

На правах рукописи



Анисимова Ирина Викторовна

**ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА В МОДЕЛЯХ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ**

05.13.18 - Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Тюмень – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования "Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ" (КНИТУ-КАИ)

- Научный консультант:** заслуженный деятель науки РФ,
доктор технических наук, профессор
Гортышов Юрий Федорович
- Официальные оппоненты:** **Липанов Алексей Матвеевич**
доктор технических наук, академик РАН,
Федеральное государственное учреждение «Федеральный
исследовательский центр Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша Российской академии наук», главный
научный сотрудник
Задорин Александр Иванович
доктор физико-математических наук, профессор,
Омский филиал Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института математики им. С.Л. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук,
заведующий лабораторией математического моделирования в
механике
Кирпичников Александр Петрович
доктор физико-математических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования «Казанский национальный
исследовательский технологический университет» (КНИТУ),
заведующий кафедрой интеллектуальных систем и
управления информационными ресурсами.
- Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Казанский научный центр Российской академии наук (КазНЦ
РАН)

Защита состоится 28 июня 2017 г. в 16:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.274.14 в ФГАОУ ВО «Тюменский государственный университет» по адресу: 625003, г. Тюмень, ул. Перекопская, 15А, ауд.410.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Тюменский государственный университет» и на сайте <https://diss.utmn.ru/sovets/diss-sovets-212-274-14/zashchita/305639/>.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Е.А. Оленников

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Проблема корректного описания процессов переноса при математическом моделировании задач механики жидкости и газа является чрезвычайно актуальной. Сегодня она привлекает внимание большого круга ученых в связи с перспективами использования в приоритетных направлениях развития науки, технологий и техники в Российской Федерации.

Моделирование газодинамических процессов, происходящих в природе и технике, на основе макроуравнений тепломассопереноса занимает одно из значимых мест в технологиях создания энергосберегающих систем транспортировки, распределения и использования энергии, энергоэффективного производства, создания ракетно-космической и транспортной техники нового поколения. При этом возникают проблемы: одна из них – создание физико-математически обоснованных положений определения коэффициентов переноса, а другая – создание математически обоснованных вычислительных технологий решения возникающих при этом задач. Переносные характеристики сред обусловлены, в основном, внутренней микроструктурой. В настоящее время для определения коэффициентов переноса многокомпонентных сред не существует надёжных данных, полученных опытным путём или методами численного моделирования. Существующие методы суперпозиции дают приблизительные результаты и не всегда адекватны для многокомпонентных смесей (например, для газовых смесей, используемых в химической промышленности и ракетостроении). Поэтому данная тематика актуальна и востребована.

В связи с этим для решения проблемы определения коэффициентов переноса в макроуравнениях тепломассопереноса соискатель исходит согласно первому положению молекулярно-кинетической теории.

Представленная диссертационная работа направлена на разработку математической модели многокомпонентных смесей и создание вычислительных и компьютерных технологий определения транспортных характеристик в ней.

Степень разработанности темы исследования. Одной из первых публикаций, обозначившей проблему изучения и влияния микропроцессов на переносные характеристики сред, была работа Дж. К. Максвелла, вклад которого в кинетическую теорию газов общепризнан. Он заложил математические основы кинетической теории газов и впервые предложил конкретный вид функции распределения для описания равновесного состояния газа, называемой максвелловское распределение по скоростям. Им впервые была предложена схема вывода из уравнения Больцмана системы уравнений газовой динамики типа Навье-Стокса для случая максвелловских молекул. В дальнейшем, схема вывода усовершенствовалась благодаря работам С. Чепмена и Д. Энскога. В середине и конце XX века развитие данного направления значительно расширилось благодаря работам В. В. Струминского, В.Е. Алемасова, А.Ф. Дрегаллина, Г.А. Тирского, И.В. Соколовой, В.М. Кузнецова, С.А. Лосева, В.Я. Рудяка.

Значительный вклад в теорию определения переносных характеристик в моделях многокомпонентных сред внесли работы А. Эйнштейна, С. К. Годунова и

У. М. Султангазина, С.В. Валландера, Е. А. Нагнибеды и М. А. Рыдалевской, С. З. Аджаяева и В. В. Веденяпина, Ф.Г. Черемисина, Л.Р. Фокина и А.Н. Калашникова, В.Н. Монахова, Р.Р. Нигматуллина.

Большая часть задач «математической теории процессов переноса в газах» направления «гидроаэромеханика» связана с численным решением интегрально-дифференциальных уравнений механики жидкости и газа. Среди работ, относящихся к данному направлению, особое место занимают труды Б. Л. Рождественского и Н. Н. Яненко, В. М. Ковени, Ю. И. Шокина, А. А. Самарского, Г.И. Марчука, О. М. Белоцерковского, С.Г. Черного, А.М. Ильина, А.М. Липанова, В.М. Фомина, А.И. Задорина и др.

При определении переносных характеристик в моделях газовых средах, в соответствии с кинетической теории газов, в столкновительном члене уравнения Больцмана используются кратные несобственные интегралы с осциллирующей подынтегральной функцией. Здесь надо отметить, во-первых, необходимость анализа равномерной сходимости подобных интегралов, а во-вторых – создание и математическое обоснование квадратурных и кубатурных формул для определения их значений. К этой вычислительной проблематике можно отнести труды Н. С. Бахвалова, Н.С. Никольского, С. Л. Соболева, Н. Н. Калиткина, Дж. Филона.

По состоянию на первое десятилетие XXI века исследования в области определения коэффициентов переноса в макроуравнениях, описывающих процессы в многокомпонентных газовых смесях, включают в себя следующие основные направления:

1. Фундаментальные проблемы определения транспортных характеристик в математических моделях для описания процессов в многокомпонентных газовых смесях согласно первому положению молекулярно кинетической теории.

2. Математическое обоснование равномерной сходимости несобственных интегралов, используемых в столкновительном члене уравнения Больцмана для описания процессов взаимодействия молекул в газах.

3. Создание и математическое обоснование квадратурных и кубатурных формул для определения значений несобственных интегралов с осциллирующей подынтегральной функцией, используемых в столкновительном члене уравнения Больцмана.

4. Создание комплекса программ для определения переносных характеристик в моделях многокомпонентных сред на базе разработанных алгоритмов.

Цели и задачи исследования. Целью диссертационного исследования является развитие аппарата математического моделирования задач гидроаэромеханики на основе макроуравнений тепломассопереноса, в которых коэффициенты переноса (вязкость, диффузия и т.д.) определяются согласно первому положению кинетической теории газов. Для достижения данной цели в настоящем диссертационном исследовании были сформулированы следующие задачи:

а) создание корректной математической модели потенциала, описывающего процесс взаимодействия молекул в многокомпонентных средах;

б) математическое обоснование равномерной ограниченности несобственных интегралов, используемых в кинетической теории газов для определения переносных характеристик сред;

в) создание эффективных квадратурных и кубатурных формул, основанных на теории ортогональных многочленов и сплайн-функций, для определения значений несобственных интегралов в столкновительном члене уравнения Больцмана, используемых для определения значений коэффициентов переноса;

г) создание комплекса программ по вычислению величин для определения переносных характеристик в многокомпонентных газовых средах;

д) применение разработанных методов и комплекса программ для определения коэффициентов переноса в многокомпонентных средах и сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными.

Объекты и методы исследования. Объектом диссертационного исследования являются микропроцессы, протекающие в газовых средах. На основе анализа этих процессов методами кинетической теории газов и прикладной математики в главе II предложено математическое выражение для потенциала, описывающего процесс взаимодействия молекул в многокомпонентных газовых средах. Для определения параметров в предложенном соискателем двухпараметрическом потенциале используется и обосновывается метод наименьших квадратов. Точность определения значений переносных характеристик сред зависит от точности определения значений функции угла рассеяния молекул $\chi(n, AI, b^*, g^*)$. В её выражение входит несобственный интеграл, в котором нижний предел интегрирования определяется значением наименьшего положительного корня нелинейного алгебраического уравнения. В связи с этим в главе III предлагаются и обосновываются асимптотические и численные алгоритмы определения требуемого корня. Глава IV посвящена анализу равномерной сходимости несобственного интеграла и равномерной непрерывности функции $\chi(n, AI, b^*, g^*)$, асимптотическим и вычислительным технологиям определения её значений. Для определения «критической» поверхности (линии), в точках которой нарушается свойство равномерной сходимости одного из несобственных интегралов в столкновительном члене уравнения Больцмана, предложена нелинейная система уравнений и численный алгоритм определения координат точек поверхности. Поскольку при определении переносных характеристик в многокомпонентных средах в столкновительном члене уравнения Больцмана используются несобственные интегралы с осциллирующими подынтегральными функциями, то в этой главе приведен анализ эффективности различных квадратур для определения значений подобных интегралов. В главе V для вычисления значений несобственных интегралов с осциллирующими подынтегральными функциями предлагается квадратурная формула Гаусса-Кристоффеля, основанная на ортогональных многочленах. Проведено качественное математическое

обоснование данной квадратуры, предложены вычислительные алгоритмы определения весов и узлов разбиения отрезка интегрирования из условия минимизации погрешности квадратуры. Глава VI посвящена качественному анализу вычислительных технологий для определения значения двукратного несобственного $\Omega_{ij}^{(l,r)}$ - интеграла, описывающего эффективное сечение рассеяния в кинетической теории газов. Надо отметить, что точность определения его значения с учетом осциллирующего характера подынтегральной функцией влияет на точность определения переносных характеристик исследуемых сред. В связи с этим, для определения значений $\Omega_{ij}^{(l,r)}$ -интеграла соискателем предлагаются и математически обосновываются кубатурные формулы, основанные на теории ортогональных многочленов и сплайн-функций. Следуя методу Чепмена-Энскога, переносные характеристики в многокомпонентных газах определяются из решений систем линейных алгебраических уравнений в которых коэффициенты зависят от значений $\Omega_{ij}^{(l,r)}$ -интегралов. Вследствие этого, в данной главе проведен анализ алгоритмов решения СЛАУ, возникающих при определении коэффициентов переноса в многокомпонентных средах. Предложен комплекс программ для однопроцессорных ЭВМ, реализующий рассматриваемый метод решения СЛАУ с учетом анализа обусловленности матриц СЛАУ. Проведен анализ использования данного комплекса программ на многопроцессорных кластерах с параллельными вычислительными системами. Глава VII посвящена сравнительному анализу результатов, полученных с помощью вычислительных технологий и комплекса программ определения коэффициентов переноса, предлагаемых в данной работе, и экспериментальных данных, как для моделей простых газов, так и для многокомпонентных газовых смесей. Разработанный в настоящей работе комплекс программ был реализован с использованием лицензированного математического пакета Mathematica, подходящим для программирования сложных математических исследований, как в символьной, так и численной форме. Все программы ЭВМ зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (Роспатент).

Положения, выносимые на защиту

На защиту выносятся следующие результаты, соответствующие пяти пунктам паспорта специальности 05.13.18-математическое моделирование, численные методы и комплексы программ по физико-математическим наукам.

Пункт 1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений.

1. Новый математический метод описания взаимодействия молекул в многокомпонентных газовых средах. Его важной особенностью является определение коэффициентов переноса в макроуравнениях тепломассопереноса, исходя из первого положения кинетической теории газов с учетом микропроцессов на молекулярном уровне.

Пункт 2. Развитие качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей.

2. Развитие приближенных и аналитических методов для определения значений потенциала взаимодействия молекул и функции угла рассеяния взаимодействующих молекул.

3. Качественный анализ равномерной непрерывности ключевой функции из кинетической теории - функции угла рассеяния молекул. Анализ позволяет корректно определять её численные значения.

Пункт 3. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.

4. Методы построения и качественного обоснования вычислительных технологий определения значений однократных и кратных несобственных интегралов с осциллирующей подынтегральной функцией, использующихся для определения переносных характеристик при описании процессов в многокомпонентных газовых средах.

5. Вычислительные технологии определения значения нижнего предела в несобственном интеграле, входящем в выражение для функции угла рассеяния взаимодействующих молекул.

Пункт 4. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

6. Комплекс программ, ориентированный для решения задач в области определения коэффициентов переноса в моделях многокомпонентных смесей, зарегистрированный в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Роспатент). «Определение минимального положительного корня нелинейного уравнения из кинетической теории газа, применяющегося при вычислении коэффициентов переноса в реагирующих газовых потоках», «Вычисление значений функции угла рассеивания молекул в газах при их взаимодействии», «Вычисление значений приведенных интегралов столкновений молекул в многокомпонентной газовой среде».

Пункт 5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

7. Результаты численных исследований с применением разработанных вычислительных технологий и комплекса программ для определения коэффициентов переноса, как для моделей простых газов, так и для многокомпонентных газовых смесей.

Таким образом, в соответствии с формулой специальности 05.13.18 в диссертации представлены оригинальные результаты одновременно из трех областей: математического моделирования, численных методов и комплексов программ.

Научная новизна результатов проведенных исследований по трем областям специальности 05.13.18, заключается в следующих положениях:

Математическое моделирование:

1. На основе описания механизма столкновения молекул, базирующегося на кинетической теории газов, предложено физико-математически обоснованное выражение для потенциала взаимодействия молекул в моделях многокомпонентных газовых средах, учитывающее упругие и геометрические характеристики взаимодействующих молекул.

Численные методы:

2. Получены и математически обоснованы асимптотические решения и вычислительные технологии определения значения нижнего предела в несобственном интеграле, входящим в выражение для функции угла рассеяния. Это позволит увеличить точность определения коэффициентов переноса в моделях газовых сред.

3. Разработаны и математически обоснованы асимптотические методы и вычислительные технологии определения значений функции угла рассеяния взаимодействующих молекул. Проведен численный анализ эффективности различных квадратурных формул определения значения несобственного интеграла, входящего в выражение для функции угла рассеяния молекул.

4. Проведено математическое обоснование равномерной сходимости несобственных интегралов, входящих в столкновительный член уравнения Больцмана, и равномерной непрерывности подынтегральных функций в них.

5. Предложена квадратурная формула и математически обоснован численный алгоритм определения значения несобственного интеграла с осциллирующей подынтегральной функцией, используемого в кинетической теории газов.

6. Разработаны и качественно обоснованы вычислительные технологии определения значения двукратного несобственного интеграла с осциллирующей подынтегральной функцией.

Комплексы программ:

7. Разработанный в рамках настоящего исследования комплекс программ характеризуется тем, что он представляет собой взаимосвязанный набор модулей, объединённых общими исходными данными и общим интерфейсом взаимодействия. Представляет собой законченную кибернетическую систему, имеющую на входе параметры молекул, входящих в смесь, а на выходе переносные свойства смеси в целом. Отдельные составляющие модули комплекса зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Роспатент).

