

ISSN 0044-4669

Том 63, Номер 12

Декабрь 2023



ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

www.sciencejournals.ru



СОДЕРЖАНИЕ

Том 63, номер 12, 2023 год

ЮБИЛЕЙ

Девяностолетний юбилей доктора физико-математических наук,
профессора Евгения Михайловича Шахова

В. В. Аристов, В. А. Титарев

1939

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Численный анализ течения разреженного газа через систему коротких каналов

И. В. Воронич, В. А. Титарев

1942

Эволюция формы облака газа при импульсном лазерном испарении в вакуум:
прямое статистическое моделирование и решение модельного уравнения

А. А. Морозов, В. А. Титарев

1960

Численный и теоретический анализ модельных уравнений
для многокомпонентного разреженного газа

А. А. Фролова

1973

О моделировании струи разреженной плазмы на основе кинетических уравнений

М. В. Абгарян, А. М. Бишаев, В. А. Рыков

1984

Алгоритм параллелизации по данным для метода прямого статистического
моделирования течений разреженного газа на основе технологии OpenMP

Н. Ю. Быков, С. А. Фёдоров

1993

Неклассический перенос тепла в микроканале и одна задача
для решеточных уравнений Больцмана

О. В. Ильин

2016

Исследование неклассического переноса с применением численных
методов решения уравнения Больцмана

В. В. Аристов, И. В. Воронич, С. А. Забелок

2025

Ускорение решения уравнения Больцмана с помощью контроля
величины вкладов в интеграл столкновений

Ф. Г. Черемисин

2035

Трехмерное моделирование высокоскоростного движения тела
в трубе с разреженным газом

А. Н. Якунчиков, А. Р. Юлдашева

2051

Об одном методе расчета нестационарного теплообмена газового потока
и твердого тела

В. Т. Жуков, Н. Д. Новикова, О. Б. Феодоритова

2066

Формирование особенности в несжимаемом пограничном слое
на движущейся вверх по потоку стенке при заданном внешнем давлении

С. И. Безродных, В. Б. Заметаев, Тэ Ха Чжун

2081

Stability Analysis of Polymerization Fronts

Y. Joundy, H. Rouah, A. Taik

2094

Generalisation of the Penalised Wall Function Method for the Simulation of Turbulent Flows with Unfavourable Pressure Gradients

O. V. Vasilyev, N. S. Zhdanova

2095

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Исследование дефектов и построение гармонических сеток в областях с углами и выемками

С. И. Безродных, В. И. Власов

2096

Projection Grid Schemes on Irregular Grid for Parabolic Equation

O. G. Olkhovskaya

2130

Конформное отображение Z-образной области

С. Л. Скороходов

2131

Study of the Gardner Equation with Homogeneous Boundary Conditions Via Fourth Order Modified Cubic B-Spline Collocation Method

S. Dahiya, A. Singh, S. P. Singh

2155

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ

Density Function-Based Trust Region Algorithm for Approximating Pareto Front of Black-Box Multiobjective Optimization Problems

K. H. Ju, Y. B. O, K. Rim

2156

ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

A Uniformly Convergent Numerical Method for Singularly Perturbed Semilinear Integro-Differential Equations with Two Integral Boundary Conditions

B. Gunes, M. Cakir

2157

A Novel Fitted Approach for The Solution of a Class of Singularly Perturbed Differential-Difference Equations Involving Small Delay in Undifferentiated Term

Javed Alam, Hari Shankar Prasad, Rakesh Ranjan

2158

УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Stability and Error Estimates of High Order Bdf-Ldg-Discretizations for the Allen–Cahn Equation

Fengna Yan, Ziqiang Cheng

2159

Multipole Representation of the Gravitational Field for Asteroid (16) Psyche

V. I. Nikonov

2160

ЮБИЛЕЙ

УДК 51(092)

*Этот номер подготовлен в связи с 90-летием со дня рождения профессора
Е.М. Шахова и состоит в основном из статей его учеников, сотрудников и коллег*

**ДЕВЯНОСТОЛЕТНИЙ ЮБИЛЕЙ
ДОКТОРА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК,
ПРОФЕССОРА ЕВГЕНИЯ МИХАЙЛОВИЧА ШАХОВА**

© 2023 г. В. В. Аристов^{1,*}, В. А. Титарев^{1,**}

¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: aristovvl@yandex.ru

**e-mail: vladimir.titarev@frccsc.ru

Поступила в редакцию 11.06.2023 г.

Переработанный вариант 15.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

4 февраля 2023 г. исполнилось 90 лет доктору физико-математических наук, профессору Евгению Михайловичу Шахову — одному из лидеров современной механики разреженного газа.

DOI: 10.31857/S0044466923120323, EDN: CBJKWH



Евгений Михайлович Шахов окончил мехмат МГУ им. М.В. Ломоносова и с самого начала своей деятельности сочетал в своих работах способности механика и математика, что прямо соответствовало факультету, на котором он учился. Е.М. Шахов начал работать в группе выдающегося ученого, д.ф.-м.н., профессора А.А. Никольского в Институте механики АН СССР (Никольский был тогда директором института). Это отчасти предопределило направление дальнейших исследований Е.М. Шахова — математические и физические проблемы в области кинетической теории, динамики разреженных газов. В конце 50-х, начале 60-х годов и в нашей стране, и во всем мире был небывалый интерес к вопросам, связанным с космонавтикой, высотной аэромеханикой, что было во многом связано с запуском первого искусственного спутника Земли. При решении таких задач динамика разреженных газов, методы решения уравнения Больцмана потребовали тщательного изучения и связи академических задач с практическими. Что требовало углубленного изучения этой весьма сложной области математической физики.

В 1965 г. Е.М. Шахов вместе с рядом других сотрудников перешел в Вычислительный центр АН СССР, и с тех пор вся его научная работа была связана с этим институтом. Директор ВЦ, академик АН СССР А.А. Дородницын всегда поддерживал исследования в области кинетической теории газов, понимая при этом, какие сложности приходится преодолевать в продвижении здесь, это касается в равной степени и проблем механики, и вычислительной математики. В конце 60-х — начале 70-х годов Е.М. Шахов выполнил цикл работ, которые выдвинули его в первые ряды специалистов в кинетической теории в нашей стране и за рубежом. Построение математических методов шло тогда по трем направлениям: прямое интегрирование уравнения Больцмана, что требовало больших математических усилий и компьютерных затрат, статистическое моделирование (метод Берда и др.), точность которых была тогда невелика, и развитие более простых модельных уравнений, что делало решение сложных задач обозримым.

Е.М. Шахов выбрал третье направление и добился здесь больших успехов. *S*-модельное кинетическое уравнение, которое он предложил, исследовал и применил, получило признание во всем мире. До сих пор его используют в различных научных лабораториях. В 1974 г. он защитил докторскую диссертацию, тогда же вышла его монография “Метод исследования движений разреженного газа”.

На основе этого уравнения и различных его модификаций Е.М. Шахов вместе с учениками и последователями исследовал многочисленные сложные течения разреженного газа. При этом им были развиты и эффективные численные методы, которые также широко применяются. Среди изученных им, под его руководством и в соавторстве как классические задачи динамики разреженных газов, так и принципиально новые: структура ударной волны, задача Куэтта и задача о теплопередаче, обтекание простых и сложных тел сверхзвуковым потоком газа, использование специальных процедур для изучения гиперзвуковых течений, когда температурой фона фактически можно пренебречь, нелинейное рассеяние пучков, течение в каналах различной длины и выявление новых эффектов в них, истечение потоков газа в вакуум и затопленное пространство и многие другие задачи. В последние годы с помощью его подхода были получены и различные приложения.

Научные труды Е.М. Шахова оказали и продолжают оказывать важное влияние на развитие кинетической теории газов.

Е.М. Шахов вел и успешную преподавательскую работу, являясь профессором МГТУ им. Н.Э. Баумана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Шахов Е.М.* Метод исследования движений разреженного газа. М.: Наука, 1974.
2. *Шахов Е.М.* Уравнения Больцмана и моментные уравнения в криволинейных координатах // Известия РАН. МЖГ. 1967. № 2.
3. *Шахов Е.М.* О приближенных кинетических уравнениях в теории разреженного газа // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 1. С. 156–161.
4. *Шахов Е.М.* Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 5. С. 142–145.
5. *Шахов Е.М.* Поперечное обтекание пластины разреженным газом // Изв. АН СССР. МЖГ. 1972. № 6. С. 106–113.
6. *Жук В.И., Шахов Е.М.* Разлет плоского слоя разреженного газа в вакуум // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1973. Т. 13. № 4. С. 984–997.

7. Жук В.И., Рыков В.А., Шахов Е.М. Кинетические модели и задача о структуре ударной волны // Известия Академии наук СССР. Механ. жидкости и газа. 1973. № 4. С. 135.
8. Шахов Е.М. Решение осесимметричных задач теории разреженных газов методом конечных разностей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1974. Т. 14. № 4. С. 970–981.
9. Aristov V.V., Shakhov E.M. Intense explosion in rarefied gas // Rarefied Gas Dynamics. Paris: Commissariat a l'Energie Atomique. 1978. V. 1. P. 65–73.
10. Аристов В.В., Шахов Е.М. Течение разреженного газа, вызванное сильным точечным выбросом конечной массы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1985. Т. 25. № 7. С. 1066–1077.
11. Шахов Е.М. Колебания спутника-зонда, буксируемого на нерастяжимой нити в неоднородной атмосфере // Прикладная матем. и механ. 1988. № 4.
12. Аристов В.В., Шахов Е.М. Нелинейное рассеяние импульсного молекулярного пучка в разреженном газе // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1987. Т. 27. № 2. С. 159–164.
13. Бишаев А.М., Лимар Е.Ф., Попов С.П., Шахов Е.М. Вход свободно расширяющейся газовой струи в круговое отверстие в поперечной преграде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1989. Т. 29. № 2. С. 277–285.
14. Жук В.И., Шахов Е.М. О колебаниях спутника-зонда малой массы под действием аэродинамических и гравитационных сил // Космические исследования. 1990. Т. 28. № 6. С. 820.
15. Ларина И.Н., Рыков В.А., Шахов Е.М. Испарение с поверхности и истечение пара через плоский канал в вакуум // Изв. РАН. МЖГ. 1996. № 1. С. 150–158.
16. Шахов Е.М. Осесимметричная нелинейная задача о стационарном течении разреженного газа в трубе кругового сечения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1996. Т. 36. № 8. С. 169–179.
17. Титарев В.А., Шахов Е.М. Сверхзвуковое течение разреженного газа за задней кромкой гладкой пластины // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2000. Т. 40. № 3. С. 483–494.
18. Титарев В.А., Шахов Е.М. Численное исследование нестационарного испарения и теплоотдачи с поверхности сферы // Изв. РАН. МЖГ. 2005. № 1. С. 181–192.
19. Рыков В.А., Титарев В.А., Шахов Е.М. Структура ударной волны в двухатомном газе на основе кинетической модели // Изв. РАН. МЖГ. 2008. Т. 43. № 2. С. 171–182.
20. Рыков В.А., Титарев В.А., Шахов Е.М. Разреженное течение Пуазейля в трубе эллиптического или прямоугольного поперечного сечения // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2011. № 3. С. 147–159.
21. Titarev V.A., Shakhov E.M. Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // Vacuum, Special Issue "Vacuum Gas Dynamics". 2012. V. 86. № 11. P. 1709–1716.
22. Титарев В.А., Шахов Е.М. Концевые эффекты при истечении разреженного газа через длинную трубу в вакуум // Известия РАН. Механ. жидкости и газа. 2013. № 5. С. 146–158.
23. Aristov V.V., Shakhov E.M., Titarev V.A., Zabelok S.A. Comparative study for rarefied gas flow into vacuum through a short circular pipe // Vacuum. 2014. V. 103. P. 5–8.
24. Титарев В.А., Шахов Е.М. Нестационарное течение разреженного газа с ударной волной в канале // Изв. РАН. МЖГ. 2018. № 1. С. 147–155.
25. Титарев В.А., Фролова А.А., Шахов Е.М. Отражение потока разреженного газа от стенки с отверстием и истечение газа в вакуум // Изв. РАН. МЖГ. 2019. № 4. С. 111–118.
26. Titarev V.A., Shakhov E.M., Frolova A.A. Shock wave reflection from a short orifice open to vacuum // Vacuum. March 2019. V. 161. P. 232–241.
27. Азарова О.А., Шахов Е.М. Распространение ударной волны в вязком теплопроводном газе в длинном микроканале // Известия РАН. МЖГ. 2019. № 3. С. 113–122.
28. Титарев В.А., Шахов Е.М. Гибридный метод расчета струи разреженного газа при истечении через очень длинный канал в вакуум // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2020. Т. 60. № 11. С. 1998–2011.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

*Посвящается доктору физико-математических наук профессору
Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием*

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА ЧЕРЕЗ СИСТЕМУ КОРОТКИХ КАНАЛОВ¹⁾

© 2023 г. И. В. Воронич^{1,*}, В. А. Титарев^{1,**}

¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: i.voronich@frcsc.ru

**e-mail: vladimir.titarev@frcsc.ru

Поступила в редакцию 17.05.2023 г.

Переработанный вариант 26.06.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

На основе S-модельного кинетического уравнения рассматривается задача о перетекании разреженного газа из резервуара высокого давления в резервуар низкого давления через плоскую мембрану с конечным числом пор. Кинетическое уравнение решается численно неявным консервативным методом второго порядка точности, реализованным в собственном расчетном коде Несветай. Для переходных и континуальных режимов получены численные решения уравнений Навье—Стокса сжимаемой среды. Изучается зависимость от числа Кнудсена (Kn) расхода газа через систему пор и действующих на стержни мембраны силы при отношении давлений в резервуарах 2 : 1. Описаны особенности поля течения вблизи мембраны и на удалении от нее. Библ. 49. Фиг. 13. Табл. 3.

Ключевые слова: мембрана, канал, кинетическое уравнение, S-модель, разреженный газ, вычислительная аэродинамика, неструктурированная сетка, параллельные вычисления.

DOI: 10.31857/S0044466923120281, **EDN:** RGYZZW

ВВЕДЕНИЕ

Исследование течений разреженных газов в каналах и трубах важно для многих приложений (см. [1, 2]). К настоящему времени хорошо развиты методы расчета для случая бесконечной длины и произвольного поперечного сечения на основе линеаризованных кинетических моделей (см. [3–5]). Много работ посвящено изучению течений разреженного газа через одиночные каналы и трубы конечной длины на основе нелинейных кинетических уравнений либо метода прямого статистического моделирования Монте-Карло (см. [6–12]). Более сложной является задача моделирования течения газа через мембрану высокой проницаемости, представляющую собой объединение большого количества отверстий (пор), так как в расчетах необходимо учитывать взаимное влияние пор.

Спектр применения современных мембран включает фильтрацию жидкостей и газов, разделение газовых смесей и другие приложения (см. [13–15]). Мембраны изготавливаются с использованием различных методов производства и характеризуются рядом геометрических и топологических свойств: долей площади, занятой порами (геометрическая проницаемость), формой пор в поперечном сечении и в продольном направлении, удлинением пор. Использование современных микро- и нанотехнологий привело к увеличению проницаемости мембран за счет миниатюризации их пор и увеличения количества пор на единицу площади (см. [13]. Некоторые из мембран имеют периодические структуры с высокой геометрической проницаемостью и толщиной, сравнимой с размером пор. Иногда в приложениях вместо мембран для создания потока с заданными свойствами используются обычные проволочные сетки (см. [16, 17]).

¹⁾Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования “Высокопроизводительные вычисления и большие данные” (ЦКП “Информатика”) ФИЦ ИУ РАН и МСЦ РАН (г. Москва).

Настоящая работа посвящена прямому численному анализу задачи течения разреженного газа через плоскую мембрану, состоящую из конечного числа коротких пор. Основная цель исследования состоит в изучении влияния степени разреженности газа на расход массы через поры, действующие на стержни мембраны силы и общую картину течения при конечном значении перепада давления. Вычисления проводятся в широком диапазоне чисел Кнудсена. Для больших и умеренных чисел Кнудсена результаты основаны на численном решении кинетического уравнения с S-модельным интегралом столкновений (см. [18, 19]) с помощью собственного трехмерного параллельного решателя (см. Несветай [20]). Для режимов, близких к континуальным, строится решение уравнений Навье—Стокса сжимаемой среды. Полученные результаты для мембраны с конечным числом пор сравниваются с решением для бесконечной системы пор с таким же шагом.

1. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим течение одноатомного разреженного газа через двухмерную мембрану, состоящую из конечного числа пор и разделяющую два полубесконечных резервуара. Вдали от мембраны газ в резервуарах поддерживается при одинаковой температуре и разных давлениях, что обуславливает возникновение течения газа через мембрану. Структура мембраны описывается геометрической проницаемостью h/H и относительной длиной поры L/h . Здесь h — полувисота поры, H — полупериод структуры (шаг решетки пор). Введем декартову систему координат (x, y) с центром в начале центральной поры $x = y = 0$, ось Ox направлена вдоль пор. Границы поры с номером k задаются условиями

$$0 \leq x \leq L, \quad y_k^- \leq y \leq y_k^+, \quad y_k = -h + 2(h + H)k, \quad y_k^+ = y_k^- + 2h, \quad k = 0, \pm 1, \dots \quad (1.1)$$

Центральная пора с номером $k = 0$ соответствует $-h \leq y \leq h$. Полное число пор равно $N = 2k + 1$. Предельный случай $k \rightarrow \infty$ соответствует течению через бесконечную систему каналов (пор). Между порами находятся стержни мембраны высоты $2(H - h)$. Границы стержня с номером k , расположенного между порами k и $k + 1$, выражаются условием

$$0 \leq x \leq L, \quad y_k^+ \leq y \leq y_{k+1}^-.$$

Течение разреженного газа сквозь поры от входного сечения $x = 0$ к выходному сечению $x = L$ обусловлено разницей давлений $p_L - p_R$ между левым резервуаром-источником и правым резервуаром-стоком. Боковые стенки пор и вертикальная стена мембраны поддерживаются при одной и той же постоянной температуре, равной температуре невозмущенного газа на бесконечности $T_w = T_L = T_R$.

Решение задачи зависит от следующих безразмерных величин: отношения давлений p_L/p_R , числа пор N , относительной длины поры L/h , геометрической проницаемости h/H и параметра разреженности δ , который обратно пропорционален числу Кнудсена Kn и определяется по формуле

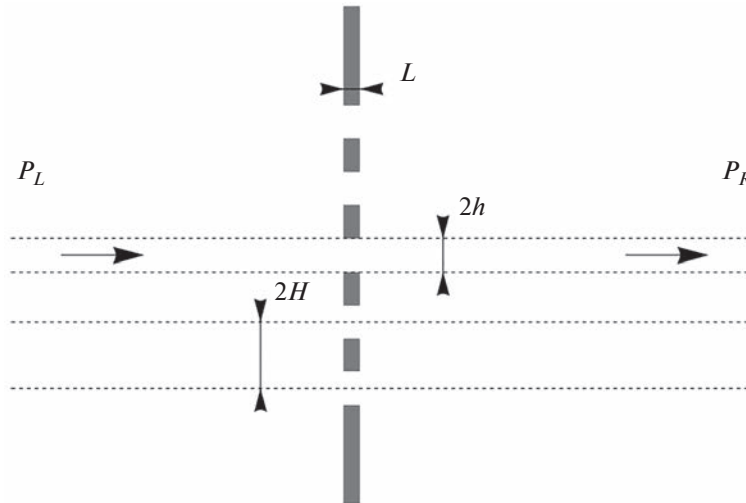
$$\delta = \frac{hp_L}{\mu_L \beta_L}. \quad (1.2)$$

Здесь $\beta_L = \sqrt{2RT_L}$ — наиболее вероятная тепловая скорость, R — газовая константа, μ_L — значение динамической вязкости газа при температуре $T = T_L$. В настоящей работе расчеты ограничиваются случаем умеренного отношения давлений $p_L/p_R = 2$ и коротких пор $L/h = 1$. Число пор принимается равным $N = 5$ ($-2 \leq k \leq 2$), геометрическая проницаемость $h/H = 0.5$. Соответствующая данному выбору схема течения приведена на фиг. 1.

Основными практически интересными характеристиками задачи являются расход газа через поры, действующие на стержни мембраны силы и поле течения в обоих резервуарах. Расход газа через пору с номером l дается формулой

$$\dot{M}_k(x) = \int_{y_k}^{y_k+2h} m n u_x dy, \quad (1.3)$$

где m — масса молекулы.



Фиг. 1. Геометрия задачи и схема течения для $N = 5$, $L/h = 1$, $h/H = 0.5$.

Полная сила, действующая на стержень k , определяется обычным образом: интегрированием по всей поверхности стержня. В расчетах диапазон изменения параметра разреженности охватывает практически важные режимы $0 \leq \delta \leq 200$.

2. РАСЧЕТНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОДНОАТОМНОГО ГАЗА

Численный анализ течения основан на использовании как кинетического, так и континуального подходов. Предполагаем, что среда подчиняется уравнению состояния совершенного газа

$$p = \rho RT, \quad \rho = mn, \quad (2.4)$$

где p — давление, ρ — плотность, R — газовая постоянная, T — температура, n — числовая плотность. Энергия единицы объема газа выражается через внутреннюю энергию единицы массы e , плотность и скорость $\mathbf{u}$ газа — по формуле

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} u_\alpha u_\alpha \right), \quad e = \frac{RT}{\gamma - 1}. \quad (2.5)$$

Здесь предполагается суммирование по повторяющимся греческим индексам. В расчетах приняты значения показателя степени адиабаты $\gamma = 5/3$ и числа Прандтля $Pr = 2/3$. Зависимость вязкости газа μ от температуры предполагается соответствующей модели твердых сфер $\mu \sim \sqrt{T}$, так что

$$\delta = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{Kn} \approx \frac{0.903}{Kn}.$$

Кинетический подход основан на прямом численном решении уравнения Больцмана с S-модельным интегралом столкновений (см. [18, 19]) и используется в диапазоне значений параметра разреженности $0 \leq \delta \leq 50$. S-модель широко использовалась при расчетах течений разреженного газа в каналах и трубах и показала надежные результаты (см., например, [1, 2, 9, 12]). Хотя поставленная двумерная задача допускает существенное упрощение путем введения редуцированных функций распределения (см., например, [21]), в настоящем исследовании переход к редуцированным функциям не применялся, так как в расчетах использовался универсальный трехмерный решатель.

Состояние одноатомного разреженного газа определяется функцией распределения по скоростям $f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$, где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ — пространственная координата, $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ — вектор скорости молекулы, t — время. Макроскопические величины, такие как числовая плот-

ность n , скорость, температура и вектор теплового потока $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$, определяются как интегралы функции распределения скоростей по молекулярной скорости:

$$(n, n\mathbf{u}, E, \mathbf{q}) = \int \left(1, \xi, \frac{1}{2}m\xi^2, \frac{1}{2}m\mathbf{v}\mathbf{v}^2\right) f d\xi, \quad v_i = \xi_i - u_i. \quad (2.6)$$

S-модельное кинетическое уравнение для функции распределения имеет вид (см. [18, 19])

$$\begin{aligned} \partial f / \partial t + \xi_\alpha \partial f / \partial x_\alpha &= \nu(f^{(S)} - f), \quad \nu = p/\mu, \\ f^{(S)} &= f_M \left(1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr})S_\alpha c_\alpha (c^2 - 5/2)\right), \quad f_M = n/(2\pi RT)^{3/2} \exp(-c^2), \\ S_i &= 1/n \int c_i c^2 f d\xi, \quad c_i = v_i/\sqrt{2RT}, \quad c^2 = c_\alpha c_\alpha. \end{aligned} \quad (2.7)$$

На поверхности пор и мембраны предполагается условие диффузного молекулярного рассеяния с полной тепловой аккомодацией к заданной температуре поверхности T_w . Плотность отраженных молекул n_w находится из условия непроницаемости, согласно которому поток массы через стенки равен нулю.

Для анализа течения при переходных и континуальных режимах, помимо кинетического уравнения, используются уравнения Навье—Стокса сжимаемой среды, имеющие вид законов сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla(\mathbf{F} - \mathbf{F}^\nu) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F} = (\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3), \quad \mathbf{F}^\nu = (\mathbf{F}_1^\nu, \mathbf{F}_2^\nu, \mathbf{F}_3^\nu), \quad (2.8)$$

где векторы независимых переменных $\mathbf{U}$, конвективных $\mathbf{F}$ и вязких потоков $\mathbf{F}^\nu$ имеют вид

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k = \begin{pmatrix} \rho u_k \\ \rho u_1 u_k + \delta_{1k} p \\ \rho u_2 u_k + \delta_{2k} p \\ \rho u_3 u_k + \delta_{3k} p \\ (E + p)u_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_k^\nu = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1k} \\ \tau_{2k} \\ \tau_{3k} \\ u_\alpha \tau_{\alpha k} - q_k \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Здесь δ_{ik} — символ Кронеккера. Выражения для вектора потока и тензора вязких напряжений имеют вид

$$\tau_{ik} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \text{div} \mathbf{u} \right), \quad q_k = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k}.$$

Коэффициенты вязкости μ и теплопроводности λ связаны друг с другом через определение числа Прандтля следующей формулой:

$$\lambda = \frac{c_p \mu}{\text{Pr}}, \quad c_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1}.$$

Наконец, на поверхности пор применяется граничное условие прилипания газа и задается фиксированная температура поверхности T_w .

3. ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ

3.1. Метод решения кинетического уравнения

Для решения S-модельного кинетического уравнения (2.7) в настоящей работе используется вариация универсального метода дискретных скоростей, предложенного в [22–25]. Используемый вариант численного метода предназначен для моделирования стационарных течений на неподвижных гексаэдральных расчетных сетках и комбинирует квазимонотонную аппроксимацию оператора переноса второго порядка аппроксимации, консервативную процедуру вычисления входящих в S-модельный интеграл столкновений макропараметров и неявную одношаговую схему продвижения по времени. Полученный таким образом численный метод решения хорошо подходит для расчета всех областей течения, включая области быстрого изменения макроскопических величин и области с разрывами функции распределения.

Подробное описание используемого варианта численного метода можно найти в [23, 24]. Для удобства представления результатов кратко опишем основные детали метода решения. Введем в скоростном пространстве ограниченную расчетную область и сетку с узлами $\xi_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})$, $j = 1, \dots, N_\xi$. Кинетическое уравнение (2.7) переписывается в виде системы из N_ξ уравнений для вектора $f_j = f(t, \mathbf{x}, \xi_j)$ значений функции распределения в центрах скоростных ячеек:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\Xi_\alpha \circ \mathbf{f}) = \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \mathbf{v}(\mathbf{f}^{(S)} - \mathbf{f}). \quad (3.10)$$

Здесь $f_j^{(S)} = f^{(S)}(t, \mathbf{x}, \xi_j)$, Ξ_k — вектор, компонентами которого являются k -компонента молекулярной скорости во всех узлах сетки: $\Xi_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \dots, \xi_{kN_\xi})^T$; через $\circ$ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов: $c = a \circ b$ — вектор с компонентами $c_i = a_i b_i$.

Далее расчетная область в физических переменных разбивается на контрольные объемы (ячейки) V_i , $i = 1, \dots, N_{\text{space}}$, гексаэдральной формы с четырехугольными гранями A_{li} , где l — номер грани. Интегрирование системы (3.10) по ячейке V_i приводит к полудискретной схеме для сеточных значений функции распределения $\mathbf{f}_i$:

$$\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i = -\frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \Phi_{li} + \mathbf{J}_i, \quad \Phi_{li} = \int_{A_{li}} (\xi_{li} \circ \mathbf{f}) dS. \quad (3.11)$$

Здесь компоненты вектора ξ_{li} равны значениям проекции вектора молекулярной скорости на внешнюю единичную нормаль к грани l пространственной ячейки V_i .

Процедура нахождения численного потока Φ_{li} для грани l ячейки V_i состоит из двух шагов. На первом шаге для достижения второго порядка аппроксимации по пространству используется интерполяция вдоль сеточных линий в направлении нормали к грани (см. [26–28]). Значения $\mathbf{f}_{li}$ функции распределения на внутренней стороне каждой грани ячейки V_i вычисляются по формуле

$$\mathbf{f}_{li} = \mathbf{f}_i + \psi(\mathbf{S}_L, \mathbf{S}_R) \Delta_l. \quad (3.12)$$

Здесь $\mathbf{S}_L$ и $\mathbf{S}_R$ — левая и правая оценки наклона решения, Δ_l — расстояние от центра ячейки i до центра грани l , функция ψ — ограничитель наклонов ван Албада, используемый для подавления осцилляций на разрывах. На втором этапе полученные значения функции распределения $\mathbf{f}^-$, $\mathbf{f}^+$ с двух сторон каждой грани сетки используются для нахождения окончательного значения Φ_{li} путем решения задачи Римана для линейного уравнения в направлении, перпендикулярном грани:

$$\Phi_{li} = \frac{1}{2} \xi_{li} \circ [\mathbf{f}^- + \mathbf{f}^+ - \text{sign}(\xi_{li}) \circ (\mathbf{f}^+ - \mathbf{f}^-)] |A_{li}|, \quad (3.13)$$

где $|A_{li}|$ — площадь грани. Для граней сетки, лежащих на границах расчетной области в физическом пространстве, значение $\mathbf{f}^+$ находится путем аппроксимации заданного граничного условия. Для диффузного отражения при заданной температуре поверхности вычисляется плотность отраженных молекул n_w таким образом, чтобы обеспечивалось точное выполнение условия непротекания. Новым элементом численного метода, реализованным в настоящей работе, является специальное граничное условие на границах резервуаров, используемое для поддержания заданных давлений p_L , p_R , что требуется для обеспечения течения газа через мембрану. На каждом временном шаге скорость $\mathbf{u}$ и температура T газа экстраполируются из области течения, тогда как плотность n вычисляется с использованием заданного значения давления (p_L либо p_R) и экстраполированной температуры.

В каждой точке физического пространства макроскопические величины находятся из дискретного аналога условий аппроксимации точного интеграла столкновений S-модельным инте-

гравом, так что обеспечивается выполнение в полудискретной схеме (3.11) условий сохранения массы, импульса и энергии и правильной релаксации потока тепла [29]:

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = m \sum_{j=1}^{N_\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \\ \xi^2 \\ \mathbf{v}\mathbf{v}^2 \end{pmatrix}_j (f^{(S)} - f)_j \omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ \text{Pr} \mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{W} = (n, \mathbf{u}, T, \mathbf{q})^T. \quad (3.14)$$

Система (3.14) восьми нелинейных уравнений решается методом Ньютона. Для ускорения вычислений используется приближенное выражение для Якоби, предложенное в [22]. Отметим, что в специальном случае модели $\text{Pr} = 1$ (кинетическая модель БГК, см. [30]) последние три уравнения для вектора потока тепла $\mathbf{q}$ могут быть опущены, и система (3.14) сводится к использованию только законов сохранения (см. [31, 32]).

Неявная одношаговая схема для продвижения по времени получается из (3.11) обычным образом:

$$\frac{\Delta \mathbf{f}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1}, \quad \Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{f}_i^{n+1} - \mathbf{f}_i^n. \quad (3.15)$$

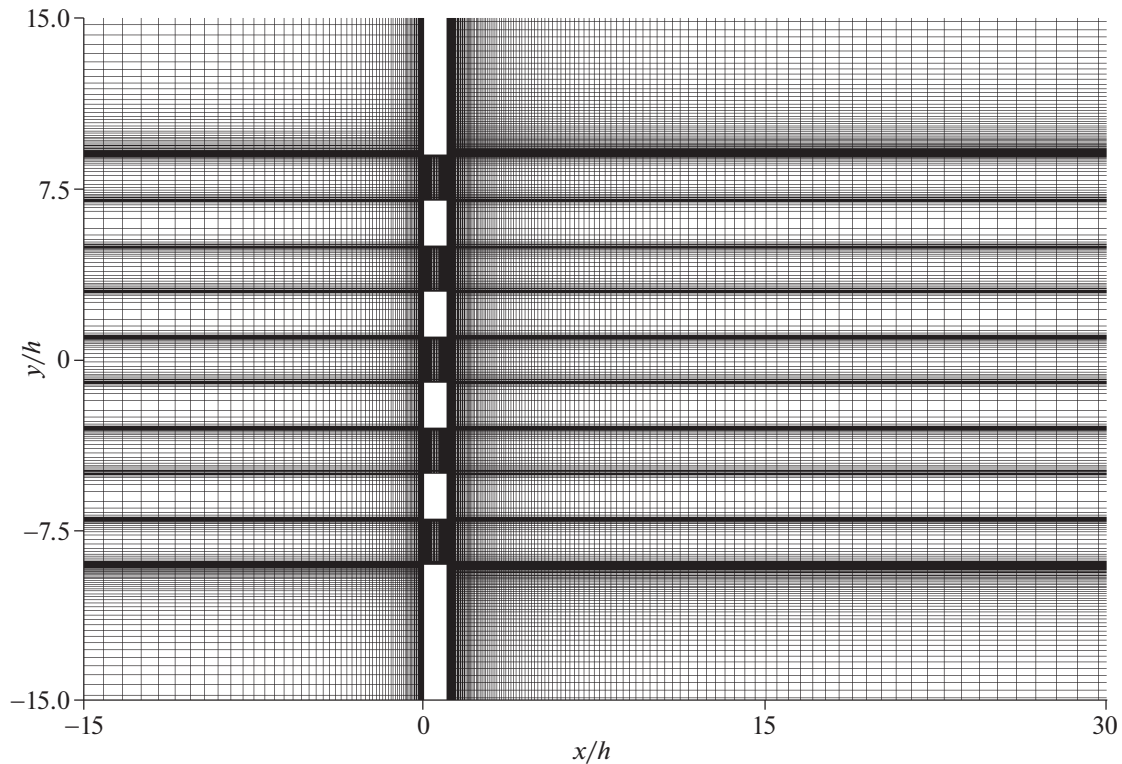
Для вычисления приращений функции распределения по времени $\Delta \mathbf{f}_i$ проводится приближенная линейаризация правой части схемы (3.15). Получающаяся система уравнений решается с помощью подхода LU-SGS, предложенного в [33, 34] для уравнений газодинамики.

Описанный численный метод реализован в параллельном коде (см. [20]), разрабатываемом в ФИЦ ИУ РАН вторым автором. Для проведения вычислений на современных многопроцессорных суперЭВМ с возможностью использования десятков тысяч ядер в пакете Несветай реализована двухуровневая модель параллельных вычислений MPI + OpenMP (см. [35, 36]), которая активно развивается в последние годы в приложении к газодинамическим расчетам (см., например, [37–39]). Примеры успешного применения кода Несветай к расчету различных течений разреженного газа, включающие сравнения с методом прямого численного моделирования, приближенными подходами и экспериментальными данными, можно найти в [9, 11, 12, 23, 25, 40–43].

3.2. Метод решения уравнений Навье–Стокса

Для решения уравнений сплошной среды (2.9) использовался коммерческий пакет Ansys CFX (см. [44]), лицензия на который имеется в ФИЦ ИУ РАН. Вычислительная модель в Ansys строится на основе полных уравнений Навье–Стокса, уравнения состояния, набора численных граничных условий и параметров численного метода. Граничные условия включают в себя условие прилипания на твердых стенках с фиксированной температурой $T = T_w$ и условия на внешних границах. Граничные условия на внешних границах левого резервуара-источника задавались как условие входа с фиксацией полного давления p_0 и температуры T_0 , соответствующих статическим значениям p_L и T_L при текущей скорости потока, при этом величина и направление вектора скорости потока не ограничиваются. Граничные условия на внешних границах правого резервуара-стока заданы с фиксацией среднего по площади статического давления p_R , также без ограничений на вектор скорости. Начальные условия задавались в виде однородных по области распределений скорости $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ и температуры $T = T_L$, а также ступенчатого распределения давления между резервуарами. Для удобства расчета расходов в каналах были введены интерфейсы между расчетными сетками правого и левого резервуаров на входе в каждый канал. Данные интерфейсы не влияют на точность расчета, так как расчетные сетки сопрягаются по принципу 1 : 1 без интерполяции.

Для дискретизации пространственных производных в уравнениях Навье–Стокса используются противопотоковые схемы класса TVD номинально 2-го порядка аппроксимации, с реконструкций внутри элементов с помощью конечноэлементных функций формы (см. [44–46]). Для интегрирования по времени применяется неявный метод Ньютона 1-го порядка аппроксимации и ограничением на шаг по времени через число Куранта на уровне ≈ 100 . Такие методы позволяют достичь достаточно быстрой сходимости к квазистационарному решению за ≈ 5000 – 10000 итераций по времени, обеспечивая разрешение переходных нестационарных процессов.



Фиг. 2. Расчетная сетка в физическом пространстве. Вид в плоскости x – y .

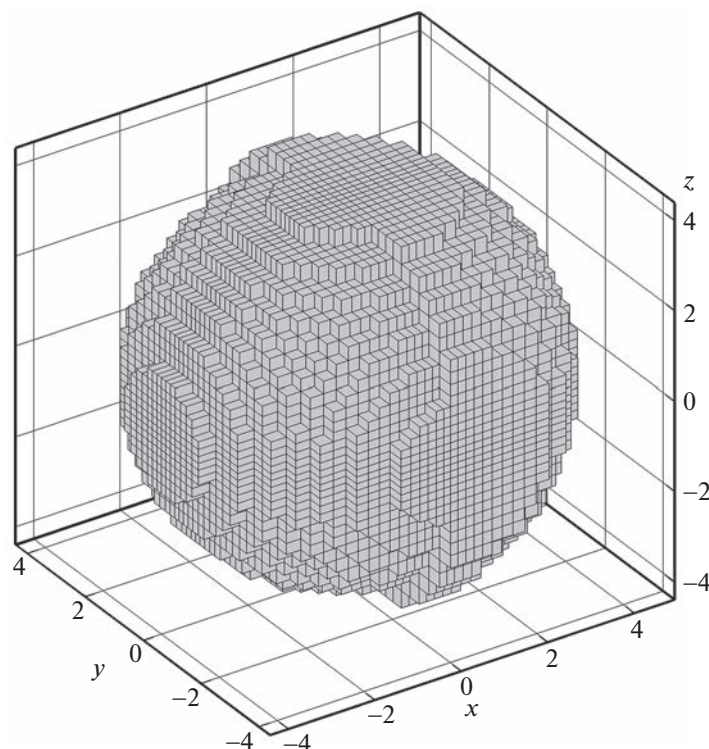
Критерием сходимости расчета является достижение среднеквадратичной невязкой для всех переменных уровня 10^{-5} и ниже в совокупности с установлением интегральных характеристик (расходов через каналы).

3.3. Расчетные сетки и организация вычислений

Для построения расчетных сеток использовалась программа Ansys ICEM CFD (см. [47]). Для учета особенностей решаемой плоской задачи в расчетах использовалась специальным образом построенная пространственная сетка. Как обычно, в расчетах полубесконечные резервуары заменялись расчетной областью конечного размера, в которой использовалась гексаэдральная пространственная сетка. По направлению z вводилось разбиение из одной расчетной точки и выставлялись граничные условия зеркального отражения молекул. Так как при больших значениях параметра разреженности δ течение в правом резервуаре-стоке может становиться нестационарным вследствие распада возникающей составной струи газа, сетка в плоскости x – y соответствовала полной постановке без учета геометрической симметрии.

При решении S-модельного кинетического уравнения (2.7) размер расчетной области, моделирующей резервуар-сток, принимался равным $L \leq x \leq 1000h$, $|y| \leq 500h$. Размер резервуара-источника менее критичен и принимался равным $-150h \leq x \leq 0$, $|y| \leq 100h$. Фигура 2 иллюстрирует особенности пространственной сетки вблизи пор. Размер ячейки по нормали к поверхности поры и вертикальной части мембраны равнялся $0.02h$. Количество ячеек вдоль поры равнялось 35, поперек поры – 25. Общее число ячеек в пространственной сетке равнялось 137 500.

