделены частицы газа, красным – пористая среда, зеленым – границы элементарных областей. Течение газа направлено слева направо.

$t = 0006.0$

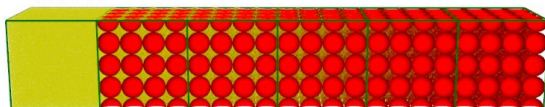


Рисунок 8. Течение газа для 3-й конфигураций пористой среды при $t = 6.0, N = 10^8$

В рамках вычислительного эксперимента решалась обратная задача о нахождении коэффициента k/μ , связывающего скорость фильтрации со скоростью течения газа, в зависимости от конфигурации пористой среды после выхода течения на квазистационарный режим. На рисунке 9 представлены графики зависимости компоненты гидродинамической скорости v_j (скорости течения) и скорости фильтрации $u_{j,i}$ от времени t при различных номерах j и i элементарных областей.

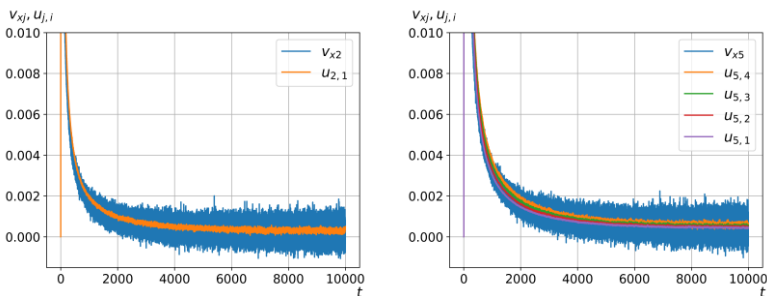


Рисунок 9. Графики зависимости компоненты скорости течения v_{xj} и скорости фильтрации $u_{j,i}$ от времени t при $N = 10^8$ для 3-й конфигурации пористой среды

Выполнено качественное и количественное сравнение полученных результатов, включая исследование параметров, связанных с коэффициентом фильтрации, оценку погрешностей статистических оценок макроскопических величин. Построены таблицы зависимостей коэффициента проницаемости от числа частиц в эксперименте и номера конфигурации пористой среды (размеров ячеек пористой среды). Для идеального газа, у которого отсутствует внутреннее трение, коэффициент фильтрации зависит от структуры пористой среды. Выполнен расчет оценки производительности созданного комплекса программ при различном шаге по времени для трех конфигураций пористой среды.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в ходе диссертационного исследования. В приложениях описывается структура размещения файлов и каталогов разработанного комплекса программ, представлены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Основными результатами диссертационной работы являются:

1. Найден класс точных решений для задачи об адиабатическом сжатии кнудсеновского газа в трехмерной области с подвижной границей, исследованный методом Монте-Карло.

2. Разработаны вычислительный метод и алгоритмы расчета течения идеального бесстолкновительного газа в области с подвижными границами.

3. Создан комплекс проблемно-ориентированных программ для численного решения задачи о течении идеального бесстолкновительного газа в трехмерной изменяющейся во времени области, позволяющий визуализировать динамику процесса.

4. Выполнена оптимизация программного кода с учетом декомпозиции данных и векторизации вычислений для проведения расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах.

5. Выполнена верификация разработанного комплекса программ на задачах газовой динамики с аналитическими решениями. Достигнута производительность, равная 49% от пиковой, при численном решении задачи о движении встречных пучков газа и 39% — при численном решении задачи об адиабатическом сжатии газа в трехмерной области с подвижной границей методом Монте-Карло.

6. При численном исследовании задачи фильтрации была построена зависимость коэффициента проницаемости от размеров ячеек пористой среды. Установлена линейная зависимость между скоростью течения и скоростью фильтрации для идеального бесстолкновительного газа.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА

1. Егоров А. А., Гавриленко Т. В., Быковских Д. А. Оценка параметров фрактальных пористых сред // Вестник КРАУНЦ. Физ.-мат. Науки. 2020. Т. 30, № 1. С. 87 – 96. **Перечень ВАК.**

2. Быковских Д. А., Галкин В. А. Моделирование и визуализация течения идеального газа в пористой среде методом Монте-Карло // Научная визуализация. 2019. Т. 11. № 3. С. 27 – 42. (перевод Bykovskih D. A., Galkin V. A. An ideal gas flow modeling and visualization in porous medium by Monte Carlo method // Scientific Visualization. 2019. V. 11. N. 3. P. 27 – 42.) **Scopus, перечень ВАК.**