Теоретическая значимость работы. Разработанные в диссертационном исследовании:

а) построение математических моделей механики сплошной среды для описания физико-химических процессов в многокомпонентных газовых средах, в которых переносные характеристики учитывают микроструктуру среды, в частности, упругие и геометрические характеристики молекул;

б) анализ равномерной сходимости несобственных интегралов, входящих в столкновительный член уравнения Больцмана, и равномерной непрерывности подинтегральной функции в них;

в) математическое обоснование квадратурных и кубатурных формул для определения значений несобственных интегралов, входящих в интеграл столкновения в уравнении Больцмана;

г) алгоритмизация и реализация предложенных вычислительных технологий определения переносных характеристик в многокомпонентных средах на однопроцессорных ЭВМ и на многопроцессорных кластерах с параллельными вычислительными системами;

д) вычислительные технологии определения значений некоторых характеристик кинетической теории газов

вносят существенный вклад в развитие математического моделирования задач гидроаэромеханики на основе макроуравнений в которых переносные характеристики определяются исходя из первого положения кинетической теории газов.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в возможности применения её результатов (алгоритмов, их программной реализации, результатов расчетов) для развития критических технологий Российской Федерации, поскольку целый ряд практических задач требуют знаний транспортных характеристик в многокомпонентных системах. Здесь можно упомянуть численное моделирование физико-химических процессов на основе макроуравнений тепломассопереноса, которые имеют место в технологии создания энергосберегающих систем транспортировки, распределения и использования энергии, технологии энергоэффективного производства, технологии создания ракетно-космической и транспортной техники нового поколения. Полученные результаты могут также применяться при обучении студентов по направлениям «Прикладная математика», «Прикладная информатика», «Теплоэнергетика и теплотехника», «Проектирование авиационных и ракетных двигателей», «Авиастроение», «Материаловедение и технологии материалов» и др.

Достоверность результатов, приведённых в настоящей диссертационной работе, достигается за счет построения корректных математических моделей, в которых коэффициенты переноса определяются согласно первому положению кинетической теории, сравнением с известными теоретическими результатами, тестированием разработанных численных алгоритмов и комплекса программ на модельных задачах, решения которых ранее были опубликованы другими авторами, сопоставлением результатов с экспериментальными данными. Представленные в настоящем диссертационном исследовании результаты обсуждались на научных, научно-технических семинарах и конференциях, а также получили положительные отзывы рецензентов при публикации в ведущих российских журналах и научных фондах.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались и обсуждались на 31 международной и всероссийской конференциях и симпозиумах: VIII

Четаевская международная конференция «Аналитическая механика, устойчивость и управление движением», Казань, 2002; XVII Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция «Электромеханические и внутрикамерные процессы в энергетических установках, струйная акустика и диагностика, приборы и методы контроля природной среды, веществ, материалов и изделий», Казань, 2005; Международная научно-техническая конференция, посвященная 1000-летию Казани, Казань, 2005; Вторая международная научно-практическая конференция «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности», Санкт-Петербург, 2006; Международная научно-практическая конференция «Авиакосмические технологии и оборудование», Казань, 2006; Национальная конференция по теплоэнергетике НКТЭ, Исследовательский центр проблем энергетики КазНЦ РАН, РФФИ, Казань, 2006; Международная молодёжная научная конференция «Туполевские чтения», Казань, 2007, 2008, 2009, 2010, 2011; XVIII сессия Международной школы по моделям механики сплошной среды, Саратов, 2007; 2-я Всероссийская конференция ученых, молодых специалистов и студентов «Информационные технологии в авиационной и космической технике-2009», Москва, 2009; 8-я международная конференция «Авиация и космонавтика - 2009», посвященная 80-летию МАИ, Москва, 2009; VII школа-семинар молодых ученых и специалистов академика РАН В.Е. Алемасова «Проблемы тепломассообмена и гидродинамики в энергомашиностроении», Казань, 2010; девятая Всероссийская конференция «Сеточные методы для краевых задач и приложения», Казань, 2012; Международная научно-техническая конференция «Проблемы и перспективы развития авиации, наземного транспорта и энергетики «АНТЭ-2013», Казань, 2013; Симпозиум по физико-техническим проблемам создания двигателей и энергоэффективных установок, посвященный 90-летию со дня рождения академика РАН В.Е. Алемасова, Казань, 2013; IX Международный симпозиум, посвященный 90-летию со дня рождения академика В.П. Макеева, Челябинск, 2014; V международная научно-практическая конференция «21 century: fundamental science and technology V», North Charleston, USA, 2014; XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Казань, 2015; международная научно-практическая конференция «Science in the modern information society X», North Charleston, USA, 2016.

Публикации по теме диссертации. По материалам работы опубликованы 68 научных работ, в том числе 16 статей в журналах, рекомендованных ВАК для опубликования основных результатов докторской диссертации [1-16]), пять свидетельств о государственной регистрации программы ЭВМ [17-21], зарегистрированных в Федеральной службе по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (Роспатент), две монографии [22-23] и 56 материалов докладов в сборниках научных, научно-технических и научно-методических конференций и семинаров [24-68].

Диссертация выполнена на кафедре теоретической и прикладной механики и математики (ранее высшей математики) Казанского национального

исследовательского технического университета им. А. Н. Туполева (КНИТУ-КАИ) в период 2000 по 2017 г.

Личный вклад автора. Все результаты, представленные в диссертационной работе, были получены соискателем лично. Обсуждение и публикация научных результатов проводилась вместе с соавторами и научным консультантом, но основное содержание настоящего исследования и положения, выносимые на защиту, отражают личный вклад автора в выполненную работу.

Связь с научными проектами. Результаты, полученные в ходе выполнения диссертации, вошли в материалы научно – исследовательских работ:

- проект МК-8150.2006.8 «Компьютерное моделирование инженерных задач на базе уравнений тепломассопереноса в газотурбинных двигателях (ГТД) и энергетических установках» Федеральной целевой программы Президента Российской Федерации для государственной поддержке молодых российских ученых 2006-2007 г.;

- проект № 2.1.1/984 «Компьютерное вычисление коэффициентов переноса в задачах механики сплошной среды» аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011 годы)”;

- госбюджетная НИР № 1.19.10 «Создание теории нелокальных уравнений тепломассопереноса и вычислительных технологий решения задач наукоемкого авиа- и машиностроения»;

- проект № 14.В37.21.0386 «Компьютерные технологии для определения транспортных характеристик в многофазных средах» федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы;

- проект № 01201365737 «Компьютерные технологии определения коэффициентов переноса в средах газоперекачивающих агрегатов» РФФИ 2013-2014 годы.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, семи глав, заключения, списка цитируемой литературы на 323 наименования, списка основных обозначений и одного приложения. Полный объем диссертации составляет 279 страниц, включая 39 рисунков и 15 таблиц.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении в краткой форме изложено обоснование актуальности темы диссертационной работы, на основании которой сформулированы проблемы, цель, основные задачи и положения, выносимые на защиту. Показана научная новизна и практическая значимость работы. Описана структура диссертации.

В первой главе приведён анализ взаимосвязи кинетического уравнения Больцмана с макроскопическими уравнениями классической гидроаэродинамики.

В п.1 приведена история развития кинетической теории газов и изложены основные этапы решения проблемы определения коэффициентов переноса согласно первому положению кинетической теории газов.

В п.2 первой главы показана взаимосвязь кинетического уравнения Больцмана с макроскопическими уравнениями классической гидроаэродинамики

через коэффициенты переноса. Зависимость между тензором напряжения $\mathbf{P}^{(1)}$ и введённым тензором \mathbf{B} имеет вид:

$$\mathbf{P}^{(1)} = -\frac{1}{5}kT \int \mathbf{B} : I(\mathbf{B}) d^3c, \quad (1)$$

где

$$I(\mathbf{B}) = \frac{1}{n^2} \iiint f \cdot f (\mathbf{B} + \mathbf{B}_1 - \mathbf{B}' - \mathbf{B}'_1) g b d b d \varepsilon d c \quad (2)$$

- интегральный оператор.

Используя понятие интегральных скобок, равенство (1) записывается в виде:

$$\mathbf{P}^{(1)} = -\frac{1}{5}kT [\mathbf{B}, \mathbf{B}] = -2\eta \mathbf{S}. \quad (3)$$

В (3) \mathbf{S} - бездивергентная часть тензора ∇v , т.е.

$$\mathbf{S}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right) - \frac{1}{3} \nabla v \delta_{\alpha\beta}, \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3), \quad (4)$$

а η - коэффициент вязкости, определенный соотношением:

$$\eta = \frac{1}{10}kT [\mathbf{B}, \mathbf{B}]. \quad (5)$$

Аналогично для вектора теплового потока получается:

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\frac{1}{3}kT [\mathbf{A}, \mathbf{A}] \nabla \ln T. \quad (6)$$

Вводя обозначение коэффициента теплопроводности λ , имеем:

$$\lambda = \frac{1}{3}kT [\mathbf{A}, \mathbf{A}]. \quad (7)$$

В первом приближении метода Чепмена – Энскога для вектора теплового потока получается соотношение, которое посредством интегральной скобки выражается как:

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\lambda \nabla T, \quad (8)$$

Подстановкой соотношения (5) и (7) в общее уравнение сохранения для инвариантов столкновения молекул газов, устанавливается связь между кинетическими и макроскопическими уравнениями гидродинамики через транспортные характеристики среды:

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\nabla \cdot v, \quad (9)$$

$$\rho \frac{dv}{dt} = \rho \mathbf{F} - \nabla p + 2\eta \nabla \cdot \mathbf{S}, \quad (10)$$

$$\rho \frac{dT}{dt} = -\frac{2m}{3k} (-\nabla \cdot \lambda \nabla T + p \nabla \cdot v - 2\eta \mathbf{S} : \nabla v), \quad (11)$$

где тензор \mathbf{S} определяется выражением (4).

Для замыкания системы уравнений (9)-(11) необходимо определить \mathbf{B} и \mathbf{A} из интегральных уравнений (5) и (7) и получить выражения для кинетических коэффициентов η и λ .

В п.3 первой главы представлен обзор интегральных скобок и их свойства.

В п.4 этой главы проводится преобразование интегральных скобок, позволяющее в интегро-дифференциальной части уравнения Больцмана перейти от шестикратных интегралов к линейной комбинации Ω -интегралов столкновения молекул:

$$\Omega_{ij}^{(l,r)} = \left(\frac{kT}{2\pi m_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2r+3} Q_{ij}^{(l)} d\gamma \quad (12)$$

и средним сечениям рассеяния (транспортные сечения)

$$Q_{ij}^{(l)} \equiv Q_{ij}^{(l)}(g^*) = 2\pi \int_0^\infty \left\{ 1 - \cos^l \chi_{ij}(b^*, g^*) \right\} b^* db^*, \quad (13)$$

где

$$\gamma = \left(\frac{m_{ij}}{2kT} \right)^{1/2} g^* \quad (14)$$

В п.5 первой главы рассматриваются приближенные методы решения интегральных уравнений (5) и (7), которые позволяют определять значения коэффициентов переноса вязкости η и теплопроводности λ . Наиболее распространённым приближенным методом их решения является способ, использующий ортогональные полиномы Сонина $S_\nu^{(n)}(x)$, которые представляют собой коэффициенты разложения функции

$$(1-s)^{-\nu-1} \exp\left(-\frac{x \cdot s}{1-s}\right) = \sum_{n=0}^\infty S_\nu^{(n)}(x) s^n \quad (15)$$

по степеням s .

Определение величин \mathbf{B} и \mathbf{A} в (5) и (7) основано на принципе максимума, который позволяет найти класс пробных тензоров \mathbf{b} и пробных векторов \mathbf{a} , дающих максимальное значение интегральных скобок $[\mathbf{b}, \mathbf{b}]$ и $[\mathbf{a}, \mathbf{a}]$. Это является наилучшим приближением для \mathbf{B} и \mathbf{A} , используемым для определения коэффициентов переноса η из (5) и λ из (7).

В п.6 первой главы приведены приближенные формулы вычисления коэффициентов переноса. Так, при вычислении коэффициента теплопроводности простого газа для векторной величины \mathbf{A} в (7) пробная функция \mathbf{a} представляется в виде комбинации по полиномам Сонина:

$$\mathbf{a} \equiv a(C) \mathbf{C} = - \left(\frac{m}{2kT} \right)^{1/2} \sum_{p=0}^n a_p^{(n)} S_{3/2}^{(p)}(g^2) \mathbf{g}. \quad (16)$$

В выражении (16) $a_p^{(n)}$ - неизвестные коэффициенты разложения, которые определяются из решения следующей СЛАУ:

$$\sum_{q=1}^n \Lambda^{pq} a_q^{(n)} = \frac{4}{5k} \delta_{p1}, \quad (p = 1, \dots, n; n = 1). \quad (17)$$

Значения коэффициентов Λ^{pq} ($p, q = 1, 2, \dots, n$) определяются в (17) интегральными скобками, которые связаны с полиномом Сонина следующим образом:

$$\Lambda^{pq} = \frac{8m}{75k^2 T} \left[S_{3/2}^{(p)} \left(g_{3/2}^{(p)} \left(g^2 \right) g, S_{3/2}^{(q)} \left(g^2 \right) g \right) \right]. \quad (18)$$

Для случая первого приближения Чепмена–Энскога выражение для коэффициента теплопроводности в простом газе через Ω -интегралы имеет вид:

$$[\lambda]_1 = \frac{25c_v k \cdot T}{16\Omega^{(2,2)}}. \quad (19)$$

Используя приведённый Ω^* - интеграл, получаем:

$$[\lambda]_1 = \frac{25c_v k \cdot T}{32\pi\sigma^2 \Omega^{*(2,2)}}. \quad (20)$$

Также в п.6 этой главы представлены приближенные формулы вычисления коэффициента вязкости для модели простого газа. Для наилучшего приближения к решению интегрального уравнения (5) для тензора \mathbf{B} в качестве пробной функции \mathbf{b} снова рассматривается разложение по полиномам Сонина

$$\mathbf{b} = \sum_{p=0}^{n-1} b_p^{(n)} S_{5/2}^{(p)} \left(g^2 \right) \left(g\mathbf{g} - \frac{1}{3} g^2 \mathbf{E} \right), \quad (21)$$

где $b_p^{(n)}$ - неизвестные коэффициенты разложения. Используя, как и в алгоритме вычисления коэффициента теплопроводности, метод множителей Лагранжа, убеждаемся, что коэффициенты $b_p^{(n)}$ можно определить из решения следующей СЛАУ

$$\sum_{q=0}^{n-1} H^{pq} b_q^{(n)} = \frac{2}{kT} \delta_{p0}, \quad p = 0, \dots, n-1. \quad (22)$$

Значения коэффициентов H^{pq} в (22) определяются через полиномы Сонина

$$H^{pq} = \frac{2}{5kT} \left[S_{5/2}^{(p)} \cdot \left(g^2 \right) \left(g\mathbf{g} - \frac{1}{3} g^2 \right) \right], \quad S_{5/2}^{(q)} \cdot \left(g^2 \right) \left(g\mathbf{g} - \frac{1}{3} g^2 \mathbf{E} \right). \quad (23)$$

$(q = 0, 1, \dots, n-1; p = 0, 1, \dots, n-1)$

В n -ом приближении Чепмена – Энскога выражение для вязкости простого газа имеет вид

$$[\eta]_n = [\eta]_1 f_n^{(\eta)}. \quad (24)$$

При $n = 1$ выражение (24) через Ω -интегралы записывается в виде

$$[\eta]_1 = \frac{5kT}{8\Omega^{(2,2)}}.$$

В п.7 первой главы рассматриваются алгоритмы определения коэффициентов вязкости, теплопроводности, диффузии и термодиффузии для моделей многокомпонентных смесей.