В скоростном пространстве вводилась конечная область интегрирования с размерами $-4\beta_L \leq \xi_x \leq 4.5\beta_L$, $|\xi_y|, |\xi_z| \leq 4\beta_L$. Для большинства режимов течения использовалась равномерная трехмерная сетка с шагом $\Delta\xi \approx 0.45\beta_L$. Однако для режимов с $\delta \leq 5$ более точные результаты для поля течения получаются при использовании неравномерной сетки со сгущением к центру координат. Чтобы уменьшить количество узлов по скорости, углы области были скруглены (см. [48]), так что общее число ячеек по скорости равнялось 3628 для $\delta > 5$ и 23 784 для $\delta \leq 5$.



Фиг. 3. Расчетная сетка в скоростном пространстве, состоящая из 23 784 ячеек.

Фигура 3 иллюстрирует подробную скоростную сетку. Полное число ячеек в шестимерной расчетной сетке равнялось примерно 5×10^8 и 3.2×10^9 соответственно.

Для выхода на установившийся режим течения расчет проводился с большим шагом по времени $\Delta t = 0.2h/\beta_L$, что соответствует числу Куранта порядка 100. Для режимов, соответствующих значениям параметра разреженности $0 \leq \delta \leq 20$, удастся выйти на строго стационарное численное решение за 30 000–100 000 временных шагов. Однако для $50 > \delta > 30$ для получения установившегося расхода массы требуется сделать до 200 000 временных шагов.

Для построения кинетического решения для разных значений δ используется процедура продвижения по δ , организованная следующим образом. Сначала строится решение для $\delta = 1$ как наиболее простого для счета режима. После этого последовательно строятся решения задачи как в сторону свободномолекулярного режима ($\delta = 0.3, 0.1, 0.03$ и 0), так и в сторону режима сплошной среды ($\delta = 5, 10, 20, 30, 50$). При этом в качестве начального условия берется функция распределения, полученная для предыдущего значения δ из списка расчетных режимов.

Основные вычисления проводились с использованием четырех серверов, установленных в ЦКП “Информатика” ФИЦ ИУ РАН. Каждый сервер содержит в себе два CPU Intel Xeon Gold 6338 (32 ядра; 2.0 ГГц; 2 потока на ядро) и 512 Гб оперативной памяти. Для межузловых обменов по MPI используется высокоскоростная сеть InfiniBand EDR с пропускной способностью 100 Гбит/с.

При решении уравнений сплошной среды (2.9) размер расчетной области выбирался приблизительно таким же, как для кинетического уравнения. При этом для аккуратного разрешения пристеночной области при $\delta \geq 100$ шаг сетки по нормали к поверхности пор принимался равным $0.002h$, по нормали к вертикальной стороне мембраны – $0.004h$, число ячеек на полную высоту канала $2h$ равнялось 120. Общее число ячеек в расчетной сетке – 1 264 000. Вычисления проводились на одном сервере ЦКП “Информатика” с использованием 64 ядер.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В качестве примера рассмотрим течение через мембрану одноатомного газа гелия. Молекулярная масса гелия $m = 6.65 \times 10^{-27}$ кг, газовая постоянная $R = 2077.1$ Дж/(кг · К). Для коэффициента динамической вязкости μ принято выражение

$$\mu = \mu_{\text{ref}} \sqrt{\frac{T}{T_{\text{ref}}}},$$

где $T_{\text{ref}} = 273.15$ К, $\mu_{\text{ref}} = 0.000018$ Па с. Поскольку изучаются массовый расход и режим течения как функции параметра разреженности δ , полагаем $T_L = T_{\text{ref}}$, $\mu_L = \mu_{\text{ref}}$ и варьируем значение входного давления p_L с помощью определения параметра разреженности (1.2). Окончательно p_L выражается через параметр разреженности δ и полувысоту поры h по формуле

$$p_L = 0.0192 \frac{\delta}{h}. \quad (4.16)$$

В расчетах принято значение полувысоты поры $h = 0.1$ мм, что является реалистичным значением для тонкой прочной мембраны. Тогда при $\delta = 1$ давление на входе $p_L = 192$ Па.

При анализе результатов удобно использовать безразмерный приведенный массовый расход Q , который определяется как отношение фактического расхода через пору при заданных параметрах задачи к расходу $\dot{M}_{\text{вак}}^0$ при истечении через одиночную щель ($L = 0$) в вакуум ($p_R = 0$) в свободномолекулярном режиме:

$$Q_k(x) = \frac{\dot{M}_k(x)}{\dot{M}_{\text{вак}}^0}, \quad \dot{M}_{\text{вак}}^0 = \frac{hp_L}{\sqrt{\pi}\beta_L}. \quad (4.17)$$

Здесь выражение для $\dot{M}_{\text{вак}}^0$ взято из [49]. Строго говоря, значение расхода массы не должно зависеть от координаты x , однако в расчетах значение $Q_k(x)$ может отклоняться от константы вследствие ошибок дискретизации. В настоящей работе условие постоянства расхода массы вдоль поры выполнялось с точностью не хуже 0.1%.

В табл. 1 приведены рассчитанные значения приведенного расхода массы для каждой поры в зависимости от параметра разреженности. Видно, что зависимость расхода от положения поры мала для режимов, близких к свободномолекулярным, и увеличивается с ростом δ . При $\delta = 200$ отличие расхода массы через центральную пору $k = 0$ от расходов через крайние поры $k = \pm 2$ составляет около 8%. Различие между кинетическим и сплошносредным решениями при $\delta = 30$ и $\delta = 50$ составляет 6 и 4% соответственно. Сравнение расхода через центральную пору Q_0 с решением задачи в случае бесконечного числа пор ($N = \infty$) показывает значительное отличие периодической системы пор от мембраны с $N = 5$ порами. При $\delta < 1$ отличие между результатами может доходить до 50% и уменьшается с ростом величины δ до $\approx 6\%$.

В табл. 2, 3 приведены безразмерные значения действующих на стержни мембраны сил в направлениях x и y в зависимости от параметра разреженности. Видно, что действующая вдоль оси x сила имеет выраженный максимум при $\delta \approx 1$, при этом значения для центральных и боковых стержней отличаются примерно на 2–3%. Значения вертикальной компоненты силы пренебрежимо малы при малых значениях параметра δ , что говорит о малой кривизне линий тока вблизи каналов, но становится заметным при $\delta \geq 1$. При этом вертикальная сила направлена к оси x и прижимает стержни к линии симметрии. При сплошносредных режимах отношение вертикальной силы к горизонтальной силе для крайних стержней $|F_y/F_x| \approx 0.1$. Также заметна потеря симметрии сил с ростом δ . Согласие для сил со сплошносредным режимом заметно лучше, чем для расхода массы. Отличие от результатов для периодической системы пор достаточно заметное во всем диапазоне значений параметра разреженности. При этом для периодической системы каналов сила F_x монотонно падает с ростом значения параметра разреженности δ .

В заключение рассмотрим влияние на поле течения параметра разреженности. На фиг. 4, 5 представлены линии уровня числа Маха и линии тока для $\delta = 1$, полученные решением S-модельного кинетического уравнения (2.7). Хорошо видна стандартная симметричная картина дозвукового течения газа через центральную пору, которая начинает искажаться при переходе к бо-

Таблица 1. Нормированный расход газа как функция параметра разреженности и геометрии задачи: I – решение S-модельного уравнения (2.7), II – решение уравнений Навье–Стокса (2.9)

δ	$N = 5$										$N = \infty$	
	$k = -2$		$k = -1$		$k = 0$		$k = 1$		$k = 2$			
	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II
0.0	0.423		0.424		0.424		0.424		0.423		0.661	
0.01	0.432		0.434		0.435		0.434		0.432		0.657	
0.1	0.486		0.497		0.500		0.497		0.486		0.667	
0.3	0.551		0.576		0.583		0.576		0.551		0.691	
1.0	0.682		0.719		0.727		0.719		0.682		0.778	
5.0	1.040		1.075		1.080		1.075		1.040		1.132	
10.	1.198	1.032	1.241	1.071	1.248	1.074	1.241	1.071	1.198	1.032	1.307	1.101
20.	1.293	1.209	1.343	1.258	1.350	1.266	1.343	1.258	1.292	1.209	1.421	1.311
30.	1.343	1.280	1.395	1.333	1.402	1.340	1.404	1.333	1.343	1.280	1.468	1.394
50.	1.382	1.343	1.441	1.403	1.447	1.411	1.441	1.403	1.382	1.343	1.516	1.475
100.		1.393		1.468		1.475		1.468		1.393		1.551
200.		1.403		1.506		1.520		1.506		1.403		1.600

Таблица 2. Безразмерная сила $F_x/(hp_L)$ на каждом стержне: I – решение S-модельного уравнения (2.7), II – решение уравнений Навье–Стокса (2.9)

δ	$N = 5$								$N = \infty$	
	$k = -2$		$k = -1$		$k = 0$		$k = 1$			
	I	II	I	II	I	II	I	II	I	II
0.0	1.207		1.208		1.208		1.207		0.970	
0.01	1.235		1.239		1.239		1.235		0.970	
0.1	1.399		1.420		1.420		1.399		0.968	
0.3	1.562		1.604		1.604		1.562		0.966	
1.0	1.729		1.776		1.776		1.729		0.954	
5.0	1.703		1.725		1.725		1.703		0.905	
10.	1.592	1.705	1.617	1.725	1.617	1.725	1.592	1.705	0.874	0.906
20.	1.457	1.528	1.487	1.559	1.487	1.559	1.456	1.528	0.851	0.870
30.	1.373	1.416	1.402	1.448	1.402	1.448	1.373	1.416	0.841	0.855
50.	1.313	1.318	1.332	1.340	1.332	1.340	1.313	1.318	0.831	0.840
100.		1.192		1.192		1.192		1.192		0.826
200.		1.113		1.155		1.155		1.113		0.817

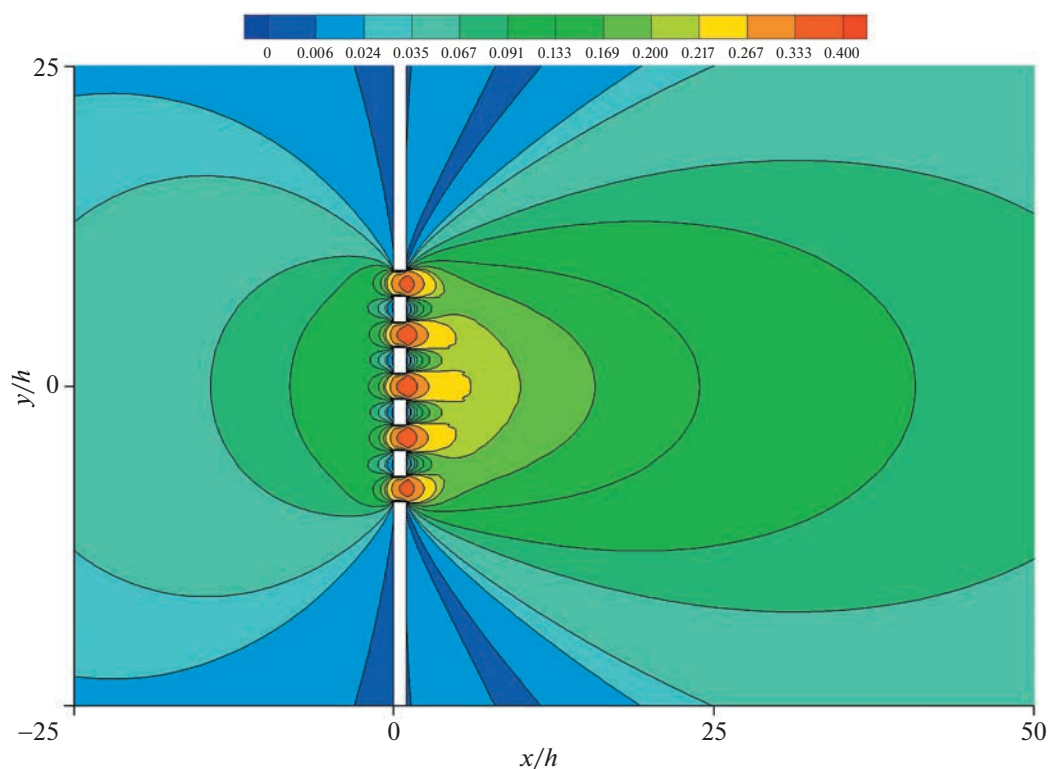
ковым порам. Возвратные течения вблизи пор не формируются. С ростом значения параметра δ картина течения существенно меняется (фиг. 6–9). Ядра формирующихся струй газа становятся сверхзвуковыми. Число Маха достигает значения 1.2 для центральной струи и падает до 1.08 на боковых струях, при этом заметно их притяжение к оси x . За вертикальными частями мембраны между порами формируются области возвратного течения газа.

При дальнейшем росте значения δ течение теряет симметрию вследствие неустойчивости коллективной струи. Так, при $\delta = 200$ потеря симметрии наблюдается сразу на выходе из пор (см. фиг. 10, 11). Наконец, фиг. 12, 13 иллюстрируют мгновенные линии тока в основной области

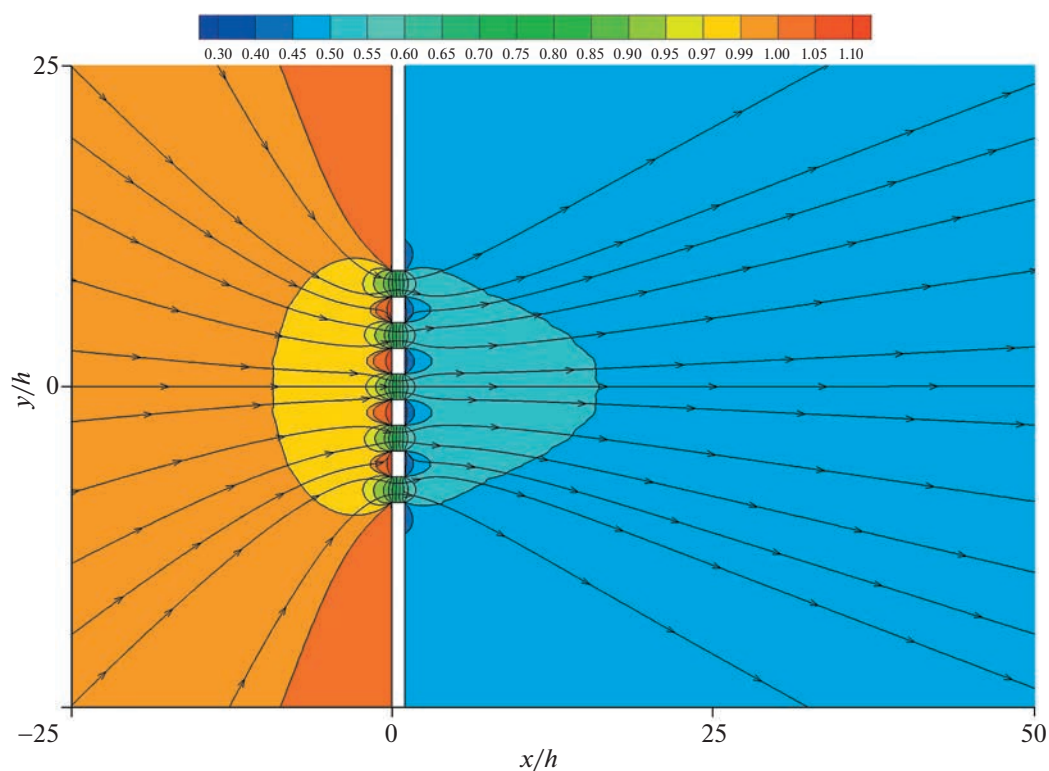
Таблица 3. Безразмерная сила $F_y/(hp_L)$ на каждом стержне: I – решение S-модельного уравнения (2.7), II – решение уравнений Навье–Стокса (2.9)

δ	$N = 5$							
	$k = -2$		$k = -1$		$k = 0$		$k = 1$	
	I	II	I	II	I	II	I	II
0.0	0.000		0.000		0.000		0.000	
0.01	0.000		0.000		0.000		0.000	
0.1	0.000		0.000		0.000		0.000	
0.3	0.005		0.002		−0.002		−0.005	
1.0	0.017		0.005		−0.005		−0.017	
5.0	0.055		0.017		−0.017		−0.055	
10.	0.097	0.071	0.030	0.022	−0.030	−0.022	−0.097	−0.071
20.	0.131	0.115	0.039	0.034	−0.039	−0.034	−0.131	−0.115
30.	0.147	0.133	0.043	0.039	−0.043	−0.039	−0.147	−0.133
50.	0.167	0.153	0.048	0.043	−0.048	−0.043	−0.167	−0.153
100.		0.180		0.049		−0.049		−0.180
200.		0.211		0.058		−0.059		−0.210

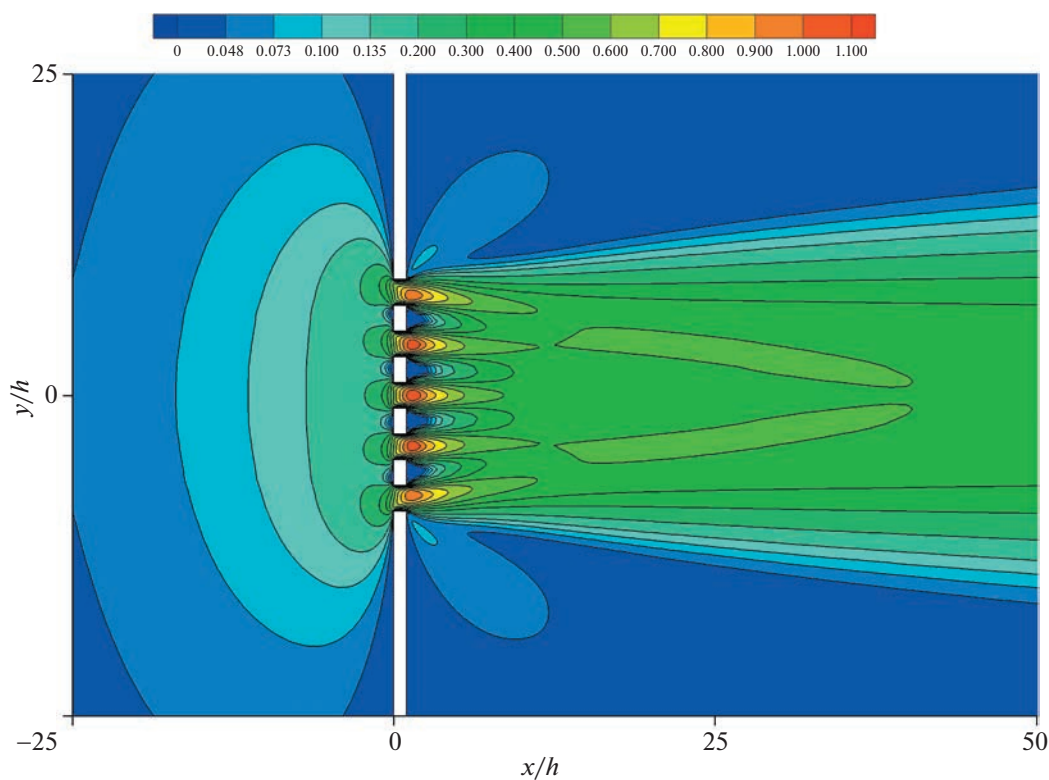
течения вдали от пор. Хорошо видна нестационарная несимметричная картина течения, связанная с двухмерным распадом струи газа. Однако возникающие вдали от мембраны вихревые структуры оказывают слабое влияние на расход газа через поры, который выходит на практически постоянное значение.



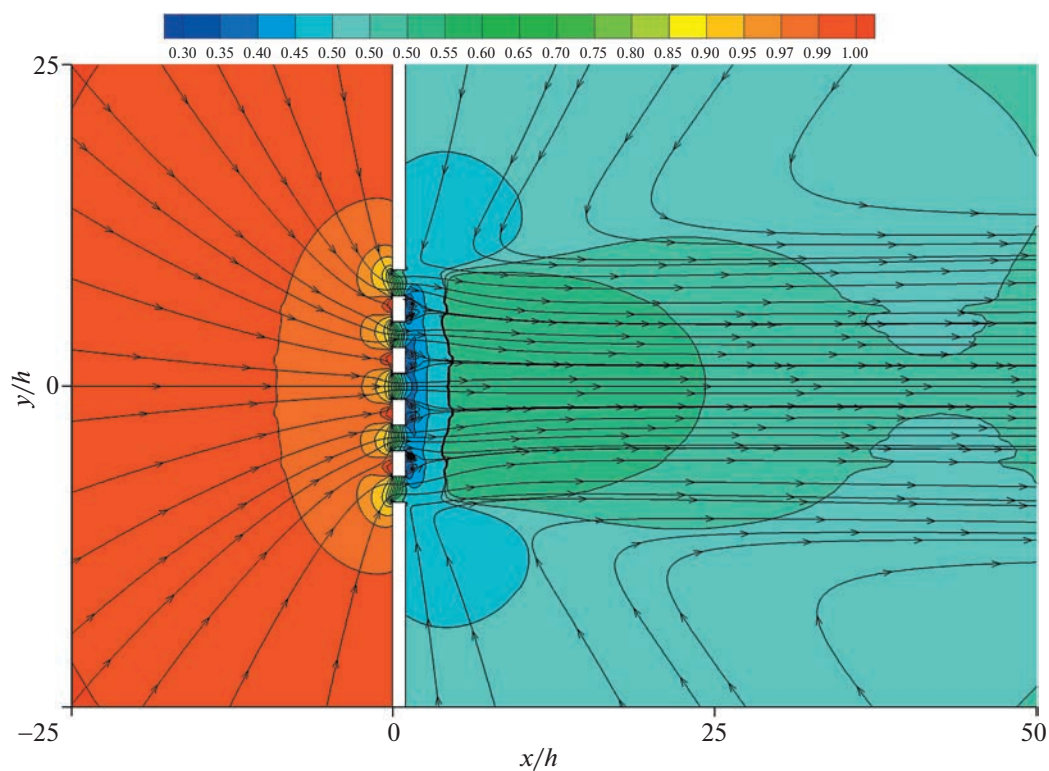
Фиг. 4. Линии уровня числа Маха для $\delta = 1$ вблизи мембраны. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



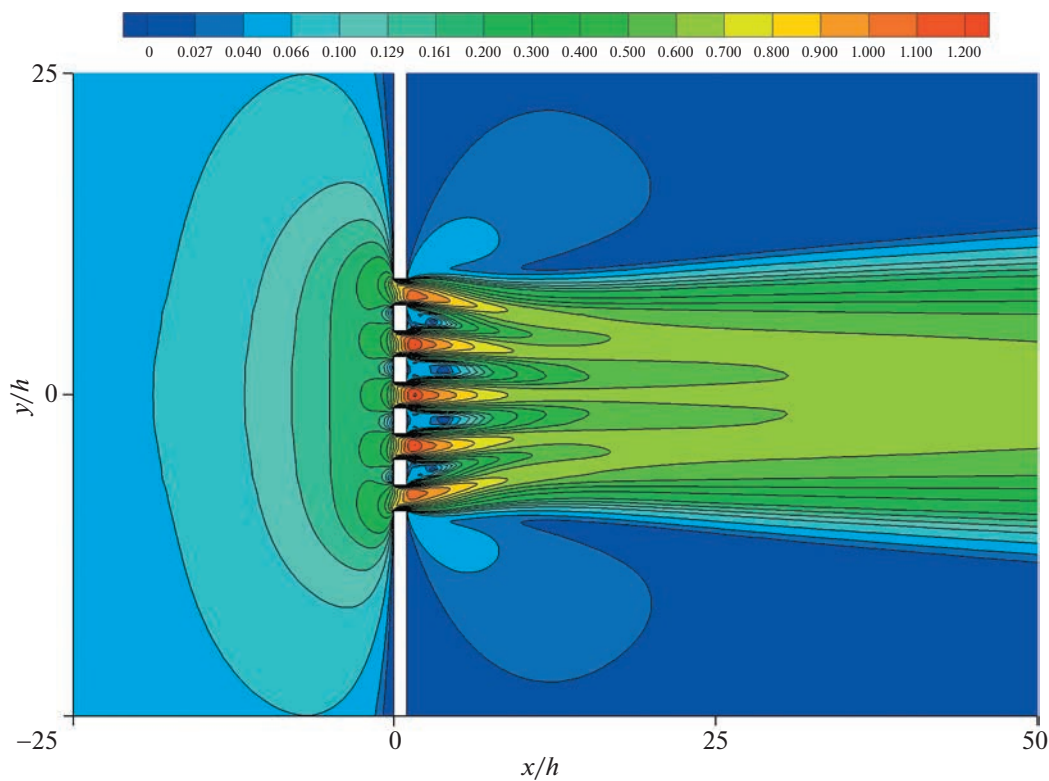
Фиг. 5. Безразмерное давление p/p_L и линии тока для $\delta = 1$ вблизи мембраны. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



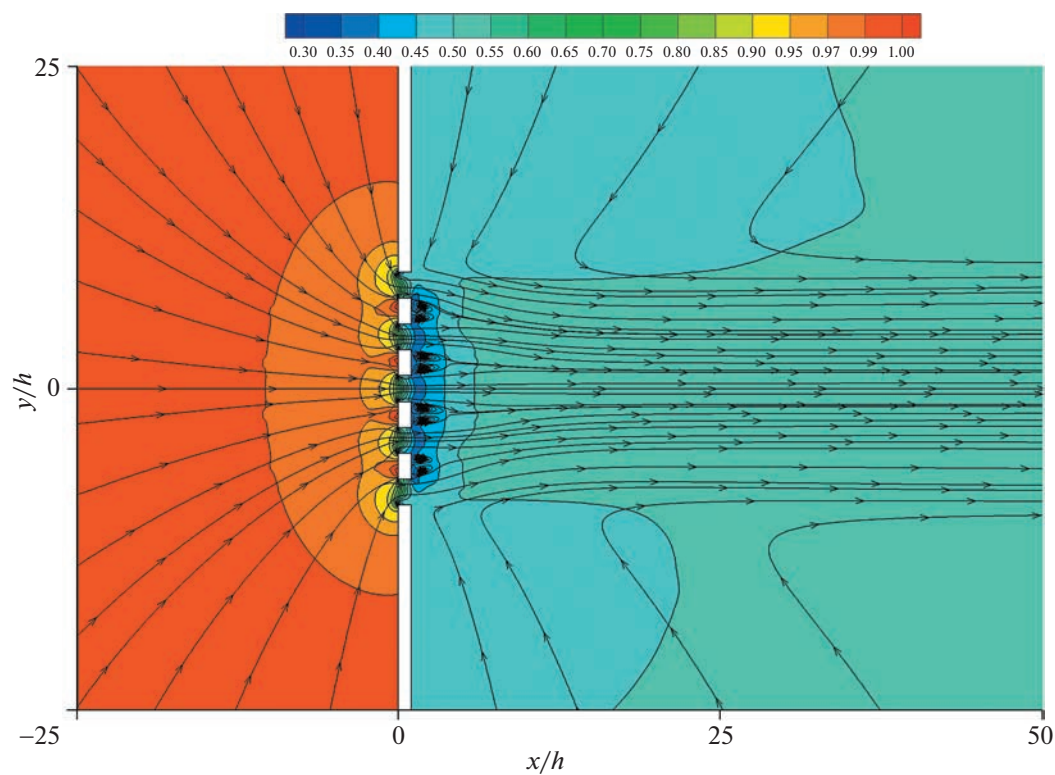
Фиг. 6. Линии уровня числа Маха для $\delta = 20$ вблизи мембраны. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



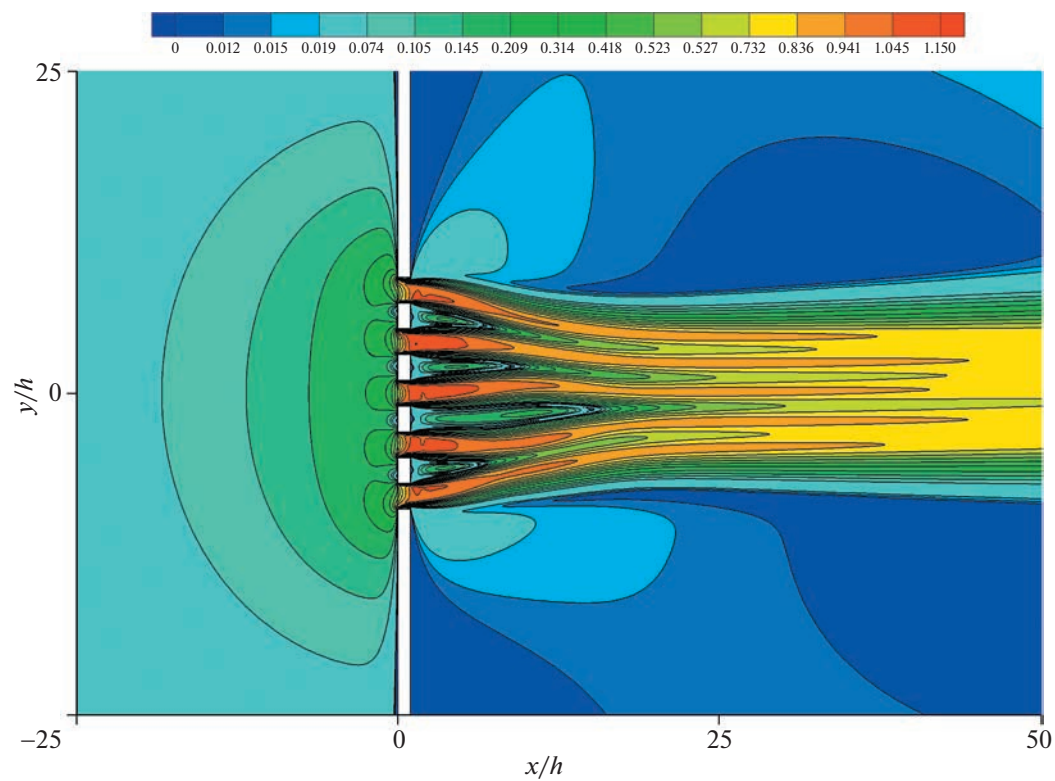
Фиг. 7. Безразмерное давление p/p_L и линии тока для $\delta = 20$ вблизи мембраны. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



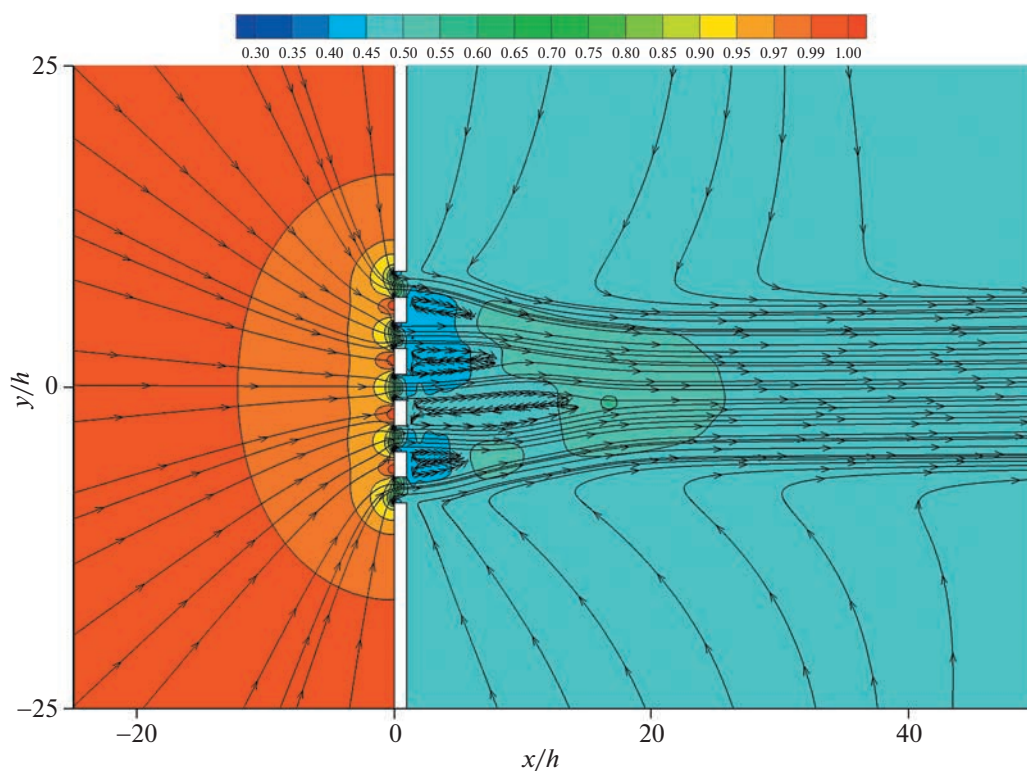
Фиг. 8. Линии уровня числа Маха для $\delta = 50$ вблизи мембраны. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



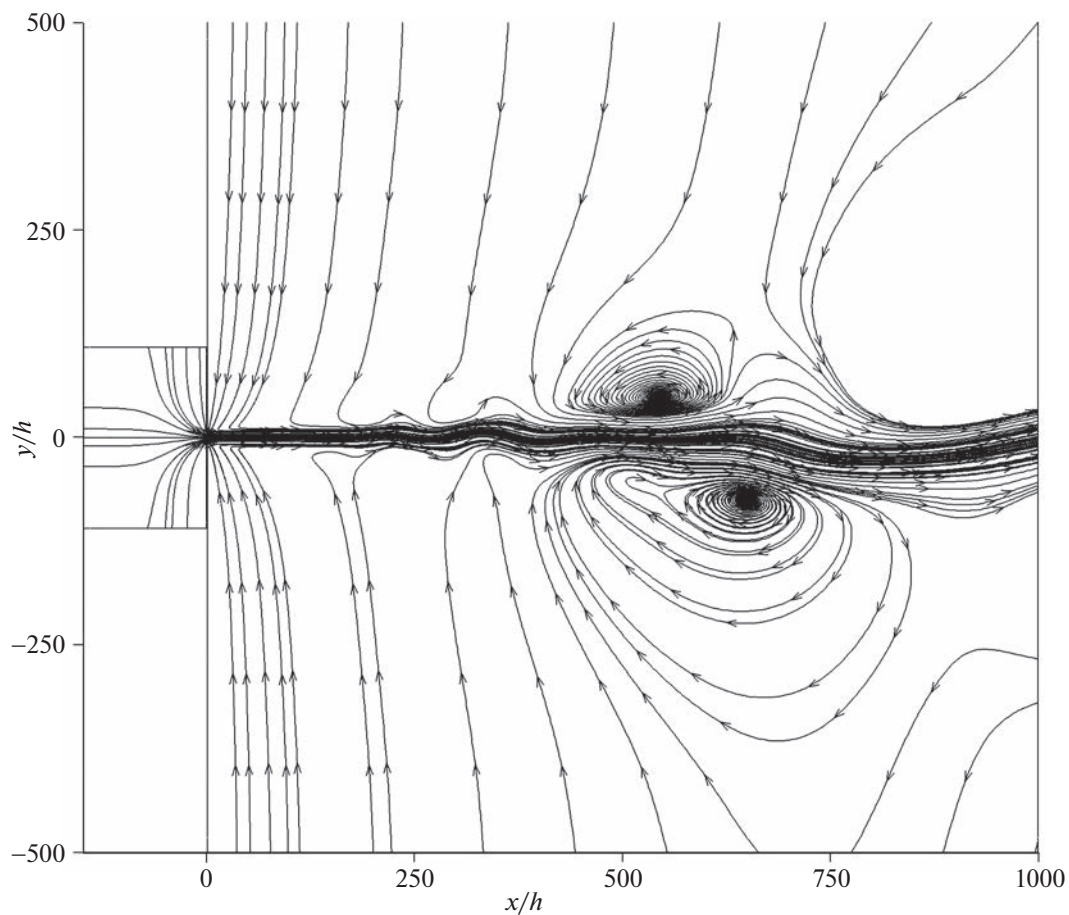
Фиг. 9. Безразмерное давление p/p_L и линии тока для $\delta = 50$ вблизи мембраны. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



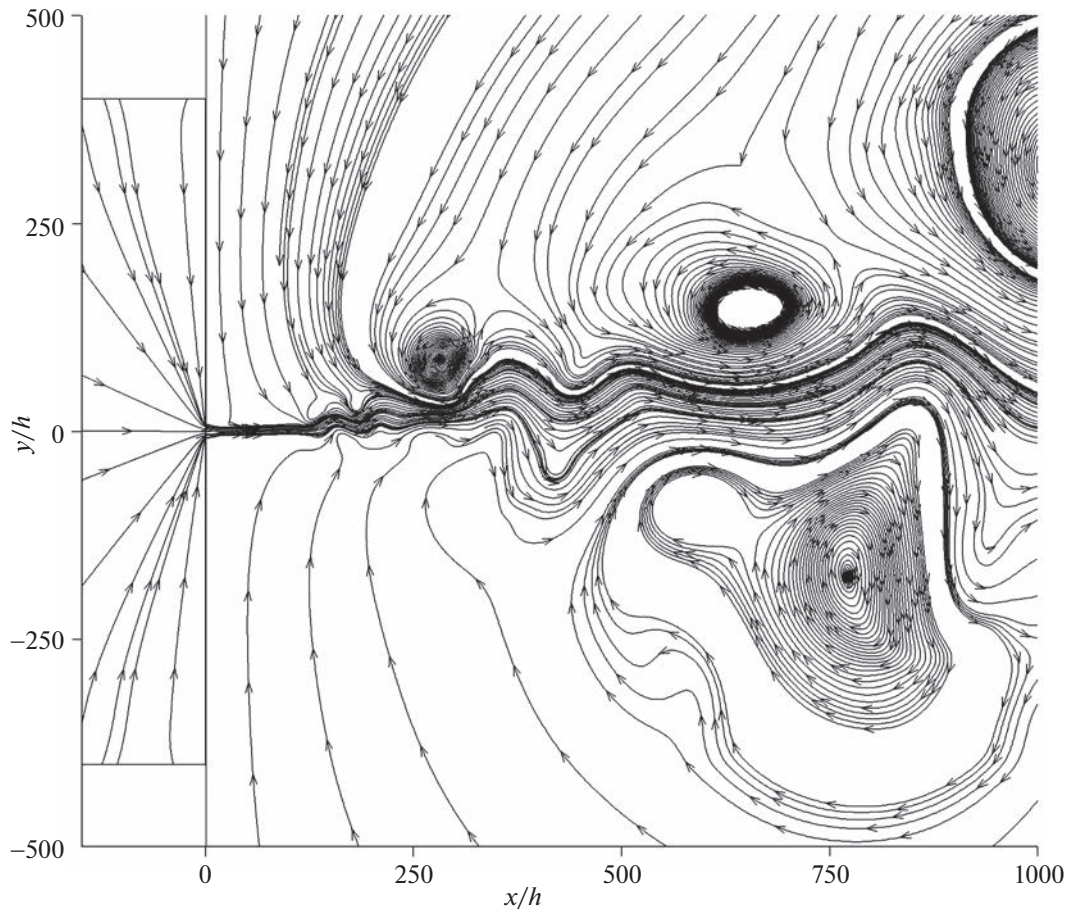
Фиг. 10. Линии уровня числа Маха для $\delta = 200$ вблизи мембраны. Решение уравнений Навье—Стокса (2.9).



Фиг. 11. Безразмерное давление p/p_L и линии тока для $\delta = 200$ вблизи мембраны. Решение уравнений Навье—Стокса (2.9).