3. Быковских Д. А., Галкин В. А. О вычислительном тесте для модели адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2019. № 1 (33). С. 15 – 23. **Перечень ВАК.**

4. Быковских Д. А., Галкин В. А. О вычислительном тесте для одной модели бесстолкновительного идеального газа // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2017. № 3 (27). С. 119 – 127. **Перечень ВАК.**

5. Галкин В. А., Гавриленко Т. В., Быковских Д. А. Управление динамикой невзаимодействующих частиц в плоской области // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2015. № 3 (19). С. 148 – 159. **Перечень ВАК.**

6. Галкин В. А., Быковских Д. А., Гавриленко Т. В., Стулов П. А. Фильтрационная модель движения идеального газа в пористой среде // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2016. № 4 (24). С. 50 – 57.

7. Галкин В. А., Быковских Д. А., Гавриленко Т. В., Дубовик А. О. Моделирование движения частиц газа в пористой среде при периодическом воздействии на границу среды // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2016. № 4(24). С. 58 – 65.

8. Быковских Д. А., Галкин В. А. Об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в одномерном пространстве // Успехи кибернетики. Электр. Журн. 2020. Т. 1. № 4. С. 6 – 12.

9. Быковских Д. А., Галкин В. А., Гавриленко Т. В. Моделирование движения невзаимодействующих частиц в пространстве // Северный регион: наука, образование, культура. Сургут : СурГУ, 2015. Т. 2. № 2 (32). С. 48 – 55.

10. Галкин В. А., Гавриленко Т. В., Быковских Д. А. О моделировании динамики невзаимодействующих частиц с переменной во времени геометрией // Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе: тез. докл. Междунар. конф. Сургут : ИЦ СурГУ, 2016. С. 131 – 132.

11. Быковских Д. А., Галкин В. А., Гавриленко Т. В. О моделировании идеального газа с переменной во времени геометрией // Север России: стратегии и перспективы развития: материалы II Всерос. науч.-практ. конф. Сургут : СурГУ, 2016. Т. 2. С. 19 – 24.

12. Галкин В. А., Гавриленко Т. В., Быковских Д. А. Об управлении поведением идеального газа с переменной во времени геометрией // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики: тез. докл. XXI Всерос. конф. М. : ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. С. 74 – 75.
13. Быковских Д. А. Модель фильтрации идеального газа в пористой среде // Наука и инновации XXI века: материалы III Всерос. конф. молодых ученых. Сургут : СурГУ, 2016. Т. 1. С. 22 – 26.
14. Быковских Д. А., Галкин В. А. Фильтрационная модель движения идеального газа в пористой среде // Супервычисления и математическое моделирование: тез. докл. XVII Международной конференции. Саратов : ИПК ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2018. С. 36 – 37.
15. Быковских Д. А., Галкин В. А. Фильтрационная модель движения газа в пористой среде // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики: тез. докл. XXI Всерос. конф. М. : ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018. С. 24 – 25.
16. Быковских Д. А., Галкин В. А. Моделирование течения идеального бесстолкновительного газа в пористой среде методом Монте-Карло // Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе: труды Междунар. конф. Самара : ООО «Порто-принт», 2019. С. 185 – 188.
17. Быковских Д. А., Галкин В. А. О вычислительном тесте для модели адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики: тез. докл. междунар. конф. Новосибирск : ИПЦ НГУ. 2019. С. 43.
18. Быковских Д. А., Галкин В. А. О моделировании течения газа Кнудсена в трехмерной области методом Монте-Карло // Математические идеи П. Л. Чебышева и их приложения к современным проблемам естествознания: тез. докл. междунар. конф. Калуга : Калужский печатный двор. 2021. С. 205 – 206.
19. Быковских Д. А., Галкин В. А., Гавриленко Т. В. и др. Midges: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016617287; правообладатель БУ ВО ХМАО-Югры «Сургутский государственный университет». – Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 29.06.2016 г.
20. Быковских Д. А., Галкин В. А., Гавриленко Т. В. и др. Midges D3: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016617145; правообладатель БУ ВО ХМАО-Югры «Сургутский государственный университет». – Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 28.06.2016 г.

Подписано в печать 13.04.2022 г. Формат 60×84/16
Усл. печ. л. 1,4. Тираж 120. Заказ № 143

Оригинал-макет подготовлен и отпечатан
в Издательском центре СурГУ
Тел. (3462) 76-30-65, 76-30-66, 76-30-67

БУ ВО «Сургутский государственный университет»
628400, Россия, Ханты-Мансийский автономный округ,
г. Сургут, пр. Ленина, 1
Тел. (3462) 76-29-00, факс (3462) 76-29-29