В п.8 первой главы приведены коэффициенты СЛАУ для приближений $n = 1, 2, 3$, выражающиеся разложением интегральных скобок по полиномам Сонина и Ω - интегралам для коэффициентов переноса в газовой среде, состоящей из K компонентов.

В первой главе настоящей диссертационной работы соискателем приведено математическое обоснование связи кинетического уравнения Больцмана с макроуравнениями Эйлера, Навье-Стокса и Бернетта. Автором работы показано, что для решения проблемы определения коэффициентов переноса в моделях многокомпонентных сред, исходя из первого положения молекулярно кинетической теории, необходимо использовать методы математического и функционального анализа, вычислительной математики и линейной алгебры, а также аппарата физико-математического моделирования процессов, протекающих на микроуровне. В данной главе было показано, что в зависимости от количества компонент, составляющих многокомпонентную среду, для определения переносных характеристик в газах наряду с однопроцессорными ЭВМ необходимо применять элементы параллельных вычислений и параллельные вычислительные системы.

Во второй главе соискателем проведен обзор наиболее известных работ, посвященных математическим моделям описания взаимодействия молекул, используемых для определения переносных характеристик среды. Впервые проведена их классификация, предложена и обоснована математическая модель потенциала $(2(n+3), 6)$.

В п.1 второй главы приведен анализ сил, действующих между молекулами, и представлено предположение, что потенциал взаимодействия молекул на малых и больших расстояниях можно аппроксимировать степенным или экспоненциальным многочленом, в котором содержатся коэффициенты, основанные на экспериментальных данных.

В п.2 приведен анализ известных потенциалов взаимодействия молекул в газах. Среди всех потенциалов, описывающих процесс взаимодействия молекул в двумолекулярных газах, самым востребованным является (m, n) потенциал. Но этот потенциал требует экспериментального определения трех параметров, что не всегда возможно. Предложена математическая модель однопараметрического потенциала $(2(n+3), 6)$, который предлагается использовать для описания процесса взаимодействия молекул, как в двумолекулярной, так и многокомпонентной газовых средах

$$\varphi(r) = \varepsilon \cdot f(n) \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{2(n+3)} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (25)$$

где $f(n) = \left(\frac{n+3}{3} \right)^{3/n} / \left(1 - \left(\frac{n+3}{3} \right)^{-1} \right)$.

График функции обобщенного безразмерного потенциала $\varphi_{eff}^*(r^*) = \varphi(r)/\varepsilon$, в которой $AI = \sigma/d_{average}$, $r^* = r/d_{average}$, $d_{average} = (d_1 + d_2)/2$, где d_1 и d_2 – диаметры молекул, приведен на рис. 1:

$$\varphi_{eff}^*(r^*) = f(n) \left[\left(\frac{AI}{r^*} \right)^{2(n+3)} - \left(\frac{AI}{r^*} \right)^6 \right] + \left(\frac{g^* \cdot b^*}{r^*} \right)^2 \quad (26)$$

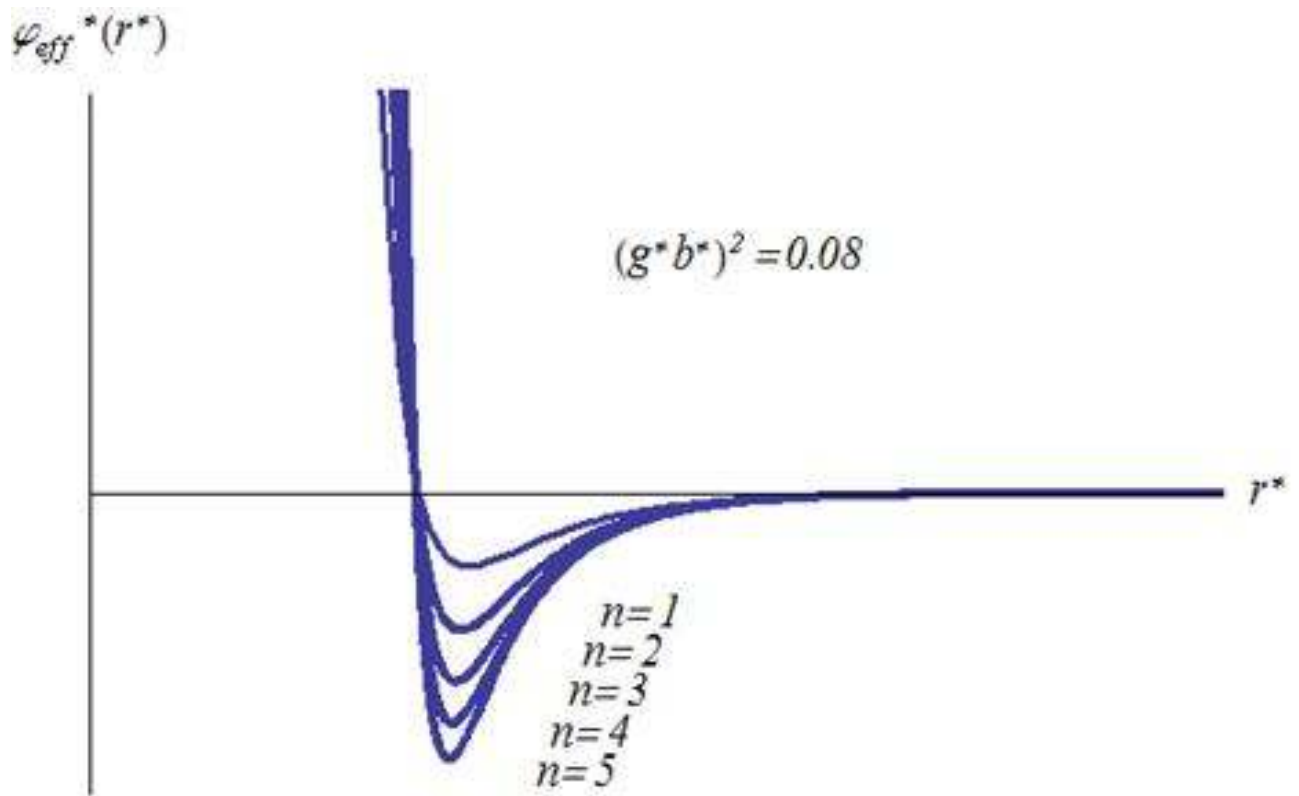


Рис.1. Графики потенциала $(2(n+3),6)$ при различных значениях параметра n .

В отличие от других, предлагаемая соискателем модель потенциала $(2(n+3),6)$ учитывает упругие и геометрические параметры молекул при их взаимодействии. Данные характеристики молекул очень важно учитывать при решении проблемы снижения сопротивления газов с помощью полимерных добавок. Хотя потенциал $(2(n+3),6)$ получен для описания взаимодействия молекул в двумолекулярной среде, допустимо его обобщение для многокомпонентной среды. Это возможно осуществить исходя из понятия аппроксимации многокомпонентной среды «базовой» двумолекулярной средой, состоящей из молекул с максимальной мольной концентрацией диаметром d_1 с одинаковой молекулярной плотностью n_i^* ($i=1,2,\dots,K_1$) и молекул оставшейся части смеси с осредненным диаметром $d_2 = \left(\sum_{n=1}^K d_n - K_1 \right) / (K - K_1)$. Затем

полученное выражение для потенциала «базовой» двумолекулярной среды адаптируется на многокомпонентную газовую среду с помощью функционального регуляризатора:

$$AI_{gener} = AI / \left(\frac{\sum_{i=1}^K d_i}{d_{average}} \right) \text{ или } AI = AI_{gener} \frac{\sum_{i=1}^K d_i}{d_{average}}. \quad (27)$$

Регуляризованное выражение для эффективного потенциала взаимодействия молекул в многокомпонентной газовой среде имеет вид:

$$\varphi_{eff}^* = f(n) \cdot \left(\left(\frac{AI_{gener} \cdot \sum_{l=1}^K d_l / d_{average}}{r^*} \right)^{2(n+3)} - \left(\frac{AI_{gener} \cdot \sum_{l=1}^K d_l / d_{average}}{r^*} \right)^6 \right) + \left(\frac{g^* b^*}{r^*} \right)^2 \quad (28)$$

Для определения параметров n и AI в обобщённом потенциале (28) соискателем предложен алгоритм, основанный на методе наименьших квадратов.

В п.3. второй главы диссертантом исследуется квантово-механическая модель, которая описывает процесс взаимодействия двух и более молекул с помощью функции, удовлетворяющей нестационарному волновому уравнению. При сравнении этой модели с моделью, полученной на основе классической механики $(2(n+3), 6)$, возникает вопрос, какой из них лучше воспользоваться для описания процесса взаимодействия молекул. В книге Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц «Квантовая механика (нерелятивистская теория)»¹ показано, что значения величины угла сечения рассеивания, рассчитанной по обеим математическим моделям почти совпадают и поэтому с большей степенью точности можно пользоваться любой из них. Однако, расчеты, полученные по модели классической механики, дают правильные результаты, когда угол рассеивания χ мал.

Во второй главе проведен обзор наиболее известных работ, посвященных математическим моделям взаимодействия молекул, используемых для определения переносных характеристик среды. Автором предложена математическая модель однопараметрического потенциала $(2(n+3), 6)$, который предлагается использовать для описания процесса взаимодействия молекул, как в двумолекулярной, так и многокомпонентной газовой среде. В отличие от других предлагаемая модель потенциала $(2(n+3), 6)$ учитывает упругие и геометрические параметры молекул при их взаимодействии. Хотя потенциал $(2(n+3), 6)$ получен для описания взаимодействия в двумолекулярной среде, допустимо его обобщение для многокомпонентной среды. Это возможно осуществить исходя из аппроксимации многокомпонентной среды «базовой» двумолекулярной средой,

¹ Ландау, Л.Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - Издание 6-е, исправленное./Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.-М.: Физматлит, 2004.- 800 с.

состоящей из молекул, имеющих максимальную мольную концентрацию, и молекул с осредненным диаметром оставшейся части смеси. Затем полученное выражение для потенциала «базовой» двумолекулярной среды переносится на многокомпонентную газовую среду с помощью функционального регуляризатора.

Для определения параметров в обобщённом потенциале $(2(n+3), 6)$ соискателем предложен численный алгоритм, основанный на методе наименьших квадратов.

Третья глава посвящена важной характеристике, используемой в кинетической теории газов, – функции угла рассеяния взаимодействующих молекул:

$$\chi(b^*, g^*) = \pi - 2b^* \int_{(r_0^*)_{\min}}^{\infty} \frac{dr^*}{(r^*)^2 \sqrt{1 - \varphi_{eff}^* / (g^*)^2}}. \quad (29)$$

В несобственном интеграле выражения (29) значение нижнего предела $(r_0^*)_{\min}$ является минимальным положительным корнем нелинейного параметрического алгебраического уравнения. В связи с этим в п.1 этой главы при определении величины $(r_0^*)_{\min}$ на основе динамики соударения двух тел (молекул) показывается, что данная величина является первым положительным корнем нелинейного уравнения:

$$f(r_0^*) = (r_0^*)^2 - (b^*)^2 - \frac{r_0^*}{g^*} \left(f(n) \cdot \left(\left(\frac{AI}{r_0^*} \right)^{2(n+3)} - \left(\frac{AI}{r_0^*} \right)^6 \right) + \left(\frac{g^* \cdot b^*}{r_0^*} \right)^2 \right) = 0, \quad (30)$$

где $f(n) = \left(\frac{n+3}{3} \right)^{3/n} / \left(1 - \left(\frac{n+3}{3} \right)^{-1} \right)$.

Представляет интерес разработка численного алгоритма определения не всех корней нелинейного уравнения (30), а только одного – первого минимального положительного корня $(r_0^*)_{\min}$. Такого типа задачи представляют самостоятельный научный интерес в связи с использованием в приложениях. Надо отметить, что (30) является нелинейным многопараметрическим алгебраическим уравнением степени $2(n+3)$, зависящим от параметров AI, n, g^* и b^* .

В п.2 рассмотрены предельные случаи, описывающие динамику столкновения молекул на основе нелинейного уравнения (30). Так,

асимптотический анализ уравнения (30) показал, что если величина $\left(\frac{g^* \cdot b^*}{r_0^*}\right)^2$, обусловленная центробежной силой, мала по сравнению с силами притяжения и отталкивания молекул, и в потенциале (30) ею можно пренебречь, то значение величины $(r_0^*)_{\min}$ определяется значением безразмерного числа AI :

$$(r_0^*)_{\min} = AI. \quad (31)$$

В другом предельном случае, величина минимального положительного корня уравнения (30) $(r_0^*)_{\min}$ пропорциональна значению приведенного прицельного параметра b^* , когда значения числа $AI \ll 1$:

$$(r_0^*)_{\min} = \sqrt{2} \cdot b^*. \quad (32)$$

Полученные асимптотические выражения (31) и (32) для величины $(r_0^*)_{\min}$ в дальнейшем используются в качестве начального приближения в итерационном алгоритме её определения из нелинейного уравнения (30), а также при получении асимптотического выражения функции угла рассеяния молекул $\chi(b^*, g^*)$.

В п.3 третьей главы предлагается численный алгоритм определения требуемого корня $(r_0^*)_{\min}$ нелинейного алгебраического уравнения (30). Для его определения использовался итерационный алгоритм, основанный на методе Ньютона. При реализации численных алгоритмов на ЭВМ возникали следующие вопросы: а) определение подобласти, в которой находится искомый корень (решение); б) обоснование выбора начального приближения для используемого итерационного процесса. В связи с определением подобласти расположения единственного требуемого решения нелинейных алгебраических уравнений (30), были доказаны теоремы, которые в отличие от теоремы Больцано, не требуют у функции $f(r)$ свойства монотонности на отрезке $[a_k, b_k]$.