Фиг. 12. Линии тока для $\delta = 50$ в основной части течения. Решение S-модельного кинетического уравнения (2.7).



Фиг. 13. Линии тока для $\delta = 200$ в основной части течения. Решение уравнений Навье–Стокса (2.9).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено численное исследование течения разреженного газа через решетку из пяти коротких плоских каналов (пор), имитирующих течение через мембрану. Анализ основан на численном решении S-модельного кинетического уравнения и уравнений Навье–Стокса сжимаемой среды. Получены поля течения для режимов течения от свободномолекулярного до сплошносредного. Продемонстрированы заметное отличие расхода газа в рассматриваемой конфигурации от случая периодической системы каналов и связанные с этим особенности поля течения: наличие краевых эффектов, возникновение коллективной струи, которая с уменьшением числа Кнудсена распадается на вихревые структуры на некотором удалении от мембраны вследствие неустойчивости. При значениях числа Кнудсена $Kn \leq 0.02$ получено хорошее согласование расхода массы и действующих на стержни мембраны сил в кинетическом и континуальном решениях. Для продольной компоненты силы обнаружен эффект максимума по значению числа Кнудсена, которого не наблюдается в периодической системе каналов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sharipov F., Seleznev V. Data on internal rarefied gas flows // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1997. V. 27. № 3. P. 657–706.
2. Sharipov F., Seleznev V. Flows of rarefied gases in channels and microchannels. Russian Academy of Science, Ural Branch, Institute of Thermal Physics, 2008. in Russian.
3. Titarev V.A., Shakhov E.M. Nonisothermal gas flow in a long channel analyzed on the basis of the kinetic S-model // Comput. Math. and Math. Phys. 2010. V. 50. № 12. P. 2131–2144.
4. Pantazis S., Valougeorgis D. Rarefied gas flow through a cylindrical tube due to a small pressure difference // Europ. J. Mech. / B Fluids. 2013. V. 38. P. 114–127.

5. *Valougeorgis D., Vasileiadis N., Titarev V.* Validity range of linear kinetic modeling in rarefied pressure driven single gas flows through circular capillaries // *Europ. J. Mech. / B Fluids, Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows*. 2017. V. 64. P. 2–7.
6. *Varoutis S., Valougeorgis D., Sharipov F.* Simulation of gas flow through tubes of finite length over the whole range of rarefaction for various pressure drop ratios // *J. Vac. Sci. Technol. A*. 2009. V. 27. № 6. P. 1377–1391.
7. *Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A., Arslanbekov R.R., Kolobov V.I.* Simulations of pressure-driven flows through channels and pipes with unified flow solver // *Vacuum, Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”*. 2012. V. 86. № 11. P. 1717–1724.
8. *Varoutis S., Day C., Sharipov F.* Rarefied gas flow through channels of finite length at various pressure ratios // *Vacuum*. 2012. V. 86. № 12. P. 1952–1959.
9. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // *Vacuum, Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”*. 2012. V. 86. № 11. P. 1709–1716.
10. *Shoev G.V., Bondar Y.A., Khotyanovsky D.V., Kudryavtsev A.N., Ivanov M.S., Maruta K.* Numerical study of shock wave entry and propagation in a microchannel // *Thermophys. Aeromech.* 2012. V. 19. № 1. P. 17–32.
11. *Titarev V.A.* Rarefied gas flow in a circular pipe of finite length // *Vacuum*. 2013. V. 94. P. 92–103.
12. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Rarefied gas flow into vacuum through a pipe composed of two circular sections of different radii // *Vacuum. SI “Advances in Vacuum Gas Dynamics”*. 2014. V. 109. P. 236–245.
13. *Dou H., Xu Mi, Wang B., Zhang Z., Wen G., Zheng Y., Luo D., Zhao L., Yu A, Zhang L., Jiang Z., Chen Z.* Microporous framework membranes for precise molecule/ion separations // *Chemic. Soc. Rev.* 2021. V. 50. P. 986–1029.
14. *Taassob A., Bordbar A., Kheirandish S., Zarnaghsh A., Kamali R., Rana A.S.* A review of rarefied gas flow in irregular micro/nanochannels // *J. Micromechan. and Microengineer.* 2021. V. 31. P. 113002.
15. *Wu L., Ho M., Germanou L., Gu X., Liu C., Xu K., Zhang Y.* On the apparent permeability of porous media in rarefied gas flows // *J. Fluid Mech.* 2017. V. 822. P. 398–417.
16. *Popov S.P., Tcheremissine F.G.* Subsonic rarefied gas flow over a rack of flat transverse plates // *J. Appl. Mech. and Tech. Phys.* 2008. V. 49. № 1. P. 46–52.
17. *Plotnikov M. Yu.* Hydrogen dissociation in rarefied gas flow through a wire obstacle // *J. Appl. Mech. and Tech. Phys.* 2018. V. 59. № 5. P. 794–800.
18. *Shakhov E.M.* Approximate kinetic equations in rarefied gas theory // *Fluid Dynamic.* 1968. V. 3. № 1. P. 112–115.
19. *Shakhov E.M.* Generalization of the Krook kinetic relaxation equation // *Fluid Dynamic.* 1968. V. 3. № 5. P. 95–96.
20. *Titarev V.A.* Computer package Nesvetay-3D for modelling three-dimensional flows of monatomic rarefied gases // *Science & Education. Scientific periodical of the Bauman MSTU*. 2014. № 6. P. 124–154.
21. *Konopel'ko N.A., Titarev V.A., Shakhov E.M.* Unsteady rarefied gas flow in a microchannel driven by a pressure difference // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2016. V. 56. № 3. P. 470–482.
22. *Titarev V.A.* Implicit numerical method for computing three-dimensional rarefied gas flows using unstructured meshes // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2010. V. 50. № 10. P. 1719–1733.
23. *Titarev V.A.* Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows // *Computers and Fluids, Special issue “Nonlinear flow and transport”*. 2018. V. 169. P. 62–70.
24. *Titarev V.A.* Application of the Nesvetay node for solving three-dimensional high-altitude aerodynamics problems // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2020. V. 60. № 4. P. 737–748.
25. *Titarev V.A., Morozov A.A.* Arbitrary Lagrangian-Eulerian discrete velocity method with application to laser-induced plume expansion // *Appl. Math. and Comput.* 2022. V. 429. P. 127241.
26. *Колган В.П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных течений газовой динамики // *Уч. зап. ЦАГИ*. 1972. Т. 3. № 6. С. 68–77.
27. *Kolgan V.P.* Application of the principle of minimizing the derivative to the construction of finite-difference schemes for computing discontinuous solutions of gas dynamics // *J. Comput. Phys.* 2011. V. 230. № 7. P. 2384–2390.
28. *van Leer B.* Towards the ultimate conservative difference scheme V: a second order sequel to Godunov's method // *J. Comput. Phys.* 1979. V. 32. P. 101–136.
29. *Titarev V.A.* Conservative numerical methods for model kinetic equations // *Computers and Fluids*. 2007. V. 36. № 9. P. 1446 – 1459.
30. *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. № 511. P. 1144–1161.
31. *Mieussens L.* Discrete-velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries // *J. Comput. Phys.* 2002. V. 162. № 2. P. 429–466.

32. *Gusarov A.V., Smurov I.* Gas-dynamic boundary conditions of evaporation and condensation: numerical analysis of the Knudsen layer // *Phys. Fluids*. 2002. V. 14. № 12. P. 4242–4255.
33. *Yoon S., Jameson A.* Lower-upper symmetric-gauss-seidel method for the Euler and Navier Stokes equations // *AIAA J.* 1988. V. 26. № 9. P. 1025–1026.
34. *Men'shov I.S., Nakamura Y.* An implicit advection upwind splitting scheme for hypersonic air flows in thermochemical nonequilibrium // *A Collection of Technical Papers of 6th Int. Symp. on CFD*. V. 2. P. 815. Lake Tahoe, Nevada, 1995.
35. *Titarev V.A., Dumbser M., Utyuzhnikov S.V.* Construction and comparison of parallel implicit kinetic solvers in three spatial dimensions // *J. Comput. Phys.* 2014. V. 256. P. 17–33.
36. *Titarev V.A., Utyuzhnikov S.V., Chikitkin A.V.* OpenMP + MPI parallel implementation of a numerical method for solving a kinetic equation // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2016. V. 56. № 11. P. 1919–1928.
37. *Gorobets A.V.* Parallel Algorithm of the NOISEtte Code for CFD and CAA Simulations // *Lobachevskii J. Math.* 2018. V. 39. № 4. P. 524–532.
38. *Gorobets A.V., Duben A.P.* Technology for supercomputer simulation of turbulent flows in the good new days of exascale computing // *Supercomputing Frontiers and Innovation*. 2021. V. 8. № 4. P. 4–10.
39. *Alvarez-Farre X., Gorobets A., Trias F.X.* A hierarchical parallel implementation for heterogeneous computing. Application to algebra-based CFD simulations on hybrid supercomputers // *Comput. and Fluid*. 2021. V. 214. P. 104768.
40. *Titarev V.A., Utyuzhnikov S.V., Shakhov E.M.* Rarefied gas flow through a pipe of variable square cross section into vacuum // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2013. V. 53. № 8. P. 1221–1230.
41. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Unsteady rarefied gas flow with shock wave in a channel // *Fluid Dynamic*. 2018. V. 53. № 1. P. 143–151.
42. *Titarev V.A., Frolova A.A., Rykov V.A., Vashchenkov P.V., Shevyrin A.A., Bondar Ye.A.* Comparison of the Shakhov kinetic equation and DSMC method as applied to space vehicle aerothermodynamics // *J. Comput. Appl. Math.* 2020. V. 364. P. 1–12.
43. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* A hybrid method for the computation of a rarefied gas jet efflux through a very long channel into vacuum // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2020. V. 60. № 11. P. 1936–1949.
44. *Ansys CFX – Solver Theory Guide*. Release 2021R2. Ansys, Inc. 2021.
45. *Barth T., Jespersen D.C.* The design and application of upwind schemes on unstructured meshes // *AIAA paper* 89-0366. 1989.
46. *Rao S.S.* The Finite Element Method in Engineering. 6th ed. Elsevier, 2018.
47. *Ansys ICEM CFD Help Manual*, version 2021 R2. 2021.
48. *Frolova A.A.* Analysis of the boundary conditions for rarefied molecular gases with partial accommodation coefficients and energy exchange // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2021. V. 61. № 10. P. 1672–1681.
49. *Koshamarov Yu.A., Ryzhov Yu.A.* Applied Rarefied Gas Dynamics. Moscow, Mashinostroenie, 1977. in Russian.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.635

*Посвящается доктору физико-математических наук профессору
Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием*

ЭВОЛЮЦИЯ ФОРМЫ ОБЛАКА ГАЗА ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ИСПАРЕНИИ В ВАКУУМ: ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ¹⁾

© 2023 г. А. А. Морозов^{1,2,*}, В. А. Титарев^{2,**}

¹ 630090 Новосибирск, пр-т Лаврентьева, 1, Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Россия

² 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: morozov@itp.nsc.ru

**e-mail: vladimir.titarev@frcsc.ru

Поступила в редакцию 23.06.2023 г.

Переработанный вариант 05.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Проведено исследование динамики разлета газа при наносекундном лазерном испарении в вакуум. Задача рассматривается в осесимметричной постановке для широкого диапазона параметров: числа испаренных монослоев и размера пятна испарения. Для получения достоверного численного решения используются два разных кинетических подхода: прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло и решение модельного кинетического уравнения БГК. Анализируется изменение формы облака испаренного вещества в процессе разлета. Показано сильное влияние степени разреженности на форму формирующегося облака. При испарении большого числа монослоев наблюдается хорошее согласие с континуальным решением. Библ. 57. Фиг. 6.

Ключевые слова: кинетическая модель БГК, прямое статистическое моделирование, разреженный газ, импульсное лазерное испарение, LasInEx, Несветай.

DOI: 10.31857/S0044466923120207, **EDN:** ZUMXKA

ВВЕДЕНИЕ

Импульсная лазерная абляция широко используется в различных технологиях, связанных с осаждением тонких пленок, синтезом наночастиц, обработкой и структурированием поверхности. Исследования лазерной абляции в вакууме являются важными для изучения механизмов и динамики процесса абляции на основе анализа времяпролетных (см. [1, 2]) и угловых (см. [1, 3]) распределений разлетающихся частиц. Для корректной интерпретации экспериментальных данных необходимо представлять в целом динамику разлета облака продуктов абляции в вакууме.

Теоретический анализ рассматриваемой задачи базируется в основном на различных вычислительных подходах. При малой плотности потока лазерного излучения газ можно считать нейтральным, так как эффекты поглощения лазерного излучения в факеле и ионизации газа пренебрежимо малы. Обычно для изучения разлета нейтрального факела в вакууме используется прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло (ПСМ) (см. [4]). В первых работах этот метод позволял исследовать угловые распределения частиц при импульсной десорбции нескольких монослоев на основе одномерных расчетов (см. [5, 6]). Позднее на основе двумерных расчетов было исследовано влияние размера пятна испарения на разлет частиц (см. [7]), изучены структура формирующегося факела и динамика его разлета (см. [8, 9]). Также исследовано влияние химических реакций (см. [10]) и потенциала межатомного взаимодействия в факеле

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-11-00078). Расчеты проводились с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования “Высокопроизводительные вычисления и большие данные” (ЦКП “Информатика”) ФИЦ ИУ РАН и МСЦ РАН (г. Москва).

(см. [11]) на динамику расширения. Изучено влияние давления испаряемого вещества на формирующиеся угловые распределения частиц (см. [12]). Особое внимание уделялось эффектам разделения компонентов газовой смеси при абляции многокомпонентных веществ (см. [13–15]).

В ряде работ анализировались времяпролетные распределения частиц, пролетающих через детектор малого размера, расположенный на нормали к поверхности испарения. Исследовано влияние теплоты парообразования и химических реакций на времяпролетные распределения (см. [16]). Введение в расчет высокоскоростных частиц для учета эффекта рекомбинации ионов позволило описать времяпролетные распределения в условиях формирования плазмы в лазерном факеле (см. [17]). Было показано, что использование расчетной базы данных времяпролетных распределений позволяет определить температуру облучаемой поверхности из экспериментальных распределений (см. [18]), в то время как обычно используемые подгоночные формулы сильно завышают температуру поверхности (см. [19]). Было объяснено, почему энергия частиц во времяпролетном распределении может в несколько раз превышать энергию частиц при испарении, и показано, как эта энергия зависит от размера пятна (см. [20]) и от количества испаряемых монослоев (см. [21]). Раскрыты причины немонотонности этого роста энергии для большого числа монослоев и определена максимально достижимая средняя энергия частиц во времяпролетном распределении (см. [22]). Показано, что учет эволюции лазерного излучения во времени (см. [23, 24]) и его неоднородности вдоль радиуса пятна испарения (см. [25]) мало влияет на энергию и функцию распределения частиц по скоростям на времяпролетном детекторе.

С другой стороны, следует отметить работы в рамках подходов сплошной среды. Проведен анализ различных стадий разлета газа при испарении в вакуум (см. [26]), выведено одномерное аналитическое континуальное решение для адиабатического газа (см. [27, 28]), и получено соответствующее численное решение (см. [29]). В осесимметричной постановке рассматриваются газодинамические уравнения в предположении изотермического (см. [30]) или адиабатического расширения, причем в последнем случае удалось получить относительно простые уравнения, которые описывают изменение формы облака и профиль осаждаемой пленки (см. [31]).

Данное континуальное решение достаточно широко используется для описания динамики разлета облака и экспериментально измеренных угловых распределений частиц. Однако это решение не учитывает эффекты разреженности течения, которые могут возникать при испарении небольшого количества вещества. Поэтому интересно рассмотреть влияние разреженности течения на динамику разлета и сравнить точное кинетическое решение задачи с континуальным решением. Целью настоящей работы является проведение такого исследования с анализом изменения формы облака при импульсном испарении в вакуум в осесимметричной постановке для широкого диапазона режимов разреженности. Для получения достоверного численного решения используются два разных кинетических подхода: прямое статистическое моделирование методом Монте-Карло и решение модельного уравнения. Ранее эти два подхода были использованы вместе для получения достоверного решения задачи импульсного испарения в вакуум применительно к анализу времяпролетных распределений частиц только в рамках одномерной постановки задачи (см. [22, 32]).

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается двухмерная осесимметричная задача импульсного испарения в вакуум. Предполагается механизм нормального испарения, соответствующий тепловой модели абляции. Молекулы испаряются с поверхности круглого пятна площадью $S = \pi R^2$ с энергией, соответствующей температуре поверхности T_0 . Для скоростей испаряющихся частиц задается полумаксвелловская функция распределения. Давление насыщенного пара определяется уравнением Клапейрона–Клаузиуса

$$p_s(T_0) = p_b \exp \left\{ \frac{L_v}{k} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_0} \right) \right\}, \quad (1)$$

где T_b — температура кипения при давлении p_b , L_v — скрытая теплота парообразования, k — постоянная Больцмана. Отметим, что параметры T_b и p_b не предполагают механизм взрывного вскипания и используются в качестве нормирующих величин. Давление определяет плотность

насыщенного пара $n_0(T) = p_s(T_0)/(kT_0)$. В течение временного интервала τ задается постоянный поток молекул Ψ_{VAP} :

$$\Psi_{VAP} = \frac{1}{4} n_0 u_T, \quad (2)$$

где $u_T = \sqrt{8kT_0/(\pi m)}$ — средняя тепловая скорость частиц при испарении, m — масса молекулы. Для описания межмолекулярных взаимодействий используется модель твердых сфер. Предполагается, что все возвращающиеся молекулы поглощаются на поверхности испарения.

Решение задачи в данной постановке однозначно определяется количеством испаренного вещества и размером пятна испарения. Общее число испаренных частиц за все время действия импульса τ равняется

$$N = \tau \Psi S. \quad (3)$$

Предположим, что одна частица занимает площадь на поверхности испарения $\Sigma = \sigma/4$, где σ — полное сечение столкновений. Определим, что один монослой испаренного вещества соответствует такому числу частиц N_1 , когда вся поверхность пятна испарения полностью заполнена частицами, т.е.

$$N_1 = S/\Sigma. \quad (4)$$

Тогда общее число испаренных монослоев с поверхности будет равно

$$\Theta = \frac{N}{N_1} = \tau \Psi_{VAP} \Sigma = \frac{u_T \tau}{16\sqrt{2}\lambda_0} = \frac{\sigma \tau p_s(T_0)}{4\sqrt{2}\pi m k T_0}, \quad (5)$$

где $\lambda_0 = 1/(n_0 \sigma \sqrt{2})$ — средняя длина пробега.

Размер пятна испарения также удобно представить в безразмерном виде, поделив радиус на характерную длину облака испаренных частиц в момент завершения импульса:

$$b = \frac{R}{u_T \tau} = \frac{R}{16\sqrt{2}\Theta \lambda_0}. \quad (6)$$

Данные параметры определяют режим разреженности течения. Действительно, из (6) можно оценить начальное число Кнудсена течения по размеру пятна испарения как

$$\text{Kn} = \frac{\lambda_0}{R} = \frac{1}{16\sqrt{2}\Theta b}. \quad (7)$$

Отметим, что в процессе разлета плотность газа в облаке уменьшается, и соответственно число Кнудсена увеличивается.

Диапазон изменения безразмерного радиуса пятна испарения b можно оценить следующим образом. Типичный размер пятна испарения при лазерной абляции $R = 0.1\text{--}1$ мм. Для молекулярной массы $m = 12\text{--}200$ а.е.м. и температуры поверхности $T = 4000\text{--}8000$ К получаем по формуле тепловую скорость $u_T = 700\text{--}8000$ м/с. В результате по формуле (6) получаем для длительности испарения $\tau = 10$ нс безразмерный радиус пятна испарения $b = 3\text{--}150$. В то же время при лазерной десорбции (обычно для $\Theta < 1$) длительность испарения может быть намного меньше, чем длительность действия лазерного импульса, поэтому имеет смысл увеличить рассматриваемый диапазон вплоть до $b = 1000$.

2. РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

2.1. Модель БГК

В первом из кинетических подходов решается уравнение Больцмана с интегралом столкновений в виде модели БГК (Бхатнагара, Гросса и Крука) (см. [33]). Хотя поставленная двумерная задача допускает существенное упрощение путем введения цилиндрической системы координат (см., например, [34, 35]), в настоящем исследовании решение строилось в декартовой системе координат, так как в расчетах использовался универсальный трехмерный решатель. Макроскопические параметры, такие как числовая плотность n , вектор средней скорости $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$,

давление p и температура T выражаются через функцию распределения в виде интегралов по молекулярной скорости:

$$n = \int f d\xi, \quad n\mathbf{u} = \int \xi f d\xi, \quad \frac{3}{2}p + \frac{1}{2}mnu^2 = \frac{1}{2}m \int \xi^2 f d\xi, \quad p = nkT. \quad (8)$$

Кинетическое уравнение для функции распределения с оператором столкновений в форме модели БГК имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\epsilon} (\xi_\alpha f) = J(f), \quad J = v(f_M - f), \quad v = \frac{p}{\mu}, \quad (9)$$

$$f_M = \frac{n}{(2\pi kT/m)^{3/2}} e^{-c^2}, \quad \mathbf{c} = \frac{\xi - \mathbf{u}}{\sqrt{2kT/m}}.$$

Коэффициент динамической вязкости выбран в соответствии с моделью твердых сфер:

$$\mu = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi m k T}{\sigma}}. \quad (10)$$

Граничное условие для молекул, движущихся в область течения с поверхности пятна ($\xi_x > 0$), имеет вид

$$f = f_0 = \begin{cases} \frac{n}{(2\pi k T_0/m)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2k T_0/m}\right), & t \leq \tau, \\ 0, & t > \tau. \end{cases} \quad (11)$$

Вне пятна для любого момента времени предполагается полное поглощение падающих молекул, так что $f = f_w = 0$.

Решение задачи зависит от параметра разреженности δ , который обратно пропорционален числу Кнудсена (Kn) и определяется по формуле

$$\delta = \frac{Rp_0}{\mu_0 \beta_0}, \quad (12)$$

где μ_0 — вязкость (10) при температуре T_0 , $\beta_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ — наиболее вероятная скорость молекул при температуре T_0 . Для модели твердых сфер

$$\delta = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{Kn}} = \frac{32\sqrt{2}}{5\sqrt{\pi}} \Theta b. \quad (13)$$

2.2. Метод дискретных ординат

Для решения кинетического уравнения (9) в настоящей работе используется недавнее обобщение (см. [36]) универсального метода дискретных скоростей (discrete ordinate method — DVM) (см. [37–39]), предназначенное для моделирования нестационарных течений на основе общего лагранжево-эйлерового (arbitrary Lagrangian-Eulerian — ALE) подхода (см. [40–42]). Основное отличие данного метода DVM-ALE от более традиционных подходов (см. [43, 44]) состоит в использовании деформирующихся пространственных сеток и расширении пространственных областей, что значительно увеличивает скорость счета. Для полноты представления результатов кратко опишем общую идею DVM-ALE.

Введем в скоростном пространстве ограниченную расчетную область и расчетную сетку с общим числом ячеек N_ξ . Обозначим через $\xi_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})^T$ центр ячейки j , ω_j — ее объем. Функции f, f_M будем задавать в центрах ячеек скоростной сетки, интерпретируя их как векторы длины N_ξ с компонентами $f_j = f(t, \mathbf{x}, \xi_j)$, $(f_M)_j = f_M(t, \mathbf{x}, \xi_j)$. Кинетическое уравнение (9) переписывается в виде системы из N_ξ уравнений и в векторной форме имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\hat{\xi}_\alpha \circ \mathbf{f}) = \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = v(\mathbf{f}_M - \mathbf{f}), \quad (14)$$

где $\hat{\xi}_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \dots, \xi_{kN_\xi})$ — вектор, составленный из значений компоненты k координат центров ячеек скоростной сетки, символом $\circ$ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов.

В физическом пространстве введем расчетную область конечного размера. В настоящей работе мы ограничиваемся только сетками с шестигранными ячейками с четырехугольными гранями A_{li} , где l — номер грани. Общее количество ячеек равняется N_{space} . Обозначим через $\mathbf{U}(t, \mathbf{x})$ скорость движения сетки, способ задания которой будет приведен ниже. Используя общепринятый способ перехода от системы дифференциальных уравнений (14) к интегральным соотношениям для подвижного деформирующегося контрольного объема V_i , получаем следующую полудискретную схему для нахождения значений функции распределения $\mathbf{f}_i$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_i |V_i|) = \mathbf{R}_i, \quad \mathbf{R}_i = -\sum_l \Phi_{li} + |V_i| \mathbf{J}_i, \quad (15)$$

$$\Phi_{li} = \int_{A_{li}} (\hat{\xi}_{nli} - U_{nli} \mathbf{I}) \circ \mathbf{f} ds, \quad \hat{\xi}_{nli} = \hat{\xi}_\alpha n_{\alpha li}, \quad U_{nli} = U_\alpha n_{\alpha li}, \quad (16)$$

где $\mathbf{n}_{li} = (n_{l1}, n_{l2}, n_{l3})_{li}^T$ — внешняя единичная нормаль к грани l пространственной ячейки V_i , $\mathbf{I}$ — единичный вектор размерности N_ξ .

Пространственный оператор аппроксимируется методом Годунова второго порядка точности, представляющим собой комбинацию кусочно-линейной реконструкции решения по координатным направлениям и точного римановского решателя на границах ячеек. Поскольку решение кинетического уравнения является разрывным, используется квазимоноотонная кусочно-линейная реконструкция, впервые предложенная независимо Колганом (см. [45, 46]) и ван Лином (см. [47]). Для подавления возможных осцилляций на разрывах используется ограничитель наклонов “van Albada”. В результате применения процедуры реконструкции для каждой грани сетки получается пара значений функции распределения $\mathbf{f}_{li}^-, \mathbf{f}_{li}^+$, соответствующих экстраполяции решения с двух сторон грани. Выражение для численного потока Φ_{li} записывается с учетом движения сетки в физическом пространстве:

$$\Phi_{li} = \frac{1}{2} (\hat{\xi}_{nli} - U_{nli} \mathbf{I}) \circ \left[(f_{li}^+ + f_{li}^-) - \mathbf{K}_{li} \circ (f_{li}^+ - f_{li}^-) \right] |A_{li}|, \quad (17)$$

$$\mathbf{K}_{li} = \text{sign}(\hat{\xi}_{nli} - U_{nli} \mathbf{I}). \quad (18)$$

Вычисление модельного (приближенного) интеграла столкновений $\mathbf{J}$ (индексы сетки по пространству и шагу времени опущены для простоты) требует знания макроскопических величин $\mathbf{W} = (n, \mathbf{u}, T)$. В настоящей работе вектор $\mathbf{W}$ находится из системы уравнений, выражающей законы сохранения массы, импульса и энергии (см. [48, 49])

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} (1, \hat{\xi}, \xi^2)_j (f_M - f)_j \omega_j = \mathbf{0}. \quad (19)$$

Здесь индекс пространственной сетки i опущен для простоты. Выписанная система нелинейных уравнений (19) решается методом Ньютона. В качестве начального приближения используются значения, полученные обычной аппроксимацией выражений (8) квадратурной формулой второго порядка точности. Для ускорения счета точная матрица Якоби системы уравнений заменяется приближенной матрицей, которая явным образом выражается через макропараметры газа без необходимости интегрирования по молекулярной скорости (см. [37]). Помимо этого, итерационная процедура решения системы для расчета макропараметров может расходиться в областях с низкими температурами и высокими скоростями, что не редкость для метода Ньютона. Для решения этой проблемы предлагается ограничить приращение вектора $\mathbf{W}$ значением 10% для компонент плотности и температуры и 20% локальной скорости звука для компонентов скорости. Данная модификация позволила обеспечить надежную работу метода (19) для практически произвольной скоростной сетки.

Продвижение по времени осуществляется с помощью явной схемы Рунге—Кутты 2-го порядка с уменьшением полной вариации (TVD) (см. [50]). В результате получаем итоговый вид нового метода дискретных скоростей на подвижной сетке:

$$\mathbf{f}_i^* |V_i^{n+1}| = \mathbf{f}_i^n |V_i^n| + \Delta t^n \mathbf{R}_i(f^n), \quad (20)$$

$$\mathbf{f}_i^{n+1} |V_i^{n+1}| = \frac{1}{2} \left(\mathbf{f}_i^n |V_i^n| + \mathbf{f}_i^* |V_i^{n+1}| + \Delta t^n \mathbf{R}_i(f^*) \right), \quad (21)$$

где величина шага по времени $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ выбирается по обычной формуле, модифицированной для учета движения и деформации сетки.

Описанный метод DVM-ALE реализован в параллельном коде Несветай (см. [51]), разрабатываемом в ФИЦ ИУ РАН вторым автором. Для проведения вычислений на современных многопроцессорных супер ЭВМ с возможностью использования десятков тысяч ядер в пакете Несветай реализована двухуровневая модель параллельных вычислений MPI + OpenMP (см. [52]), которая активно развивается в последние годы в приложении к газодинамическим расчетам (см., например, [53, 54]).

2.3. Расчетные сетки и параметры расчетов

Для построения расчетных сеток использовался пакет Ansys ICEM CFD (см. [55]), лицензия на который имеется в ФИЦ ИУ РАН. Осесимметричные расчеты проводились на трехмерной многоблочной пространственной сетке, построенной для четверти полупространства $y \geq 0, z \geq 0$ (см. [36]). В плоскостях yz и xz использовалось граничное условие зеркального отражения молекул. Сетка состояла из 100 ячеек по координате x , 46 ячеек в радиальном направлении и восьми ячеек по угловой координате. Общее число ячеек равнялось 35 тысячам. Начальный размер расчетной области $0 \leq x \leq 0.05R, y^2 + z^2 \leq 3R$. Как правило, скорость движения вершин пространственной сетки внутри области линейно пропорциональна их относительному положению по отношению к внешней границе области.

Для построения неструктурированной скоростной сетки использовался подход, предложенный в [32] и хорошо зарекомендовавший себя в задачах испарения с плоской поверхности (см. [22]). Для $\xi_x \geq 0$ скоростная сетка строится путем вытягивания в радиальном направлении треугольной сетки на единичной сфере с некоторым сгущением к $\xi_r \approx 2.5\beta_0$. При $\xi_x < 0$ использовалась обычная гексаэдральная сетка. Общее число ячеек в построенной таким образом скоростной сетке равнялось 180 тысячам.

Важно отметить, что во избежание деления на нуль начальное состояние вакуума замещается фоновым газом с плотностью $n_b = 10^{-13}n_0$. Значение температуры фонового газа не имеет большого значения и для простоты принимается равным $T_b = 0.03T_0$. В начальный момент времени задается максвелловская функция распределения скоростей с плотностью и температурой фонового газа.

Поскольку расчетная область во время разлета газа постоянно увеличивается, необходимо задать алгоритм движения сетки в физическом пространстве. В направлении координаты x задается движение правой границы расчетной области со скоростью $4.5\beta_0$. Аналогичным образом задается движение границы области в радиальном направлении со скоростью $2.5\beta_0$. При этом скорость движения вершин сетки пропорциональна их относительному положению по отношению к внешней границе.

Основные вычисления проводились с использованием одного из высокопроизводительных вычислительных комплексов, установленных в ЦКП “Информатика” ФИЦ ИУ РАН. Комплекс состоит из 14 серверов, каждый из которых содержит два процессора Intel Xeon Gold 6338 (32 ядра; 2.0 ГГц; 2 потока на ядро) и 512 Гб оперативной памяти. Для межузловых обменов по протоколу MPI используется высокоскоростная сеть InfiniBand EDR с пропускной способностью 100 Гбит/с.

3. ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Используется традиционная схема метода ПСМ (см. [4]) с некоторыми элементами “усложненной” версии (см. [56]). Физическая область делится на вычислительные ячейки, и решение изменяется дискретными временными шагами. Процесс моделирования делится на две части:

во-первых, бесстолкновительное движение частиц в пространстве и, во-вторых, моделирование столкновений между частицами. Временная эволюция газового облака строится по модельным молекулам. Состояние каждой молекулы определяется ее положением в пространстве и вектором скорости. Столкновения между частицами моделируются по схеме “без счетчика времени”.

Схема ПСМ реализована первым автором в параллельном коде LasInEx (Laser-Induced-Expansion). Ранее этот код успешно использовался во многих исследованиях импульсной абляции (см. [22, 24, 25, 32]). Длина расчетной области в начальный момент времени составляла $0.5R$, а затем в ходе расчета увеличивалась каждые 1000–2000 шагов по времени таким образом, чтобы частицы не вылетали из расчетной области. При изменении расчетной области задавалась новая равномерная сетка. Обычно в расчете задавалось до 4 млн ячеек и до 200 млн частиц. Для более точного моделирования столкновений на каждом этапе столкновений использовались временные столкновительные подъячейки следующим образом: каждый раз при моделировании столкновений в каждой ячейке задавалось некоторое число подъячеек таким образом, чтобы среднее число молекул на подъячейку равнялось 8 (см. [56]). Некоторые режимы (с плотным начальным облаком, например, $\Theta > 10$ для $b = 10$) рассчитывались с использованием “равновесной” модификации метода ПСМ (см. [57]). В рамках этого подхода предполагается, что газ в каждой ячейке находится в состоянии теплового равновесия, и поэтому размер ячейки и временной шаг могут превышать локальную длину свободного пробега частиц и среднее время между столкновениями.

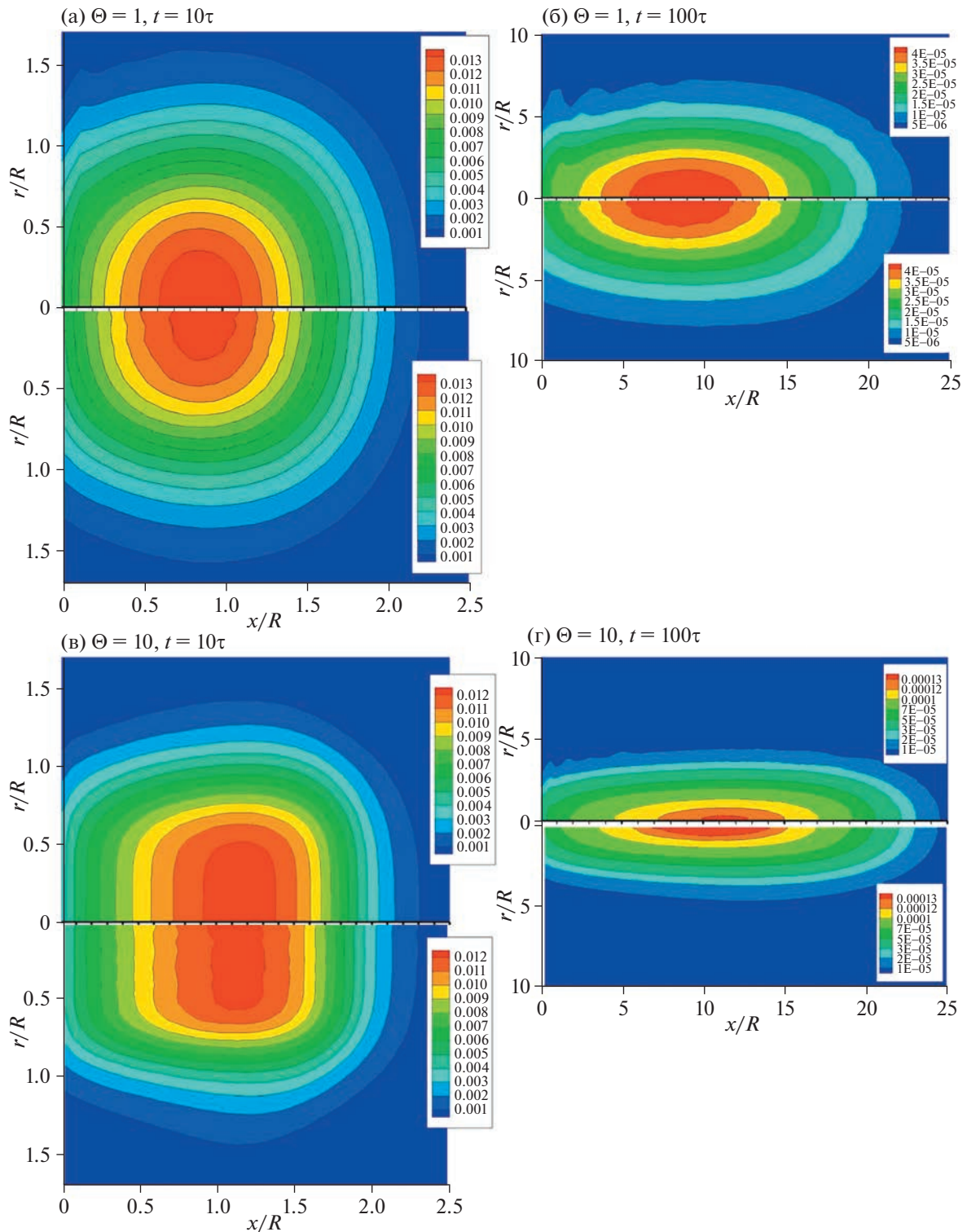
4. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

4.1. Изменение формы облака

На фиг. 1 представлены типичные распределения плотности при разлете газа в моменты времени $t = 10\tau$ и 100τ для $b = 10$ и числа монослоев $\Theta = 1$ и 10. По формуле (7) для данных режимов начальное число Кнудсена (по плотности насыщенного пара) будет $\text{Kn} \approx 0.005$ и 0.0005 соответственно. Затем в процессе разлета степень разреженности существенно увеличивается. Так, в момент времени $t = 10\tau$ имеем значение плотности $n = 0.01n_0$ в облаке с характерным размером $L \approx R$, так что $\text{Kn} = \lambda/L \sim 0.4$ и 0.04 для $\Theta = 1$ и 10 соответственно, что свидетельствует о нарушении условий сплошной среды. Далее при времени $t = 100\tau$ имеем значение плотности $n \sim 0.0001n_0$ в облаке с характерным размером $L \approx 10R$, откуда получаем $\text{Kn} = \lambda/L \sim 4$ и 0.4 для $\Theta = 1$ и 10 соответственно, что уже соответствует переходу к практически бесстолкновительному режиму разлета газа. Видно достаточно хорошее согласие между результатами различных кинетических подходов. Отметим, что для ПСМ решения имеет место некоторая негладкость линий уровня плотности на малых временах, связанная с недостаточным количеством модельных частиц, а для решения кинетического уравнения — негладкость на больших временах, связанная с недостаточным разрешением скоростной сетки.