Теорема 1. Если функция $f(r)$ непрерывна $\forall r \in [a_k, b_k]$ и существует точка $d \in (a_k, b_k)$ такая, что для $\forall \varepsilon > 0$ и $\forall r \in [a_k, d - \varepsilon]$ функция $f(r)$ имеет только положительные (отрицательные) экстремумы, а для $\forall r \in [d + \varepsilon, b_k]$ функция $f(r)$ имеет только отрицательные (положительные) экстремумы, то выполняется равенство $f(d) = 0$.

Теорема 2. Если функция $f(r)$ непрерывна на отрезке $[a_k, b_k]$ и для $\forall r \in (a_k, b_k)$ имеет только положительные (отрицательные) экстремумы, то $f(r) \neq 0 \forall r \in (a_k, b_k)$.

Для определения минимального положительного корня $(r_0^*)_{\min}$ нелинейного уравнения (30) был использован итерационный алгоритм Ньютона, который реализован в программе ЭВМ № 2011610042 «Определение минимального положительного корня нелинейного уравнения из кинетической теории газа, применяющегося при вычислении коэффициентов переноса в реагирующих газовых потоках». Отделение корней на отрезке $[a, b]$ проводилось на основании выполнения условий теоремы 1 и 2, а начальное значение $(r_0^*)_{\min}^0$ для используемого итерационного процесса определялось соотношением (31). Зависимость расчетных значений величины $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ от параметров AI, n и g^* приведена на рис. 2-3.

На рис.2 приведена зависимость значений $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ от параметров n и AI при фиксированных b^* и g^* . В этом случае имеет место зависимость $(r_0^*)_{\min} = AI$. Анализ вычисленных значений величины $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ и асимптотических решений показывает, что искомая величина $(r_0^*)_{\min}$ не зависит от параметра n . На рис. 3 показана зависимость $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ от g^* при различных значениях параметра AI и фиксированных n и b^* . Надо отметить, что при $AI \geq 1$ значения $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ имеют убывающий, а при $0 < AI < 1$ нелинейно возрастающий характер поведения.

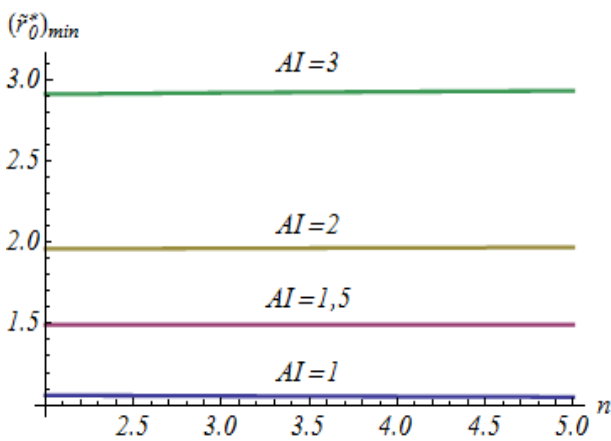


Рис. 2. Зависимость значений величины $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ от параметров n и AI при фиксированных $b^* = 1$ и $g^* = 1$

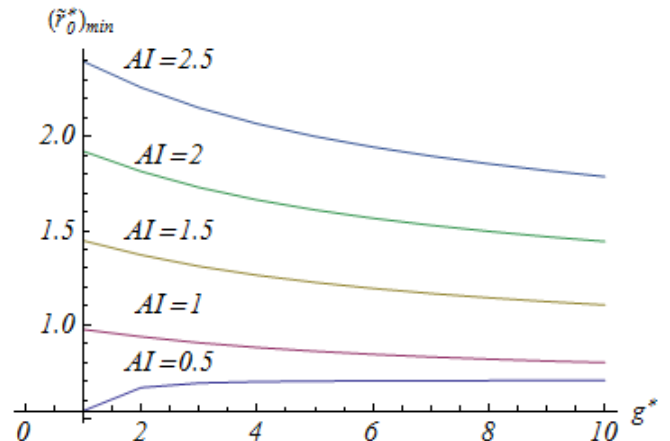


Рис. 2. Зависимость значений величины $(\tilde{r}_0^*)_{\min}$ от параметров g^* и AI при фиксированных $b^* = 1$ и $n = 2$

В третьей главе соискателем для определения нижнего предела в несобственном интеграле функции угла рассеяния (29) предложено нелинейное

алгебраическое уравнение степени $2(n+3)$, зависящее от параметров AI, n, g^* и b^* , минимальный положительный корень $\left(r_0^*\right)_{\min}$ которого и есть искомая величина. Поскольку переносные характеристики среды существенно зависят от значений $\chi(b^*, g^*)$, то корректность их определения требует качественного математического обоснования, в частности, и величины $\left(r_0^*\right)_{\min}$. В работе впервые получено асимптотическое выражение для определения наименьшего положительного корня нелинейного уравнения, описывающего динамику столкновения двух тел $\left(\left(r_0^*\right)_{\min} = AI\right)$. Наряду с асимптотическим решением предложены вычислительные технологии определения значения $\left(r_0^*\right)_{\min}$. Ввиду того, что из всех решений исходного уравнения требуется найти только одно, то в работе доказаны теоремы, на основе которых осуществляется определение подобласти расположения искомого корня и вычислительный алгоритм его определения. Одна из приведенных теорем, в отличие от теоремы Больцано-Коши, не требует у функции выполнения свойства монотонности на отрезке. Автором работы приведены результаты в виде графиков и таблиц, и проведено сравнение асимптотических и вычисленных значений величины $\left(r_0^*\right)_{\min}$.

В четвертой главе проводится анализ равномерной ограниченности (непрерывности) функции угла рассеяния взаимодействующих молекул

$$\chi\left(b^*, g^*, AI, n\right) = \pi - 2b^* \int_{\left(r_0^*\right)_{\min}}^{\infty} \frac{\frac{dr^*}{r^{*2}}}{\sqrt{1 - \varphi_{eff}^*(r^*, b^*, g^*)/g^{*2}}}, \quad (33)$$

относительно параметров b^* и g^* , и исследуются асимптотические и вычислительные алгоритмы определения её значений. Функция $\chi\left(b^*, g^*, AI, n\right)$ входит в подынтегральное выражение Ω -интеграла столкновения молекул, который используется для вычисления коэффициентов переноса. Поскольку она является одной из определяющих в кинетической теории газов, то анализ свойств её равномерной непрерывности является условием корректного определения коэффициентов переноса.

Проведенные исследования показали, что если в рассматриваемых физико-химических процессах приведенная кинетическая энергия относительного движения превышает приведенную потенциальную энергию взаимодействующих молекул, т.е. для $\forall r^* \in \left[\left(r_0^*\right)_{\min}, \infty\right)$ имеет место неравенство

$$g^{*2} > \varphi_{eff}^*, \quad (34)$$

то несобственный интеграл в выражении (33) является равномерно сходящимся и значения функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ определяются на множестве действительных чисел R . Если имеет место:

$$\varphi_{eff}^* > g^{*2}, \forall r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, \infty \right), \quad (35)$$

то значения функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ определяются на множестве комплексных чисел C и описываются физико-химические процессы, в которых приведенная потенциальная энергия взаимодействующих молекул превышает приведенную кинетическую энергию относительного движения. Поверхность уровня, разделяющая множества R и C , является бифуркационной и называется «критической». Её уравнение имеет вид:

$$g^{*2} = \varphi_{eff}^* = \varphi^* + \frac{g^{*2} b^{*2}}{r^{*2}}. \quad (36)$$

Надо отметить, что до настоящего времени анализ равномерной непрерывности функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ относительно параметров b^* и g^* не проводился. Но это свойство является существенным, поскольку гарантирует корректность определения её значений. В связи с этим в п.1 этой главы доказываются теоремы о равномерной непрерывности функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ относительно параметров b^* и g^* как на множестве действительных R , так и комплексных чисел C . Сначала были доказаны следующие теоремы:

Теорема 3. Подынтегральная функция в несобственном интеграле выражения (33) является равномерно непрерывной $\forall r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, \infty \right)$ на множестве R при выполнении условия (34).

Теорема 4. Подынтегральная функция в несобственном интеграле выражения (33) является непрерывной $\forall r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, \infty \right)$ на множестве C при выполнении неравенства (35).

Теоремы 3 и 4 утверждают, что несобственный интеграл в выражении (33) является равномерно сходящимся по переменной r^* . Далее был проведен анализ равномерной непрерывности функции (33) относительно параметров b^* и g^* .

Теорема 5. Функция $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ равномерно непрерывна по параметрам $b^* \in [0, \infty)$ и $g^* \in [0, \infty)$ на множестве действительных чисел R при выполнении условия (34).

Теорема 6. Если имеет место неравенство $\varphi_{eff}^* > g^{*2} \forall r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, \infty \right)$, то функция $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ равномерно непрерывна по параметрам b^* и g^* на множестве комплексных чисел C .

П.2 четвертой главы рассмотрено асимптотическое решение функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ для некоторых предельных случаев. Показано, что в физико-химических процессах, для которых выполняется неравенство $g^{*2} > \varphi_{eff}^*$ ($b^* < r^*$) $\forall r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, \infty \right)$, функция $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ имеет решение на множестве R :

$$\chi(b^*, g^*, AI, n) = \pi - 2b^* \int_{\left(r_0^* \right)_{\min}}^{\infty} \frac{dr^*}{r^{*2} \left(1 - \left(\frac{b^*}{r^*} \right)^2 \right)^{1/2}} = \pi - 2a \arcsin \frac{b^*}{\left(r_0^* \right)_{\min}}. \quad (37)$$

Если $\varphi_{eff}^* > g^{*2}$ и $b^* > r^* \forall r^* \in \left[r_0^*, \infty \right)$, то в соответствии с теоремой 4 функция $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ является равномерно непрерывной на множестве C . С учетом предположения, что $b^* = \alpha \cdot r^*$ ($\alpha > 1$), получено решение явного вида:

$$\chi(b^*, g^*, AI, n) = \pi - 2i \cdot \ln \left| \frac{\alpha + (\alpha^2 - 1)^{1/2}}{\frac{b^*}{\left(r_0^* \right)_{\min}} + \left(\left(\frac{b^*}{\left(r_0^* \right)_{\min}} \right)^2 - 1 \right)^{1/2}} \right|. \quad (38)$$

Рассмотрим предельный случай, когда имеет место неравенство (34) и $\varphi_{eff}^* = \varphi^*$, то есть у взаимодействующих молекул центробежная сила мала в

сравнении с силами притяжения и отталкивания. Получение первообразной для интеграла в выражении (33) в аналитическом виде представляется сложной задачей. Поэтому рассматриваются два предельных случая, позволяющих найти её явный вид через специальные гипергеометрические функции. Пусть силы притяжения и отталкивания превосходят центробежные, причем сила притяжения при взаимодействии молекул является незначительной по сравнению с силой отталкивания, т.е. $\left(\frac{AI}{r^*}\right)^6 \ll \left(\frac{AI}{r^*}\right)^{2(n+3)}$. В этом случае

выражение функция $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ записывается явно в виде:

$$\chi(b^*, g^*, AI, n) = \pi - 2b^* \left(\begin{array}{l} \Gamma_2 F_1 \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{6+2n}, 1 + \frac{1}{6+2n}, \frac{f(n) \cdot AI^{2(n+3)} \cdot (r_0^*)^{-2(n+3)}}{g^{*2}} \right] \\ - \Gamma_2 F_1 \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{6+2n}, 1 + \frac{1}{6+2n}, \frac{f(n) \cdot AI^{2(n+3)} \cdot (r_1^*)^{-2(n+3)}}{g^{*2}} \right] \end{array} \right), \quad (39)$$

где $\Gamma_2 F_1$ – гипергеометрическая функция, а значение величины r_1^* определяется из выполнения условия $\varphi_{eff}^* < g^{*2} \forall r^* \in [r_1^*, \infty)$.

Если сила притяжения превосходит силу отталкивания, т.е. $\left(\frac{AI}{r^*}\right)^6 \gg \left(\frac{AI}{r^*}\right)^{2(n+3)}$, тогда несобственный интеграл в (33) можно заменить приближением вида:

$$\chi(b^*, g^*, AI, n) = \pi - 2b^* \int_{r_1^*}^{\infty} \frac{dr^*}{r^{*2} \sqrt{1 + \frac{f(n)}{g^{*2}} \left(\frac{AI}{r^*}\right)^6}} = \pi - \frac{2b^*}{r_1^*} \cdot \Gamma_2 F_1 \left[\frac{1}{6}, \frac{1}{2}, \frac{7}{6}, -\frac{AI^6 \cdot f(n)}{g^{*2} r_1^{*6}} \right]. \quad (40)$$

Для определения значения несобственного интеграла в (33) предлагается использовать алгоритм, который основан на следующем: полуинтервал интегрирования $r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, \infty \right)$ разбивается на отрезок $r^* \in \left[\left(r_0^* \right)_{\min}, r_1^* \right]$ и полуинтервал $r^* \in \left[r_1^*, \infty \right)$. При этом в первом отрезке преобладает сила отталкивания, а на втором полуинтервале – сила притяжения. С учетом полученных формул (39) и (40) можно определить значения несобственного

интеграла (33) как сумму двух интегралов, один из которых определенный, а второй – несобственный:

$$\chi(b^*, g^*, AI, n) = \pi - 2b^* \left(\int_{(r_0^*)_{\min}}^{r_1^*} \frac{dr^*}{r^{*2} \sqrt{1 - \frac{f(n)}{g^{*2}} \left(\frac{AI}{r^*}\right)^{2(n+3)}}} + \int_{r_1^*}^{\infty} \frac{dr^*}{r^{*2} \sqrt{1 + \frac{f(n)}{g^{*2}} \left(\frac{AI}{r^*}\right)^6}} \right) \quad (41)$$

Полученные асимптотические решения (37)-(40) для функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ могут служить оценкой корректности определения её значения численными методами и быть использованы при решении практических задач.

В п.3 четвертой главы проводится анализ вычислительных алгоритмов, предлагаемых для определения значений несобственных интегралов. Рассматривается два способа вычисления несобственных интегралов. Один из них – введение новой переменной, с помощью которой бесконечный предел интегрирования отображается в конечный. Другой метод – использует выполнения

условия $\int_a^{\infty} f(x) dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) dx$. Поскольку оба метода вычисления несобственных

интегралов сводятся к алгоритмам вычисления значений определенных интегралов, то для вычисления значения последних приводится обоснование эффективности адаптивной квадратуры и сплайн-квадратуры.

П.4 этой главы рассмотрены компьютерные технологии определения значений функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$. Вычисления её значений требуют выполнения условий теорем 5 и 6, т.е. определения координат точек $M(r_{extr}^*, b_{extr}^*)$, лежащих вблизи критической поверхности (линии) (36). Эти точки при фиксированном значении одного из параметров (например g^*) определялись методом Ньютона из следующей нелинейной системы уравнений:

$$\begin{cases} f(r_{extr}^*, b_{extr}^*, g_{extr}^*) = \\ \varphi'(r_{extr}^*) = -2 \cdot f(n) \cdot \frac{AI}{r_{extr}^*} \left[(n+3) \cdot \left(\frac{AI}{r_{extr}^*}\right)^{2(n+3)-1} - 3 \cdot \left(\frac{AI}{r_{extr}^*}\right)^5 \right] - 2 \cdot \frac{g^* \cdot b_{extr}^*}{r_{extr}^*} = 0. (42) \\ \psi(r_{extr}^*, b_{extr}^*, g_{extr}^*) = \varphi(r_{extr}^*) - g_{extr}^* = 0 \end{cases}$$

За начальное значение величины $(r_{extr}^*)^{(0)}$ в итерационном процессе Ньютона принималось $(r_{extr}^*)^{(0)} = AI$, полученное на основе асимптотического решения, а затем определялось начальное значение $(b_{extr}^*)^{(0)}$ из второго уравнения системы (42) при фиксированных значениях \tilde{g}^* и $(r_{extr}^*)^{(0)} = AI$. Итерационный процесс для определения значений $(r_{extr}^*)^{(\beta)}$ и $(b_{extr}^*)^{(\beta)}$ проводился до выполнения условия:

$$\max_{\varepsilon_i, (i=1,2)} \left\{ \left| (r_{extr}^*)^{(\beta+1)} - (r_{extr}^*)^{(\beta)} \right| < \varepsilon_1, \quad \left| (b_{extr}^*)^{(\beta+1)} - (b_{extr}^*)^{(\beta)} \right| < \varepsilon_2 \right\}.$$

Для определения численного значения несобственного интеграла в выражении (33) были реализованы оба метода его нахождения: введение новой переменной, которая позволяет отобразить полупрямую интегрирования $\left[(r_0^*)_{\min}, \infty \right)$ в конечный отрезок $[0,1]$ и алгоритм с использованием выполнения

приближения $\int_a^\infty f(x)dx \approx \int_a^b f(x)dx, (b \rightarrow \infty)$. В методе введения новой переменной

выяснилось, что при $t \rightarrow 0$ значения подынтегральной функции в (33) и ее производных сильно возрастают. Это потребовало использование квадратуры с алгоритмом построения адаптивных узлов интегрирования в подобластях наибольшего роста производной у подынтегральной функции. После построения адаптивных узлов разбиения вычислялся интеграл (33) по квадратурной формуле Ньютона–Котеса для случая $n = 2$.

Другим численным методом определения приближенных значений интеграла в (33) являлась сплайн-квадратура, в которой узлы интегрирования строились из условия фиксированного значения погрешности интерполяции подынтегральной функции кубическими сплайнами. Как показали численные эксперименты сплайн-квадратура, в отличие от адаптивной квадратуры Ньютона–Котеса, при фиксированной точности вычисления интеграла в (33) требует меньше времени вычисления.

Некоторые результаты вычислений значений $\chi(b^*, g^*, AI, n)$, выполненных с помощью программы ЭВМ № 2011610952 «Вычисление значений функции угла рассеивания молекул в газах при их взаимодействии», приведены на рис.4. Значение интеграла в (33) вычислялось при фиксированных $b^* = 1$ и $n = 2$ в зависимости от параметров g^* и AI . Анализ графиков поведения функции на рис.4

показал, что при $AI > 1$ функция $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ является убывающей, а при $AI \leq 1$ возрастающей и ограниченной.

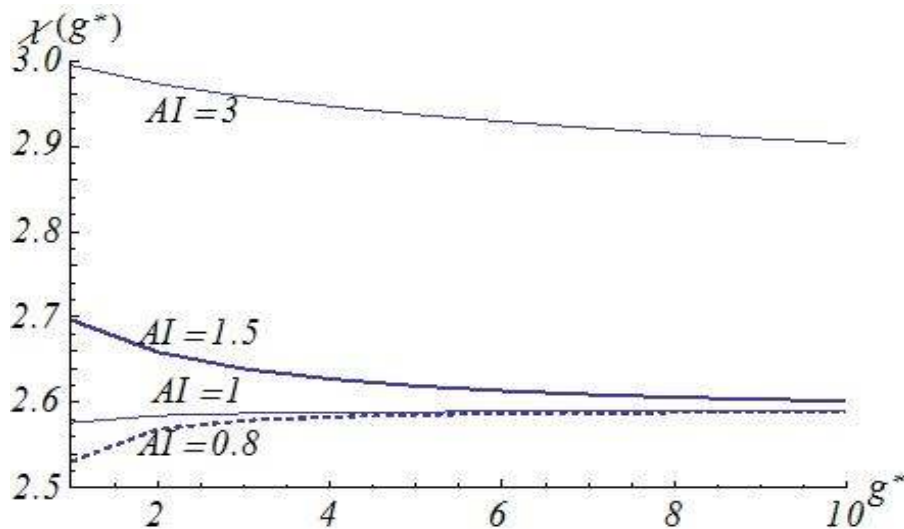


Рис. 4. Зависимость функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$ при $b^* = 1, n = 2$

В четвертой главе соискатель впервые доказал непрерывность по переменной r^* и равномерную непрерывность по параметрам b^* и g^* функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$, как на множестве действительных R , так и комплексных чисел C . В диссертационной работе введено понятие «критической» поверхности (линии), разделяющей множества определения функции угла рассеяния взаимодействующих молекул в многокомпонентных средах. Впервые получены явные асимптотические выражения для некоторых предельных случаев функции $\chi(b^*, g^*, AI, n)$, которые могут служить оценкой корректности определения её значения численными методами и быть использованными при решении практических задач. Предложены эффективные вычислительные технологии вычисления несобственных интегралов для определения функции $\chi(g^*, b^*)$, базирующиеся на адаптивных квадратурах, а также квадратуре, построенной на сплайн-функции. Создана программа ЭВМ и получены расчетные значения функции угла рассеяния на основе предложенных вычислительных и компьютерных технологий, проведено сравнение с асимптотическими выражениями для некоторых предельных случаев.

Пятая глава посвящена анализу и построению квадратурных формул для вычисления несобственных интегралов с осциллирующими подынтегральными функциями. Одним из таких интегралов в кинетической теории газов, является несобственный интеграл, описывающий среднее сечение рассеяния взаимодействующих молекул:

$$Q(g^*) = 2\pi \int_0^{\infty} [1 - \cos \chi(g^*, b^*)] b^* db^*. \quad (43)$$

Значение этого интеграла являются одним из определяющих в алгоритме вычисления переносных характеристик сред. Следовательно, точность значений коэффициентов переноса во многом зависит от корректности вычисления его значений.

В п.1 этой главы рассматривается квадратура Гаусса - Кристоффеля, основанная на ортогональных многочленах. Одной из проблем построения такой квадратуры является определение узлов разбиения отрезка интегрирования и значения весов квадратуры в них, которые находятся из условия минимизации погрешности квадратуры. Надо отметить, что осцилляционный характер подынтегральной функции в (43) учитывается квадратурой Гаусса-Кристоффеля поскольку её алгоритм основан на минимизации погрешности квадратуры.

Для определения узлов и весов для квадратуры Гаусса - Кристоффеля предлагается воспользоваться системой алгебраических уравнений

$$\sum_{k=1}^n c_k x_k^\alpha = \int_a^b \rho(x) x^\alpha dx \quad (\alpha = 0, \dots, m). \quad (44)$$

В системе (44) n -количество узлов разбиения, m -значение наивысшего порядка рассматриваемого многочлена. Для определения весов $c_i (i=1, 2, \dots, n)$ и узлов разбиения $x_i (i=1, 2, \dots, n)$ система алгебраических уравнений (44) расщепляется на две системы: линейную и нелинейную. Линейную систему алгебраических уравнений предлагается использовать для определения весов квадратуры, а нелинейную - для определения узлов разбиения отрезка интегрирования. Для определения значений неизвестных весов $c_i^{(0)} (i=1, 2, \dots, n)$ при известных (заданных) значениях $x_i^{(0)} (i=1, 2, \dots, n)$ соискатель предлагает использовать СЛАУ, решение которой определяется методом, связанным с построением интерполяционного многочлена, корнями которого служат неизвестные величины $c_i^{(0)} (i=1, 2, \dots, n)$. Поскольку матрицей этой СЛАУ является матрица Вандермонда, то это обеспечивает существование и единственность решения данной системы уравнений.

В п.2 пятой главы проведен качественный анализ нелинейной системы алгебраических уравнений для определения значений узлов x_i и весов $c_i (i=1, 2, \dots, n)$ в квадратуре Гаусса - Кристоффеля. С этой целью исходная алгебраическая система уравнений (44) приводится к виду:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1 x_1^n + c_2 x_2^n + \dots + c_n x_n^n - \int_a^b \rho(x) x^n dx = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1 x_1^{n+1} + c_2 x_2^{n+1} + \dots + c_n x_n^{n+1} - \int_a^b \rho(x) x^{n+1} dx = 0, \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1 x_1^{2n-1} + c_2 x_2^{2n-1} + \dots + c_n x_n^{2n-1} - \int_a^b \rho(x) x^{2n-1} dx = 0 \end{array} \right. \quad (45)$$

или в сокращенной форме:

$$\mathbf{F}(\bar{x}) = 0, \quad (46)$$

где $\mathbf{F} = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T$, $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$.

Для определения значений узлов и весов в квадратуре Гаусса-Кристоффеля соискателем предложен и математически обоснован метод, который основан на расщеплении системы уравнений (45) на две: линейную систему алгебраических уравнений для определения значений весов c_i ($i = 1, 2, \dots, n$)

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 + c_2 + \dots + c_n = \int_a^b \rho(x) dx; \\ c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n = \int_a^b \rho(x) x dx; \\ c_1 x_1^2 + c_2 x_2^2 + \dots + c_n x_n^2 = \int_a^b \rho(x) x^2 dx; \\ \dots \\ c_1 x_1^{n-1} + c_2 x_2^{n-1} + \dots + c_n x_n^{n-1} = \int_a^b \rho(x) x^{n-1} dx \end{array} \right. ,$$

и нелинейную систему для определения расположения узлов разбиения x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) на отрезке интегрирования

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 x_1^n + c_2 x_2^n + \dots + c_n x_n^n = \int_a^b \rho(x) x^n dx; \\ c_1 x_1^{n+1} + c_2 x_2^{n+1} + \dots + c_n x_n^{n+1} = \int_a^b \rho(x) x^{n+1} dx; \\ \dots \\ c_1 x_1^m + c_2 x_2^m + \dots + c_n x_n^m = \int_a^b \rho(x) x^m dx. \end{array} \right.$$

В работе была доказана теорема о сходимости решений расщепленных систем алгебраических уравнений к решению исходной системе (45).

Теорема 7. Пусть в шаре $S_r(x^{-(0)})$ оператор $F(x)$ (46) дифференцируем и его производная удовлетворяет в нём условию Липшица с постоянной l . Пусть в $S_r(x^{-(0)})$ оператор $F(x)$ непрерывно обратим и существует постоянная $m > 0$ такая, что:

$$\left\| [F'(x)]^{-1} \right\| \leq m.$$

Пусть, далее, $\left\| F(x^{-(0)}) \right\| \leq \eta$. Тогда, если $q = \frac{1}{2} m^2 l \eta < 1$ и $r' = m \eta \sum_{j=0}^{\infty} q^{2j-1} < r$, то

уравнение $F(x) = 0$ имеет решение $x^* \in S_{r'}(x^{-(0)})$, к которому сходится итерационный процесс Ньютона. Скорость сходимости $x^{-(k)}$ к x^* дается неравенством

$$\left\| x^{-(k)} - x^* \right\| \leq m \eta \frac{q^{2k} - 1}{1 - q^{2k}}.$$

Значения весов $c_i (i = 1, 2, \dots, n)$ из линейной алгебраической системы уравнений определялись методом Гаусса. Значения узлов $x_i (i = 1, 2, \dots, n)$ из нелинейной системы уравнений определялись итерационным методом Ньютона, используя при этом найденные значения $c_i (i = 1, 2, \dots, n)$. После выполнения условия для локальных итераций по определению значений $x_i (i = 1, 2, \dots, n)$, проводились глобальные итерации до выполнения условия

$$\max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \left| x_i^{(\beta+1)} - x_i^{(\beta)} \right|, \left| c_i^{(\beta+1)} - c_i^{(\beta)} \right| \right\} \leq \varepsilon (k = 0, 1, \dots).$$

В п.3 пятой главы диссертантом приведены расчеты для модельного интеграла с осциллирующей подынтегральной функцией, аналогичной по виду с интегралом $Q(g^*)$ в (43):

$$J = \int_a^b (1 - \cos \omega x) x dx. \quad (47)$$

Вычисления значений интеграла (47) при различных значениях величины ω выполнялись с помощью квадратуры, включающей: а) алгоритм определения значений узлов и весов; б) алгоритм вычисления значения интеграла (47). Применение квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля для определения значений интегралов вида (43) позволяет вычислять значения как определенных, так и несобственных интегралов со сложным видом непрерывных подынтегральных функций, включая осциллирующие.

При определении переносных характеристик в многокомпонентных средах используются несобственные интегралы с осциллирующими подынтегральными функциями. Для корректного определения их значений необходимо использовать математически обоснованные квадратуры. В связи с этим в пятой главе для определения значений такого типа интегралов исследуется квадратура Гаусса-Кристоффеля. Для определения количества узлов разбиения (их координат) и весов в этой квадратурной формуле предлагается расщепление исходной нелинейной системы уравнений на две системы: линейную и нелинейную. Линейная система алгебраических уравнений используется для определения весов квадратуры, а нелинейная - для определения узлов разбиения отрезка интегрирования. Доказана теорема о глобальной сходимости решений данных систем к решению исходной нерасщепленной системе уравнений. Исследованы как прямые, так и итерационные методы решения расщепленных систем, и сходимость глобальных итераций к решению исходной нерасщепленной системы. Выполнены расчеты для модельного интеграла с осциллирующей подынтегральной функцией, которая схожа с подынтегральной функцией, входящей в транспортное сечение $Q(g^*)$. Проведен анализ эффективности квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля.

В шестой главе рассмотрены кубатурные формулы для определения значений несобственных интегралов в столкновительном члене уравнения Больцмана. Одним из них является Ω – интеграл столкновения молекул, который описывает взаимодействие молекул сортов i, j , и имеет вид:

$$\Omega_{ij}^{(l,r)} = \left(\frac{kT}{2\pi m_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2r+3} Q_{ij}^{(l)} d\gamma, \quad (48)$$

где

$$Q_{ij}^{(l)}(g^*) = 2\pi \int_0^\infty \left[1 - \cos \chi_{ij}^{(l)}(g^*, b^*) \right] b^* db^*. \quad (49)$$

Интегралы (48)-(49) являются несобственными интегралами, зависящими от параметров b^*, g^* . Подынтегральное выражение в (49) содержит осциллирующую функцию.