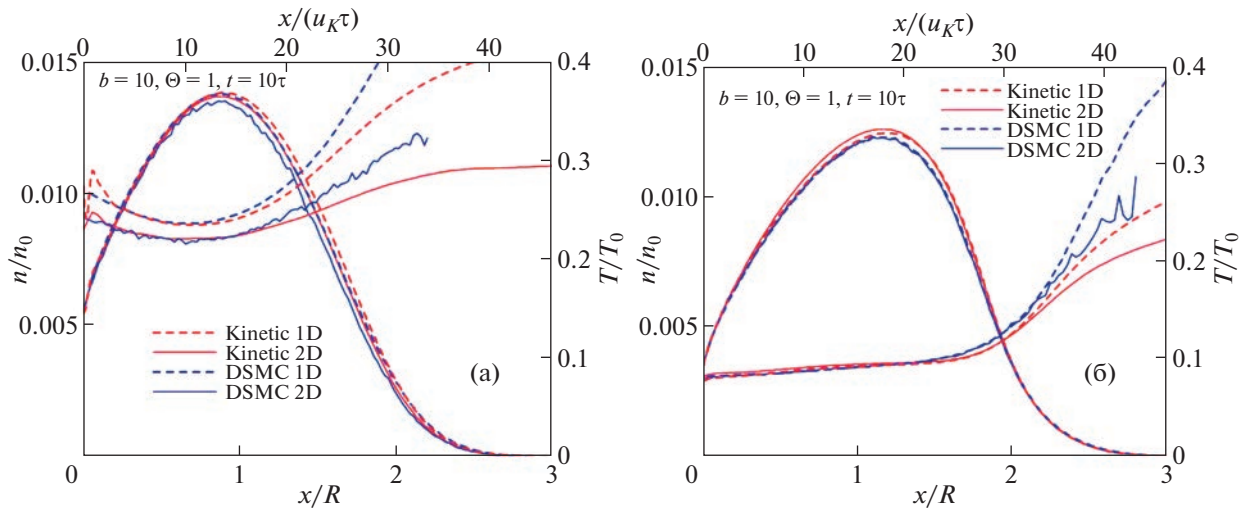
Для более детального сравнения расчетных данных на фиг. 2 представлены профили плотности и температуры на оси симметрии в момент времени $t = 10\tau$ для числа монослоев $\Theta = 1$ и 10. Как следует из фиг. 1, в это время течение на оси является практически одномерным, поэтому для проверки точности расчета на фиг. 2 также приведены результаты соответствующих одномерных расчетов. Результаты решения кинетического уравнения и ПСМ хорошо согласуются между собой с отличием по плотности в пределах 1–2%. Для $\Theta = 10$ наблюдается полное согласие одномерных и двухмерных ПСМ расчетов, тогда как для решения кинетического уравнения для одномерного и двухмерного расчетов максимальная плотность отличается на 1%. Для $\Theta = 1$ двухмерный расчет дает заметно меньшее значение плотности и температуры, что, по-видимому, является проявлением эффектов двумерности течения.

Отметим, что на фронте движения облака имеет место рост температуры с существенным расхождением результатов ПСМ и решения модельного уравнения. Повышение температуры обусловлено тем, что летящие на фронте частицы практически не испытывают столкновений между собой ввиду малой плотности, что приводит к нарушению теплового равновесия и “заморозке” неосевых компонент температуры (см. [8]). Отличие результатов двух рассматриваемых подходов объясняется фактически разными граничными условиями на фронте. Для метода ПСМ в расчете действительно задается вакуум (полное отсутствие фоновых частиц). Однако при решении модельного уравнения в окружающем пространстве задается газ с предельно малой плотностью $n_b = 10^{-13}n_0$ и температурой $T_b = 0.03T_0$. В результате в расчете на большом расстоянии перед

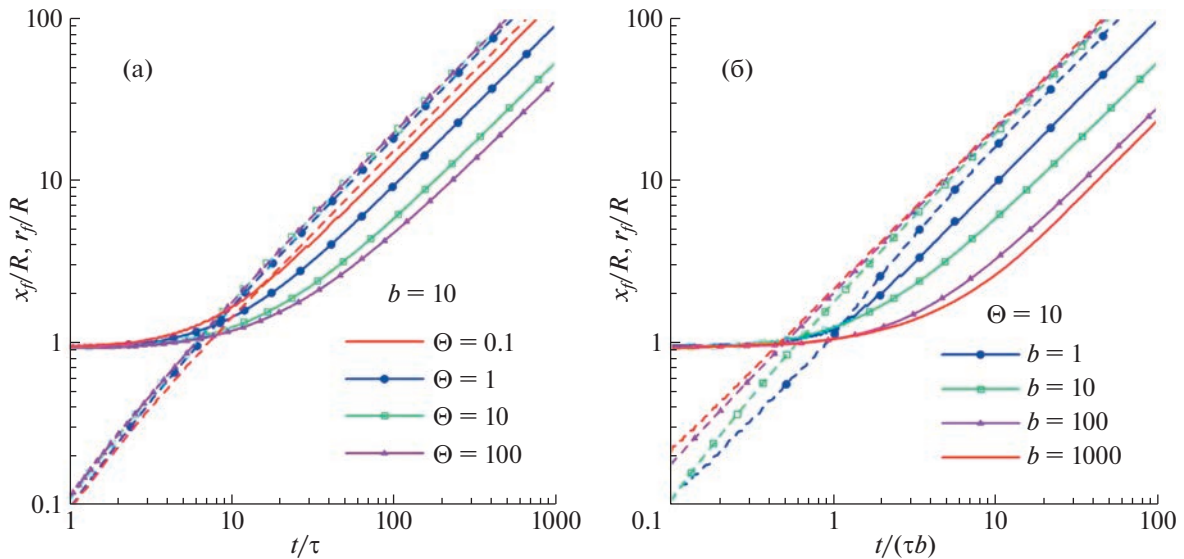


Фиг. 1. Поля плотности в момент времени $t = 10\tau$ и 100τ для $b = 10$, $\Theta = 1$ (а), (б) и 10 (в), (г). Вверху — кинетическое уравнение, внизу — ПСМ.

фронтом облака ($x/R \sim 4-5$ для режимов, фиг. 2) образуется ударная волна. Поскольку эта ударная волна реализуется при пренебрежимо малой плотности, мы ее не рассматриваем, однако само ее наличие, по-видимому, приводит к заметному искажению профиля температуры на фронте облака.



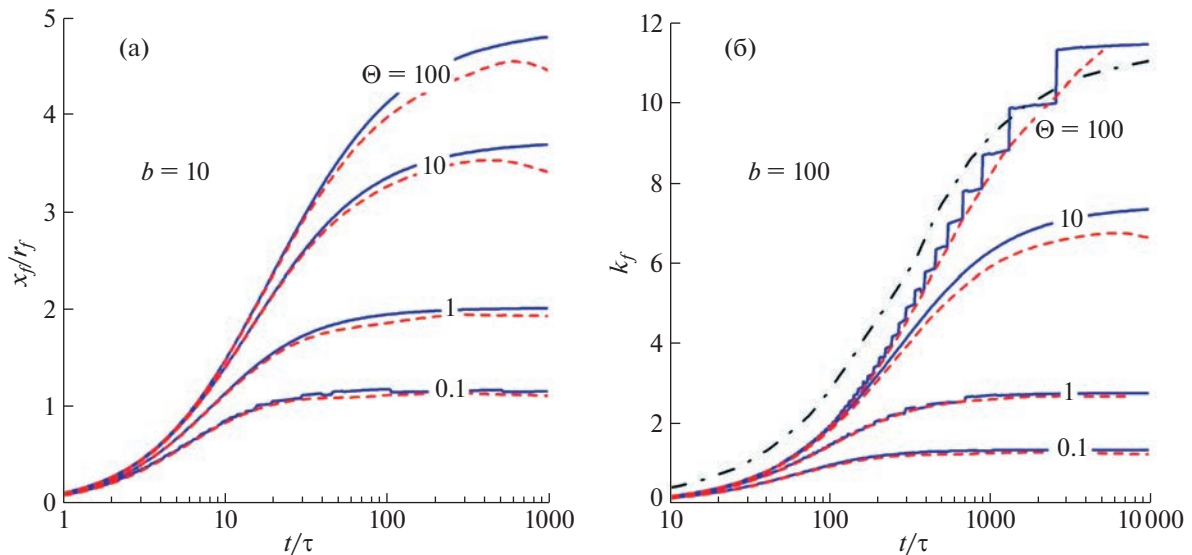
Фиг. 2. Профили плотности и температуры в момент времени $t = 10\tau$ для $b = 10, \Theta = 1$ (а) и 10 (б).



Фиг. 3. Временная эволюция положения фронта облака в осевом направлении x_f (штриховые линии) и в радиальном направлении r_f (сплошные линии) для фиксированного размера пятна $b = 10$ и разных значений числа монослоев (а) и фиксированного числа монослоев $\Theta = 10$ и разных значений размера пятна (б). Представлены результаты ПСМ.

4.2. Вытянутость облака в осевом направлении

Для анализа динамики изменения формы облака рассмотрим движение фронта облака в осевом и радиальном направлениях. Положение границы фронта облака определим как поверхность, за пределами которой вниз по потоку содержатся 10% всех частиц облака (см. [8]). На фиг. 3 представлена рассчитанная методом ПСМ временная эволюция границы фронта облака в осевом направлении (x_f) и в радиальном направлении (r_f). Видно, что осевое положение границы фронта слабо зависит от параметров задачи, тогда как радиальный размер облака r_f существенно уменьшается при увеличении размера пятна или числа монослоев. Следует отметить, что при уменьшении числа монослоев Θ скорость движения фронта в радиальном направлении увеличивается (фиг. 3а) и в бесстолкновительном пределе ($\Theta = 0$) совпадает со скоростью движения фронта в осевом направлении.



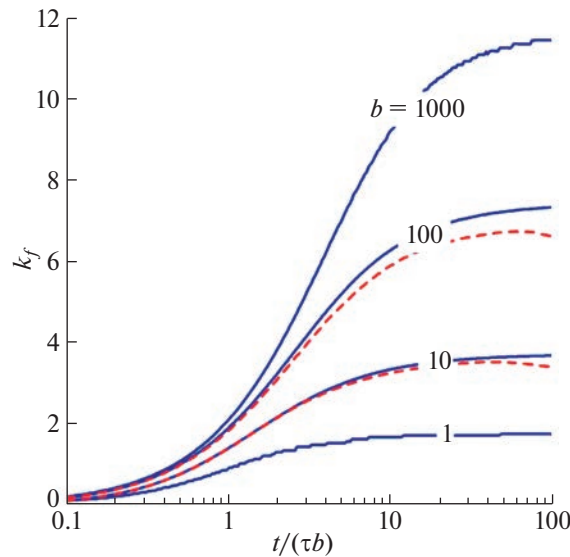
Фиг. 4. Временная эволюция степени вытянутости облака k_f для разных значений числа монослоев для размера пятна $b = 10$ (а) и 100 (б): ПСМ (сплошные линии), кинетическое уравнение (штриховые) и континуальное решение (штрихпунктир) (см. [31]).

Для оценки степени вытянутости факела в осевом направлении введем отношение $k_f = x_f/r_f$ (см. [31]), которое непосредственно определяет угловые распределения частиц в облаке. Временная эволюция степени вытянутости представлена на фиг. 4. Степень вытянутости сильно увеличивается как с увеличением числа монослоев, так и с увеличением размера пятна испарения. Так, для размера пятна $b = 10$ для $\Theta = 100$ получается максимальная вытянутость $k_f = 5$, тогда как для размера пятна $b = 100$ имеем максимальное значение $k_f = 11$. Со временем степень вытянутости k_f стремится к некоторому предельному значению.

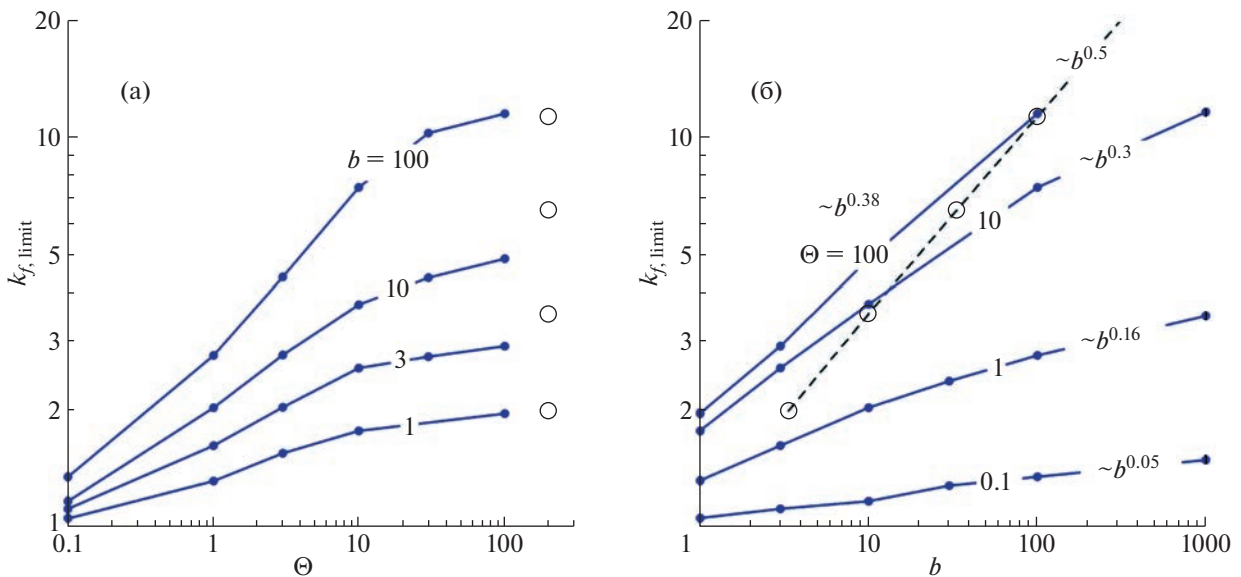
Решение кинетического уравнения и метод ПСМ дают близкие значения степени вытянутости. Начиная с некоторого момента, для числа монослоев 10 и 100 полученные в решении кинетического уравнения кривые начинают “заваливаться” вниз, что объясняется недостаточным разрешением пространственной сетки и сложностью проведения расчетов в вакуум с использованием конечного значения плотности газа, которое ограничено разрядностью ЭВМ. На фиг. 4б также представлено континуальное решение из работы [31]. Видно, что оно достаточно хорошо согласуется с кинетическими решениями для числа монослоев $\Theta = 100$.

На фиг. 5 представлена временная эволюция степени вытянутости для разных размеров пятна испарения b . Видно, что увеличение размера пятна испарения в 10 раз приводит примерно к двукратному увеличению степени вытянутости. Отметим, что время выхода степени вытянутости на предельное значение фактически пропорционально размеру пятна испарения $R \sim \tau b$.

Зависимость предельной степени вытянутости $k_{f,\text{limit}} = \lim_{t \rightarrow \infty} k_f(t)$ от размера пятна и числа монослоев представлена на фиг. 6. Также там приведено континуальное решение из работы [31]. При фиксированном числе монослоев Θ с увеличением нормированного размера пятна b степень вытянутости стремится к некоторому предельному значению, которое достаточно хорошо согласуется с континуальным решением (фиг. 6а) (см. [31]). Зависимость степени вытянутости от размера пятна b может быть описана степенной функцией в виде $k_{f,\text{limit}} \sim b^d$, где d меняется от нуля при бесстолкновительном разлете ($\Theta = 0$) до $d = 0.38$ при $\Theta = 100$. При этом для континуального решения получается $d = 0.5$. По-видимому, показатель степенной зависимости в расчетах ПСМ приблизится к $d = 0.5$ при дальнейшем увеличении числа монослоев (режимы с $\Theta > 100$, которые сейчас фактически невозможно посчитать ввиду ограничений возможностей вычислительной техники). Отличия в конкретных значениях степени вытянутости в расчетах ПСМ и в решении из [31] связаны, по-видимому, с приближенным описанием факела в континуальной модели и другим определением фронта факела по сравнению с расчетом ПСМ.



Фиг. 5. Временная эволюция степени вытянутости облака k_f для фиксированного числа монослоев $\Theta = 10$ и разных значений размера пятна $b = 1, 10, 100, 1000$: ПСМ (сплошные линии) и кинетическое уравнение (штриховые).



Фиг. 6. Зависимость предельной степени вытянутости облака $k_{f, \text{limit}}$ от числа монослоев Θ (а) и от размера пятна испарения b (б): ПСМ расчет (сплошные линии) в сравнении с непрерывным решением из [31] (штриховая линия и кружки).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное исследование динамики разлета газа в осесимметричной постановке при наносекундном лазерном испарении в вакуум на основе прямого статистического моделирования методом Монте-Карло и решения модельного уравнения БГК. Выполнен анализ изменения формы формирующегося облака в зависимости от параметров задачи: числа испаренных монослоев и размера пятна испарения. Показано сильное влияние степени разреженности течения на вытянутость формирующегося облака. При испарении большого числа монослоев наблюдается хорошее согласие с непрерывным решением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kelly R., Dreyfus R.W. Reconsidering the mechanisms of laser sputtering with Knudsen-layer formation taken into account // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1988. V. 32. № 1–4. P. 341–348.
2. Morozov A.A. Analytical formula for interpretation of time-of-flight distributions for neutral particles under pulsed laser evaporation in vacuum // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. V. 48. № 19. P. 195501–195512.
3. Konomi I., Motohiro T., Asaoka T. Angular distribution of atoms ejected by laser ablation of different metals // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. P. 013107–013115.
4. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation Monte Carlo method. Oxford: Clarendon Press, 1994.
5. NoorBatcha I., Lucchese R.R., Zeiri Y. Effects of gas-phase collisions on particles rapidly desorbed from surfaces // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 4978–4981.
6. Feil H., Baller T.S., Dieleman J. Effects of post-desorption collisions on the energy distribution of SiCl molecules pulsed-laser desorbed from Cl-covered Si surfaces: Monte-Carlo simulations compared to experiments // Appl. Phys. A. 1992. V. 55. P. 554–560.
7. Sibold D., Urbassek H.M. Effect of gas-phase collisions in pulsed-laser desorption: a three-dimensional Monte Carlo simulation study // J. Appl. Phys. 1993. V. 73. № 12. P. 8544.
8. Булгакова Н.М., Плотников М.Ю., Ребров А.К. Исследование разлета продуктов лазерного испарения методом прямого статистического моделирования // Теплофизика и аэромеханика. 1998. Т. 5. № 3. С. 421.
9. Morozov A.A. Dynamics of gas cloud expansion under pulsed laser evaporation into vacuum // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 1105. P. 012116.
10. Itina T.E., Tokarev V.N., Marine W., Autric M. Monte Carlo simulation study of the effects of nonequilibrium chemical reactions during pulsed laser desorption // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 8905–8912.
11. Petrov V.A., Ranjbar O.A., Zhilyaev P.A., Volkov A.N. Kinetic simulations of laser-induced plume expansion from a copper target into a vacuum or argon background gas based on ab initio calculation of Cu–Cu, Ar–Ar, and Ar–Cu interactions // Phys. Fluid. 2020. V. 32. P. 102010–102027.
12. Konomi I., Motohiro T., Kobayashi T., Asaoka T. Considerations on the determining factors of the angular distribution of emitted particles in laser ablation // Appl. Surf. Sci. 2010. V. 256. P. 4959–4965.
13. Urbassek H.M., Sibold D. Gas-phase segregation effects in pulsed laser desorption from binary targets // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 1886–1889.
14. Morozov A.A., Mironova M.L. Numerical analysis of time-of-flight distributions of neutral particles for pulsed laser ablation of binary substances into vacuum // Appl. Phys. A. 2017. V. 123. № 12. P. 783, 1–9.
15. Morozov A.A., Starinskiy S.V., Bulgakov A.V. Pulsed laser ablation of binary compounds: effect of time delay in component evaporation on ablation plume expansion // J. Phys. D: Appl. Phys. 2021. V. 54. № 17. P. 175203.
16. Itina T.E., Patrone L., Marine W., Autric M. Numerical analysis of TOF measurements in pulsed laser ablation // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. S59–S65.
17. Garrelie F., Aubreton J., Catherinot A. Monte Carlo simulation of laser-induced plasma plume expansion under vacuum: comparison with experiments // J. Appl. Phys. 1998. V. 83. № 10. P. 5075–5082.
18. Morozov A.A. Interpretation of time-of-flight distributions for neutral particles under pulsed laser evaporation using direct Monte Carlo simulation // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. P. 234706–234714.
19. Bykov N.Y., Bulgakova N.M., Bulgakov A.V., Loukianov G.A. Pulsed laser ablation of metals in vacuum: DSMC study versus experiment // Appl. Phys. A. 2004. V. 79. P. 1097–1100.
20. Morozov A.A. Analysis of time-of-flight distributions under pulsed laser ablation in vacuum based on the DSMC calculations // Appl. Phys. A. 2013. V. 111. P. 1107–1111.
21. Morozov A.A., Evtushenko A.B., Bulgakov A.V. Gas-dynamic acceleration of laser-ablation plumes: Hyperthermal particle energies under thermal vaporization // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 106. P. 054107–054122.
22. Morozov A., Titarev V. Planar gas expansion under intensive nanosecond laser evaporation into vacuum as applied to time-of-flight analysis // Entropy. 2022. V. 24. P. 1738.
23. Ellegaard O., Schou J., Urbassek H.M. Monte–Carlo description of gas flow from laser-evaporated silver // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. S577–S581.
24. Morozov A.A. Effect of temporal evolution of the evaporation surface temperature on the plume expansion under pulsed laser ablation // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1677. P. 012143–012150.
25. Morozov A.A. Effect of evaporation-flux nonuniformity along the irradiation-spot radius on the plume expansion dynamics during pulsed laser ablation in vacuum // Thermophysics and Aeromechanics. 2022. V. 29. P. 437–448.
26. Kelly R. Gas dynamics of the pulsed emission of a perfect gas with applications to laser sputtering and to nozzle expansion. // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. № 2. P. 860–874.
27. Sibold D., Urbassek H.M. Gas-dynamic study of pulsed desorption flows into a vacuum // Phys. Fluids A. 1992. V. 4. P. 165.
28. Kelly R., Miotello A. Pulsed-laser sputtering of atoms and molecules. Part I: Basic solutions for gas-dynamic effects // Appl. Phys. B. 1993. V. 57. P. 145–158.

29. *Miotello A., Moro C.* Numerical solution of gas-dynamic equations with boundary conditions for reflection and recondensation // *Phys. Lett. A.* 1995. V. 199. P. 333–338.
30. *Singh R.K., Narayan J.* Pulsed-laser evaporation technique for deposition of thin films: physics and theoretical model // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. № 13. P. 8843–8859.
31. *Anisimov S.I., Bäuerle D., Luk'yanchuk B.S.* Gas dynamics and film profiles in pulsed-laser deposition of materials // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 48. P. 12076–12081.
32. *Morozov A.A., Frolova A.A., Titarev V.A.* On different kinetic approaches for computing planar gas expansion under pulsed evaporation into vacuum // *Phys. Fluid.* 2020. V. 32. № 11. P. 112005.
33. *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. № 511. P. 1144–1161.
34. *Shakhov E.M.* Solution of axisymmetric problems of the theory of rarefied gases by the finite-difference method // *USSR Comput. Math. and Math. Phys.* 1974. V. 14. № 4. P. 147–157.
35. *Larina I.N., Rykov V.A.* A numerical method for calculating axisymmetric rarefied gas flows // *Comput. Math. and Math. Phys.* 1998. V. 38. № 8. P. 1335–1346.
36. *Titarev V.A., Morozov A.A.* Arbitrary Lagrangian-Eulerian discrete velocity method with application to laser-induced plume expansion // *Appl. Math. and Comput.* 2022. V. 429. P. 127241.
37. *Titarev V.A.* Implicit numerical method for computing three-dimensional rarefied gas flows using unstructured meshes // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2010. V. 50. № 10. P. 1719–1733.
38. *Titarev V.A.* Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows // *Comput. and Fluid.* 2018. V. 169. P. 62–70.
39. *Titarev V.A.* Application of the Nesvetay code for solving three-dimensional high-altitude aerodynamics problems // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2020. V. 60. P. 737–748.
40. *Hirsh C.* Numerical computation of internal and external flows. 2nd Ed. Publ.: John Wiley & Sons, 2007.
41. *Gaburro E., Dumbser M., Castro M.J.* Direct Arbitrary-Lagrangian-Eulerian finite volume schemes on moving nonconforming unstructured meshes // *Comput. and Fluid.* 2017. V. 159. P. 254–275.
42. *Boscheri W., Dimarco G.* High order central WENO-implicit-explicit Runge Kutta schemes for the BGK model on general polygonal meshes // *J. Comput. Phys.* 2020. V. 422. P. 109766.
43. *Gusarov A.V., Smurov I.* Influence of atomic collisions in vapour phase on pulsed laser ablation // *Appl. Surf. Sci.* 2000. V. 168. P. 96–99.
44. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Heat transfer and evaporation from a plane surface into a half-space upon a sudden increase in body temperature // *Fluid Dynamics.* 2002. V. 37. № 1. P. 126–137.
45. *Колган В.П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных течений газовой динамики // *Уч. зап. ЦАГИ.* 1972. Т. 3. № 6. С. 68–77.
46. *Kolgan V.P.* Application of the principle of minimizing the derivative to the construction of finite-difference schemes for computing discontinuous solutions of gas dynamics // *J. Comput. Phys.* 2011. V. 230. № 7. P. 2384–2390.
47. *van Leer B.* Towards the ultimate conservative difference scheme I: the quest for monotonicity // *Lect. Not. Phys.* 1973. V. 18. P. 163–168.
48. *Mieussens L.* Discrete-velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries // *J. Comput. Phys.* 2000. V. 162. № 2. P. 429–466.
49. *Gusarov A.V., Smurov I.* Gas-dynamic boundary conditions of evaporation and condensation: numerical analysis of the Knudsen layer // *Phys. Fluid.* 2002. V. 14. № 12. P. 4242–4255.
50. *Shu C.-W.* Total-Variation-Diminishing time discretizations // *SIAM J. Sci. and Statistic. Comput.* 1988. V. 9. P. 1073–1084.
51. *Титарев В.А.* Программный комплекс Несветай-3Д моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа // *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журн.* 2014. № 6. С. 124–154.
52. *Titarev V.A., Utyuzhnikov S.V., Chikitkin A.V.* OpenMP + MPI parallel implementation of a numerical method for solving a kinetic equation // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2016. V. 56. № 11. P. 1919–1928.
53. *Gorobets A.V., Duben A.P.* Technology for supercomputer simulation of turbulent flows in the good new days of exascale computing // *Supercomput. Frontiers and Innovat.* 2021. V. 8. № 4. P. 4–10.
54. *Alvarez-Farre X., Gorobets A., Trias F.X.* A hierarchical parallel implementation for heterogeneous computing. Application to algebra-based CFD simulations on hybrid supercomputers // *Comput. and Fluid.* 2021. V. 214. P. 104768.
55. *Ansys ICEM CFD, version 2021 R2.* Ansys ICEM CFD Help Manual. 772 с.
56. *Bird G.A.* Sophisticated versus simple DSMC // *Rarefied Gas Dynamics. Proc. 25th Intern. Symp.*, Ed. by M.S. Ivanov and A.K. Rebrov. Novosibirsk, 2007. P. 349.
57. *Titov E.V., Levin D.A.* Extension of the DSMC method to high pressure flows // *Inter. J. Comput. Fluid Dyn.* 2007. V. 21. P. 351.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

ЧИСЛЕННЫЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА

© 2023 г. А. А. Фролова^{1,*}

¹19333 Москва, ул. Вавилова, 44, корп. 2, ФИЦИУ РАН, Россия

*e-mail: aafrolova@yandex.ru

Поступила в редакцию 15.06.2023 г.

Переработанный вариант 14.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Исследуются модельные уравнения, аппроксимирующие систему уравнений Больцмана для многокомпонентного газа. Анализируются методы определения параметров в релаксационных членах, соответствующих интегралам перекрестных столкновений. Проводится численное сравнение решений с использованием трех модельных систем и уравнений Больцмана на примере следующих задач: релаксация смеси к равновесию, задача о структуре ударной волны и определение динамики парогазового облака, вызванного импульсным лазерным облучением вещества мишени. Показано влияние параметров в релаксационных операторах на степень отличия решений при использовании различных моделей. Библ. 25. Табл. 2. Фиг. 3.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, модельные уравнения, законы сохранения, многокомпонентный газ, нестационарные задачи.

DOI: 10.31857/S0044466923120128, **EDN:** TBGJZG

1. ВВЕДЕНИЕ

Физические процессы, подлежащие изучению, становятся все более сложными и многообразными, что связано с уменьшением размеров используемых устройств и изучением сильно неравновесных процессов. Важными факторами становятся учет различных форм внутренней энергии молекул, учет состава изучаемого газа, явлений ионизации и кластеризации. В этом случае кинетический подход является одним из основных инструментов исследования. В силу большой трудоемкости прямого интегрирования точного уравнения Больцмана (УБ) наиболее часто численные подходы основываются на прямом статистическом методе (ПСМ) или на использовании альтернативных подходов на основе модельных кинетических уравнений. Однако создание модельных уравнений для описания течения, например, многокомпонентного газа, вызывает трудности при аппроксимации УБ.

Если для однокомпонентного газа разработанные модельные уравнения [1–3] в определенных режимах течения показали свою эффективность, подтвержденную многочисленными расчетами Е.М. Шахова и его коллег (см., например, [4–7]), то для многокомпонентного газа пока не удалось получить аппроксимацию системы УБ, приводящую в гидродинамическом пределе к одновременно всем правильным коэффициентам переноса (Фика, Соре, Дюфура, Фурье и Ньютона). Кроме этого, многие модели разработаны для бинарных смесей максвелловских молекул, и вопрос о применимости их для любого количества компонент и любых законов взаимодействия молекул остается открытым.

Первая модель типа БГК (Бхатнагара–Гросса–Крука) для смесей была представлена в 1956 г. [8] и с тех пор была модифицирована во многих работах, опубликованных с 60-х годов прошлого столетия по настоящее время (см., например, [9–20]). Предложенные к настоящему времени модели представляют в основном два типа приближения системы УБ. К первому типу относятся модели, аппроксимирующие все интегралы столкновений каждой компоненты одним релаксационным оператором (односкоростные релаксационные модели) [13–15, 20], а ко второму – мо-

дельные уравнения, в которых каждый интеграл столкновений аппроксимируется отдельно (многоскоростные релаксационные модели) [10, 11, 17].

В работе [17] представлены положения, определяющие корректность модельных уравнений для приближения системы УБ, которые включают в себя три условия: а) выполнение законов сохранения, б) доказательство Н-теоремы и в) единственность равновесного решения. Кроме этого, в работе [12] было указано еще на необходимость выполнения для модельных уравнений условия неразличимости (indifferentiability), означающего, что в случае смеси, состоящей из механически эквивалентных молекул (с равными массами и сечениями столкновений), сумма функций распределения по скоростям компонент смеси удовлетворяет уравнению Больцмана для одной компоненты. Однако, как показано в работе [17], это свойство может быть выполнено, если интеграл столкновений молекул одного вида и интегралы перекрестных столкновений аппроксимируются одновременно одним релаксационным членом. Таким образом, многоскоростные релаксационные модели, сохраняющие структуру системы УБ, не могут удовлетворять условию неразличимости в отличие от односкоростных релаксационных моделей. Насколько важно это свойство, можно определить, только проводя сравнение соответствующих решений.

Отметим также, что для многих предложенных моделей не представлен сравнительный анализ с решениями по УБ, и поэтому вопрос об их пригодности для расчетов остается открытым. Цель данной работы — провести численное и теоретическое сравнение моделей [13, 15, 17], относящихся к разным типам построения, с решением по УБ с целью выбора наиболее корректной аппроксимации для моделирования разлета парогазового облака, вызванного коротко импульсным лазерным облучением вещества мишени. Отметим, что для всех рассматриваемых моделей доказаны Н-теорема, выполнение законов сохранения и существование единственного равновесного решения.

2. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА

Для многокомпонентного газа система уравнений Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + (\xi, \nabla_r f_i) = Q_{ii}(f_i, f_i) + \sum_{j \neq i}^N Q_{ij}(f_i, f_j) = Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.1)$$

где $Q_{ii}(f_i, f_i)$ — интегралы самостолкновений (столкновений молекул одного вида), $Q_{ij}(f_i, f_j)$ — интегралы перекрестных столкновений (столкновений молекул разных видов) [21]. Система (2.1) определяет эволюцию функций распределения $f_i(\mathbf{r}, \xi, t)$, зависящих от вектора координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$ физического пространства, вектора скоростей $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ и времени t . Макропараметры каждой компоненты, плотность числа частиц n_i , вектор скорости $\mathbf{u}_i$ и температура T_i определяются по функции распределения соотношениями

$$(n_i, n_i \mathbf{u}_i, 3k_B n_i T_i)' = \int f_i(\xi) (1, \xi, m_i |\xi - \mathbf{u}_i|^2) d\xi,$$

а глобальные макропараметры всей смеси, плотность числа частиц n , массовая плотность ρ , средняя скорость $\mathbf{u}$ и температура T по макропараметрам компонент следующим образом:

$$n = \sum_{i=1}^{i=N} n_i, \quad \rho = \sum_{i=1}^{i=N} m_i n_i, \quad \mathbf{u} = \sum_{i=1}^{i=N} m_i n_i \mathbf{u}_i / \rho,$$

$$3nk_B T + \rho \mathbf{u}^2 = \sum_{i=1}^{i=N} (3n_i k_B T_i + m_i n_i \mathbf{u}_i^2).$$

Для системы (2.1) выполняются законы: а) сохранения числа частиц, суммарного импульса и суммарной энергии [21]

$$\langle Q_i, 1 \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, N; \quad \sum_{i=1}^{i=N} m_i \langle Q_i, \xi \rangle = 0; \quad \sum_{i=1}^{i=N} m_i \langle Q_i, \xi^2 \rangle = 0,$$

б) Н-теорема

$$\sum_{i=1}^{i=N} \langle Q_i, \log(f_i) \rangle \leq 0$$

и в) существование единственного равновесного решения $f_i = n_i M(\xi, \mathbf{u}, T/m_i)$ при $Q_i = 0$, $i = 1, \dots, N$. Здесь использованы обозначения для интеграла по скоростному пространству $\langle f, h \rangle = \int f(\xi) h(\xi) d\xi$ и для функции Максвелла $M(\xi, \mathbf{u}, T/m) = (2\pi k_B T/m)^{-3/2} e^{-m(\xi - \mathbf{u})^2 / (2k_B T)}$. Для корректного приближения (2.1) системой модельных уравнений необходимо, чтобы указанные свойства также были выполнены.

При построении модельных уравнений используются различные виды релаксационных операторов, которые можно записать в виде

$$\tilde{Q}_{ij} = v_{ij} (n_i G_{ij}(\mathbf{u}_{ij}, T_{ij}) - f_i),$$

где вектор скорости $\mathbf{u}_{ij}$, температура T_{ij} и частота столкновений v_{ij} — параметры, подлежащие определению. В случае модельных уравнений типа БГК $G_{ij}(\mathbf{u}_{ij}, T_{ij})$ является функцией Максвелла. Если рассматриваются эллипсоидально-статистические модели, то функция G_{ij} представляет собой эллипсоидальную функцию, зависящую от вектора скорости $\mathbf{u}_{ij}$, температуры T_{ij} и тензора напряжений каждой компоненты [2] или всей смеси [15].

Так как число законов сохранения меньше числа свободных параметров, то определение в функции G_{ij} вектора скорости и температуры представляет основную проблему при замене системы УБ модельными уравнениями. Параметры в релаксационных членах $\tilde{Q}_{ii}$ можно определить из законов сохранения числа частиц, импульса и энергии для каждой компоненты

$$\langle \tilde{Q}_{ii}, \Psi(\xi) \rangle = 0, \quad \Psi(\xi) = (1, m_i \xi, m_i \xi^2)^t,$$

а определение $\mathbf{u}_{ij}, T_{ij}$ в релаксационных членах, соответствующих перекрестным интегралам столкновений, возможно, например, из соотношений

$$m_i \langle \tilde{Q}_{ij}, \xi \rangle + m_j \langle \tilde{Q}_{ji}, \xi \rangle = 0, \quad m_i \langle \tilde{Q}_{ij}, \xi^2 \rangle + m_j \langle \tilde{Q}_{ji}, \xi^2 \rangle = 0,$$

но с дополнительными условиями [14]. Различные дополнительные условия приводят к разным модельным уравнениям.

Часто макропараметры в $\tilde{Q}_{ij}$ определяются из равенства моментов интегралов перекрестных столкновений и их модельных аналогов [10, 11, 13, 17]

$$\langle (\tilde{Q}_{ij} - Q_{ij}), \xi \rangle = 0, \quad \langle (\tilde{Q}_{ij} - Q_{ij}), \xi^2 \rangle = 0.$$

В случае максвелловских молекул (с потенциалом взаимодействия $U_{ij}(r) = \frac{\alpha_{ij}}{r^p}$, $p = 4$) моменты первого и второго порядков имеют вид [9, 10]:

$$\int m_i \xi Q_{ij} d\xi = 2\mu_{ij} \chi_{ij} n_i n_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad (2.2)$$

$$\int m_i (\xi - \mathbf{u}_i)^2 Q_{ij} d\xi = 4\mu_{ij} \chi_{ij} n_i n_j \frac{1}{(m_i + m_j)} \left[3k_B (T_j - T_i) + m_j |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i|^2 \right], \quad (2.3)$$

где $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ — приведенная масса.

Соотношения (2.2), (2.3) для максвелловских молекул являются точными, и χ_{ij} является величиной, зависящей от масс молекул и не зависящей от температур. Для потенциалов взаимодействия с произвольным показателем p соотношения (2.2), (2.3) могут быть записаны в таком же виде, если $(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i)^2 / (k_B T_j / m_j + k_B T_i / m_i) \ll 1$, и функции распределения близки к равновесным.

Значения коэффициентов χ_{ij} для потенциалов центрального поля приведены в [9], а в случае закона взаимодействия молекул по закону твердых сфер (с диаметром d) имеют вид

$$\chi_{ij} = \frac{4}{3} \sqrt{2\pi k_B T_i / m_i + 2\pi k_B T_j / m_j} (d_i + d_j)^2 / 4. \quad (2.4)$$

3. МОДЕЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА

Рассмотрим сначала модельные уравнения, которые при определении макропараметров в релаксационных членах используют равенства (2.2), (2.3). К таким моделям относятся модель ААР [13], (Андриес, Аоки, Пертхаме) и ВВГСП [17] (Бобылев, Бизи, Гроппи, Спига, Потапенко). Данные модельные уравнения имеют разную структуру и используют различные предположения.

Модельные уравнения ААР представляют собой односкоростную релаксационную модель, при условии, что $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{U}_i$, $T_{ij} = \bar{T}_i$, $v_{ij} = v_i$, приближают $Q_i = \sum_{j=1}^N Q_{ij}$ одним релаксационным оператором вида

$$\tilde{Q}_i = v_i (n_i M(\xi, \mathbf{U}_i, \bar{T}_i / m_i) - f_i)$$

с общей температурой $\bar{T}_i$ и вектором скорости $\mathbf{U}_i$. Из (2.2), (2.3) макропараметры $\mathbf{U}_i$ и $\bar{T}_i$ определяются следующими формулами:

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{u}_i + \sum_{j=1}^{j=N} \alpha_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad \alpha_{ij} = 2 \frac{\chi_{ij} n_j m_j}{v_i (m_i + m_j)},$$

$$3k_B \bar{T}_i = 3k_B T_i - m_i (\mathbf{U}_i - \mathbf{u}_i)^2 + \sum_{j=1}^{j=N} 2\alpha_{ij} m_i / (m_j + m_i) \left[3k_B (T_j - T_i) + m_j |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i|^2 \right],$$

а частота столкновений v_i , полагается равной $v_i = \sum_{j=1}^{j=N} \chi_{ij} n_j$, что гарантирует положительность температуры. Данная модель помимо основных свойств (а—в) удовлетворяет также условию неразличимости [13].