Для определения значений несобственных интегралов (48)-(49) в шестой главе предлагаются вычислительные технологии, основанные на теории кубатурных формул Гаусса и сплайн - кубатурах.

В п.1 шестой главы приведен численный алгоритм вычисления несобственного интеграла (48), основанный на кубатурной формуле Гаусса-Кристоффеля. По этому алгоритму в двукратном несобственном интеграле (48)

проводится отображение исходной неограниченной области интегрирования в квадратную область. Поскольку подынтегральная функция в (49) является осциллирующей, то для вычисления значения этого интеграла необходимо использовать численный алгоритм на основе кубатурной формулы Гаусса-Кристоффеля.

Наряду с кубатурной формулой Гаусса-Кристоффеля в п.2 этой главы для определения значения интеграла (48) соискателем проводится обоснование и адаптация многомерной сплайн-кубатурной формулы. Для этого сначала рассматривается задача двумерной интерполяции подынтегральной функции с помощью кусочно-бикубической функции, а затем вычислительная технология определения значения интеграла (48), основанная на сплайн-кубатуре. Предлагаемая вычислительная технология состоит из вычисления значения интеграла (48) с помощью сплайн-кубатурной формулы вида:

$$\left(\Omega_{ij}^{(l,k)}\right)_{k_1, i_1} = 4h_1 \cdot h_2 \sum_{k_1=1}^{N_1} \sum_{i_1=1}^{N_2} f_{1_{h_1, h_2}} \left((2k_1 - 1) \cdot h_1, (2i_1 - 1) \cdot h_2 \right) + E(f_1) \quad , \quad (50)$$

где

$$f_{1_{h_1, h_2}} = e^{-z_{i_1}} \cdot z_{i_1}^{\left(r + \frac{3}{2}\right)} \cdot \frac{1}{(1 - y_{i_1})^2} \left[1 - \cos(x_{k_1}, i_1) \right] \cdot \frac{x_{k_1}}{(1 - x_{k_1})^3},$$

$$z_{i_1} = \left(\frac{y_{i_1}}{1 - y_{i_1}} \right)^2 \cdot \left(\frac{2kT}{m_{ij}} \right),$$

$E(f_1)$ - погрешность сплайн-кубатуры.

Доказана теорема:

Теорема 8. Кубатурная формула (50) является наилучшей для определения значения двукратного Ω – интеграла столкновения молекул (48) в кинетической теории газов.

В п.3 шестой главы исследован вопрос об алгоритмах определения решений СЛАУ, которые используются для вычисления значений коэффициентов переноса в макроуравнениях моделей многокомпонентных сред. Соискателем проведён анализ методов решения СЛАУ в зависимости от вида матрицы СЛАУ. Предложен комплекс программ для определения решения СЛАУ на однопроцессорных и многопроцессорных вычислительных комплексах с учетом их архитектуры.

Итак, в шестой главе предложены вычислительные технологии определения значений кратных несобственных интегралов, содержащихся в столкновительном

члене уравнения Больцмана, основанные на: а) кубатурных формулах Гаусса-Кристоффеля; в) сплайн-кубатурах. Показано, что кубатурная формула вида (50) является наилучшей для определения значений двукратного несобственного Ω – интеграла (48). Проведен анализ методов решения СЛАУ, которые используются в алгоритмах определения значений коэффициентов переноса в макроуравнениях математических моделей, описывающих процессы в многокомпонентных средах. Предложен и реализован комплекс программ решения СЛАУ с учетом анализа устойчивости решения посредством определения числа обусловленности матрицы. Создан комплекс программ по определению коэффициентов переноса в K -компонентных средах, который для $K \leq 10$ реализован на однопроцессорной ЭВМ. Для среды с $K > 10$ предлагается определять значения коэффициентов переноса на многопроцессорных вычислительных кластерах с помощью программ, в которых реализована автоматическая настройка функций комплекса базовыми операциями линейной алгебры, а также программ по определению значений кубатурных формул, основанных на параллельных алгоритмах. Представленные в диссертации программы, составляющие комплекс программ, были зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (Роспатент).

В седьмой главе проводится сравнительный анализ расчетных значений коэффициентов переноса, полученных с помощью вычислительных технологий и комплекса программ, предлагаемых в данной работе, для простых газов и многокомпонентных газовых смесей с имеющимися экспериментальными данными. Приведено также сравнение расчетных значений $\Omega_{ij}^{(l,r)}$ - интеграла для потенциала (12,6), взятых из работы L. Monchick and E.A. Mason. «Transport properties of polar gases»¹, с результатами соискателя, полученными с помощью предлагаемых вычислительных технологий.

В п.1 седьмой главы приведена табл.1 сравнения значений $\Omega_{ij}^{(l,r)}$ - интеграла столкновения молекул. Для вычисления значений Ω - интеграла использовалась программа ЭВМ № 2013619624 «Вычисление значений приведенных интегралов столкновений молекул в многокомпонентной газовой среде». При этом использовалась нормировка

$$\Omega^{*(l,r)} = \frac{\Omega_{ij}^{(l,r)}}{\left[\Omega_{ij}^{(l,r)} \right]_{r.s.}}, \quad (51)$$

где $\left[\Omega_{ij}^{(l,r)} \right]_{r.s.}$ - значение интеграла столкновения для модели твердых сфер.

¹ L. Monchick and E.A. Mason. Transport properties of polar gases. J. Chem. Phys. 35 (5). Nov.1961 P 1676.

Сравнение расчета величины $\Omega^{*(1,1)}(T^*)$, выполненного в настоящей работе, с результатами работы L. Monchick and E.A. Mason. Transport properties of polar gases.¹ и оценка относительной погрешности $\delta\Omega^{*(1,1)}(T^*)$, %.

T^*	0,1	0,4	0,6	1,0	1,6	1,8	2,0
Настоящая работа	4,0119	2,3174	1,8800	1,4420	1,1688	1,1181	1,0763
Работа L. Monchick and E.A. Mason ¹	4,0079	2,3144	1,8767	1,4398	1,1679	1,1166	1,0753
$\delta\Omega^{*(1,1)}(T^*)$, %	0,09	0,12	0,17	0,15	0,07	0,13	0,09

Представленная оценка относительной погрешности $\delta\Omega^{*(1,1)}(T^*)$ в интервале приведенных температур $T^* \in [0,1;2]$ составляет $\delta\Omega_{ij}^{*(l,r)}(T^*) \in [0,07;0,17]\%$, что свидетельствует о удовлетворительной точности расчетов. Качественный анализ и сопоставление с данными других авторов позволяет утверждать о корректности результатов, полученных по предлагаемым вычислительным технологиям.

В п.2 седьмой главы приведено сравнение экспериментально измеренных значений коэффициента вязкости, для газовой смеси $Ne - Ar - He$ при различных температурах и мольных составах с её расчетными значениями, полученными на основе потенциала $(2(n+3),6)$, $n = 5$.

При вычислении значений коэффициента вязкости дополнительно к комплексу программ по определению величин $(r_0^*)_{\min}$, $\chi(g^*, b^*)$, $Q_{ij}^{(l)}(g^*)$, и $\Omega_{ij}^{(r,l)}$ использовались программы DECOMP и SOLVE для решений систем линейных алгебраических уравнений. В табл.2 приведены значения коэффициента вязкости для рассматриваемой газовой смеси в первом, втором и третьем приближениях Чепмена-Энскога (соответственно $[\eta]_1$, $[\eta]_2$, $[\eta]_3$) при температурах $T \in [293,473] K$, полученные на основе предложенных вычислительных технологий, и экспериментально измеренные, взятые из работы Hirschfelder J.O., Bird R.B., Spotz E.L. The transport properties of gases and gaseous mixtures.¹ Также в табл.2 приведена относительная погрешность $(\delta[\eta]_3, \%)$ для расчетного значения коэффициента вязкости в третьем приближении Чепмена-Энскога и данных эксперимента.

¹ Hirschfelder J.O., Bird R.B., Spotz E.L. The transport properties of gases and gaseous mixtures. Chem. Rev. 1949. V. 44. P. 205.

Сравнение вычисленных значений коэффициентов вязкости для смеси газов Ne–Ar–He в первом, втором и третьем порядках приближения (соответственно $[\eta]_1$, $[\eta]_2$, $[\eta]_3$) при различных температурах и процентных соотношениях по составу и их экспериментально измеренных значений из работы Hirschfelder J.O., Bird R.B., Spatz E.L. The transport properties of gases and gaseous mixtures.¹

T, K	Состав, %			$\eta \times 10^3$ кг/м×с					
	Ne	Ar	He	$[\eta]_1$	$[\eta]_2$	$[\eta]_3$	Из работы Hirschfelder ¹	Эксп.-нт	$\delta[\eta]_3, \%$
293	55,76	26,70	17,54	2,725	2,739	2,742	2,718	2,740	0,07
	31,93	32,13	35,94	2,570	2,582	2,586	2,562	2,569	0,6
	21,66	58,51	19,83	2,435	2,445	2,428	2,429	2,411	0,7
	21,89	23,82	54,29	2,507	2,519	2,523	2,500	2,504	0,7
373	55,76	26,70	17,54	3,216	3,235	3,238	3,205	3,237	0,03
	31,93	32,13	35,94	3,040	3,056	3,060	3,025	3,044	0,5
	21,66	58,51	19,83	2,907	2,920	2,891	2,895	2,886	0,17
	21,89	23,82	54,29	2,956	2,972	2,976	2,938	2,957	0,64
473	55,76	26,70	17,54	3,774	3,797	3,802	3,752	3,790	0,31
	31,93	32,13	35,94	3,572	3,592	3,597	3,551	3,574	0,64
	21,66	58,51	19,83	3,436	3,455	3,440	3,425	3,415	0,7
	21,89	23,82	54,29	3,467	3,486	3,491	3,449	3,470	0,6

Максимальное отклонение относительной погрешности между расчетными и экспериментальными величинами ($\delta[\eta]_3, \%$) имеет место при низких температурах $T = 293\text{K}$ и составляет 0,7%. Погрешность большинства расчётных данных оценивается в диапазоне 0,07-0,7%, что составляет меньше погрешности эксперимента $\delta([\eta]_3) < 1\%$. Таким образом, значения для коэффициента вязкости, приведенные в табл.2, можно считать полученными с удовлетворительной точностью совпадения с экспериментальными данными.

В п.3 седьмой главы приведен сравнительный анализ расчетных значений коэффициентов переноса для некоторых моделей простых газов N_2 , O_2 и газовых смесей $N_2 - O_2$, $O - CO$. Результаты исследования лежат в области температур $T \geq 1500\text{K}$.

На рис. 5–8 приведены графики температурной зависимости значений коэффициентов самодиффузии и вязкости для газов N_2 и O_2 . На рис. 9–10 приведены графики температурной зависимости коэффициентов диффузии газовых смесей $N_2 - O_2$ и $O - CO$. При этом цифрой 1 обозначены изотермы, построенные по данным из работы Ю.Н. Беляева, В.Б. Леонаса. Потенциалы взаимодействия атомов H, He и молекул H_2 ¹, полученным из экспериментов по рассеянию молекулярного пучка. Цифрой 2 обозначены изотермы, построенные

¹ Ю.Н. Беляев, В.Б. Леонас. Потенциалы взаимодействия атомов H, He и молекул H_2 / Докл. АН СССР. -1967. -Т. 173. -№ 2. -С.306.

на основе расчетов с использованием потенциала $(2(n + 3), 6)$ для $n = 5$. Цифрой 3 обозначены изотермы, построенные на основании расчетов с использованием потенциала Леннарда–Джонса (12,6). На всех рис. 5-10 показаны оценки погрешности отклонения расчетных изотерм от изотерм, построенных по данным из эксперимента (в %).

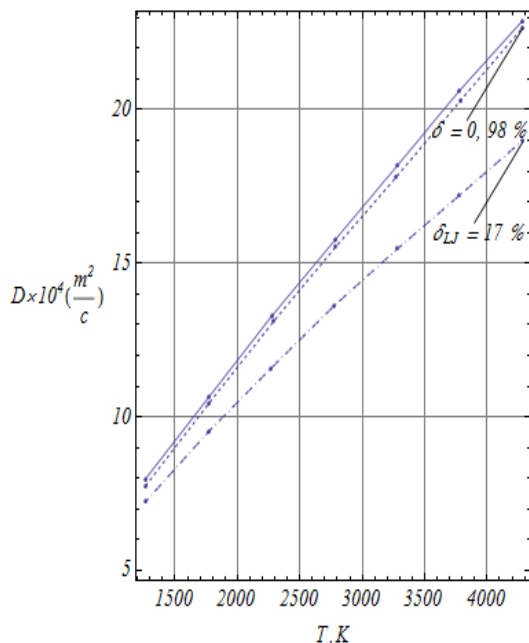


Рис. 5. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии молекулярного азота N_2 :

1 – эксперимент; 2 – потенциал $(2(n + 3), 6)$;
3 – потенциал Леннарда-Джонса

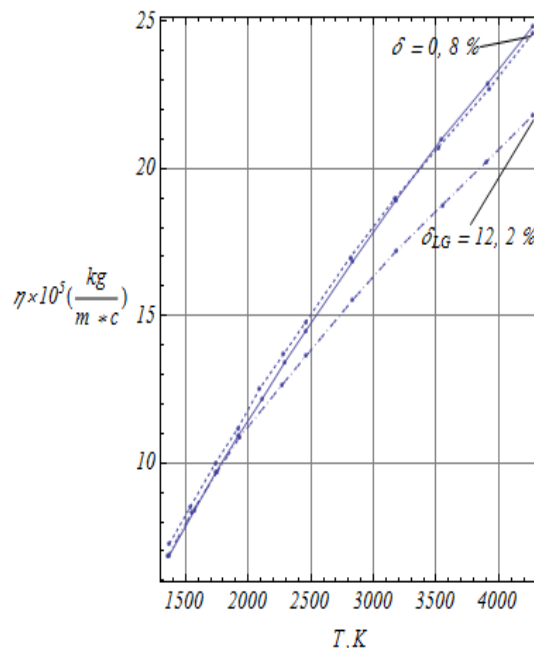


Рис. 6. Температурная зависимость коэффициента вязкости молекулярного азота N_2 :

1 – эксперимент; 2 – потенциал $(2(n + 3), 6)$;
3 – потенциал Леннарда-Джонса

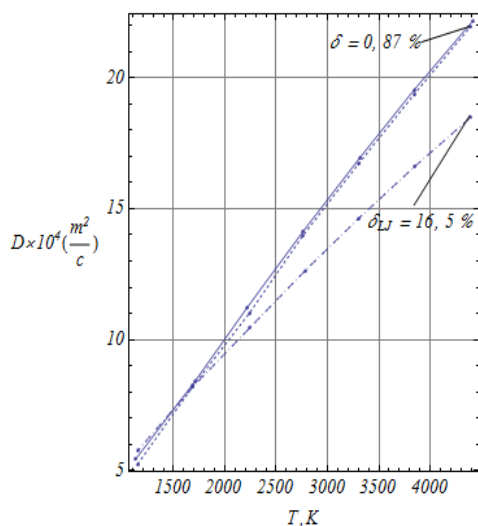


Рис. 7. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии молекулярного азота O_2 :

1 – эксперимент; 2 – потенциал $(2(n + 3), 6)$;
3 – потенциал Леннарда-Джонса

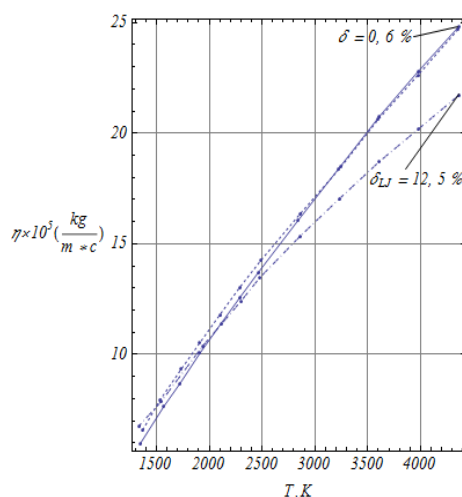


Рис. 8. Температурная зависимость коэффициента вязкости молекулярного азота O_2 :

1 – эксперимент; 2 – потенциал $(2(n + 3), 6)$;
3 – потенциал Леннарда-Джонса

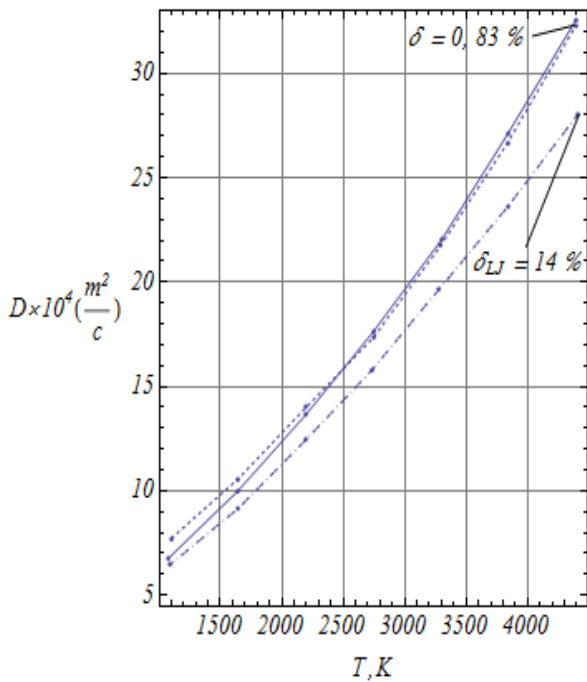


Рис. 9. Температурная зависимость коэффициента диффузии газовой смеси $N_2 - O_2$

1 – эксперимент; 2 – потенциал $(2(n + 3), 6)$;
3 – потенциал Леннарда-Джонса

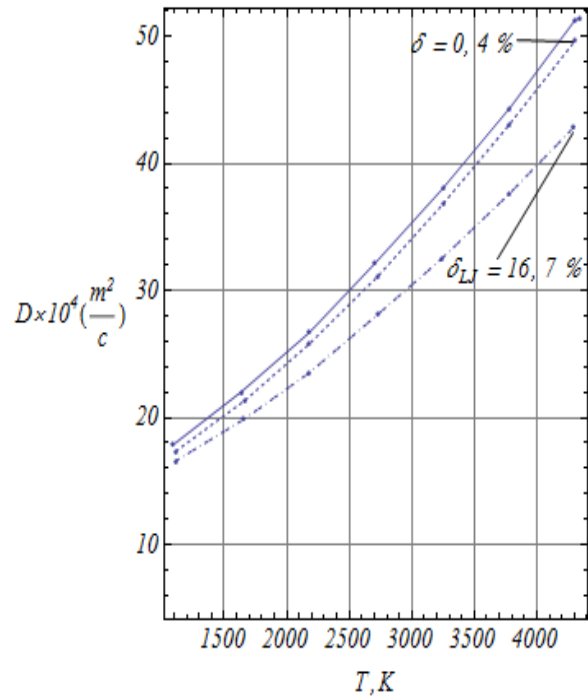


Рис. 10. Температурная зависимость коэффициента диффузии газовой смеси $O - CO$:

1 – эксперимент; 2 – потенциал $(2(n + 3), 6)$;
3 – потенциал Леннарда-Джонса

Как показывает сравнительный анализ, большинство расчетных кривых отклоняются от экспериментальных особенно в высокотемпературных точках. Важно отметить, что отклонение для изотерм **3** составляет 11,5-37,2%, а для изотерм **2** составляет 0,4-0,98%. Так как точность определения высокотемпературных коэффициентов переноса в газе из химически нестабильных частиц в пределах 10-15 % считается приемлемой, то использование математической модели потенциала $(2(n + 3), 6)$, вычислительных технологий и комплекса прикладных программ, математически обоснованных и разработанных в диссертационной работе, является корректным.

В седьмой главе проведено сравнение экспериментальных данных с расчетными значениями коэффициентов переноса, полученными на основе предложенных в диссертационной работе вычислительных технологий и комплекса программ, для моделей многокомпонентных газовых смесей. Сравнительный анализ расчетных результатов с экспериментальными данными других авторов подтверждают эффективность и физико-математическую обоснованность предложенных автором решений проблемы определения коэффициентов переноса в газах, согласно первому положению молекулярно кинетической теории.

В **приложении 1** описан разработанный комплекс программ, ориентированный на решение актуальных, проблемных задач в области определения коэффициентов переноса в моделях многокомпонентных смесей. В **приложении 2** приведены описание и листинги отдельных прикладных программ, разработанных автором в рамках данного исследования. В **приложении 3** приведены свидетельства о регистрации программ ЭВМ (Роспатент).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты диссертационной работы представляют собой новые решения актуальных проблем, связанных с повышением качества математического моделирования задач гидроаэромеханики на основе макроуравнений в которых переносные характеристики определяются исходя из первого положения кинетической теории газов. На основе проведённых исследований можно сформулировать следующие результаты и выводы:

1. Выполнена научно-квалификационная работа, в которой:

а) исходя из первого положения молекулярно-кинетической теории предложено физико-математическое обоснование определения на молекулярном уровне значений коэффициентов переноса в макроуравнениях моделей многокомпонентных газовых сред;

б) предложены и качественно обоснованы вычислительные технологии определения значений несобственных интегралов в столкновительном члене уравнения Больцмана.

2. Предложена математическая модель потенциала взаимодействия молекул в многокомпонентных средах, учитывающая упругие и геометрические параметры молекул.

3. На основе введённого понятия аппроксимации многокомпонентной среды «базовой» двухкомпонентной средой предложен физико-математически обоснованный метод определения коэффициентов переноса в макроуравнениях, описывающих процессы в многокомпонентной среде.

4. Впервые доказана равномерная непрерывность по параметрам b^* и g^* функции угла рассеяния взаимодействующих молекул, позволяющая корректное определение её значений.

5. Предложены и математически обоснованы асимптотические решения и вычислительные технологии определения нижнего предела в несобственном интеграле выражения для функции угла рассеяния молекул, влияющей на точность определения коэффициентов переноса.

6. Проведен анализ эффективности адаптивных квадратур, сплайн-квадратур для вычисления значения несобственного интеграла в

столкновительном члене уравнения Больцмана. Предложена и математически обоснована квадратура Гаусса-Кристоффеля для определения значения интегралов подобного типа с осциллирующей подынтегральной функцией, а также асимптотические методы определения значений функции угла рассеяния молекул $\chi(b^*, g^*)$.

7. Впервые проведено математическое обоснование вычислительных технологий определения значений $Q_{ij}^{(l)}$ -интеграла, моделирующего траекторию взаимодействия молекул для случая осцилляции подынтегральной функции в нем. Для расчета двойных несобственных интегралов с осциллирующей подынтегральной функцией предложены и математически обоснованы вычислительные технологии, базирующиеся на квадратурах Гаусса-Кристоффеля и сплайн – кубатурах.

8. Создан комплекс программ по определению коэффициентов переноса в K -компонентных средах, который при $K \leq 10$ реализован на однопроцессорной ЭВМ. Для многокомпонентных сред с $K > 10$ предлагается определять значения коэффициентов переноса на параллельных вычислительных кластерах с помощью программ, в которых реализована автоматическая настройка функций комплекса, а также программ по определению значений кубатурных формул, основанных на параллельных алгоритмах. Отдельные составляющие модули комплекса зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (Роспатент).

9. Результаты численных исследований с применением разработанных вычислительных технологий и комплекса программ для определения коэффициентов переноса, как для моделей простых газов, так и для многокомпонентных газовых смесей.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в ведущих рецензируемых научных журналах и изданиях из перечня ВАК РФ:

1. Анисимова, И.В. Компьютерное моделирование горения углеводородного топлива с учетом “точных” значений коэффициентов переноса / И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев, Р.Р. Таксеитов // Химическая физика и мезоскопия. - 2006. – Т.8. - № 2. - С.239-247.

2. Анисимова, И.В. Подбор силовых параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия ряда индивидуальных газов при высоких

температурах / И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев, Р.Р. Таксеитов // Известия вузов. Авиационная техника. - 2007. - №3. - С.65-67.

3. Анисимова, И.В. О численном исследовании нелинейного уравнения, встречающегося в кинетической теории газов/И.В. Анисимова// Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2008. - № 2. - С.60-63.

4. Анисимова, И.В. Аналитический и численный алгоритм определения значений функций угла рассеивания в газах при их взаимодействии/И.В. Анисимова// Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2008. - № 3. - С.58-61.

5. Анисимова, И.В. О нелинейном уравнении в кинетической теории газов и его решениях/И.В. Анисимова// Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2009. - № 3. - С.74-77.

6. Анисимова, И.В. Об алгоритме локализации некротных решений нелинейного уравнения и их вычислений / И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2010. - № 2. - С.69-72.

7. Анисимова, И.В. О непрерывности несобственного интеграла от параметра при вычислении угла рассеивания в кинетической теории газов/ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина// Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2010. -№3. - С.71-75.

8. Анисимова, И.В. Об анализе влияния сил на траекторию взаимодействующих молекул и компьютерные методы вычисления среднего сечения угла рассеивания / И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. - Т.13. - №2, - С. 200-207.

9. Анисимова, И.В. Потенциал $(2(n+3), 6)$ кинетической теории газов и его влияние на значение среднего угла рассеивания/ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2011. - №1. -С.89-93.

10. Анисимова, И.В. Компьютерные вычисления квадратур в кинетической теории газов/ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2011. - №2. - С.59-62.

11. Анисимова, И.В. Компьютерные технологии моделирования процессов столкновения молекул в газах / И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2012. - №2. - С.282-288.

12. Анисимова, И.В. О квадратурах Гаусса и алгоритме вычисления значений узлов и весов/ И.В. Анисимова И.В., Гиниятуллина Р.Р. // Естественные и технические науки.-2012. - №4. – С.31-34.

13. Анисимова, И.В. Об одном методе вычисления узлов и весов квадратур Гаусса-Кристоффеля/ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев // Математическое моделирование. -2013. – Т.25. -№3.- С. 3-13.

Anisimova I.V., R.R. Giniyatullina, and V.N. Ignat`ev. On One Method for Calculating the Nodes and Weights of the Gauss-Christoffel Quadratures.// Mathematical Models and Computer Simulations. -2013. -Vol.5. -No.5. -P.448-455.

14. Анисимова, И.В. О влиянии многокомпонентности газовых сред на функцию угла рассеяния молекул/ И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. - 2014. - №3. - С.282-288.

15. Анисимова, И.В. Вычисление функции угла рассеяния молекул в многокомпонентных газовых средах/ И.В. Анисимова, Ю.Ф. Гортышов, В.Н. Игнатьев // Известия вузов. Авиационная техника. -2015. -№2. -С.48-53.

I.V. Anisimova, Yu.F. Gortyshov, V.N. Ignat`ev. Function evaluation of the molecular scattering angle in multicomponent gaseous medium// Russian Aeronautics (Iz VUZ). -2015. -Vol. 58. -No 2. -P.187-192.

16. Анисимова, И.В. К проблеме снижения гидродинамического сопротивления в устройствах энергоустановок/ И.В. Анисимова, Ю.Ф. Гортышов, В.Н. Игнатьев // Известия вузов. Авиационная техника. -2016. -№3. -С. 111-115.

I.V. Anisimova, YU.F. Gortyshov and V.N. Ignat`ev. On a problem of reducing the hydrodynamic drag in the pipelines of power plants// Russian Aeronautics (Iz VUZ). 2016. 59(3). -P.414-418.

Свидетельства о регистрации программ ЭВМ:

17. Анисимова, И.В. Определение минимального положительного корня нелинейного уравнения из кинетической теории газа, применяющегося при вычислении коэффициентов переноса в реагирующих газовых потоках/ И.В. Анисимова// Роспатент (ФИПС), 16 мая 2011 г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011613799.

18. Анисимова, И.В. Вычисление значений функции угла рассеивания молекул в газах при их взаимодействии./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина//Роспатент (ФИПС), 25 января 2011 г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011610952.

19. Анисимова, И.В. Вычисление значений Ω - приведённых интегралов столкновения молекул / И.В. Анисимова// Роспатент (ФИПС), 25 января 2011 г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011610951.

20. Анисимова, И.В. Вычисление значений приведенных интегралов столкновений молекул в многокомпонентной газовой среде./ И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев// Роспатент (ФИПС), 11 октября 2013 г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013619624.

21. Анисимова, И.В. Расчет значений функции угла рассеивания взаимодействующих молекул в газах с учетом влияния температурных полей /

И.В. Анисимова// Роспатент (ФИПС), 25 января 2013 г. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013619627.

Монографии:

22. Анисимова, И.В. Вычислительные технологии процессов переноса газов/ Анисимова И.В., Игнатьев В.Н. –Казань: КНИТУ-КАИ, 2012. -236 с.

23. Абылгазиев, Ж.С. Итоги науки. Том 2. -Избранные труды Международного симпозиума по фундаментальным и прикладным проблемам науки/ Абылгазиев Ж.С., Анисимова И.В., Бакасова А.Б. и др. -М.: РАН, 2014. - 186 с.