Модельные уравнения ВВГСП представляют собой многоскоростную релаксационную модель $\tilde{Q}_i = \sum_{j=1}^N \tilde{Q}_{ij}$, где $\tilde{Q}_{ij}$ задаются в виде

$$\tilde{Q}_{ij} = v_{ij} (n_i M(\xi, \mathbf{U}_{ij}, \bar{T}_{ij} / m_i) - f_i).$$

Здесь скорости $\mathbf{U}_{ij}$ и температура $\bar{T}_{ij}$ находятся из соотношений (2.2), (2.3) для каждой компоненты смеси отдельно:

$$\mathbf{U}_{ij} = (1 - \alpha_{ij}) \mathbf{u}_i + \alpha_{ij} \mathbf{u}_j,$$

$$\bar{T}_{ij} = (1 - b_{ij}) T_i + b_{ij} T_j + \gamma_{ij} |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|^2, \quad i, j = 1, \dots, N,$$

где

$$\alpha_{ij} = 2 \frac{\chi_{ij} n_j m_j}{v_{ij} (m_i + m_j)}, \quad b_{ij} = \frac{2\alpha_{ij} m_i}{(m_i + m_j)}, \quad \gamma_{ij} = \frac{\alpha_{ij} m_i}{3} \left[\frac{2m_j}{(m_i + m_j)} - \alpha_{ij} \right].$$

Величина v_{ij} является свободным параметром. Если положить $v_{ij} = 2\chi_{ij} n_j$, то получатся соотношения

$$\mathbf{U}_{ij} = (m_i \mathbf{u}_i + m_j \mathbf{u}_j) / (m_i + m_j),$$

$$\bar{T}_{ij} = T_i + \frac{2\mu_{ij}}{(m_i + m_j)} (T_j - T_i + m_j |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|^2 / (3k_B)),$$

которые использовались для бинарной смеси в [8, 10, 11]. При $v_{ij} = \chi_{ij} n_j$ (которое будет использоваться в наших расчетах) будем иметь следующие соотношения:

$$U_{ij} = [(m_i u_i + m_j u_j) + m_j (u_j - u_i)] / (m_i + m_j),$$

$$\bar{T}_{ij} = T_i + \frac{4\mu_{ij}}{(m_i + m_j)} (T_j - T_i).$$

Частота в модельном члене $\tilde{Q}_{ii}$ определяется, как и в случае однокомпонентного газа [1]. Отметим, что модельные уравнения BBGSP не удовлетворяют условию неразличимости [17].

Обе эти модели относятся к БГК типу и в континуальном режиме не дают правильного значения для числа Прандтля.

Для коррекции числа Прандтля Pr предложены различные формы эллипсоидально-статистической модели (см., например, [2, 15, 20]), отличающиеся параметрами в эллипсоидальной функции G^{ES} .

Мы рассмотрим односкоростную релаксационную модель ESBGK (Брулл) [15, 22], имеющую следующий вид $\tilde{Q}_i = v (G_i^{ES} - f_i)$. В этой модели полагается равенство векторов скорости и температуры в релаксационных функциях глобальным макропараметрам смеси, т.е. $u_{ij} = u$, $T_{ij} = T$, и частота столкновений полагается одинаковой для всех компонент смеси $v_{ij} = v$. Функции G_i^{ES} представляются в виде

$$G_i^{ES} = \frac{n_i}{\sqrt{\det(A)}} \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_i c^T A^{-1} c}{2k_B T} \right),$$

где анизотропная матрица $A = I - \frac{1 - \alpha Pr}{\alpha Pr} \left(\frac{P}{k_B n T} - I \right)$ определяется по тензору напряжения P :

$$P = \sum_{i=1}^N m_i \int f_i (\xi - u) \otimes (\xi - u) d\xi.$$

Здесь I — единичная матрица, $c = \xi - u$ — собственная скорость частиц, $\alpha = \sum \frac{m n_i}{n m_i}$, $m = \sum m_i n_i / n$.

На основании разложения Чепмена—Энского модельных уравнений и сопоставления с уравнениями Навье—Стокса частота столкновений v определяется по глобальным переменным следующим образом [15]:

$$v = \frac{n k_B T}{\mu} \alpha Pr,$$

где μ — коэффициент вязкости смеси. Число Прандтля смеси $Pr = c_p \mu / K$ находится по коэффициенту теплопроводности K и удельной теплоемкости $c_p = 5k_B / (2m)$. Коэффициенты вязкости и теплопроводности могут быть определены по правилу смешения Уилки [22], которое и используется в наших расчетах.

Особенность данной модели состоит в том, что функция в релаксационном операторе не зависит от состояния отдельных компонент, а определяется по макропараметрам всей смеси. Данное предположение может сужать область применения такого подхода до задач, рассматривающих течения, близкие к равновесию. Однако достоинствами модели являются выполнение условия неразличимости и возможность в континуальном пределе получить правильное отношение коэффициента вязкости к коэффициенту теплопроводности.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Расчеты для сравнения описанных выше моделей проводятся в безразмерных величинах, определяемых по характерным параметрам: длины L , температуры T_{ref} , массы m_0 и диаметра d_0

Таблица 1. Параметры трехкомпонентной смеси и отличия скорости и температуры от решения по УБ при релаксации к равновесию

Газы	m_i	n_i	u_{xi}	T_i	$\delta_u, \%$ AAP	$\delta_u, \%$ ESBGK	$\delta_T, \%$ AAP	$\delta_T, \%$ ESBGK
Kr	1.0	0.5	1.0	1.0	0.1	0.9	0.6	0.1
Ar	0.48	0.3	0.0	2.0	0.4	1.4	0.8	3.5
Ne	0.24	0.2	0.5	0.5	0.3	4.0	4.1	10

Таблица 2. Параметры двухкомпонентной смеси и отличия скорости и температуры от решения по УБ при релаксации к равновесию

Газы	m_i	n_i	u_{xi}	T_i	$\delta_u, \%$ AAP	$\delta_u, \%$ ESBGK	$\delta_T, \%$ AAP	$\delta_T, \%$ ESBGK
Ne	1.0	0.1	1.0	0.2	16.0	>100	4.2	72
He	0.2	0.9	-1.0	0.2	6.0	50	3.4	12

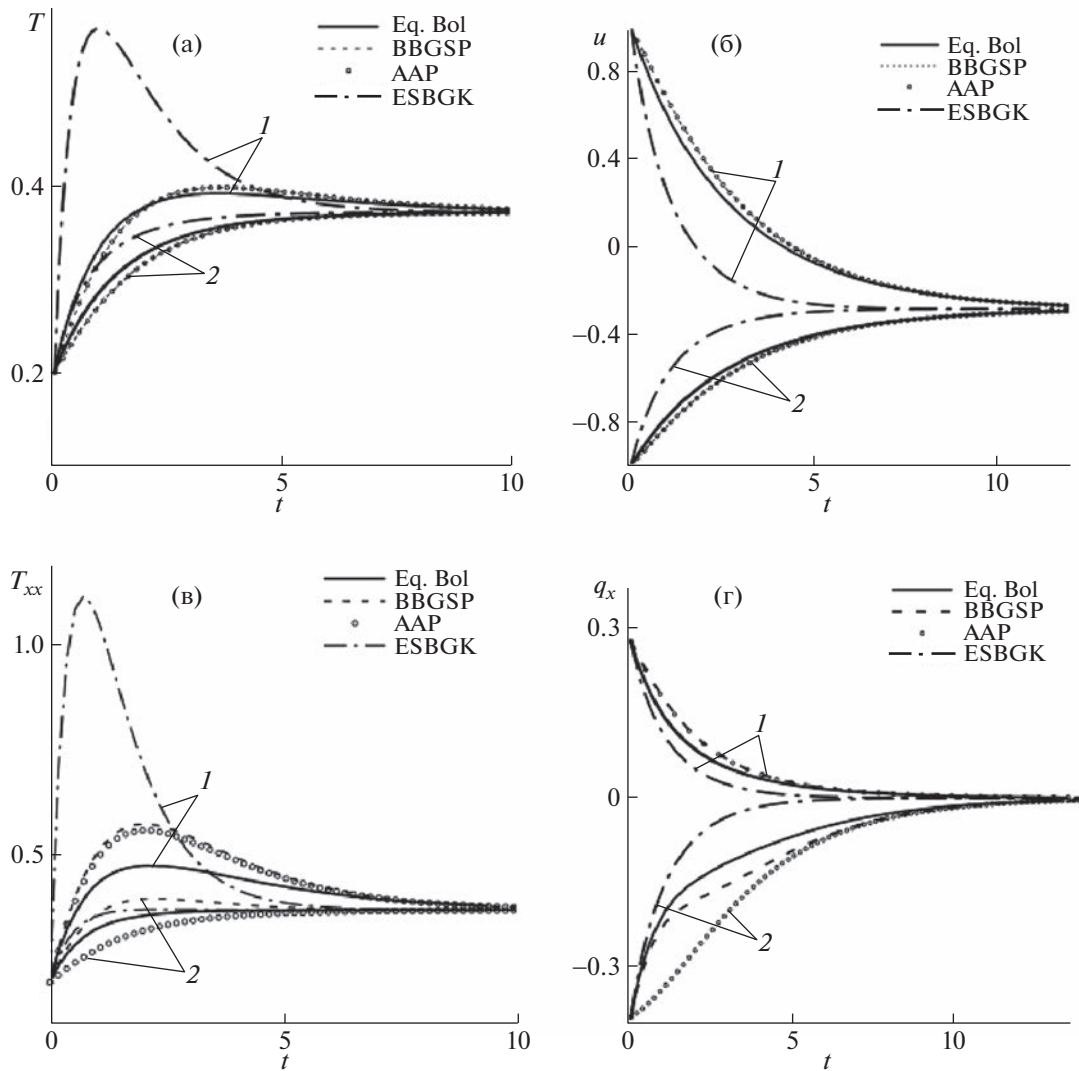
самой тяжелой компоненты, наиболее вероятной скорости молекул $u_0 = \sqrt{2k_B T_{\text{ref}}/m_0}$ и плотности числа частиц n_{ref} . Вычисления осуществляются на основе программного комплекса UFS [23], где в кинетический блок добавлены алгоритмы расчетов рассматриваемых модельных уравнений. Для вычисления интеграла столкновений применяется метод, предложенный в [24], основанный на двухточечном проектировании энергии частиц после столкновений на равномерную кубическую сетку в импульсном пространстве. Для численного решения УБ используется метод расщепления на свободно молекулярный этап и этап релаксации. Для уравнения переноса применяется метод конечных объемов с реконструкцией функции распределения на грани с использованием ограничителя потоков minmod.

Для сравнения численных решений модельных уравнений и УБ рассмотрим первоначально задачу о релаксации к равновесию трех- и двухкомпонентной смеси. Данные сравнения показывают, насколько правильно были заданы коэффициенты χ_{ij} и параметры в моделях.

Тест 1. Задача об однородной релаксации. Постановка данной задачи предполагает отсутствие зависимости функции распределения от координат физического пространства, и определению подлежат скорости релаксации к равновесию макропараметров каждой компоненты. Функции распределения в начальный момент задаются в виде функций Максвелла $f_i(\xi, t=0) = n_i M(\xi, \mathbf{u}_i, T_i/m_i)$, параметры которых приведены в табл. 1, 2, при этом компоненты скорости u_{yi} и u_{zi} равны нулю, а диаметры молекул в данных расчетах считаются равными.

Расчеты релаксации трех компонент показали, что профили температуры, скорости, теплового потока и компоненты тензора вязких напряжений, полученные по моделям AAP и BBGSP, практически совпадают и близки к решению по УБ. Модель ESBGK дает большее отличие. Максимальные относительные отклонения $\delta_f = \max_i |f_M - f_B|/f_B$, где нижние индексы М, Б, обозначают расчет с использованием модельных уравнений и УБ соответственно, приведены в табл. 1.

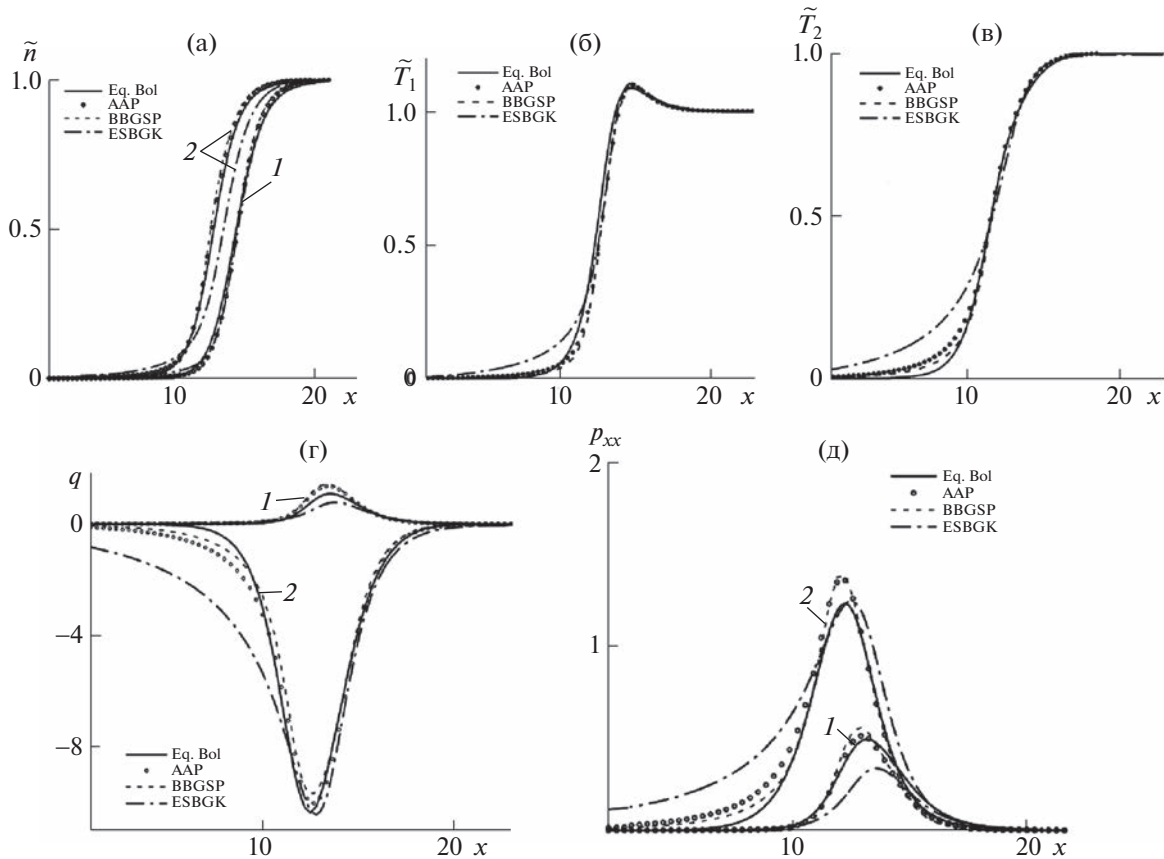
Во втором варианте начальные скорости и температуры (см. табл. 2) выбраны так, что условие $(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i)^2 / (k_B T_j/m_j + k_B T_i/m_i) \ll 1$ не выполняется, и использованное соотношение (2.4) для величины χ_{ij} становится несправедливым. Кроме этого, данные начальные условия соответствуют сильно неравновесному режиму. Как видно из фиг. 1а, б, результаты расчетов по моделям AAP и BBGSP качественно согласуются с результатами, полученными с помощью кинетического уравнения Больцмана. Тогда как относительные отклонения макропараметров для модели ESBGK (см. табл. 2) достигают более 100% из-за всплеска температуры и слишком быстрой релаксации скорости вследствие использования в функции G_i^{ES} единых глобальных макропараметров и одинаковой частоты столкновений для всех компонент. Отметим, что профили теплового потока и продольной температуры (фиг. 1в, г) для всех модельных уравнений имеют существенные отличия от результатов, полученных решением УБ.



Фиг. 1. Релаксация двух компонент с отношением масс $m_1 : m_2 = 5$, (а) температура, (б) скорость, (в) продольная температура, (г) тепловой поток, цифрами 1, 2 обозначены профили макропараметров Ne и He соответственно.

Тест 2. Задача о структуре ударной волны. Рассматривается ударная волна для смеси двух газов со скоростью набегающего потока с числом Маха $M = 3$ и отношением масс компонент $m_1 : m_2 = 5$ (Ne, He). Диаметры атомов разных компонент предполагаются равными $d_1 = d_2 = d_0$. Безразмерные плотности числа частиц компонент до ударной волны $n_1 = 0.1$, $n_2 = 0.9$. Число Кнудсена $Kn = \lambda/L = 1$, длина свободного пробега λ задается в расчете, как $\lambda = 1/(n_{ref} d_0^2 \pi \sqrt{2})$, где n_{ref} — плотность числа частиц газовой смеси до ударной волны.

На фиг. 2а–в показаны нормированные значения плотностей и температур $\tilde{s}_i = (s - s_{ia}) / (s_{ib} - s_{ia})$, где s_{ia} , s_{ib} — макропараметры до и после ударной волны соответственно. И как видно из фиг. 2а, б, профили плотности и температуры Ne (тяжелой компоненты), полученные по моделям AAP, BBGSP, хорошо воспроизводят решение по УБ, а температурные профили He (легкой компоненты) (фиг. 2в) имеют отличия. Результаты расчета по эллипсоидально-статистической модели для всех приведенных макропараметров имеют значительные отклонения от результатов расчета по УБ, подъем температуры перед фронтом ударной волны выражен сильнее, чем дают модели AAP и BBGSP, а профиль плотности He имеет сдвиг вправо.



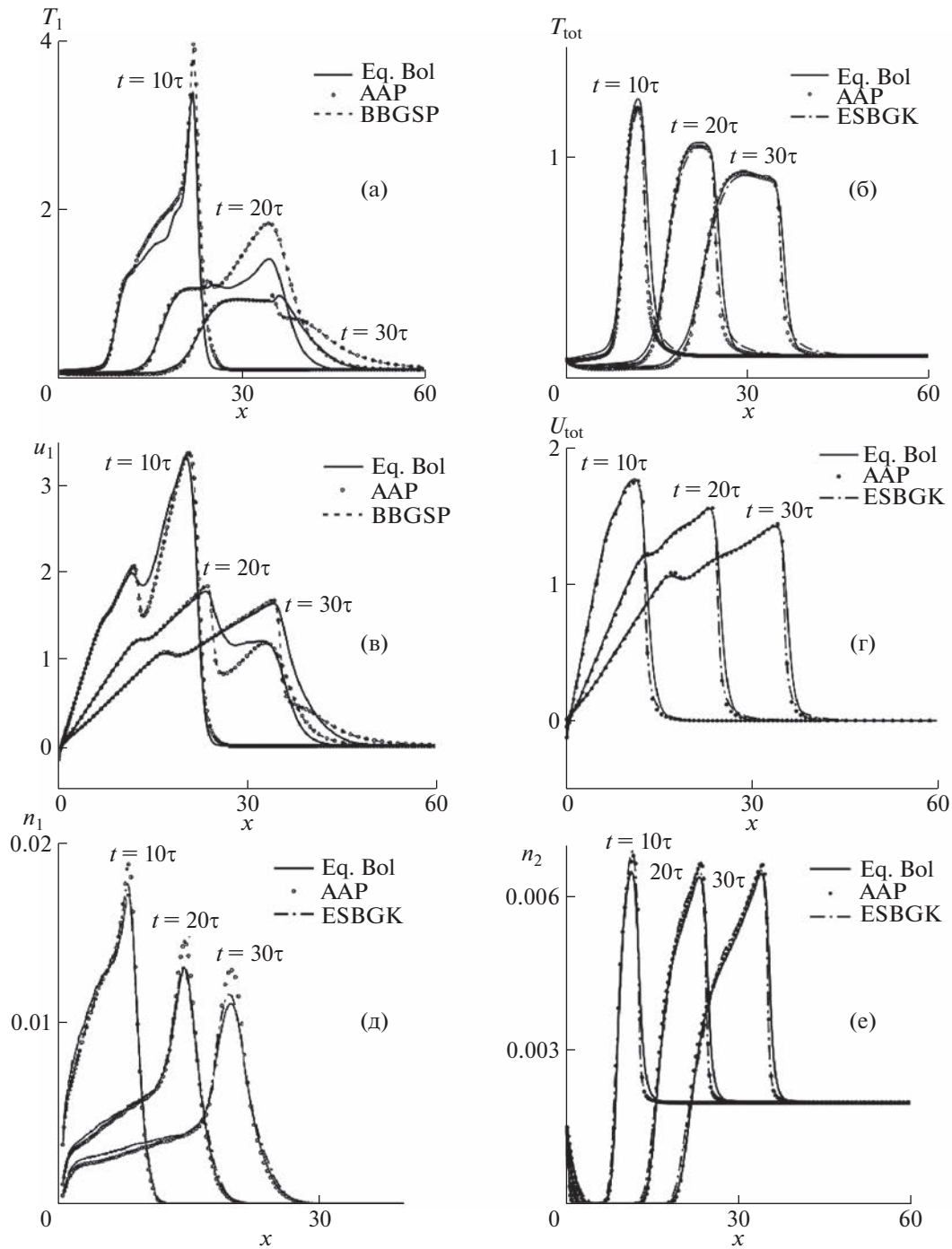
Фиг. 2. Структура ударной волны с числом Маха $M = 3$, отношением масс $m_1 : m_2 = 5$, (а) плотность, (б) температура Ne , (в) температура He , (г) тепловой поток, (д) продольная компонента тензора вязких напряжений, цифрами 1, 2 обозначены профили макропараметров Ne и He соответственно.

Отметим, что задача о структуре ударной волны соответствует режиму сильной неравновесности, и отклонения решений модельных уравнений от решений УБ являются закономерными. Тепловой поток и компонента тензора вязких напряжения также имеют существенные отличия перед фронтом ударной волны (фиг. 2г, д), при этом важно, что экстремальные значения теплового потока воспроизводятся модельными уравнениями удовлетворительно.

Тест 3. Определение динамики парогазового облака при испарении в фоновый газ. Рассматривается одномерный разлет (при $x > 0$) парогазового облака в фоновый газ, соответствующий начальной стадии испарения, вызванного импульсным лазерным облучением мишени радиуса R . Температуры поверхности и фонового газа равны 3000 и 300 К соответственно. Отношение массы атомов мишени к массе атомов фонового газа $m_1 : m_2 = 2$. Число Кнудсена $Kn = \lambda/R = 0.001$, безразмерное время действия лазера $\tau_0 = 0.5$, что соответствует ~ 25 монослоям испаряющихся частиц [25]. Безразмерные значения плотности и температуры испаряющегося газа на границе области при $x = 0$ и $t < \tau_0$ равны $n_1 = 1$, $T_1 = 1$. При $t > \tau_0$ предполагается полное поглощение обратного потока частиц, т.е. $n_1 = 0$. Плотность и температура фонового газа при $x = 0$ задаются, соответственно, $n_2 = 0.002$, $T_2 = 0.1$. Граничные условия для функций распределения имеют следующий вид:

$$f_1(x = 0, \xi_x > 0, t) = \begin{cases} n_1 M(\xi, \mathbf{u}_1 = \mathbf{0}, T_1/m_1), & t < \tau_0, \\ 0, & t \geq \tau_0, \end{cases}$$

$$f_2(x = 0, \xi_x > 0, t) = n_2 M(\xi, \mathbf{u}_2 = \mathbf{0}, T_2/m_2).$$



Фиг. 3. Разлет парогазового облака в фоновый газ в разные моменты времени. (а), (в) температура и скорость тяжелой компоненты, (б), (г) глобальные температура и скорость смеси, (д), (е) плотность числа частиц тяжелой и легкой компоненты соответственно.

При $x > 0$ и $t = 0$ плотности числа частиц атомов мишени и фоновый газ полагаются равными $n_1 = 10^{-10}$ (моделирование вакуума) и $n_2 = 0.002$, температуры обоих газов $T_1 = T_2 = 0.1$. Начальные условия для функций распределения задаются следующим образом:

$$f_i(x > 0, \xi, t = 0) = n_i M(\xi, \mathbf{u}_i = \mathbf{0}, T_i/m_i), \quad i = 1, 2.$$

Проведенные расчеты показали, что поведение скорости и температуры легкой компоненты близко к поведению глобальных значений скорости и температуры. При этом макропараметры, полученные решением УБ, хорошо воспроизводятся решением модельных уравнений (см. фиг. 3б, г). Профили скорости и температуры тяжелой компоненты (см. фиг. 3а, в) имеют отличия на фронте волны для моделей ААР и ВВГСП и качественно другое поведение при расчете по модели ESBGK (график не приводится), что связано с неравновесным режимом течения пара в этой области. Поведение плотности числа частиц для обоих компонент удовлетворительно согласуется с решением УБ для модели ESBGK, тогда как модели ААР и ВВГСП дают отличия в экстремальных точках (фиг. 3д, е).

Сравнение значений макропараметров, полученных с использованием моделей ААР и ВВГСП, показывает, что эти модели дают очень близкие результаты. Максимальные относительные отклонения скорости и температуры не превышают 2%. Такие же близкие результаты сохраняются и при равных массах молекул, а также при рассмотрении трехкомпонентной смеси. Таким образом, условие неразличимости не является важным фактором при решении рассмотренных задач, в отличие от использования в релаксационных членах хотя и приближенных макропараметров, но описывающих состояние каждой компоненты. Решение с применением ESBGK модели из-за использования глобальных макропараметров и единой частоты столкновений для обоих компонент показывает отличие решений для каждой компоненты, но для всей смеси дает решение, близкое к решению по УБ.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Были проведены численные сравнения трех кинетических релаксационных систем для моделирования течения многокомпонентного газа. Были рассмотрены как односкоростные модели (ААР и ESBGK), так и многоскоростная ВВГСП. Расчеты показали, что модели ААР и ВВГСП дают решения, удовлетворительно согласующиеся с решениями, полученными по уравнению Больцмана и близкие между собой, несмотря на то, что данные модели относятся к разным типам построения. Общее для этих моделей свойство, — использование моментных следствий интегралов перекрестных столкновений для определения макропараметров в релаксационных членах, позволяет более точно воспроизводить результаты уравнения Больцмана для каждой компоненты. Эллипсоидальная модель, дающая правильное число Прандтля, в приведенных примерах дает большее отклонение, а в некоторых случаях приводит к ложному поведению температуры. Данное отклонение от решения по УБ возникает из-за отсутствия учета динамики каждой компоненты и использования частоты столкновений единой для всей смеси. Возможно, данная модель окажется более точной при режимах, близких к континуальным, что будет исследовано в дальнейшем. Численные расчеты программным комплексом UFS проводились на вычислительных ресурсах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шахов Е.М. Обобщение релаксационного кинетического уравнения Крука // Изв. АН СССР. МЖГ. 1968. № 5. С. 142–145.
2. Holway L.H. New statistical models for kinetic theory: Methods of construction // Phys. Fluids. 1966. V. 9. P. 1658.
3. Larina I.N., Rykov V.A. Nonlinear nonequilibrium kinetic model of the Boltzmann equation for monatomic gases // Comput. Math. Math. Phys. 2011. V. 51. № 11. P. 1962–1972.
4. Konopel'ko N.A., Shakhov E.M. Evolution to a steady state for rarefied gas flowing from a tank into a vacuum through a plane channel // Comput. Math. Math. Phys. 2017. V. 57. № 10. P. 1695–1705.
5. Konopel'ko N.A., Titarev V.A., Shakhov E.M. Unsteady rarefied gas flow in a microchannel driven by a pressure difference // Comput. Math. Math. Phys. 2016. V. 56. № 3. P. 470–482.
6. Titarev V.A., Shakhov E.M. Efficient method for computing rarefied gas flow in a long finite plane channel // Comput. Math. Math. Phys. 2012. V. 52. № 2. P. 269–284.
7. Шахов Е.М. Течение разреженного газа между коаксиальными цилиндрами под действием градиента давления // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 7. С. 1107–1116.
8. Gross E.P., Krook M. Model for collision processes in gases: small amplitude oscillations of charged two-component systems // Phys. Rev. 1956. V. 102. № 3. P. 593–604.
9. Goldman E., Sirovich L. Equations for gas mixtures // Phys. Fluids. 1967. V. 10. № 9. P. 1928–1940.
10. Morse T.F. Kinetic model equations for a gas mixture // Phys. Fluids. 1964. V. 7. № 12. P. 2012–2013.
11. Hamel B.B. Kinetic model for binary gas mixtures // Phys. Fluids. 1965. V. 8. № 3. P. 418–425.

12. *Garzo V., Santos A., Brey J.J.* A kinetic model for a multicomponent gas // *Phys. Fluids A* . 1989. V. 1. № 2. P. 380–383.
13. *Andries P., Aoki K., Perthame B.* A consistent BGK-type model for gas Mixtures // *J. Stat. Phys.* 2002. V. 106. № 5. P. 993–1018.
14. *Groppi M., Monica S., Spiga G.* // A kinetic ellipsoidal BGK model for a binary gas mixture // *Europhys. Lett.* 2011. V. 96. № 6. P. 64002.
15. *Brull S.* An ellipsoidal statistical model for gas mixtures // *Commun. Math. Sci.* 2014. V. P. 1–13.
16. *Kosugo S.* Model Boltzmann equation for gas mixtures: Construction and numerical comparison // *Eur. J. Mech – B Fluids Mechanics B/Fluids*. 2009. V. 28. P. 170–184.
17. *Bobylev A.V., Bisi M., Groppi M., Spiga G., Potapenko I.F.* A general consistent BGK model for gas mixtures // *Kinetic Related Models*. 2018. V. 11. № 6. P. 1377–1393.
18. *Haack J.R., Hauck C.D., Murillo M.S.* A conservative, entropic multispecies BGK model // *J. Stat. Phys.* 2017. V. 168. № 4. P. 826–856.
19. *Klingenberg C., Pirner M., Puppo G.* A consistent kinetic model for a two component mixture with an application to plasma // *Kinetic Related Models*. 2017. V. 10. № 2. P. 445–465.
20. *Todorova B., Steijl R.* Derivation and numerical comparison of Shakhov and Ellipsoidal Statistical kinetic models for a monoatomic gas mixture // *Europ. J. Mech. B/Fluids*. 2019. V. 76. P. 390–402.
21. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
22. *Pfeiffer M., Mirza A., Nizenkov P.* Multi-species modeling in the particle-based ellipsoidal statistical Bhatnagar-Gross-Krook method for monatomic gas species// *Physics of Fluids* 2021. V. 33. №. 3. P. 036106.
23. *Kolobov V., Arslanbekov R., Aristov V., Frolova A., Zabelok S.* Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement // *J. Comput. Phys.* 2007. V. 223. P. 589–608.
24. *Черемусин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // *Докл. АН* 1997. Т. 35. № 1. С. 1–4.
25. *Морозов А.А., Фролова А.А., Тумарев В.А.* On different kinetic approaches for computing planar gas expansion under pulsed evaporation into vacuum // *Physics of Fluids*. 2020. V. 32. С. 112005.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

О МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУИ РАЗРЕЖЕННОЙ ПЛАЗМЫ
НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

© 2023 г. М. В. Абгарян^{1,*}, А. М. Бишаев^{2,**}, В. А. Рыков³

¹ 125080 Москва, Ленинградское шоссе, 5, а/я 43, МАИ, Россия

² 141701 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, МФТИ, Россия

³ 117333 Москва, ул. Вавилова, 44, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: abgmvk@gmail.com

**e-mail: bishaev@bk.ru

Поступила в редакцию 02.06.2023 г.
Переработанный вариант 14.08.2023 г.
Принята к публикации 22.08.2023 г.

Рассматривается задача о струе разреженной плазмы, выходящей из стационарного плазменного двигателя. Рассмотрение проводится полностью на кинетическом уровне, а именно, для описания движения всех компонент плазмы вводятся функции распределения. Система кинетических уравнений должна решаться совместно с уравнениями Максвелла. Обсуждаются методы решения полученной задачи. Библ. 10. Фиг. 1.

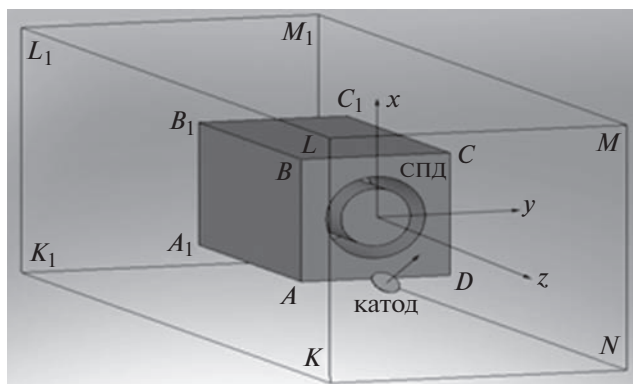
Ключевые слова: плазма, электронная, ионная и нейтральная компоненты плазмы, функции распределения электронной, ионной и нейтральной компонент плазмы, электрическое поле, длина Дебая, уравнение Пуассона, ленгмюровские колебания, квазинейтральность.

DOI: 10.31857/S0044466923120025, **EDN:** ZVAIWT

ВВЕДЕНИЕ

Наиболее полное решение задачи о струе, выходящей из стационарного плазменного двигателя (СПД), рассматривалось в работах [1] и [2]. Геометрические аспекты постановки этой задачи представлены на фиг. 1.

Из кольцевого отверстия двигателя, который моделируется параллелепипедом $ABCD_1B_1C_1D_1$, выходят в окружающее пространство ионы и нейтралы. Электроны испускаются катодом (он изображен на фиг. 1) и поступают через кольцевое отверстие в двигатель. В названных выше ра-



Фиг. 1.

ботах приводятся результаты ранее сделанных оценок, которые показывают, что движущаяся среда есть квазинейтральная плазма и для ее адекватного описания необходим кинетический подход.

В [1] и [2] для описания движения ионов и нейтралов использовался кинетический подход, т.е. вводились функции распределения ионов и нейтралов и формулировались кинетические уравнения, откуда они находились. Для описания электронной компоненты использовались ее уравнения движения, откуда с помощью выдвинутой А.И. Морозовым гипотезы “термализованного потенциала” (см. [3]) получалось выражение для электрического поля. Это позволяло замкнуть систему кинетических уравнений для ионов и нейтралов.

В [1] был построен численный метод для решения получившейся системы кинетических уравнений и, используя его, сделать расчеты, результаты которых приведены в [2]. На фиг. 1 параллелепипед $KLMNK_1L_1M_1N_1$ обозначает область (расчетную), где осуществлялись расчеты. Они производились как вверх, так и вниз по потоку.

В данной статье предлагается описание движения электронной компоненты вести на кинетическом уровне, что позволит определить электрическое поле из совместного решения системы кинетических уравнений и уравнений Максвелла и, тем самым, освободиться от гипотезы “термализованного потенциала”.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть $f_i = f_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ — функция распределения ионов, где $\boldsymbol{\xi}$ — их скорость, а D_i ($\boldsymbol{\xi} \in D_i$) — скоростное пространство ионов. Соответственно, $f_e = f_e(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ — функция распределения электронов, а $\mathbf{v}$, D_e суть скорость и скоростное пространство электронов. Аналогично $f_n = f_n(t, \mathbf{x}, \mathbf{w})$ является функцией распределения нейтралов, тогда как $\mathbf{w}$ — скорость нейтралов с $\mathbf{w} \in D_n$ их скоростным пространством. Предположим, что так введенные функции распределения подчиняются следующей системе кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial t} + \xi^k \frac{\partial f_i}{\partial x^k} + \frac{e}{m_i} E^k \frac{\partial f_i}{\partial \xi^k} &= J_{in}, \\ \frac{\partial f_e}{\partial t} + v^i \frac{\partial f_e}{\partial x^i} - \frac{e}{m_e} E^i \frac{\partial f_e}{\partial v^i} &= 0, \\ \frac{\partial f_n}{\partial t} + w^i \frac{\partial f_n}{\partial x^i} &= J_{ni}. \end{aligned} \quad (1)$$

В (1) электрическое поле $\mathbf{E} = \{E^i\}$ предполагается потенциальным, т.е. $E_k = -\frac{\partial \varphi}{\partial x^k}$, $k = 1, 2, 3$, где $\varphi = \varphi(t, \mathbf{x})$ есть потенциал электрического поля, для определения которого используется уравнение Максвелла

$$\Delta \varphi = 4\pi e(n^e - n^i), \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (2)$$

e , как в (1), так и в (2) есть модуль заряда электрона, а m_i и m_e — массы иона и электрона соответственно. Фигурирующие в (2) n_e и n_i суть плотности электронов и ионов соответственно, и определяются следующими формулами:

$$n_e = \int_{D_e} f_e(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad n_i = \int_{D_i} f_i(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}.$$

Плотность тока определяется в виде

$$\mathbf{j} = e(\mathbf{j}_i - \mathbf{j}_e), \quad \text{где} \quad \mathbf{j}_i = \int_{D_i} \boldsymbol{\xi} f_i d\boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{j}_e = \int_{D_e} \mathbf{v} f_e d\mathbf{v}$$

суть плотности ионного и соответственно электронного токов. Величины $\mathbf{u}_i = \frac{\mathbf{j}_i}{n_i}$, $\mathbf{u}_e = \frac{\mathbf{j}_e}{n_e}$ являются макроскопическими скоростями ионов и электронов. Выражения

$$\frac{3}{2}kT^i = \frac{m_i}{2} \int_{D_i} (\xi - \mathbf{u}_i)^2 f_i d\xi, \quad \frac{3}{2}kT^e = \frac{m_e}{2} \int_{D_e} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_e)^2 f_e d\mathbf{v}$$

определяют такие величины, как температуры ионов и электронов. Правые части первого и третьего уравнения (1) суть интегралы столкновений ионов с нейтралами и нейтралами с ионами. В цитируемых выше работах указывалось, что основной вклад в них дает резонансная перезарядка (см. [4]) – взаимодействие, заключающееся в том, что ион отбирает электрон у нейтрала, становясь при этом нейтралом; а нейтрал, отдавая электрон, становится ионом. В [1] использовались для интегралов столкновений следующие выражения $J_{in} = v_{in}f_n - v_{ni}f_i$, $J_{ni} = v_{ni}f_i - v_{in}f_n$, где $v_{in} = n_i v$, $v_{ni} = n_n v$, а v есть функция от макропараметров ионов и нейтралов (ее выражение имеется в [1]). Эти выражения будут использоваться в данной работе. В [2], применяя процедуру феноменологического вывода уравнения Больцмана, были получены более точные выражения для частот столкновений. Как показали тестовые расчеты, результаты численных решений систем кинетических уравнений в диапазоне используемых входных данных, слабо зависели от вида частоты в интегралах столкновений.

Предполагается, что электроны в струе двигаются в бесстолкновительном режиме. Отметим сразу, что в формулах (1), (2) и тех, которые будут приведены ниже, по повторяющимся индексам производится суммирование. Стоящие внизу индексы i, e, n используются исключительно для обозначения принадлежности соответствующей величины к ионам, электронам или нейтралам. Отметим также, что аналогичный подход к описанию плазмы был предложен А.А. Власовым в [5].

Приведем уравнения (1) и (2) к безразмерному виду. За масштаб длины примем полуширину квадрата ABCD – a (см. фиг. 1). За масштабные значения скоростных пространств примем следующие величины:

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{2eU_0}{m_i}}, \quad v_0 = \sqrt{\frac{2kT_e^0}{m_e}}, \quad w_0 = \sqrt{\frac{2kT_n^0}{m_n}},$$

где U_0 – разрядное напряжение (≈ 300 В), T_e^0, T_n^0 – суть характерные значения температуры электронов и нейтралов соответственно. Так как $m_e \ll m_i$, то, как правило, $v_0 > \xi_0$, $t_0 = \frac{a}{\xi_0}$, хотя в

нашем случае $\frac{\xi_0}{v_0} \approx 10^{-2}$. Такой выбор временного масштаба связан с тем, что в задаче о струе, выходящей из СПД, основной интерес представляет поведение ионов. Электрическое поле в плазме (самосогласованное) определяется движением ее компонент, поэтому за его масштаб принимается величина $\Phi_0 = \frac{kT_e^0}{e}$, $E_0 = \frac{kT_e^0}{ae}$. Как обычно, величины

$$f_i^0 = \frac{n_0}{c_0^3}, \quad f_e^0 = \frac{n_0}{v_0^3}, \quad f_n^0 = \frac{n_n^0}{w_0^3}, \quad c_0 = \sqrt{\frac{2kT_i^0}{m_i}},$$

где T_i^0 – характерное значение температуры ионов на выходе из отверстия, принимаются за характерные значения соответствующих функций распределения. Здесь n_0 – масштабное значение плотности тонов и электронов. Она принимается одной и той же для обоих компонент. В безразмерном виде система (1) будет следующей:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial t} + \xi^k \frac{\partial f_i}{\partial x^k} + BE^k \frac{\partial f_i}{\partial \xi^k} &= \frac{1}{\text{Kn}_{in}} J_{in}, \\ \text{Sh}_e \frac{\partial f_e}{\partial t} + v^k \frac{\partial f_e}{\partial x^k} - E^k \frac{\partial f_i}{\partial v^k} &= 0, \\ \text{Sh}_n \frac{\partial f_n}{\partial t} + w^k \frac{\partial f_n}{\partial x^k} &= \frac{1}{\text{Kn}_{ni}} J_{ni}. \end{aligned} \quad (3)$$

В (3) $\text{Sh}_e = \frac{\xi_0}{v_0} = \sqrt{\frac{m_e U_0}{m_i T_e^0}} < 1$ — есть аналог числа Струхала для электронов, а $\text{Sh}_n = \frac{\xi_0}{w_0}$ для нейтронов, $B = \frac{e T_e^0}{2 U_0} < 1$. Kn_{in} , Kn_{ni} — числа Кнудсена ион-нейтрального и нейтрал-ионного взаимодействий, а стоящие перед ними члены суть безразмерные значения интегралов столкновений. Они определяются в [1] и [2].

Безразмерный вид уравнения (2) задается формулой (5)

$$\epsilon^2 \Delta \phi = (n_e - n_i). \quad (4)$$

Причем $\epsilon = \frac{r_d}{a}$, где $r_d = \sqrt{\frac{k T_e^0}{4 \pi e^2 n_0}}$ — есть длина Дебая или дебаевский радиус. В задаче о струе его величина составляет где-то 3×10^{-3} , т.е. является малой.

2. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Малость ϵ (дебаевского фактора) создает сложность для нахождения численного решения (3), (4). Она заключается в том, что из (4) следует, что, если электрическое поле в струе есть $O(1)$, то

$$n^i - n^e = O(\epsilon^2). \quad (5)$$

Соотношение (5) называется условием квазинейтральности. Его обычно принимают за определение плазмы — как среды, состоящей из заряженных частиц, чья объемная плотность заряда равна нулю (как в магнитной гидродинамике (см. [6])) или “близка” к нулю.

Экспериментальные данные свидетельствуют, что в плазме, если исключить дебаевские слои, нет сильных электрических полей $\left(O\left(\frac{1}{\epsilon^2}\right)\right)$. Тогда из уравнения Максвелла (4) не определяется электрическое поле (оно дает только условие квазинейтральности), и поэтому возникает задача определения электрического поля в ходе совместного решения макроскопических уравнений сохранения, описывающих плазменную среду, и уравнений Максвелла.

Упомянутая выше, гипотеза “термализованного потенциала” является частным случаем способа определения электрического поля, когда предполагают, что $\phi = f(n^i)$ (см. [7]).

В некоторых работах проблему определения электрического поля решают так: полагают, что $n_i = n_e$. Подставляя это соотношение в (4), получают, что $\Delta \phi = 0$. Откуда и получают электрическое поле. В основе такого подхода лежит непонимание того, что (5) есть не изначально заданный факт, а есть результат движения плазменной среды, подчиняющейся уравнениям сохранения и уравнениям Максвелла, в ходе которого получается $n^i - n^e = \epsilon^2 g(t, \mathbf{x})$. Подставляя этот результат в (4), получим $\Delta \phi = g(t, \mathbf{x})$. Это соотношение и будет определять электрическое поле в плазме, которое называется самосогласованным.

Целью данной работы является получение конкретного выражения $g(t, \mathbf{x})$ в написанном выше соотношении. Из системы кинетических уравнений (1) получим уравнение неразрывности и уравнения сохранения импульса для электронной и ионной компонент. Для этого проинтегрируем первое и второе уравнение (1) каждое по своему пространству скоростей, а затем умножим первое ξ , второе на $\mathbf{v}$, и снова проинтегрируем каждое по своему скоростному пространству (см. [8]). Получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial j_i^k}{\partial x^k} &= 0, & \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial j_e^k}{\partial x^k} &= 0, \\ \frac{\partial j_i^s}{\partial t} + M_i^s - \frac{e}{m_i} n_i E^s &= n_i v_{jn}^s - n_n v_{ji}^s, \\ \frac{\partial j_e^s}{\partial t} + M_e^s + \frac{e}{m_e} n_e E^s &= 0, & s &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$M_i^s = \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\int_{D_i} \xi^s \xi^k f_i d\xi \right), \quad M_e^s = \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\int_{D_e} v^s v^k f_e d\mathbf{v} \right),$$

$$a \quad n_n = \int_{D_n} f_n d\mathbf{w}, \quad J_n^s = \int_{D_n} w^s f_n d\mathbf{w}, \quad s = 1, 2, 3.$$

Обозначим через $N = (n^i - n^e)$ и вычтем из уравнения неразрывности для ионов уравнение неразрывности для электронов. Получим $\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial j^k}{\partial x^k} = 0$. Вычтем из уравнений сохранения импульса ионов соответствующие уравнения для электронов. После соответствующей манипуляции, которая заключается в переносе соответствующих членов из одной части уравнения в другую и вычитанию величины $n_n v j_e^s$ из обеих частей уравнения, получим

$$\frac{\partial j^s}{\partial t} + n_n v j^s - \frac{\bar{n}}{m_e} E^s = R^s, \quad R^s = M_e^s - M_i^s - n_n v j_e^s + n_i v j_n^s, \quad (7)$$

$$\bar{n} = n_e + \frac{m_e}{m_i} n_i, \quad s = 1, 2, 3.$$

Возьмем дивергенцию от левой и правой частей (7). Воспользовавшись тем, что $\operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi e N$, а $\operatorname{div} \bar{\mathbf{j}} = -\frac{\partial N}{\partial t}$, после переноса в правую часть некоторых членов получим

$$\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + n_n v \frac{\partial N}{\partial t} + 4\pi \bar{n} \frac{e^2}{m_e} N = Q,$$

где

$$Q = \frac{\partial}{\partial x^s} (M_i^s - M_e^s) + (\nabla(n_n v) \cdot \bar{\mathbf{j}}) + (\nabla(n_n v) \cdot \mathbf{j}_e) - (\nabla(n_i v) \cdot \mathbf{j}_n) - \left(\nabla \left(\frac{\bar{n}}{m_e} \right) \cdot \mathbf{E} \right),$$

$$\nabla(f) = \left\{ \frac{\partial f}{\partial x^s} \right\}, \quad s = 1, 2, 3.$$

Приведем полученную выше формулу к безразмерному виду. Будем использовать тот факт, что фигурирующая в (1) величина $n_n v$ есть (см. [1]) $n_n v = n_n^0 \xi_0 \sigma \bar{n}_n \bar{v}$, где σ есть сечение столкновений резонансной перезарядки (в расчетах $\sigma = 10^{-14}$ см²), а величины с чертой наверху обозначают безразмерные переменные. Чтобы иметь возможность анализа наиболее быстро протекающих процессов, происходящих в плазме, за временной масштаб примем самое короткое время — $\bar{t}_0 = \frac{a}{v_0}$. Рассмотрим подробнее переход к безразмерным переменным в левой части уравнения. Имеем

$$\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} = \frac{v_0^2}{a^2} n_0 \frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial \bar{t}^2}, \quad n_n v \frac{\partial N}{\partial t} = \frac{v_0^2}{a^2} n_0 \left(\frac{a \xi_0}{r_d v_0} n_n^0 r_d \sigma \right) \bar{n}_n \bar{v} \frac{\partial \bar{N}}{\partial \bar{t}} = \frac{v_0^2}{a^2} n_0 \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{Sh}_e R, \quad R = n_n^0 \sigma r_d = \frac{1}{\operatorname{Kn}_d}$$

где Kn_d есть число Кнудсена, определенное по дебаевскому радиусу r_d :

$$4\pi \bar{n} \frac{e^2}{m_e} N = \frac{v_0^2}{a^2} n_0 \left(\frac{4\pi a^2 e^2 n_0}{m_e v_0^2} \right) \bar{n}^d \bar{N} = \frac{v_0^2}{a^2} n_0 \left(a^2 \frac{2\pi e^2 n_0}{k T_e^0} \right) \bar{n}^d \bar{N} = \frac{v_0^2}{2a^2} n_0 \left(\frac{a}{r_d} \right)^2 \bar{n}^d \bar{N} = \frac{v_0^2}{a^2} n_0 \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\bar{n}^d \bar{N}}{2}.$$

Если, как это принято, опустить штрихи в безразмерных переменных и индекс у величины $\bar{n}^d$, то приведенное выше уравнение в безразмерном виде будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + \frac{R \operatorname{Sh}_e}{\varepsilon} n_n v \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\bar{n}}{2\varepsilon^2} \bar{N} = Q, \quad (8)$$

где

$$Q = \frac{\partial}{\partial x^s} (\text{Sh}_e^2 M_i^s - M_e^s) + \frac{\text{Sh}_e}{\text{Kn}_{in}} ((\nabla(n_n v) \cdot \mathbf{j}) + (\nabla(n_n v) \cdot \mathbf{j}_e) - (\nabla(n_i v) \cdot \mathbf{j}_n)) - \left(\nabla \left(\frac{\bar{n}}{2} \right) \cdot \mathbf{E} \right).$$

В последней формуле $\mathbf{j} = \text{Sh}_e \mathbf{j}_i - \mathbf{j}_e$, $\text{Kn}_{in} = \frac{1}{n_n^0 \sigma a}$.

Наличие малого параметра ε в левой части (8) указывает на то, что макроскопическое движение заряженных компонент плазмы будет происходить в двух временных масштабах: а именно — в режиме “быстрого времени”, когда $\frac{\partial N}{\partial t} = O\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$, и в масштабе, когда $\frac{\partial^2 N}{\partial t^2} \approx \frac{\partial N}{\partial t} = O(1)$. Для исследования возникающего движения воспользуемся разработанными в [9] асимптотическими методами.

Введем “быстрое время” формулой $\bar{t} = \frac{(t - t_0)}{\varepsilon}$. Нетрудно видеть, что по порядку величины это — время, которое требуется электронам, чтобы переместиться на расстояние порядка дебаевского радиуса. Будем искать решение (8) в виде разложения по параметру ε :

$$N = \bar{N}(\bar{t}, \mathbf{x}) + \varepsilon N_1(\bar{t}, \mathbf{x}) + \varepsilon^2 N_2(\bar{t}, \mathbf{x}) + O(\varepsilon^3). \quad (9)$$

Подставим (9) в уравнение

$$\varepsilon^2 \frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + \varepsilon R \text{Sh}_e n_n v \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\bar{n}}{2} \bar{N} = \varepsilon^2 Q.$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} n_n(t_0 + \varepsilon \bar{t}, \mathbf{x}) v(t_0 + \varepsilon \bar{t}, \mathbf{x}) &= n_n(t_0, \mathbf{x}) v(t_0, \mathbf{x}) + O(\varepsilon), \\ \bar{n}(t_0 + \varepsilon \bar{t}, \mathbf{x}) &= \bar{n}(t_0, \mathbf{x}) + O(\varepsilon), \quad Q(t_0 + \varepsilon \bar{t}, \mathbf{x}) = Q(t_0, \mathbf{x}) + O(\varepsilon), \end{aligned}$$

получим

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial \bar{t}^2} + \alpha \frac{\partial \bar{N}}{\partial \bar{t}} + \frac{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})}{2} \bar{N} \right) + \varepsilon \left(\left(\frac{\partial^2 N_1}{\partial \bar{t}^2} + \alpha \frac{\partial N_1}{\partial \bar{t}} + \frac{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})}{2} N_1 \right) \right) + \\ &+ \varepsilon^2 \left(\frac{\partial^2 N_2}{\partial \bar{t}^2} + \alpha \frac{\partial N_2}{\partial \bar{t}} + \frac{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})}{2} N_2 \right) = \varepsilon^2 Q(t_0, \mathbf{x}), \quad \alpha = R \cdot n_n(t_0, \mathbf{x}) v(t_0, \mathbf{x}). \end{aligned} \quad (10)$$

Откуда получим, что

$$\frac{\partial^2 \bar{N}}{\partial \bar{t}^2} + \alpha \frac{\partial \bar{N}}{\partial \bar{t}} + \frac{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})}{2} \bar{N} = 0, \quad \frac{\partial^2 N_1}{\partial \bar{t}^2} + \alpha \frac{\partial N_1}{\partial \bar{t}} + \frac{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})}{2} N_1 = 0,$$

и

$$\frac{\partial^2 N_2}{\partial \bar{t}^2} + \alpha \frac{\partial N_2}{\partial \bar{t}} + \frac{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})}{2} N_2 = Q(t_0, \mathbf{x}).$$

Пусть $N(t_0) \neq 0$, что означает отсутствие квазинейтральности в момент времени t_0 . Тогда

$$\bar{N}(\bar{t}, \mathbf{x}) = \begin{cases} A e^{-\alpha \bar{t}} \cos(\omega \bar{t} + \varphi), & \omega^2 = \frac{\bar{n}}{2} - \frac{\alpha^2}{4} > 0, \\ A e^{-\alpha_1 \bar{t}} + B e^{-\alpha_2 \bar{t}}, & \alpha_1 = \frac{\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - \frac{\bar{n}}{2}}, \quad \alpha_2 = \frac{\alpha}{2} - \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - \frac{\bar{n}}{2}}. \end{cases} \quad (11)$$

Не ограничиваясь общностью, положим $N_1(\bar{t}, \mathbf{x}) = 0$, а $N_2(\bar{t}, \mathbf{x}) = \frac{2}{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})} Q(t_0, \mathbf{x})$. Тогда с точностью до $O(\varepsilon^3)$ решение (10) записывается в виде

$$N(\bar{t}, \mathbf{x}) = \bar{N}(\bar{t}, \mathbf{x}) + \frac{2\varepsilon^2}{\bar{n}(t_0, \mathbf{x})} Q(t_0, \mathbf{x}). \quad (12)$$

Из (12) следует, что если в какой-то момент времени нарушается квазинейтральность, то в режиме быстрого времени квазинейтральность устанавливается или в режиме обычной экспоненциальной релаксации.

При получении решения (9) в режиме времени t решение также раскладывается в ряд по параметру ϵ . Опуская несложные выкладки, можно получить, что в этом случае

$$N(t - t_0, \mathbf{x}) = \epsilon^2 \frac{2Q(t - t_0, \mathbf{x})}{\bar{n}(t - t_0, \mathbf{x})} + O(\epsilon^3).$$

В [9] указано, что разложения, полученные в разных масштабах, согласуются при помощи процедуры сращивания. Если сращивание разложений можно осуществить, то можно построить равномерно пригодное разложение. В нашем случае равномерно пригодное разложение есть

$$N(t - t_0, \mathbf{x}) = \bar{N}\left(\frac{t - t_0}{\epsilon}, \mathbf{x}\right) + \frac{2\epsilon^2}{\bar{n}((t - t_0), \mathbf{x})} Q((t - t_0), \mathbf{x}) + O(\epsilon^3). \quad (13)$$

Из (13) следует, что, если вдруг в плазме нарушится квазинейтральность, т.е. $N(t_0) \neq O(\epsilon^2)$, то в течение времени $\Delta t = (t - t_0) \approx \epsilon$ возникнут процессы, которые приведут к установлению квазинейтральности.

Полученный результат является обобщением результатов, имеющих в [7]. Там, когда рассматривался вопрос, связанный с затуханием Ландау, после ряда допущений было получено, что

если квазинейтральности нет, то возникают колебания с частотой $\omega^2 = \frac{n^e}{4\pi e^2 m^e}$. В (8) именно этот

член в безразмерной форме определяет частоту возникающих колебаний. В [7] также отмечается, что возникающие колебания будут затухающими, и на примере диффузионного приближения показывается, что если $N(t_0) \neq 0$, то $N(t)$ будет за время $\Delta t = (t - t_0) \gg \epsilon$ будет приближаться к квазинейтральному режиму. В нашем случае этот результат также получается. Действительно,

если в (11) $\frac{\alpha^2}{4} - \frac{\bar{n}}{2} > 0$, то решение определяется формулой (12), и α_2 будет соответствовать полученной в [7] константе в показателе экспоненты. Идея проведенного выше анализа возникла именно тогда, когда авторы ознакомились с проведенным в [7] анализом диффузионного приближения. Собственно, проведенный выше анализ есть обобщение изложенного в [7] метода на систему уравнений сохранения, которые были получены из приведенных кинетических уравнений. Нетрудно видеть, что фигурирующая в (9) α пропорциональна числу столкновений, которые испытывают носители заряда на длине Дебая в единицу времени, поэтому ее величина будет определяться числом Kn_d .

Следует отметить, что (9) было получено без условия потенциальности электрического поля. Кинетическое уравнение для электронов в случае учета ионизации будет другим. Это приведет к тому, что изменятся выражения для частот столкновений в левой части уравнения, а также $Q(t, \mathbf{x})$. Но тип уравнения (8) не изменится, поэтому выше приведенный результат имеет достаточно общий характер.

Можно предложить естественную схему численного решения (3), (4). Пусть в момент времени t_i известны функции распределения и электрическое поле. Методом, описанным в [1], можно найти все функции распределения в момент времени $[t_i, t_i + \Delta t]$, а значит, все макропараметры, в том числе $N(t_i + \Delta t)$.

Потенциал электрического поля определится тогда из уравнения Пуассона

$$\epsilon^2 \Delta \phi = N(t_i + \Delta t, \mathbf{x}). \quad (14)$$

Так и делается во всех работах, где решалась задача о движении плазмы в канале ускорителя. Только в этих работах $N(t_i + \Delta t, \mathbf{x})$ находилась методом статистического моделирования (метод Берда). Для получения решения уравнения Пуассона (14) необходимо корректно поставить граничные условия, которые ниоткуда не следуют (речь идет о граничных условиях для потенциала электрического поля в плазме). В упомянутых выше работах для решения этой проблемы приходилось идти на ряд существенно ограничивающих полученные результаты допущений. Например, предполагалось, что электрическое поле $\mathbf{E} = (z, \phi)$, где z — длина канала, а ϕ — полярный угол (движение в канале предполагалось осесимметричным), а до этого делались абсурдные

предположения, что моделирование происходит для плазмы с другой диэлектрической проницаемостью. Нужно отметить также, что величина шага интегрирования должна выбираться так, чтобы $\min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\} < \varepsilon^2$. Последнюю проблему удастся как-то решить, так как за последнее время существенно возросли возможности ЭВМ. Следует также отметить, что в описанной выше схеме никак не учитывается процесс установления квазинейтральности в плазме, а это может привести к возникновению в численном решении незатухающих плазменных колебаний.

Чтобы ввести в численную схему учет процесса установления квазинейтральности, на промежутке $[t_i, t_i + \Delta t]$ будем решать уравнение (8). Для получения его решения запишем явную схему, т.е.

$$\varepsilon^2 \frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + \varepsilon R \text{Sh}_e n_n(t_i, \mathbf{x}) v(t_i, \mathbf{x}) \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\bar{n}(t_i, \mathbf{x})}{2} N = \varepsilon^2 Q(t_i, \mathbf{x}). \quad (15)$$

Решение уравнения (15) есть $N(t_i + \Delta t, \mathbf{x}) = g(t_i, \mathbf{x}) + \varepsilon^2 Q(t_i, \mathbf{x})$, где

$$g(t_i, \mathbf{x}) = \begin{cases} A \cos(\omega \Delta t + \varphi), & \omega^2 = \frac{\bar{n}(t_i, \mathbf{x})}{2} - \left(\frac{n_n(t_i, \mathbf{x}) v(t_i, \mathbf{x})}{2 \text{Kn}_d} \right)^2 > 0, \\ Ae^{-\alpha_1 \Delta t} + Be^{-\alpha_2 \Delta t}, & \alpha_{1,2} = \frac{n_n(t_i, \mathbf{x}) v(t_i, \mathbf{x})}{\text{Kn}_d} \pm \sqrt{\left(\frac{n_n(t_i, \mathbf{x}) v(t_i, \mathbf{x})}{2 \text{Kn}_d} \right)^2 - \frac{\bar{n}(t_i, \mathbf{x})}{2}}. \end{cases}$$

Отсутствие числа Струхала Sh_e объясняется тем, что шаг Δt берется в режиме решения кинетических уравнений.

Подставляя найденное решение в правую часть (14), получим $\Delta \varphi = \frac{g(t_i, \mathbf{x})}{\varepsilon^2} + Q(t_i, \mathbf{x})$. Откуда на-
ходится

$$\varphi(t_i + \Delta t, \mathbf{x}) = \int_V \frac{\frac{g(t_i, \mathbf{y})}{\varepsilon^2} + Q(t_i, \mathbf{y})}{4\pi \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + (y_3 - x_3)^2}} d\mathbf{y} + \varphi_{out}. \quad (16)$$

В (16) интегрирование ведется по всей счетной области V , а параметр φ_{out} есть значение потенциала электрического поля, в котором находится двигатель. Предполагается, что он известен, и удовлетворяет уравнению $\Delta \varphi_{out} = 0$. Такой способ действия решает проблему граничных условий, которые должны быть установлены, чтобы получить решение (14). С этим электрическим полем на шаге промежутка $[t_i, t_i + \Delta t]$ находится решение системы кинетических уравнений. По найденным функциям распределения находятся все макропараметры в момент времени $t_i + \Delta t$, и процесс, если нужно, повторяется.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение полностью кинетического подхода к исследованию плазменной струи позволило получить систему уравнений сохранения, которым подчиняется это движение. Проведенный анализ уравнений сохранения позволил изучить процесс установления квазинейтральности в движущейся плазменной среде, что позволило построить численный метод совместного решения кинетических уравнений и уравнения Максвелла. Этот метод основывается на том, что некоторые макропараметры находятся из решения уравнений сохранения, замкнутых с помощью соответствующих функций распределения. Такой метод решения кинетических уравнений был разработан в [10] и показал свою эффективность. Подводя итог приведенному выше анализу, надо отметить, что он позволил вскрыть механизм установления квазинейтральности в плазме и установить временные масштабы этого процесса, что является основным результатом данной статьи.

Следует отметить, что описанный выше метод исследования предполагается использовать для моделирования процессов, происходящих в ускорительных каналах электроракетных двигателей. При этом ясно, что движение электронов уже не будет свободномолекулярным, так как необходим учет ионизации. Необходимо также будет каким-то образом, рассмотрев задачу о взаимодействии электронов с твердой поверхностью, решить проблему формулирования граничных условий для функции распределения электронов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абгарян М.В., Бишаев А.М. Модернизация метода расщепления для решения системы кинетических уравнений, описывающих поведение струи разреженной плазмы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2018. Т. 39. № 7. С. 1132–11146.
2. Абгарян М.В., Бишаев А.М. Нестационарная модель струи разреженной плазмы, истекающей из Стационарного плазменного двигателя // Физ. плазмы. 2018. Т. 4. № 2. С. 238–249.
3. Жевандров П.И., Морозов А.И., Якунин С.А. Динамика плазмы, образующейся при ионизации разреженного газа // Физ. плазмы. 1984. Т. 10. Вып. 2. С. 353–365.
4. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Физматлит, 1987. 592 с.
5. Власов А.А. Нелокальная статистическая механика. М.: Наука, 1976. 264 с.
6. Франк-Каменецкий Д.А. Лекции по физике плазмы. М.: Атомиздат, 1968. 285 с.
7. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. Т. X. М.: Наука, 1987. 527 с.
8. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
9. Коул. Дж. Методы возмущения в прикладной математике. М.: Мир, 1972. 274 с.
10. Бишаев А.М., Рыков В.А. Решение стационарных задач кинетической теории газов при умеренных и малых числах Кнудсена методом итераций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1975. Т. 15. № 1. С. 172–182.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

АЛГОРИТМ ПАРАЛЛЕЛИЗАЦИИ ПО ДАННЫМ ДЛЯ МЕТОДА ПРЯМОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ OPENMP¹⁾

© 2023 г. Н. Ю. Быков^{1,2,*}, С. А. Фёдоров^{1,2}

¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 44, к. 2, ФИЦ ИУ РАН, Россия

² 195251 С.-Петербург, ул. Политехническая, 29,

С.-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия

*e-mail: nbykov2006@yandex.ru

Поступила в редакцию 26.06.2023 г.

Переработанный вариант 05.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Рассмотрен алгоритм параллелизации по данным для метода прямого статистического моделирования течений разреженного газа. Выполнен анализ масштабирования производительности основных процедур алгоритма. Показано удовлетворительное масштабирование производительности параллельной процедуры индексации частиц, предложен алгоритм ускорения работы данной процедуры. На примерах решения задач о свободном потоке и обтекании конуса для 28-ядерного узла с общей памятью получено приемлемое ускорение работы всего алгоритма. Проведено сравнение эффективности алгоритма параллелизации по данным и алгоритма декомпозиции расчетной области для свободного течения. С использованием разработанного параллельного кода выполнено исследование обтекания конуса сверхзвуковым разреженным потоком. Библ. 39. Фиг. 18. Табл. 2.

Ключевые слова: метод прямого статистического моделирования Монте-Карло, параллельные алгоритмы, параллелизация по данным, OpenMP, разреженный газ, обтекание конуса.

DOI: 10.31857/S0044466923120086, **EDN:** JAJPFH

ВВЕДЕНИЕ

Решение современных задач внешней аэродинамики для условий разреженной атмосферы, разработка двигателей малой тяги космических летательных аппаратов, устройств микроэлектромеханических и нанoeлектромеханических систем, а также многочисленные приложения в области вакуумных технологий требуют совершенствования методов расчета течений разреженного газа, разработки соответствующих программ и алгоритмов. Математическая модель расчета разреженных течений базируется на решении интегродифференциального уравнения Больцмана [1], [2]. Численное решение обобщенного уравнения Больцмана в общем случае произвольной геометрии задачи с физико-химическими процессами, протекающими в объеме газовой фазы, затруднительно. Данное обстоятельство связано со сложностью “точного” расчета интеграла столкновений [3], [4]. Широкое развитие получили методы решения уравнения Больцмана, основанные на возможности использования упрощенной модели интеграла столкновений [5–10]. Однако модификации таких методов для численного моделирования течений химически реагирующей газовой смеси еще находятся в стадии развития. Наиболее распространенным в настоящее время методом расчета течений разреженного газа является метод прямого статистического моделирования (ПСМ) Монте-Карло [11–13].

Метод ПСМ относится к стохастическим методам решения уравнения Больцмана. Метод предполагает моделирование движения и столкновений модельных частиц, каждая из которых

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (код проекта № 22-11-00078). Вычислительные ресурсы предоставлены Суперкомпьютерным центром “Политехнический”.

представляет F_N реальных атомов или молекул ($F_N \gg 1$). Макроскопические параметры течения получаются путем усреднения параметров частиц.

Метод был предложен австралийским ученым Грэмом Бердом [14]. Метод ПСМ реализован в ряде коммерческих пакетов (например, Монасо [15], SMILE [16]), свободно распространяемых кодов [17] и исследовательских программ [18]. К достоинствам метода относится возможность моделирования трехмерных течений со сложной геометрией с учетом физико-химических процессов в объеме движущейся среды и на поверхности обтекаемых тел. К недостаткам относится вычислительная ресурсоемкость метода, прямо пропорциональная числу модельных частиц в поле течения и возрастающая с уменьшением характерного числа Кнудсена. Для преодоления данного недостатка возможна как разработка экономичных схем расчета, требующих относительно малого числа частиц в ячейке [19], [20], так и адаптация алгоритма ПСМ для расчета на компьютерных кластерах различной архитектуры. В настоящей работе рассматривается второй подход для ускорения работы алгоритма ПСМ.

Разработка высокопроизводительных алгоритмов ПСМ началась с середины 1990-х гг. и была обусловлена интенсивным развитием многопроцессорных компьютеров. Наиболее популярным методом параллелизации являлся метод декомпозиции расчетной области [21–25], однако были предложены и альтернативные подходы, связанные с декомпозицией по данным [26] и декомпозицией по статистически независимым ветвям нестационарной задачи [27–29].

В настоящее время доступные суперкомпьютерные ресурсы имеют гетерогенную архитектуру – в общем случае они включают несколько узлов и несколько многоядерных процессоров в каждом узле вместе с графическими процессорами. Гетерогенная архитектура суперкомпьютеров открывает возможности для разработки многоуровневых высокопроизводительных алгоритмов, комбинирующих различные методы параллелизации. Такая разработка требует понимания возможностей каждого из упомянутых выше методов. На взгляд авторов наименее изучены возможности подхода, ориентированного на параллелизацию по данным. Работы, содержащие детальное описание техники распараллеливания по данным, а также тестовые эталонные задачи для оценки эффективности соответствующих параллельных алгоритмов ПСМ, практически отсутствуют. Настоящая работа посвящена разработке одноуровневого алгоритма параллелизации по данным и анализу его эффективности. Развитие низкоуровневых алгоритмов важно для ускорения расчетов на вычислительных системах с общей памятью, как в случае самостоятельного использования, так и в качестве одного из уровней многоуровневого алгоритма. Также такие алгоритмы будут несомненно полезны для современных персональных компьютеров и серверов с общей памятью.

Настоящая статья организована следующим образом. В разд. 1 представлено описание классического последовательного алгоритма ПСМ. В разд. 2 приведено описание алгоритма параллелизации по данным и предложены его модификации. Анализ ускорения работы соответствующего программного кода и эффективности параллельного алгоритма представлен в разд. 3. Рассмотрены задачи о моделировании свободного потока и обтекания конуса разреженным газом. Проведено сопоставление с результатами применения алгоритма декомпозиции по расчетной области. В следующем разделе обсуждаются физические аспекты обтекания конуса разреженным сверхзвуковым потоком. В заключение сформулированы общие выводы по проведенному исследованию.

1. МЕТОД ПСМ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

В своей последней монографии [13] Грэм Берд предлагает следующую характеристику метода: “Метод ПСМ обеспечивает вероятностное физическое моделирование газового потока путем одновременного отслеживания движения репрезентативных модельных молекул в физическом пространстве”. Берд разрабатывал основы метода исходя из физических представлений о динамике разреженного газа и не опирался на формализованную математическую модель [11], [14]. Однако последующие исследования [30], [12] показали, что ПСМ может рассматриваться как стохастический метод решения уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial (nf)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial (nf)}{\partial \mathbf{r}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} n^2 \left(f^* f_1^* - ff_1 \right) c_r \sigma d\Omega dc_1. \quad (1)$$

Здесь t — время, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор в физическом пространстве, n — концентрация газа, f — функция распределения частиц по скоростям, для которой выполняется следующее условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f d\mathbf{c} = 1,$$

где $\mathbf{c}$ — вектор скорости, c_r — относительная скорость сталкивающихся частиц, $\sigma d\Omega$ — дифференциальное сечение столкновения, нижний индекс 1 соответствует полевым молекулам, верхний индекс * соответствует функции распределения послестолкновительных скоростей частиц. Уравнение (1) справедливо для однокомпонентного одноатомного газа и записано в отсутствие действия внешних сил. Для случая химически реагирующей газовой смеси рассматривается обобщенное уравнение Больцмана [2].

Классический вычислительный алгоритм ПСМ для расчета стационарного течения приведен на фиг. 1. Алгоритм предполагает этап предобработки, связанный с построением сетки, вычислением необходимых констант и обнулением/заполнением используемых массивов. Далее следует основной цикл, проводящий моделирование по времени. Шаги цикла можно разделить на два последовательных блока. Первая часть шагов соответствует времени установления течения t_s . После установления течения ($t > t_s$) на каждом временном шаге второго блока цикла после выполнения основных процедур осуществляется выборка параметров модельных частиц. Отличие второго блока от первого заключается только в реализации дополнительной процедуры выборки параметров (ПВП) в каждой ячейке сетки.

Внутри цикла по времени реализуются основные процедуры метода. Предполагается расщепление процессов передвижения частиц в пространстве и их столкновений на временном шаге.

Процедура передвижения частиц (ППЧ) соответствует моделированию конвективного переноса частиц согласно (1). ППЧ предполагает перебор в цикле всех частиц и перемещение каждой частицы i в пространстве за шаг Δt :

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{0,i} + \mathbf{c}_i \Delta t;$$

здесь $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_{0,i}$ — радиус-вектор конечного и начального положений частицы соответственно, $\mathbf{c}_i$ — скорость частицы. Моделирование осесимметричного течения в методе ПСМ имеет некоторые особенности. Вычисление компонент вектора $\mathbf{r}_i(x_i, y_i)$ (y — радиальная координата) происходит согласно выражениям [11–13]:

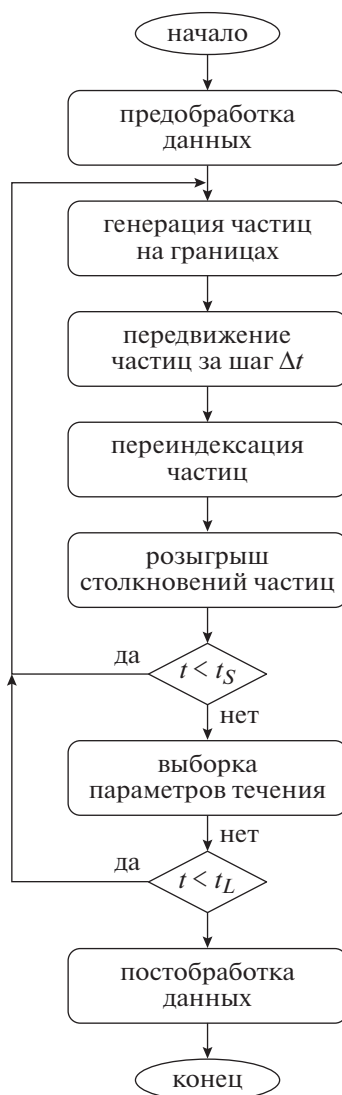
$$\begin{aligned} x_i &= x_{0,i} + u_{0,i} \Delta t, \\ y_i &= \left\{ (y_{0,i} + v_{0,i} \Delta t)^2 + (w_{0,i} \Delta t)^2 \right\}^{1/2}, \end{aligned}$$

где $(x_{0,i}, y_{0,i})$ — начальные координаты частицы, $(u_{0,i}, v_{0,i}, w_{0,i})$ — начальные компоненты скорости частицы. Компоненты скорости частиц в осесимметричном течении:

$$\begin{aligned} u_i &= u_{0,i}, \\ v_i &= \left\{ v_{0,i}(y_{0,i} + v_{0,i} \Delta t) + w_{0,i}^2 \Delta t \right\}^{1/2} / y, \\ w_i &= \left\{ w_{0,i}(y_{0,i} + v_{0,i} \Delta t) - v_{0,i} w_{0,i} \Delta t \right\} / y. \end{aligned}$$

Скорость частицы в ППЧ может изменяться при ее столкновении с поверхностью, поэтому ППЧ также включает установление факта пересечения частицы с поверхностью тела или границей области при передвижении на данном временном шаге. В случае факта пересечения моделируется отражение частиц от поверхности тела/границы или происходит удаление частиц из расчета.

Процедура розыгрыша столкновений частиц (ПСЧ) отвечает за моделирование процесса столкновений (правая часть (1)). ПСЧ предусматривает перебор в цикле всех ячеек сетки, в которых моделируются столкновения. В каждой ячейке выбираются пары частиц для розыгрыша парных столкновений и, в случае реализации столкновений, определяются послестолкновительные скорости частиц. Число сталкивающихся пар согласно кинетической теории зависит от плотности частиц в ячейке и от средней величины произведения относительной скорости частиц на сечение столкновения. Специфика реализации ПСЧ зависит от выбора схемы столкновений.



Фиг. 1. Классический алгоритм ПСМ для расчета стационарного течения.

В настоящей работе число столкновений в ячейке j определялось согласно модели без временного счетчика (NTC, no-time counter) [12], [13]:

$$N_c = 1/2 (N_{p,j} - 1) N_{p,j} F_N (\sigma c_r)_{\max} \Delta t / V_j. \quad (2)$$

Здесь $N_{p,j}$ — число модельных частиц в ячейке, σ — сечение столкновения, индекс $\max$ означает максимально возможное значение в ячейке, V_j — объем ячейки. Выражение (2) записано для однокомпонентного газа.

Переход от ППЧ к ПСЧ требует дополнительной процедуры индексации модельных частиц (ПИЧ), так как в процессе передвижения частицы могут покинуть исходную ячейку или саму расчетную область. Основная задача ПИЧ состоит в установлении соответствия между номерами частиц и ячейками, в которых они находятся, что необходимо для выбора сталкивающихся пар частиц в ПСЧ. ПИЧ играет важную роль в масштабировании производительности и может быть реализована несколькими способами, описанными ниже.

Классическим вариантом реализации (ПИЧК) является объявление двумерного массива элементов $L [2][Np]$, где Np — число частиц в расчетной области [11], [12]. Для простоты восприятия здесь и далее полагается, что индекс массива начинается с единицы. Используемая организация

хранения данных в массивах соответствует языку программирования С — первый индекс отвечает за номер строки, второй — за номер столбца, а хранение в памяти проводится по сплошным строкам. В строке $L[1]$ длиной N_p хранится номер ячейки для каждой частицы. Вторая строка $L[2]$ содержит номера частиц, сгруппированные в порядке их расположения по ячейкам (“склад” номеров частиц). Например, если первая ячейка содержит две частицы с номерами 32 и 17, а вторая — три частицы с номерами 5, 64 и 89, то первые пять элементов будут равны ($L[2]\{32, 17, 5, 64, 89\}$). Дополнительно объявляется вспомогательный массив $I[2][N_c]$, где N_c — число ячеек. Строка $I[1]$ содержит число частиц в каждой ячейке. Строка $I[2]$ для каждой ячейки содержит указатель на порядковое начало (смещение начального индекса) “склада” частиц, принадлежащих ячейке в строке $L[2]$. Для описанного выше примера ($I[1]\{2, 3\}$, $I[2]\{1, 3\}$).

ПИЧК состоит из нескольких циклов. Цикл по частицам определяет номер ячейки для каждой частицы, заполняет строку $L[1]$. В цикле происходит инкрементирование счетчика $I[1][X]$, где X — номер ячейки. Второй цикл по числу частиц позволяет организовать последовательное хранение номеров частиц в ячейках в строке $L[2]$ и также предусматривает инкрементирование счетчика $I[1][X]$. В ПИЧК рассчитывается и указатель $I[2][X]$ на начало “склада” номеров частиц для ячейки X в строке $L[2]$. В результате работы ПИЧ для каждой ячейки известно число частиц $I[1][X]$ в ней, порядковое начало “склада” номеров частиц, соответствующее ячейке X в строке $L[2]$, и заполнена сама строка $L[2]$. Таким образом, имеется вся информация для выбора пар частиц для последующего розыгрыша столкновений в процедуре ПСЧ.

Недостатком указанной классической процедуры ПИЧК является наличие двух циклов по частицам, в каждом из которых производится инкрементирование счетчика числа частиц в каждой ячейке. При распараллеливании это инкрементирование необходимо защищать средствами синхронизации, что сказывается на масштабировании производительности алгоритма.