Сборники трудов и материалы конференций:

24. Анисимова, И.В. Об одном эффективном алгоритме численного моделирования течения в цилиндрической топке./ И.В. Анисимова // В сб. Труды Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН В.Е. Алемасова. – Казань: АБАК. 1999. С.34-37.

25. Анисимова, И.В. Влияние способов линеаризации на обусловленность матриц при численном решении нелинейных сингулярно-возмущенных задач./ И.В. Анисимова // Сб. тезисов докладов VIII четаевской международной конференции «Аналитическая механика, устойчивость и управление движением». КГТУ им. А.Н. Туполева. –Казань. - 2002. - С.85.

26. Анисимова, И.В. Численное моделирование двухфазного закрученного потока в цилиндрической трубе/ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Сб. тезисов докладов VIII четаевской международной конференции «Аналитическая механика, устойчивость и управление движением». КГТУ им. А.Н. Туполева. – Казань. - 2002. - С.254.

27. Анисимова, И.В. О плохой обусловленности разностных уравнений при численном моделировании течений вязкой жидкости./ И.В. Анисимова // Сб. тезисов докладов VIII четаевской международной конференции «Аналитическая механика, устойчивость и управление движением». КГТУ им. А.Н. Туполева. – Казань. - 2002. - С.255.

28. Анисимова, И.В. Конвективный перенос тепла в трубе с внутренними источниками тепла./ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Сб. материалов XVII Всероссийской межвузовской научно-технической конференции «Электромеханические и внутрикамерные процессы в энергетических установках, струйная акустика и диагностика, приборы и методы контроля природной среды, веществ, материалов и изделий». Часть 2. Казанское высшее артиллерийское командное училище (военный институт) им. Маршала артиллерии М.Н. Чистякова. – Казань. - 2005. -С. 194-195.

29. Анисимова, И.В. Компьютерное моделирование двумерного горения углеводородных топлив на основе квазиглобального механизма реакции./ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Сб. тезисов докладов международной научно-технической конференции, посвященной 1000-летию Казани. КГТУ им. А.Н. Туполева «Рабочие процессы и технология двигателей». – Казань. -2005. - С. 296-299.

30. Анисимова, И.В. Компьютерная аэродинамика и её влияние на организацию рабочих процессов в двигателях./ И.В. Анисимова, А.Ф. Дрегалин, В.Н. Игнатьев // Сб. тезисов докладов международной научно-технической конференции, посвященной 1000-летию Казани. КГТУ им. А.Н. Туполева «Рабочие процессы и технология двигателей». – Казань. - 2005. - С.300-303.

31. Анисимова, И.В. О пакете прикладных программ для вычисления коэффициентов переноса газовых смесей при расчете задач аэротермохимии в двигателях./ И.В. Анисимова, В.Н. Игнатьев, Р.Р. Таксеитов // Сб. тезисов докладов международной научно-технической конференции, посвященной 1000-летию Казани. КГТУ им. А.Н. Туполева «Рабочие процессы и технология двигателей». – Казань. - 2005. - С304-307.

32. Анисимова, И.В. Нестационарный тепломассоперенос в трубе с пульсирующим внутренним источником тепла/ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Сб. тезисов докладов международной научно-технической конференции, посвященной 1000-летию Казани. КГТУ им. А.Н. Туполева «Рабочие процессы и технология двигателей». – Казань. - 2005. – С.308-311.

33. Анисимова, И.В. Моделирование горения углеводородного топлива на основе квазиглобального механизма химической реакции.// Материалы международной молодежной научной конференции, посвященной 1000-летию города Казани «Туполевские чтения». Том 2. –Казань.- 2005. - С.69-70.

34. Анисимова, И.В. Решения задачи о движении частиц в дисперсном газовом потоке./ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Материалы международной молодежной научной конференции, посвященной 1000-летию города Казани «Туполевские чтения». Том 2. –Казань.- 2005. - С.70-71.

35. Анисимова, И.В. Численное моделирование двумерного пламени./ И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев, Р.Р. Таксеитов // В сб. трудов «Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования, образование» под редакцией А.П. Кудинова, Г.Г. Матвиенко, В.Ф. Самохина второй международной научно-практической конференции «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности». -Санкт-Петербург. - 2006. - Том 4. -С.74-77.

36. Анисимова, И.В. О расчете температурных полей в движущейся вязкой жидкости с внутренними источниками тепла./ И.В. Анисимова, А.А. Егоров, А.В. Игнатьев // В сб. трудов «Высокие технологии, фундаментальные и прикладные

исследования, образование» под редакцией А.П. Кудинова, Г.Г. Матвиенко, В.Ф. Самохина второй международной научно-практической конференции «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности». - Санкт-Петербург. - 2006. - Том 4. - С.72-74.

37. Анисимова, И.В. Компьютерное моделирование температурных полей в движущейся псевдопластической жидкости. // Материалы международной научно-практической конференции «Авиакосмические технологии и оборудование». – Казань. - 2006. - С. 136-137.

38. Анисимова, И.В. О поведении твердых частиц в потоке цилиндрического канала. / И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // Материалы докладов национальной конференции по теплоэнергетике НКТЭ. Исследовательский центр проблем энергетике КазНЦ РАН. РФФИ. - Казань. -2006. –Т1. - С. 113-116.

39. Анисимова, И.В. О расчете температурных полей в движущейся вязкой псевдопластической жидкости с внутренними источниками тепла/ И.В. Анисимова, А.А. Егоров, А.В. Игнатьев// Материалы докладов национальной конференции по теплоэнергетике НКТЭ. Исследовательский центр проблем энергетике КазНЦ РАН. РФФИ. - Казань. -2006. –Т1. - С. 258-261.

40. Анисимова, И.В. Вычисление несобственных интегралов первого рода, используемых в кинетической теории газа. / И.В. Анисимова, А.С. Валетова // В сб. материалов Международной молодежной научной конференции XV Туполевские чтения. - Казань. - 2007. -ТII. -С.76-77.

41. Анисимова, И.В. О методике вычисления коэффициентов переноса на базе уравнения Больцмана. // В сб. материалов XVIII сессии Международной школы по моделям механики сплошной среды. Под редакцией академика Н.Ф. Морозова. Издательство Саратовского университета. - Саратов. - 2007. - С. 36-39.

42. Анисимова, И.В. Динамика твердых частиц в цилиндрических каналах. / И.В. Анисимова, А.В. Игнатьев // В сб. материалов XVIII сессии Международной школы по моделям механики сплошной среды. Под редакцией академика Н.Ф. Морозова. Издательство Саратовского университета. – Саратов. - 2007. - С. 39-41.

43. Анисимова, И.В. Исследование поведения подынтегральной функции в приведенном интеграле столкновений частиц газовой смеси. / И.В. Анисимова, А.С. Валетова // В сб. трудов Международной молодежной научной конференции XVI Туполевские чтения. – Казань. -2008. - ТII. - С.110-111.

44. Анисимова, И.В. К теории движения частиц в вязком потоке. / И.В. Анисимова, А.С. Валетова // В сб. тезисов докладов 2-й Всероссийской конференции ученых, молодых специалистов и студентов «Информационные технологии в авиационной и космической технике-2009». -Москва. -2009. -С.96.

45. Анисимова, И.В. О гидродинамике твердых частиц в неньютоновской среде. / И.В. Анисимова, А.С. Валетова, А.В. Игнатьев // В сб. тезисов докладов 8-

й международной конференции «Авиация и космонавтика – 2009», посвящённой 80-летию МАИ. -Москва. - 2009. -С.71.

46. Анисимова, И.В. Об анализе обусловленности матриц в задачах тепломассопереноса и модульный алгоритм вычисления их характеристик на параллельных кластерах./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев// В материалах докладов VII школы-семинара молодых ученых и специалистов академика РАН В.Е. Алемасова «Проблемы тепломассообмена и гидродинамики в энергомашиностроении» - Казань. -2010. - С.249-251.

47. Анисимова, И.В. Адаптивные методы вычисления значений сечения рассеивания взаимодействующих молекул в газах/ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев// В материалах докладов VII школы-семинара молодых ученых и специалистов академика РАН В.Е. Алемасова «Проблемы тепломассообмена и гидродинамики в энергомашиностроении» - Казань. -2010. - С.129-131.

48. Анисимова, И.В. О механизмах химических реакций горения и их оптимизации./ И.В. Анисимова, А.С. Валетова // В материалах Международной молодежной научной конференции XVIII Туполевские чтения. – Казань. -2010. - ТII. -С.165-166.

49. Анисимова, И.В. Компьютерный анализ устойчивости кинетики химических реакций./ И.В. Анисимова, А.С. Валетова // В материалах Международной молодежной научной конференции XVIII Туполевские чтения. – Казань. - 2010. -ТII. -С.231-232.

50. Анисимова, И.В. О компьютерном моделировании химических реакций горения в энергоустановках/ И.В. Анисимова, А.С. Валетова, В.Н. Игнатьев // В сб. докладов международной научно-практической конференции «Современные технологии и материалы – ключевое звено в возрождении отечественного авиастроения». - Казань. - 2010. -Т1. - С. 340-348.

51. Анисимова, И.В. О параллельных алгоритмах расчета кинетики горения на кластерах и её оптимизации./ И.В. Анисимова, А.С. Валетова, В.Н. Игнатьев// Материалы докладов VII школы-семинара молодых ученых и специалистов академика РАН В.Е. Алемасова «Проблемы тепломассообмена и гидродинамики в энергомашиностроении». - Казань. - 2010. -С.374-375.

52. Анисимова, И.В. Непрерывность функции угла рассеивания взаимодействующих молекул в газах./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина // В Материалах Международной молодежной научной конференции XVIII Туполевские чтения. – Казань. - 2010. - Т1. -С.126-127.

53. Анисимова, И.В. Об алгоритме параллельных вычислений на кластере характеристик квадратных матриц./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина // В

Материалах Международной молодежной научной конференции XVIII Туполевские чтения. – Казань. - 2010. - Т1. -С.127-128.

54. Анисимова, И.В. О методах вычисления квадратур с быстро осциллирующим характером, использующихся для определения значений коэффициентов переноса”.8-ая всероссийская конференция./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев // В материалах 8-й всероссийской конференции “Сеточные методы для краевых задач и приложения”. -Казань. -2010. -С.83-86.

55. Анисимова, И.В. О математическом моделировании коэффициентов переноса в слабо разряженной газовой среде./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев // В материалах Международной научно-практической конференции “Авиакосмические технологии и оборудование.Казань-2010”. -Казань. - 2010. - С. 77-78.

56. Анисимова, И.В. Вычислительные технологии расчета коэффициентов переноса в газовой среде./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев // В трудах конференции имени Н.И. Лобачевского. Математический центр имени Н.И. Лобачевского. – Казань. -2010. - Т39. - С.168-170.

57. Анисимова, И.В. Компьютерные алгоритмы вычисления интеграла с быстро осциллирующей подынтегральной функцией./ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина // В сб. трудов 18-ой Всероссийской межвузовской научно-технической конференции «Микроэлектроника и информатика». – Москва (Зеленоград). - 2011. - С.121.

58. Игнатьев, В.Н. Численные методы вычислений интегралов с быстро осциллирующей подынтегральной функцией./ В.Н. Игнатьев, Р.Р. Гиниятуллина, И.В. Анисимова// В сб. материалов всероссийской конференции по вычислительной математике КВМ-2011. - Новосибирск. - 2011. -С.68-72.

59. Анисимова, И.В. Вычисление среднего сечения угла рассеивания взаимодействующих молекул на основе квадратур Гаусса / Анисимова И.В., Гиниятуллина Р.Р., Игнатьев В.Н., // Материалы III международной научно-практической конференции «Теория и практика в физико-математических науках». – Москва: Спутник. -2012. С.4-8.

60. Анисимова, И.В. О квадратурах Гаусса и алгоритме вычисления значений узлов и весов/ Анисимова И.В., Гиниятуллина Р.Р., Игнатьев В.Н., // Материалы III международной научно-практической конференции «Теория и практика в физико-математических науках». – Москва: Спутник. . -2012. -С.9-14.

61. Анисимова, И.В. Квадратуры Гаусса-Кристоффеля для вычисления интегралов с быстро осциллирующими подынтегральными функциями/ И.В. Анисимова, Р.Р. Гиниятуллина, В.Н. Игнатьев// Материалы Девятой Всероссийской конференции «Сеточные методы для краевых задач и приложения». - Казань: Отечество. -2012. -С.28-32.

62. Анисимова, И.В. Транспортные характеристики многокомпонентных газовых сред/Анисимова И.В., Игнатьев В.Н.//В сб. докладов международной научно-технической конференции «Проблемы и перспективы развития авиации, наземного транспорта и энергетики «АНТЭ-2013». - Казань: КНИТУ-КАИ. - 2013. С.9-13.

63. Анисимова, И.В. О параллельных алгоритмах вычисления квадратур для коэффициентов переноса в задачах тепломассопереноса /Анисимова И.В., Игнатьев В.Н.//В сб. докладов международной научно-технической конференции «Проблемы и перспективы развития авиации, наземного транспорта и энергетики «АНТЭ-2013». - Казань: КНИТУ-КАИ. - 2013. -С.512-517.

64. Анисимова, И.В. О потенциале $(2(n+3),6)$ описывающем взаимодействие молекул в многокомпонентных средах/ Анисимова И.В., Игнатьев В.Н.// Материалы IX Международного симпозиума, посвященного 90-летию со дня рождения академика В.П. Макеева. –Москва. -2014. Том 1.- С.100-106.

65. Анисимова, И.В. К кинетической теории газов./ Анисимова И.В., Игнатьев В.Н. // Материалы V международной научно-практической конференции «21 century: fundamental science and technology V» North Charleston, USA. - 2014. - Том 2. -С.140-144.

66. Анисимова, И.В. К теории уравнений Больцмана./ Анисимова И.В., Игнатьев В.Н.// В сб. докладов XI Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. -Казань. -2015. -С.164-165.

67. Анисимова, И.В.О механизме снижения сопротивления в устройствах энергоустановок./ Анисимова И.В., Игнатьев В.Н., Фирсов А.А. // В сб. статей международной научно-практической конференции «Современный взгляд на будущее науки». Челябинск: РИО МЦИИ «ОМЕГА САЙНС». -2015. Т1. -С.3-4.

68. Анисимова, И.В. О снижении гидродинамического сопротивления в трубопроводах энергоустановок./ Анисимова И.В., Игнатьев В.Н.//Актуальные проблемы механики сплошной среды. К 25-летию ИММ КазНЦ РАН. Сборник научных трудов. – Казань: «Фэн» АН РТ. -2016. - С.421-432.

Подписано к печати 22.03.2017 г.
Формат 60×84 1/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.
Усл.пч.л. 2,79. Тираж 120 экз. Заказ Б 13.

Издательство КНИТУ-КАИ
420111, Казань, К.Маркса, 10