В настоящей работе предлагается рассмотреть также альтернативный алгоритм процедуры ПИЧ. Модификация процедуры (ПИЧМ) предусматривает резервирование одинакового размера “склада” N_w для номеров частиц в строке $L[2]$ для каждой ячейки. Такой шаг позволяет избавиться от расчета строки $L[1]$ с инкрементированием счетчика $I[1][X]$, а значит, в перспективе — от необходимости синхронизации при распараллеливании. При этом теряется “сплошность” хранения всех номеров частиц в $L[2]$. Размер “склада” N_w должен быть равен максимально возможному числу частиц, которое может оказаться в любой ячейке в любой моделируемый момент времени. Адрес начала “склада” в строке $L[2]$ для ячейки с номером X определяется как $(X - 1) * N_w + 1$. Такой подход позволяет ограничиться одним циклом по частицам для заполнения строки $L[2]$ и для определения числа частиц в каждой ячейке $I[1][X]$, но не исключает одну из двух процедур инкрементации элементов строки $I[1]$. С точки зрения использования оперативной памяти такой подход с одной стороны требует большей размерности “с запасом” массива L . Максимальный размер массива должен быть увеличен в зависимости от типа течения и возможной амплитуды изменения числа частиц в ячейках, так как нужно предусмотреть именно крайний случай — максимальное число частиц в одной из ячеек. С другой стороны, отпадает необходимость в строках $L[1]$ и $I[2]$. Соответственно массивы L и I могут быть объявлены одномерными: $LN[N_p]$, $IN[N_c]$.

Следует отметить возможность еще одной модификации классического варианта ПИЧ, связанной с передачей функции определения соответствия ячейки каждой частице (первый цикл заполнения строки $L[1]$), в блок передвижения частиц. Такой подход реализован в [25].

Первой процедурой основного цикла является процедура генерации частиц (ПГЧ) на границах области она следует перед ППЧ. Поток числа частиц на единичный элемент поверхности в единицу времени определяется как [11–13]:

$$F^+ = n(kT/(2\pi m))^{1/2} \left\{ \exp(-s^2 \cos^2 \theta) + \pi^{1/2} s \cos \theta (1 + \operatorname{erf}(s \cos \theta)) \right\}, \quad (3)$$

где m — масса частиц, T — температура газа, s — скоростное отношение ($s = c_0/(2RT)^{1/2}$, R — газовая постоянная), θ — угол между вектором среднemasсовой скорости газа c_0 и вектором нормали к граничной поверхности, k — постоянная Больцмана.

Последним блоком алгоритма является блок постобработки, который выполняется после достижения заданного времени $t_L > t_S$. В данном блоке рассчитывается концентрация, компоненты среднемассовой скорости и температуры газа в ячейке j :

$$n_j = \sum_{k=1}^{N_A} N_{p,j,k} F_N / (N_A V_j), \quad (4)$$

$$u_{0,j} = \sum_{k=1}^{N_A} \sum_{i=1}^{N_{p,j,k}} u_{i,j,k} / \left(\sum_{k=1}^{N_A} N_{p,j,k} \right),$$

$$T_{x,j} = \frac{m}{k} \left(\sum_{k=1}^{N_A} \sum_{i=1}^{N_{p,j,k}} u_{i,j,k}^2 / \left(\sum_{k=1}^{N_A} N_{p,j,k} \right) - u_{0,j}^2 \right), \quad (5)$$

где N_A — число временных шагов, используемых для выборки параметров, соответственно индекс k относится к временному шагу, на котором происходит выборка, m — масса частицы. Суммы

$$\sum_{k=1}^{N_A} N_{p,j,k}, \quad \sum_{i=1}^{N_{p,j,k}} u_{i,j,k}, \quad \sum_{i=1}^{N_{p,j,k}} u_{i,j,k}^2,$$

вычисляются в процедуре ПВП. Компоненты среднемассовой скорости $v_{0,j}$ и $w_{0,j}$ рассчитываются аналогично (4), а компоненты температуры $T_{y,j}$ и $T_{z,j}$ аналогично (5). Полная температура газа определяется как $T_j = (T_{x,j} + T_{y,j} + T_{z,j})/3$.

2. АЛГОРИТМ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ПО ДАННЫМ ДЛЯ УЗЛА КЛАСТЕРА С ОБЩЕЙ ПАМЯТЬЮ

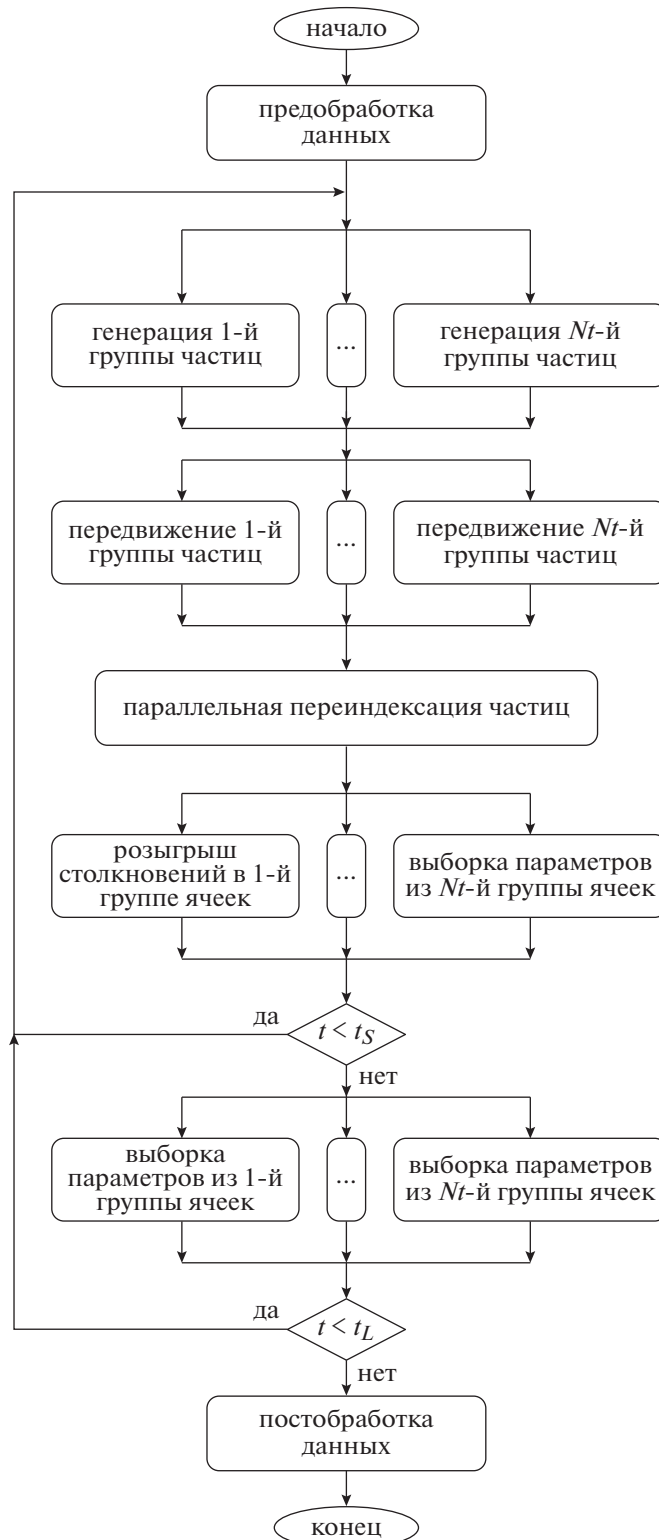
Согласно методу ПСМ распараллеливание по данным строится на следующих принципах: (i) независимости моделирования передвижения каждой частицы от передвижения других частиц, (ii) независимости моделирования процесса столкновений в каждой ячейке от столкновений частиц в других ячейках.

Версия распараллеливания алгоритма по данным представлена на фиг. 2. Предполагается параллельная работа N_t потоков (threads), каждого на отдельном ядре. Для распараллеливания используется модель параллельного программирования соединение-разветвление (fork-join) посредством технологии OpenMP.

В процедуре ППЧ реализуется параллельный расчет передвижения частиц. Каждый поток передвигает и при необходимости сталкивает с границами тел/области свою группу частиц. Основным циклом по частицам распараллелен средствами неявной многопоточности (директива parallel for) без необходимости в синхронизации по данным.

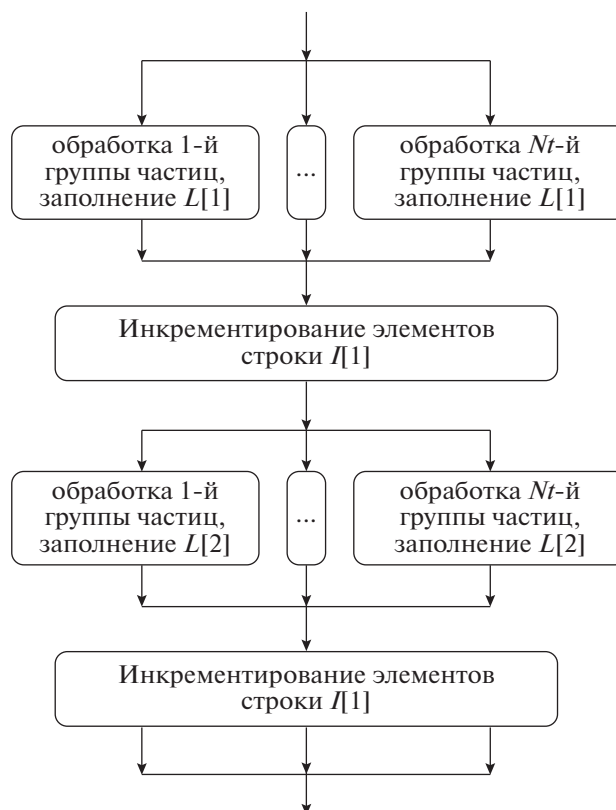
В процедуре ПСЧ реализуется параллельный расчет столкновений в ячейках. Каждый поток обрабатывает свою группу ячеек. Распараллеливание процессов столкновения частиц между потоками осуществляется средствами OpenMP без использования средств синхронизации.

Распараллеливание алгоритма требует учета специфики процедуры индексации. В случае классической ПИЧ первый цикл по частицам в этой процедуре распараллеливается стандартными средствами OpenMP по модели соединение-разветвление. Внутри цикла для каждой частицы определяется ячейка X , в которой находится частица и инкрементируется счетчик частиц в этой ячейке $I[1][X]$. Из-за того, что совершенно разные частицы могут оказаться в ячейке X , данное инкрементирование счетчика должно проводиться, используя средства синхронизации. Это одно из немногих “узких” мест алгоритма. Непосредственное использование для этой синхронизации директивы critical section, предлагаемой в OpenMP, приводит к неудовлетворительным результатам по масштабированию, поэтому при выполнении данной работы для улучшения масштабирования производительности применялось два подхода по организации согласованного инкрементирования указанного счетчика частиц. Первый подход состоял в использовании атомарного обновления (atomic update), а второй — в применении свертки (reduction) целиком для строки $I[1]$ двумерного массива I , описанного выше. Первый способ задействует атомарное инкрементирование счетчика $I[1][X]$. Второй способ стал доступен относительно недавно после реализации в используемом компиляторе gcc стандарта OpenMP 4.5. Он подразумевает использование отдельного экземпляра строки $I[1]$ для каждого потока без всякой синхронизации, а затем



Фиг. 2. Версия распараллеливания алгоритма по данным.

свертку всех строк со счетчиками в одну. Во втором цикле блока ПИЧК, в котором происходит заполнение строки $L[1]$, также применялись стандартные средства OpenMP. При этом использовался атомарный захват значения счетчика $I[1][X]$ с предварительным его инкрементированием (atomic capture). Укрупненная блок-схема этой процедуры представлена на фиг. 3.



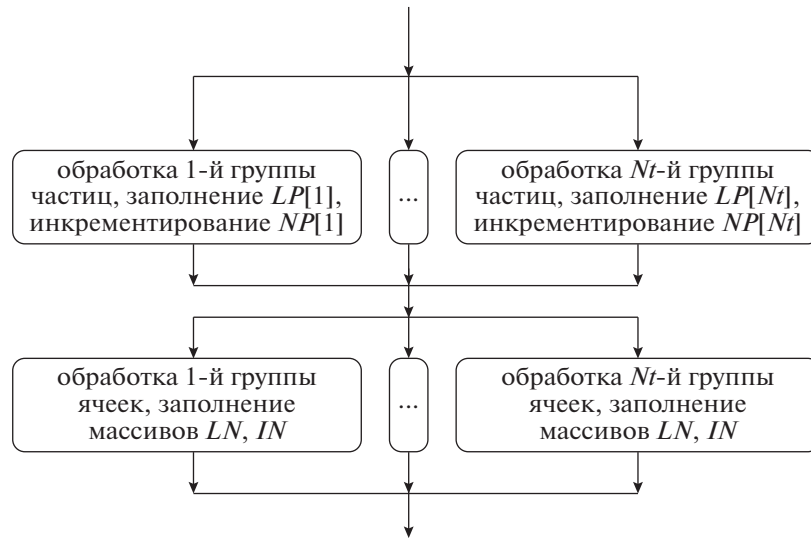
Фиг. 3. Укрупненная блок-схема процедуры ПИЧК.

В случае модифицированного варианта ПИЧМ с дополнительными массивами (далее ПИЧМД) требование по согласованному инкрементированию счетчика числа частиц в ячейке было сознательно исключено. Для этого заводятся дополнительные двумерные массивы, аналогичные массивам LN и IN , но имеющие дополнительную размерность, равную максимально возможному числу используемых вычислительных потоков: $LP[Nt][Np]$, $IP[Nt][Np]$, где Nt — количество используемых потоков. Каждый поток T работает со своей строкой $LP[T]$ и $IP[T]$. В результате распараллеливание реализуется аналогично ПИЧК, но без всяких средств синхронизации. Как необходимость, после завершения цикла по частицам организуется дополнительный цикл по ячейкам, внутри которого происходит формирование уже единых массивов LN и IN за счет суммирования соответствующих элементов массива IP и слияния элементов LP . Данный цикл также распараллеливается с использованием модели соединение—разветвление, но тоже без всяких средств синхронизации. Указанный подход является относительно ресурсозатратным в плане использования оперативной памяти за счет хранения массивов $LP[Nt][Np]$, $IP[Nt][Np]$. Увеличение размера массива LN при использовании данного подхода оказывается пропорциональным числу используемых потоков. Однако такой подход позволяет программно исключить наличие критической секции, атомарного обновления, атомарного захвата и свертки массива счетчиков — т.е. исключить необходимость в синхронизации. Укрупненная блок-схема этой процедуры представлена на фиг. 4.

Следует отметить возможность реализации упомянутой в предыдущем разделе дополнительной модификации классического варианта ПИЧ, связанной с определением соответствия ячейки каждой частице непосредственно в блоке передвижения частиц ППЧ. Однако такой подход приведет лишь к перераспределению вычислительной работы между процедурами ППЧ и ПИЧ, увеличив размер параллельного региона в ППЧ и уменьшив его размер в ПИЧ.

К вспомогательным процедурам алгоритма, которые вносят существенно меньший вклад в вычислительное время, относятся процедуры ПГЧ и ПВП.

В процедуре ПГЧ реализуется цикл по числу вбрасываемых в область частиц. Данное число, как правило, существенно меньше числа модельных частиц в области, поэтому распараллелива-



Фиг. 4. Укрупненная блок-схема процедуры ПИЧМД.

ние данной процедуры не оказывает большого влияния на масштабирование производительности алгоритма — ее вклад в общее время работы алгоритма менее 1%. Каждый поток генерирует свою часть вбрасываемых частиц. Цикл распараллелен директивой `parallel for` по полному числу вбрасываемых частиц на данном временном шаге. При этом инкрементирование общего числа частиц в области выполняется синхронизированно между потоками, используя атомарные операции OpenMP (`omp atomic`). Возможно также использование других подходов: свертки (`reduction`) счетчика или полного исключения синхронизации при явном разбиении цикла при параллелизации с выбором номеров вбрасываемых данным потоком частиц с шагом, равным общему числу потоков.

Последним блоком цикла по времени в ПСМ идет процедура выборки параметров ПВП. Для ее параллелизации перед циклом по ячейкам используется та же модель соединения—разветвления без синхронизации между потоками.

В результате описанной техники распараллеливания синхронизация по данным между потоками в основных процедурах задействуется только при переиндексации частиц в одной из трех версий алгоритма — ПИЧ+atomic. Алгоритм со сверткой ПИЧ+reduction и алгоритм с модифицированным блоком переиндексации ПИЧМД не требуют использования средств синхронизации при работе циклов.

Говоря об особенностях параллелизации по данным, стоит также отметить, что в начале работы кода средствами OpenMP создается пул потоков, работающий на протяжении всего моделирования. Каждый поток имеет свой генератор случайных чисел, обрабатывает в каждом блоке метода ПСМ свою часть частиц и свою часть ячеек без дополнительных проверок, связанных с номерами потоков и т.п. Авторами также был проверен подход, когда при обработке частиц каждый поток занимается очередной частицей или очередной ячейкой из соответствующего массива, например, каждой Nt -й частицей (ячейкой), где Nt — число потоков. Для этого использовалась политика планирования циклов `schedule (static, 1)`. Такой подход не дал отличительных результатов, что можно объяснить удержанием в ядре данных для соседней частицы, которые нужны другому потоку, работающему на другом ядре.

Следует отметить необходимость в использовании потоко-безопасного генератора псевдослучайных чисел при реализации параллельного алгоритма. Применяемый генератор использует массив `mk_m` из 250 случайных чисел. Генерация очередного псевдослучайного числа x проводится как $x = (\text{mk_m}[\text{mk_k}])^{\text{mk_m}[\text{mk_l}]}$; $\text{mk_m}[\text{mk_k}] = x$, где `mk_k` — номер возводимого в степень числа в массиве `mk_m`, а `mk_l` — номер степени, в которую возводится это число. Процесс генерации псевдослучайных чисел определяется тройкой чисел, одно из которых — элемент массива `mk_m[250]`, а два других — номера `mk_k`, `mk_l`. Для удовлетворения требования ПСМ по организации потоко-независимого моделирования каждая из этих троек является локальной для своего

потока. При этом начальное состояние для каждого потока разное и задается с использованием стандартного генератора псевдослучайных чисел библиотеки языка C.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛИЗАЦИИ ПО ДАННЫМ И СРЕДСТВ ОPENMP

3.1. Свободный поток

В качестве одной из тестовых задач рассматривается моделирование осесимметричного однородного потока аргона. Плотность атомов в потоке $n_0 = 3 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$, температура $T_0 = 288.15 \text{ К}$, скорость $c_0 = 948.6 \text{ м/с}$, число Маха $M_0 = 3$. Расчетная область представляет собой цилиндр с радиусом $R_c = 1 \text{ см}$ и длиной боковой поверхности $H_c = 25 \text{ см}$. Вектор среднемассовой скорости $\mathbf{c}_0$ направлен вдоль оси симметрии, совпадающей с осью цилиндра.

Атомы аргона вбрасываются через левую границу области (торец цилиндра) $x = 0$, поток атомов определяется согласно (3). Функция распределения по скоростям вбрасываемых частиц соответствует максвелловской:

$$f_0 = \left(\frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m \{ (u - c_0)^2 + v^2 + w^2 \}}{2k T_0} \right).$$

От верхней границы области (боковой поверхности цилиндра) $y = R_c$ частицы отражаются зеркально:

$$f_{rf}(\mathbf{c}_{rf}) = f_i(\mathbf{c}_{rf} - 2c_{rf,n}\mathbf{n}),$$

где $\mathbf{c}_{rf}$ — вектор скорости отраженной молекулы, $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к границе в точке соударения, f_{rf} — функция распределения отраженных молекул, f_i — функция распределения падающих частиц. Частицы, достигающие правой границы (правого торца цилиндра) $x = H_c$, исключаются из расчета. В начальный момент времени частицы в области отсутствуют.

Реализуется 10 000 шагов по времени, выборка параметров течения происходит на последней тысяче шагов. Число модельных частиц в области на последнем временном шаге равно 400 000. Число ячеек в области 10 000, сетка зонная прямоугольная, используется одна зона с одинаковым размером ячеек. Рассмотренное течение эквивалентно течению по трубе с зеркальным законом отражения от ее стенок. Число Кнудсена, рассчитанное по радиусу “трубы”, $Kn \approx 0.04$.

В расчетах используются схема столкновений NTC и модель сфер переменной твердости (VHS, variable hard sphere) для определения скоростей частиц после столкновения с параметрами: показатель степени в законе степенной зависимости вязкости от температуры $\omega = 0.81$, диаметр столкновений $d_{\text{ref}} = 4.17 \times 10^{-10} \text{ м}$ при температуре $T_{\text{ref}} = 273 \text{ К}$. Техника пространственных весовых множителей не применяется.

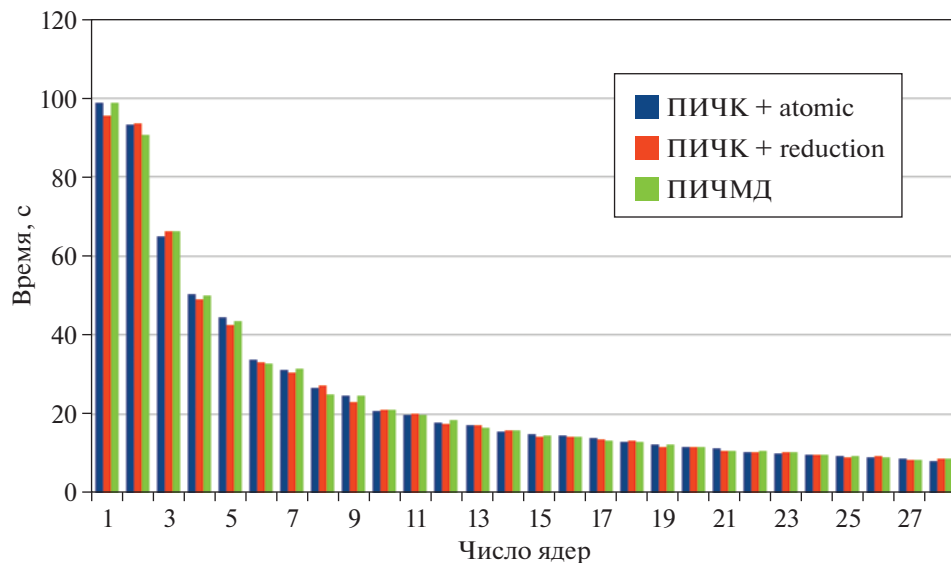
Результаты для времени расчета основного цикла последовательной версией кода ПСМ и двух вариантов реализации ПИЧ, описанных выше, представлены в табл. 1. По результатам теста можно сделать следующие выводы.

1. Реализация процедуры ПИЧ является соизмеримой по времени с процедурами ППЧ и ПСЧ. Данный вывод находится в согласии с выводами работы [31].

2. Переход от классической процедуры ПИЧК к модифицированной процедуре ПИЧМ позволяет сократить время счета на 10%.

Таблица 1. Время работы последовательного алгоритма метода ПСМ для свободного течения

Процедура	Алгоритм с ПИЧК	Алгоритм с ПИЧМ
ППЧ	98.9 с (37.2%)	98.9 с (41.3%)
ПСЧ	58.2 с (21.9%)	58.0 с (24.2%)
ПИЧ	101.7 с (38.2%)	78.5 с (32.8%)
Сумма ППЧ + ПСЧ + ПИЧ	258.8 с (97.3%)	235.5 с (98.4%)
Все время	266.0 с (100%)	239.3 с (100%)



Фиг. 5. Время работы процедур ППЧ для свободного течения в зависимости от числа ядер.

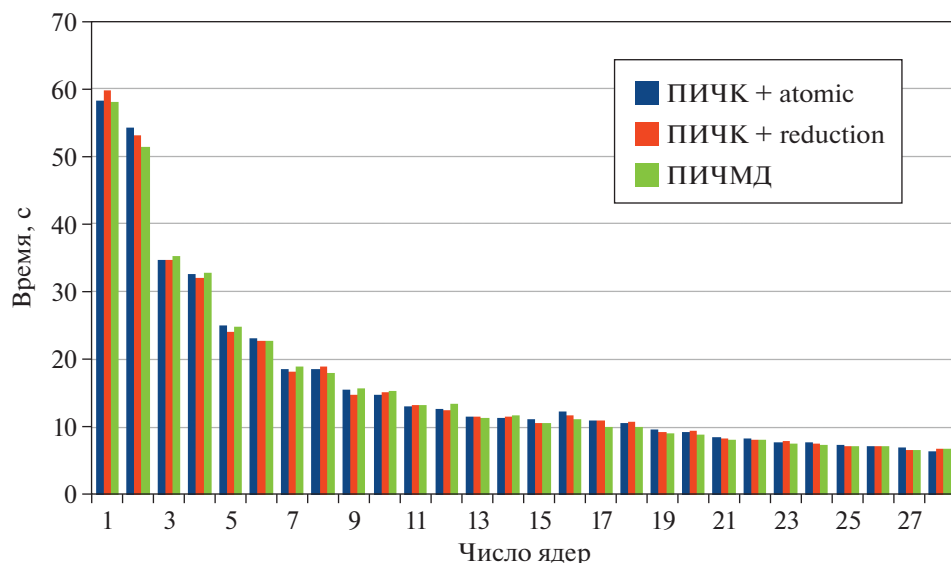
3. Процедуры ПГЧ и ПВП занимают существенно меньшее время обработки и их параллелизация носит второстепенный характер. Так, процедуры ППЧ, ПСЧ, ПИЧ занимают при моделировании более 97%.

4. Процедура ППЧ при функциональной простоте в используемой версии кода включает проверку всех частиц сеточной зоны на факт пересечения с границами и, как следствие, ее время выполнения при расчете свободного потока составляет более 30% от общего времени моделирования.

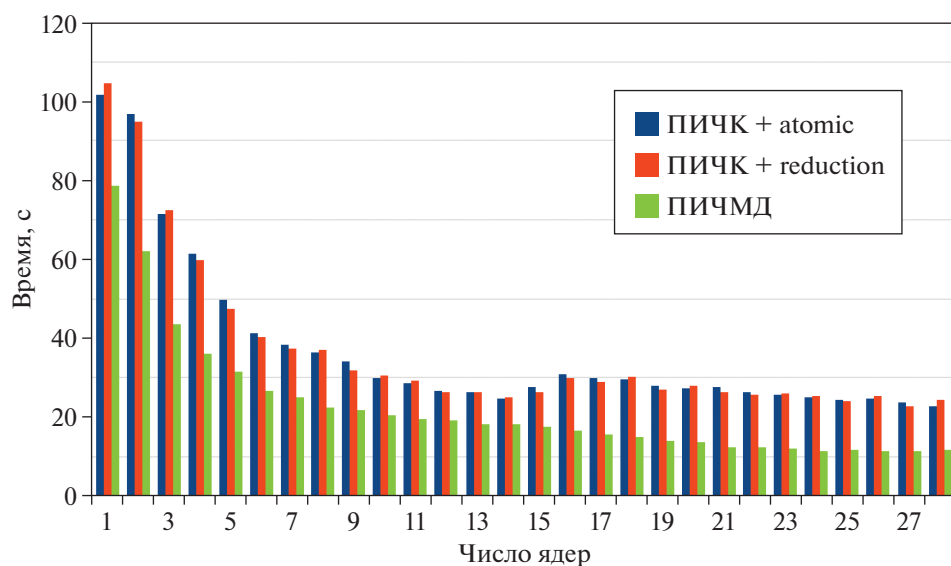
Для той же тестовой задачи проведено моделирование параллельной версией алгоритма. Для расчетов использовался один узел РСК Торнадо с общей памятью (СКЦ “Политехнический”). Узел состоит из двух процессоров Intel Xeon E5 2697 v3, каждый из которых содержит 2 контроллера памяти и 2 процессорных блока по 7 ядер в каждом. Каждое ядро выполнено по архитектуре Haswell, поддерживает гиперпоточность и расширенные инструкции AVX-2 (векторный модуль с плавающей запятой и векторное арифметико-логическое устройство). 14 ядер каждого блока имеют связанную кэш-память (СОЗУ) последнего уровня объемом 35 МБ (L3). Таким образом, в каждом узле содержится 28 ядер и 56 нитей (strands), или аппаратных потоков, для планирования на них потоков приложений. Каждый узел обеспечен 64 ГБ ОЗУ. Число используемых потоков не превышало число ядер на узле (28). Рассмотрены три версии кода: код с ПИЧК с атомарным захватом и обновлением счетчиков (далее ПИЧК + atomic), код с ПИЧК со сверткой массива счетчиков (далее ПИЧК + reduction) и предложенная модификация кода с ПИЧМ и дополнительными массивами.

Масштабирование производительности работы процедур и всего алгоритма по расчету однородного потока приведено на фиг. 5–8. Видно, что масштабирование производительности работы процедуры ППЧ является в целом приемлемым. Ускорение $S = T_p/T_{p1}$ (где T_p – время исполнения процедуры в параллельном коде, T_{p1} – время исполнения процедуры в последовательном коде) приблизительно равно 11 на 28 потоках, и 6 на 14 потоках. Потенциально увеличить ускорение можно за счет минимизации числа частиц, проверяемых на факт пересечения с границами области/обтекаемого тела. Ускорение процедуры ПСЧ демонстрирует чуть более слабые результаты. Такое ускорение процедур ППЧ и ПСЧ связано с удержанием совместно используемых данных в других вычислительных ядрах (например, в их кэш-памяти первого–третьего уровней). Стоит отметить, что в случае использования ПСЧ для осесимметричной задачи без техники пространственных весовых множителей на масштабирование производительности влияет неравномерность числа частиц в столкновительных ячейках, о чем указано далее.

Основной проблемой реализации алгоритма параллелизации по данным является неудовлетворительное масштабирование производительности алгоритма ПИЧК. Использование версии ПИЧК+atomic дает ускорение работы процедуры ПИЧ 4.5 на 28 ядрах и 4.1 на 14 ядрах. Исполь-



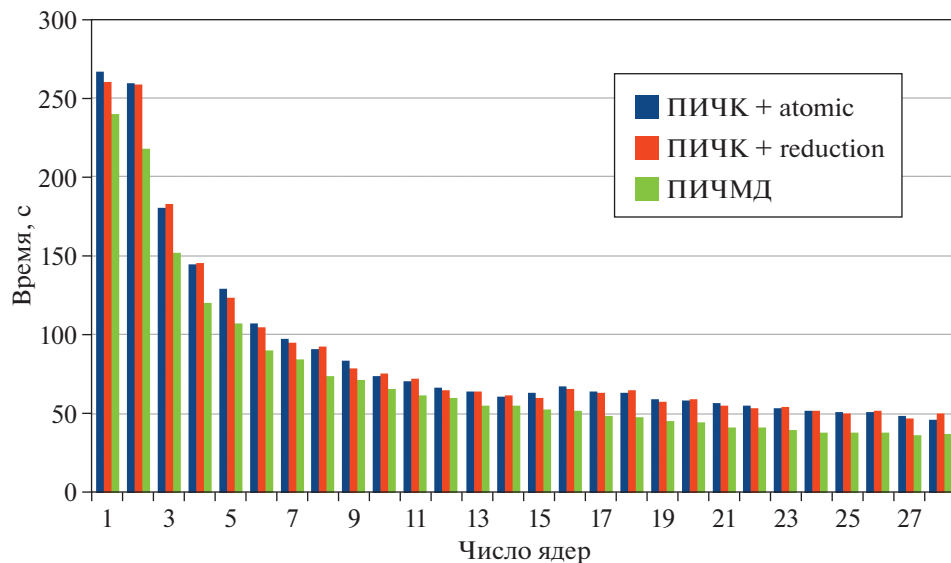
Фиг. 6. Время работы процедур ПСЧ для свободного течения в зависимости от числа ядер.



Фиг. 7. Время работы процедур ПИЧ для свободного течения в зависимости от числа ядер.

зование версии ПИЧК+reduction дает ускорение процедуры ПИЧ 4.6 на 28 ядрах и 4.2 на 14 ядрах. Эффективнее выглядит масштабирование производительности работы процедуры ПИЧМД. Прежде всего наблюдается снижение времени счета последовательного алгоритма. Кроме того, ускорение работы процедуры ПИЧ увеличивается до 4.3 на 14 ядрах и до 6.7 на 28 ядрах.

Ускорение процедур ППЧ, ПИЧ и ПСЧ предопределяет полное время работы алгоритмов. Использование версии ПИЧК+atomic дает ускорение работы всего алгоритма: 4.4 на 14 ядрах и 5.7 на 28 ядрах. Использование версии ПИЧК + reduction дает ускорение работы всего алгоритма: 4.2 на 14 ядрах и 5.2 на 28 ядрах. Наиболее предпочтительно выглядит масштабирование при использовании процедуры ПИЧМД. Как уже отмечалось, наблюдается снижение времени счета последовательного алгоритма. Ускорение работы всего алгоритма при этом увеличивается до 6.2 на 28 ядрах.



Фиг. 8. Время работы алгоритмов для свободного течения в зависимости от числа ядер.

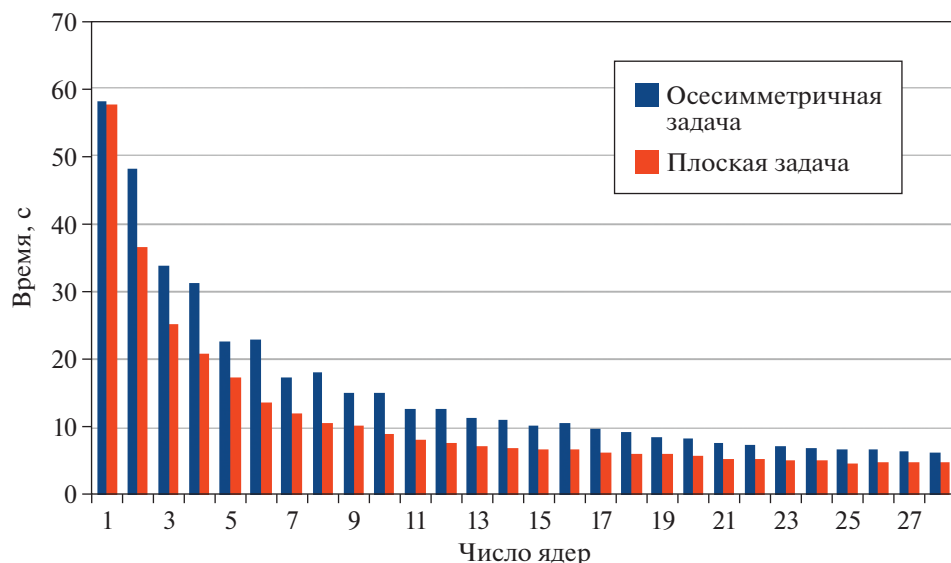
Относительно слабое ускорение связано с недостатками самой модели параллельного программирования соединение—разветвление, когда распараллеливаются только участки кода, а не весь код (например, не сразу все указанные процедуры). Среди причин можно отметить следующие дополнительные обстоятельства:

- (i) параллельные регионы содержат средства синхронизации;
- (ii) упомянутое ранее удержание совместно используемых данных в других вычислительных ядрах.

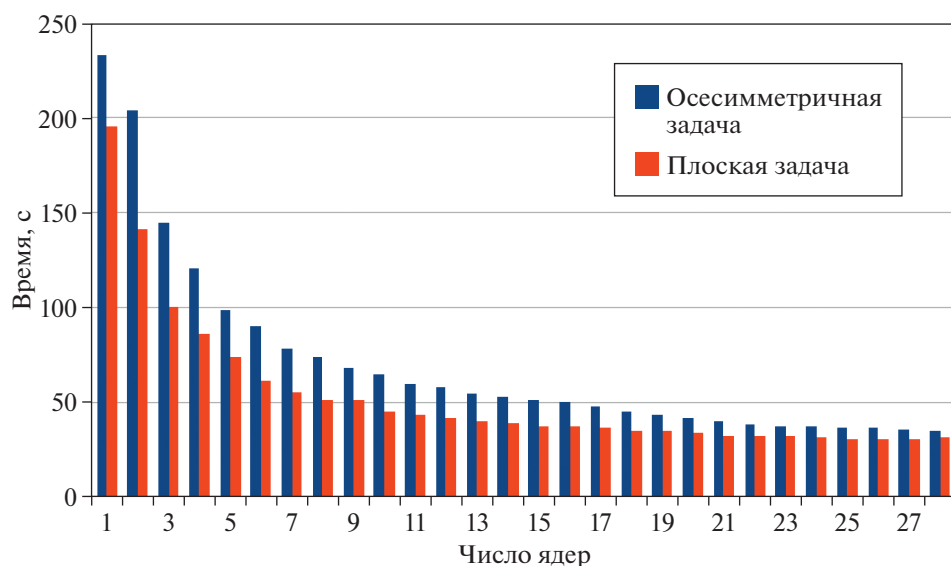
Ускорение алгоритма и, в частности, ПСЧ, несколько повышается с уменьшением числа Кнудсена из-за роста числа столкновений в ячейках. Также наблюдается незначительное повышение ускорения работы ПСЧ для алгоритма ПИЧМД (до 8.3 на 14 ядрах и до 11.5 на 28 ядрах) при переходе от осесимметричной к плоской задаче при аналогичном количестве частиц в расчетной области (фиг. 9). Данное обстоятельство связано с более равномерным распределением частиц в ячейках при моделировании плоского свободного потока. В осесимметричном случае “равномерность” распределения частиц по ячейкам может быть обеспечена за счет использования весовых пространственных множителей. Однако общее ускорение (см. фиг. 10), с учетом фактора снижения времени работы последовательного кода при расчете плоской задачи, оказывается близким к случаю расчета осесимметричной задачи (4.9 на 14 ядрах и 6.1 на 28 ядрах).

Методически важным моментом является сравнение эффективности алгоритма параллелизации по данным с алгоритмом декомпозиции расчетной области (АДО). В АДО каждое ядро “обрабатывает” свою подобласть, т.е. выполняет все основные процедуры ПСМ (ПГЧ, ППЧ, ПИЧ, ПСЧ, ПВП). Таким образом, “однотипно” распараллеливается весь код. К недостаткам АДО следует отнести необходимость на каждом временном шаге формирования массивов частиц, покидающих подобласть, и организации обменов такими массивами между ядрами.

Время работы алгоритма с параллелизацией по данным и процедурой ПИЧМД средствами OpenMP и алгоритма декомпозиции расчетной области средствами MPI в зависимости от числа используемых ядер показано на фиг. 11. В последнем случае решается тождественная задача о расчете свободного потока. Видно, что параллелизация по данным уступает в результативности АДО. Так, при задействовании 28 вычислительных ядер алгоритм с параллелизацией по данным и процедурой ПИЧМД средствами OpenMP имеет ускорение 6.36, а алгоритм декомпозиции расчетной области средствами MPI имеет ускорение 23.8. Однако здесь необходимо упомянуть главное преимущество обсуждаемого алгоритма, которое заключается в простой технике распараллеливания и минимальном изменении последовательного кода. Фактически в каждой процедуре перед соответствующим главным циклом добавляется одна строка дополнительного кода. Вторым преимуществом является отсутствие процедур отбора частиц, покидающих подобласть и идентификации подобластей, “принимающих” частицы. В случае геометрически сложной



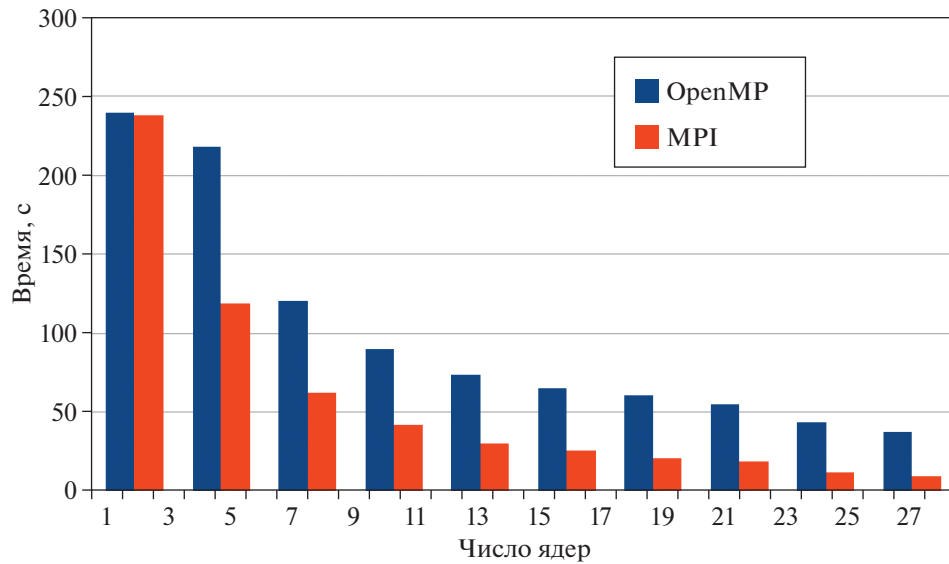
Фиг. 9. Время работы процедур ПСЧ для свободного осесимметричного и плоского течения в зависимости от числа ядер.



Фиг. 10. Время работы алгоритма ПИЧМД для свободного осесимметричного и плоского течения в зависимости от числа ядер.

расчетной области процедура передачи частиц между ядрами не является тривиальной. Наконец, в-третьих, в настоящем разделе рассматривается однородный поток, для которого балансировка загрузки работы ядер осуществляется простым, пропорциональным количеству ядер, делением расчетной области с учетом специфики осесимметричного течения. Также использование алгоритма декомпозиции по данным не требует резервирования размеров массивов, что позволяет проводить моделирование с большим числом частиц. Применение АДО к реальной задаче требует разработки дополнительных алгоритмов балансировки, без которых метод декомпозиции по расчетной области показывает лишь удовлетворительные результаты.

Следует отметить, что общее время работы последовательного кода при решении рассматриваемой задачи занимает менее 15 мин, число частиц в области увеличивается от 0 до 400000. Сле-



Фиг. 11. Время работы алгоритма ПИЧМД с параллелизацией по данным (OpenMP) и алгоритма с параллелизацией по области (MPI) в зависимости от числа используемых ядер.

дует ожидать, лучших результатов по ускорению работы программы с параллелизацией по данным на реальной задаче, время последовательного выполнения которой существенно больше.

3.2. Обтекание конуса

В качестве второй тестовой задачи в данной работе рассматривалось осесимметричное обтекание острого конуса потоком аргона. Радиус основания конуса 0.045 м, высота 0.15 м, что соответствует углу полураствора 16.7° . Плотность частиц в набегающем потоке $n_0 = 6 \times 10^{20} \text{ м}^{-3}$, температура $T_0 = 288.15 \text{ К}$, скорость потока $c_0 = 948 \text{ м/с}$, число Маха $M_0 = 3$. Размер расчетной области $H_c = 78 \text{ см}$, $R_c = 22.5 \text{ см}$.

Граничные условия аналогичны рассмотренным в предыдущем разделе. Отражение от поверхности конуса полагается диффузным с полной аккомодацией энергии, функция распределения для отраженных частиц:

$$f_{rf} = \left(\frac{m}{2\pi k T_w} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mc_{rf}^2}{2k T_w} \right).$$

Температура поверхности конуса T_w равна температуре набегающего потока $T_w = T_0$.

Реализуется 12000 шагов по времени, выборка параметров течения происходит на последней тысяче шагов. Число модельных частиц в области на последнем шаге равно 20 млн. Число ячеек в области 31 000, число сеточных зон 6. Число Кнудсена, рассчитанное по радиусу основания конуса $\text{Kn} \approx 0.05$. Число Рейнольдса может быть оценено по формуле (см. [12]):

$$\text{Re}_0 = \frac{2(5 - 2\omega)(7 - 2\omega)}{15\pi^{1/2}} \sqrt{\gamma} \frac{M_0}{2\text{Kn}_0}. \quad (6)$$

Согласно (6), $\text{Re}_0 = 75$.

Результаты для времени расчета основного цикла для последовательного кода ПСМ с двумя вариантами реализации ПИЧ, описанными выше, представлены в табл. 2. По результатам теста можно сделать следующие выводы.

1. Реализация процедуры ПИЧ является наибольшей по времени, но соизмеримой с процедурами ППЧ и ПСЧ.

2. Переход от классической процедуры ПИЧК к модифицированной процедуре ПИЧМ позволяет сократить время счета на 22.7%.

Таблица 2. Время работы последовательного алгоритма метода ПСМ для обтекания конуса

Процедура	Алгоритм с ПИЧК	Алгоритм с ПИЧМ
ППЧ	8125 с (27.4%)	5741 с (24.5%)
ПСЧ	5971 с (20.2%)	6539 с (28.0%)
ПИЧ	15524 с (52.4%)	11112 с (47.5%)
Сумма ППЧ + ПСЧ + ПИЧ	29620 с (92.9%)	23392 с (94.8%)
Все время	31890 с (100%)	24665 с (100%)

3. Процедуры ПГЧ и ПВП занимают существенно меньшее время обработки и их параллелизация носит второстепенный характер. Так, процедуры ППЧ, ПСЧ, ПИЧ занимают при моделировании более 92%.

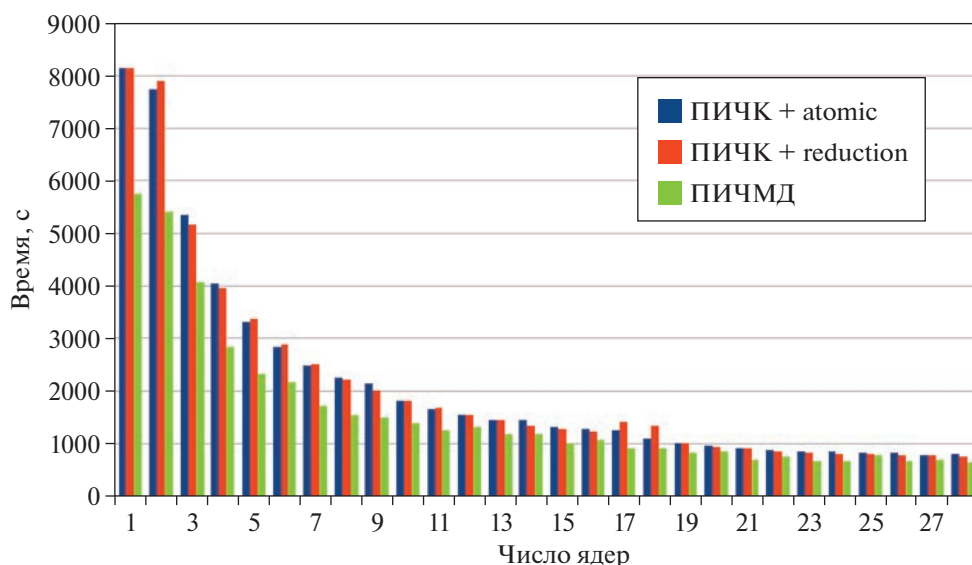
4. В процедуре ППЧ на пересечение с поверхностью конуса, а также с границами области проверяются только частицы, принадлежащие к соответствующим зонам. Как следствие, доля времени ППЧ в общем времени счета сокращается по сравнению с тестом для свободного потока.

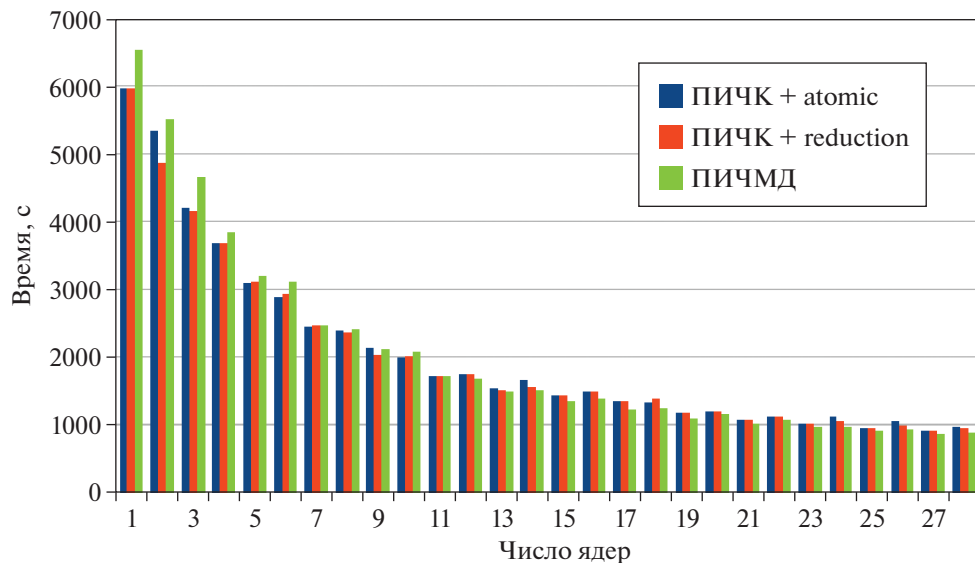
Для той же тестовой задачи проведено моделирование параллельной версией алгоритма. Для расчетов использовался тот же узел РСК Торнадо с общей памятью (СКЦ “Политехнический”). Как и ранее, рассмотрены три версии кода по моделированию: код с ПИЧК с атомарным захватом и обновлением счетчиков (ПИЧК + atomic), код с ПИЧК со сверткой массива счетчиков (ПИЧК + reduction) и предложенная модификация кода с ПИЧМ и дополнительными массивами (ПИЧМД).

Масштабирование производительности работы процедур и всего алгоритма по расчету обтекания конуса приведено на фиг. 12–15. Видно, что масштабирование процедур ППЧ и ПСЧ является в целом аналогичным задаче о свободном потоке. Ускорение работы процедур составляет 7.4–10.2 на 28 потоках и 4.3–6.9 на 14 потоках.

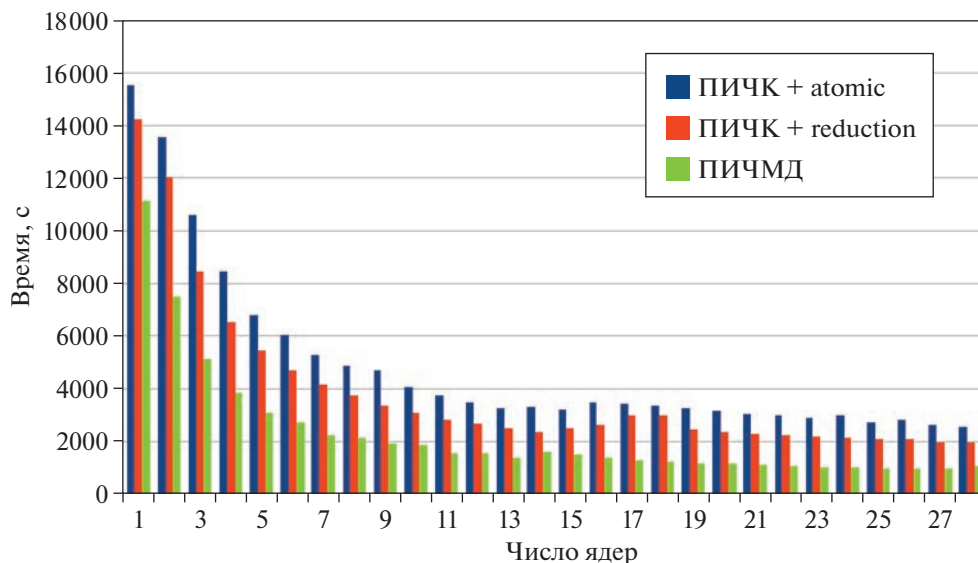
Использование версии ПИЧК+atomic дает ускорение работы процедуры ПИЧ 6 на 28 ядрах и 4.7 на 14 ядрах. Использование версии ПИЧК + reduction дает ускорение процедуры ПИЧ 7.2 на 28 ядрах и 6.0 на 14 ядрах. Как и ранее, эффективнее выглядит масштабирование производительности работы процедуры ПИЧМД. Ускорение работы процедуры ПИЧ увеличивается до 4.9 на 14 ядрах и до 7.7 на 28 ядрах.

Использование версии ПИЧК + atomic дает ускорение работы всего алгоритма: 4.4 на 14 ядрах и 5.8 на 28 ядрах. Использование версии ПИЧК+reduction дает ускорение работы всего алгоритма: 5.0 на 14 ядрах и 6.9 на 28 ядрах. Наиболее эффективным является использование алгоритма

**Фиг. 12.** Время работы процедур ППЧ для обтекания конуса в зависимости от числа ядер.



Фиг. 13. Время работы процедур ПСЧ для обтекания конуса в зависимости от числа ядер.



Фиг. 14. Время работы процедур ПИЧ для обтекания конуса в зависимости от числа ядер.

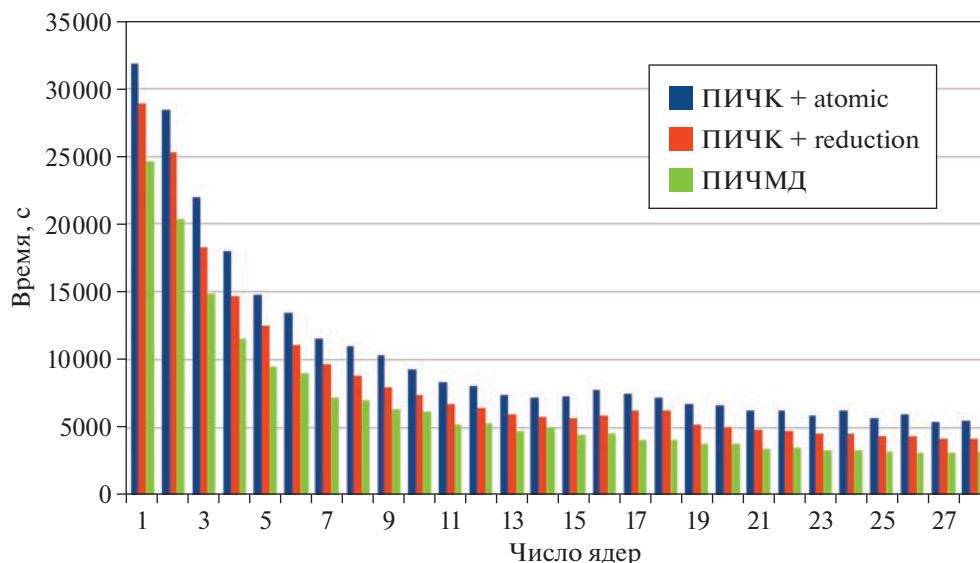
с процедурой ПИЧМД. Как уже отмечалось, наблюдается снижение времени счета последовательного алгоритма. Ускорение работы всего алгоритма увеличивается до 7.7 на 28 ядрах.

Как и ожидалось, ускорение работы кода на реальной задаче имеет чуть лучшие результаты, время последовательного выполнения которой существенно больше.

При исследовании производительности ряда процедур рассматриваемых алгоритмов можно заметить их деградацию при переходе на второй процессор и задействовании более 14 ядер. Данное обстоятельство связано с указанными ранее особенностями архитектуры узла и версии ядра Linux 3.10.0, используемой в том числе для наложения необходимых заплат, а также для поддержки файловой системы Lustre.

4. ФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ОБТЕКАНИЯ КОНУСА

Обтекание тел простой формы сверхзвуковым потоком разреженного газа являлось предметом многочисленных исследований в 60–80-е гг. прошлого века. Обтекание конуса рассматри-



Фиг. 15. Время работы алгоритмов для обтекания конуса в зависимости от числа ядер.

валось в работах [32–35]. Основное внимание отводилось анализу аэродинамических характеристик конуса. Картина течения, в особенности, в донной части подробно не рассматривалась. Данное обстоятельство можно связать с резким падением плотности газа за основанием конуса и с возрастанием вычислительной сложности статистического моделирования течения в этой области. Использование высокопроизводительных алгоритмов уже позволяет провести расчет с достаточным количеством модельных частиц для изучения донного течения.

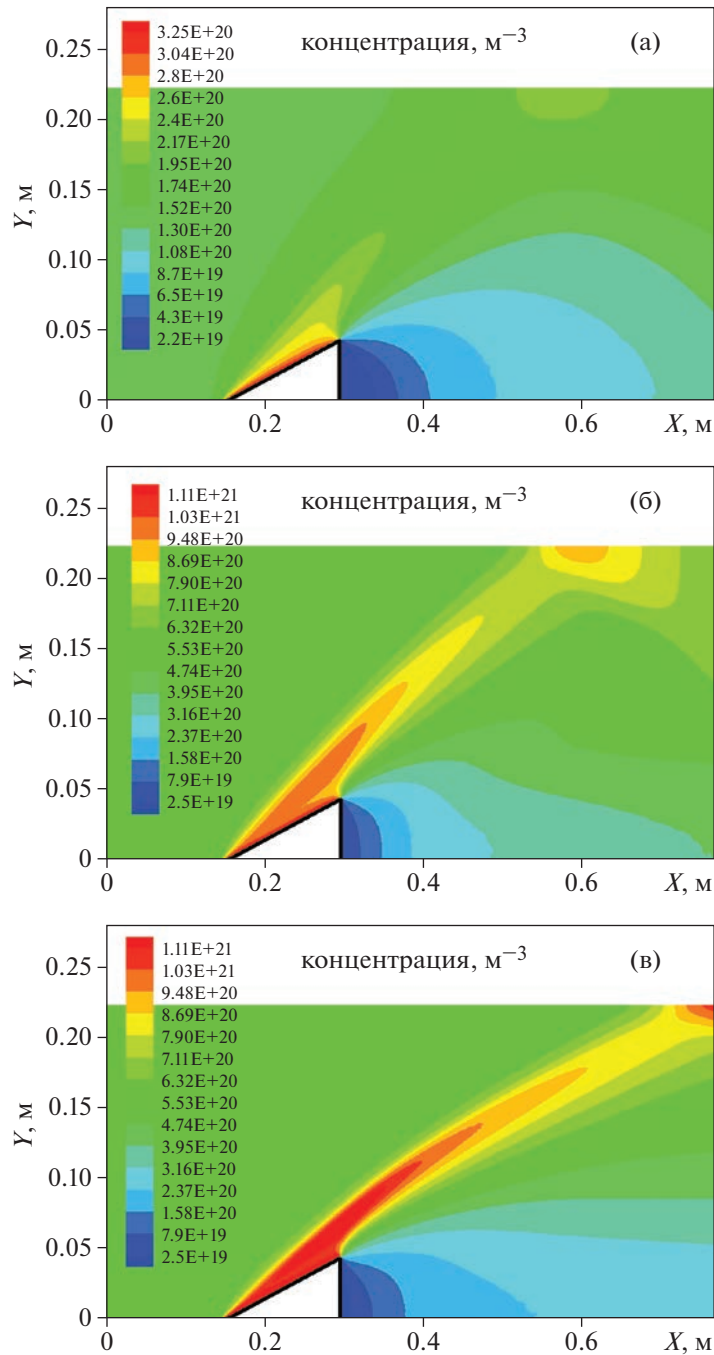
Ниже приведены результаты расчетов конуса (угол полураствора 16.7°) в постановке, приведенной в предыдущей секции, но с большим количеством ячеек (41 000) и модельных частиц (200 млн) в области. На фиг. 16, 17 приведены поля плотности и числа Маха для трех вариантов обтекания конуса, соответственно фиг. 16 а–в, 17 а–в: $Kn \approx 0.2$, $M_0 = 3$ (вариант а); $Kn \approx 0.05$, $M_0 = 3$ (вариант б); $Kn \approx 0.05$, $M_0 = 5$ (вариант в).

При числе Кнудсена $Kn = 0.2$ ударная волна сильно размыта и имеет наибольшую толщину. Интенсивность ударной волны быстро снижается с удалением от вершины конуса. На верхней границе ставились условия симметрии (зеркальное отражение атомов), координата отражения ударной волны от верхней поверхности $X_r \approx 0.55$ м. Течение между основной ударной волной и отраженной от верхней границы ударной волной ускоряется, но не достигает числа Маха на бесконечности. В донной части плотность газа падает примерно более чем в 10 раз по отношению к плотности набегающего потока. Течение в донной области является существенно дозвуковым ($M < 0.2$).

С уменьшением числа Кнудсена толщина ударной волны уменьшается, а интенсивность с удалением от вершины конуса снижается не так быстро, как для $Kn = 0.2$. Несмотря на уменьшение толщины УВ, ее структура остается размытой. Координата отражения УВ от верхней границы $X_r = 0.6$. За ударной волной поток ускоряется практически до числа Маха на бесконечности. Область дозвукового течения в донной области несколько возрастает.

Увеличение числа Маха с 3 до 5 в варианте расчета при сохранении числа Кнудсена приводит к смещению координаты отражения УВ от верхней поверхности ($X_r \approx 0.75$). В донной области наблюдается существенно меньшая плотность по отношению к варианту б.

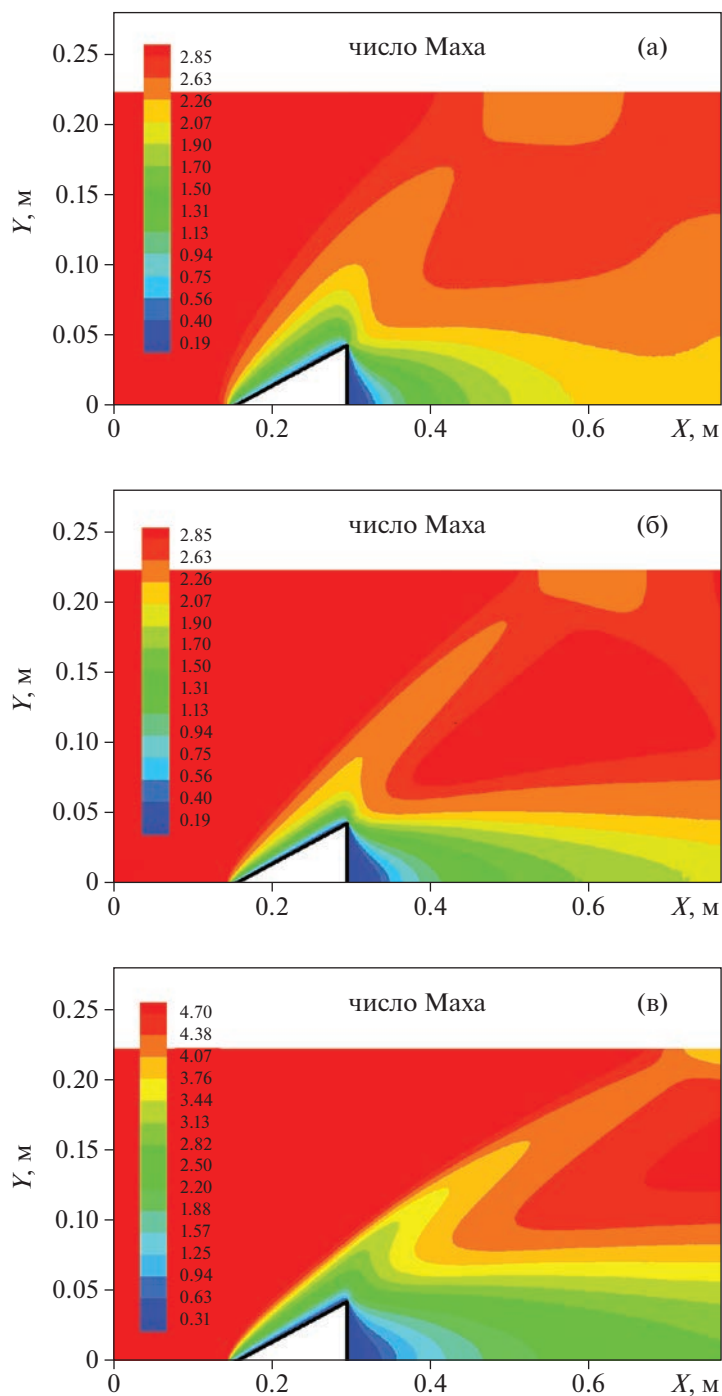
Для вариантов б и в ($Kn \approx 0.05$) результаты расчетов можно приближенно сопоставить с данными об угле наклона ударной волны при обтекании конуса сверхзвуковым невязким потоком [36], [37]. В последнем случае течение полагается коническим, что позволяет упростить систему уравнений для определения угла наклона косого скачка. Согласно [37] угол наклона составляет 30.5° для угла полураствора конуса 20° при числе Маха набегающего потока 2.84 и 20.6° для угла полураствора 15° при $M_0 = 4.6$. Угол наклона скачка уменьшается с ростом числа Маха и уменьшением угла полураствора конуса. Для полученных результатов угол наклона скачка можно оценить лишь приближенно по углу наклона изолиний максимальной плотности. Рассматриваемое



Фиг. 16. Поле плотности для вариантов (а), (б) и (в).

течение разреженное и не является коническим. Угол наклона скачка находится в отмеченном выше диапазоне и составляет 28.2° для $M_0 = 3$ и 27° для $M_0 = 5$. Качественно результаты расчета полей плотности находятся в соответствии с результатами работы [35], в которой рассматривается обтекание конуса с углом полураствора 10° потоком азота.

Интересным аспектом обтекания конуса является формирование циркуляционного течения в донной области (фиг. 18). Для варианта расчета б ($M_0 = 3$, $Kn \approx 0.05$) в донной области формируется зона развитого циркуляционного течения. Для вариантов а ($M_0 = 3$, $Kn \approx 0.02$) и в ($M_0 = 5$, $Kn \approx 0.05$) падение плотности аргона за основанием конуса оказывается существенно больше. Течение в донной области становится близким к свободномолекулярному и область циркуляционного течения деградирует.

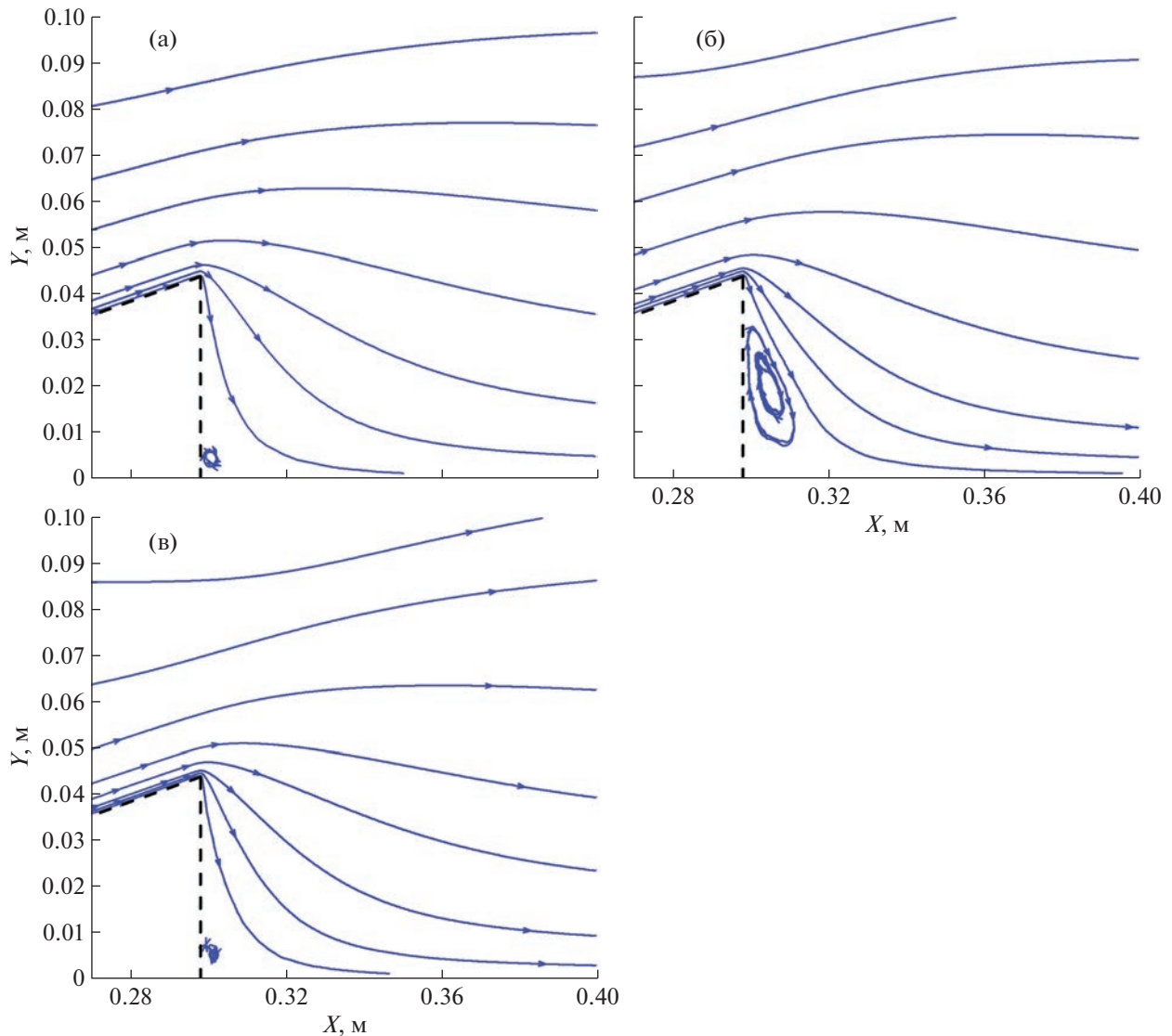


Фиг. 17. Поле числа Маха для вариантов (а), (б) и (в).

ВЫВОДЫ

Алгоритмы параллелизации необходимы для ускорения расчетов разреженных течений методом ПСМ на кластерах различной архитектуры. Одним из возможных подходов к параллелизации является параллелизация по данным. К достоинствам алгоритма параллелизации по данным относится простота реализации в имеющемся последовательном коде ПСМ средствами OpenMP, а также меньшие требования по резервированию памяти для массивов данных.

В рамках проведенного исследования разработанный алгоритм параллелизации по данным, реализованный средствами OpenMP, протестирован на двух задачах: о расчете свободного одно-



Фиг. 18. Линии тока для вариантов (а), (б) и (в).

родного потока и расчете осесимметричного обтекания конуса. Ускорение алгоритма оказалось удовлетворительным, около 6.5 на 28 потоках/ядрах. Наиболее “узким” местом работы алгоритма является плохая масштабируемость процедуры индексации частиц. Предложен алгоритм, позволяющий увеличить эффективность параллелизации данной процедуры и повысить значение ускорения работы всей программы до 8 на 28 потоках. Среди причин относительно слабого ускорения можно указать также недостаток используемой модели параллельного программирования соединения—разветвление, когда распараллеливаются только участки, а не весь код, и возможное удержание совместно используемых данных в других вычислительных ядрах.

Проведено сравнение эффективности работы алгоритма параллелизации по данным и алгоритма декомпозиции расчетной области. Последний в общем случае может быть реализован как средствами технологии MPI, так и OpenMP. Расчет свободного потока продемонстрировал существенно лучшую масштабируемость алгоритма декомпозиции расчетной области. Однако программная реализация алгоритма требует передачи данных о покидающих подобласти частицах между потоками/ядрами на каждом временном шаге, правильной “адресации” этих частиц в новые области, а также использования дополнительных алгоритмов балансировки загрузки. Таким образом, в случае применения алгоритма декомпозиции по области необходимо существенное изменение программного кода с его последующей отладкой.

С использованием параллельного кода выполнен расчет обтекания конуса с углом полураствора 16.7° разреженным сверхзвуковым потоком аргона. Распределение параметров в поле течения находится в согласии с результатами других теоретических исследований. Использование высокоэффективного алгоритма позволило изучить особенности течения в донной области, характеризующейся малой плотностью частиц. Показана деградация области циркуляционного течения с ростом числа Кнудсена и числа Маха.

Представленная работа является одним из шагов в развитии алгоритма декомпозиции по данным. Перспективным направлением является ускорение работы алгоритма за счет: реорганизации массива информации о частицах и перехода к использованию отдельных массивов для каждой ячейки, аналогично технологии, реализованной в PIC-коде (Particle-In-Cell) расчета течений плазмы [38], [39]; полному исключению процедуры индексации частиц за счет включения ряда ее операций в другие процедуры метода ПСМ. Также интерес представляет разработка двухуровневых алгоритмов, основанных на декомпозиции расчетной области средствами MPI совместно с алгоритмом с параллелизацией по данным средствами OpenMP, а также реализации алгоритма декомпозиции расчетной области средствами MPI при межузловом взаимодействии совместно с алгоритмом декомпозиции расчетной области средствами OpenMP при работе с общей памятью на каждом узле.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Boltzmann L. Weitere studien über das wärme-gleichgewicht unter gasmoleculen // Wien. Acad. Sitzungsber. 1872. № 66. P. 275–370.
2. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского гос. ун-та, 2003. 272 с.
3. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Потапов А.П., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В. Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56. № 6. С. 89–105.
4. Черемисин Ф.Г. Решение уравнения Больцмана в режиме сплошной среды // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2023. Т. 63. № 2. С. 336–348.
5. Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M. Model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // Phys. Rev. 1954. Rev. 94. P. 511–524.
6. Shakhov E.M. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation // Fluid Dynamics. 1968. V. 3. № 5. P. 95–96.
7. Шахов Е.М. Метод исследования движений разреженного газа. М.: Наука, 1974. 205 с.
8. Titarev V.A. Application of the Nesvetay Code for Solving Three-Dimensional High-Altitude Aerodynamics Problems // Comput. Math. and Math. Phys. 2020. V. 60. № 4. P. 737–748.
9. Titarev V.A., Morozov A.A. Arbitrary Lagrangian-Eulerian discrete velocity method with application to laser-induced plume expansion // Appl. Math. and Comput. VSI:Num Hyp. 2022. V. 429. P. 127241.
10. Pfeiffer M., Mirza A., Nizenkov P. Multi-species modeling in the particle-based ellipsoidal statistical Bhatnagar-Gross-Krook method for monatomic gas species // Phys. of Fluids. 2021. V. 33. P. 036106.
11. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
12. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarenton Press, 1994.
13. Bird G.A. The DSMC Method. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2013.
14. Bird G.A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas // Phys. Fluids. 1963. V. 6. P. 1518–1519.
15. Dietrich S., Boyd I.D. Scalar and parallel optimized implementation of the direct simulation Monte Carlo method // J. Comput. Phys. 1996. V. 126. № 2. P. 328–342.
16. Ivanov M., Kashkovsky A., Gimelshein S., Markelov G., Alexeenko A., Bondar Y.A., Zhukova G., Nikiforov S., Vaschenkov P. SMILE system for 2D/3D DSMC computations // Proc. of 25th Internat. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. St. Petersburg, Russia. 2006. P. 21–28.
17. Bykov N.Y., Gorbachev Yu.E. Cluster formation in copper vapor jet expanding into vacuum: the direct simulation Monte Carlo. Vacuum. 2019. V. 163. P. 119–127.
18. Plimpton S.J., Moore S.G., Borner A., Stagg A.K., Koehler T.P., Torczynski J.R., Gallis M.A. Direct simulation Monte Carlo on petaflop supercomputers and beyond // Phys. Fluids. 2019. V. 31. P. 086101.
19. Scanlon T., White C., Borg M.K., Cassineli P.R., Farbar E., Boyd I.D., Reese J., Brown R. Open source Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) chemistry modelling for hypersonic flows // AIAA Journal. 2015. V. 53. № 6. P. 1670–1680.
20. Иванов М.С., Рогазинский С.В. Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // М.: ВЦ СО АН СССР. 1988. С. 177.

21. *Stefanov S., Roohi E., Shoja-Sani A.* A novel transient-adaptive subcell algorithm with a hybrid application of different collision techniques in direct simulation Monte Carlo (DSMC) // *Physics of Fluids*. 2022. V. 34. P. 092003.
22. *Wilmoth R.G.* Application of a parallel direct simulation Monte Carlo method to hypersonic rarefied flows // *AIAA Journal*. 1992. V. 30. № 10. P. 2447–2452.
23. *Ivanov M., Markelov G., Taylor S., Watts J.* Parallel DSMC strategies for 3D computations // *Proc. parallel CFD'96*. North Holland, Amsterdam, 1997. P. 485–492.
24. *Kyun Ho Lee, Seok Weon Choi* Interaction effect analysis of thruster plume on LEO satellite surface using parallel DSMC method // *Comput. & Fluids*. 2013. V. 80. P. 333–341.
25. *Revathi Jambunathan, Deborah A. Levin.* Advanced Parallelization Strategies Using Hybrid MPI-CUDA Octree DSMC Method for Modeling Flow Through Porous Media // *Comput. and Fluids*. 2017. V. 149. P. 70–87.
26. *Гришин И.А., Захаров В.В., Лукьянов Г.А.* Параллелизация по данным прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике // Препринт № 3–98. Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. Санкт-Петербург. 1998.
27. *Быков Н.Ю., Лукьянов Г.А.* Параллельное прямое моделирование Монте-Карло нестационарных течений разреженного газа на суперкомпьютерах массивно-параллельной архитектуры // Препринт № 5–97. Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. Санкт-Петербург. 1998.
28. *Быков Н.Ю., Горбачев Ю.Е., Лукьянов Г.А.* Параллельное прямое моделирование методом Монте-Карло истечение газа в вакуум от импульсного источника // *Теплофиз. и аэромеханика*. 1998. Т. 5. № 3. С. 439–445.
29. *Shamseddine M., Lakkis I.* A Novel Spatio-Temporally Adaptive Parallel Three-Dimensional DSMC Solver for Unsteady Rare Ped Micro/Nano Gas Flows // *Comput. and Fluids*. 2019. Vol. 186. P. 1–14.
30. *Wolfgang Wagner.* A Convergence Proof for Bird's Direct Simulation Monte-Carlo Method for the Boltzmann Equation // *J. of Statistical Physics*. 1992. V. 66. № 3/4. P. 1011–1044.
31. *Gao D., Schwartzentruber T.E.* Optimizations and Open MP implementation for the direct simulation Monte Carlo method // *Comput. & Fluids*. 2011. V. 42. P. 73–81.
32. *Vogenitz F.W., Takata G.Y.* Rarefied hypersonic flow about cones and flat plates by Monte Carlo simulation // *AIAA Journal*. 1971. V. 9. Iss. 1. P. 94–100.
33. *Ерофеев А.И.* Расчет обтекания конуса под углом атаки гиперзвуковым потоком разреженного газа // *Уч. Зап. ЦАГИ*. 1979. Т. 10. № 6. С. 122–127.
34. *Ларина И.Н., Рыков В.А.* Пространственное обтекание конических тел потоком разреженного газа // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1989. Т. 29. № 1. С. 110–117.
35. *Taylor J.C., Moss J.N., Hassan H.A.* Study of hypersonic flow past sharp cones // *AIAA*. 1989. P. 89–1713.
36. *Краснов Н.Ф.* Аэродинамика тел вращения. М.: Машиностр., 1964. 572 с.
37. *Kopal Z.* Tables of supersonic flow around Cones. Technical report N. 1. MIT., 1947.
38. *Tskhakaya D., Schneider R.* Optimization of PIC codes by improved memory management // *J. of Comput. Phys.* 2007. V. 225. P. 829–839.
39. *Романенко А.А., Снытников А.В.* Оптимизация переупорядочивания модельных частиц при реализации метода частиц в ячейках на GPU // *Вестн. Новосибирского гос. ун-та. Серия: Информационные технологии*. 2019. Т. 17. № 1. С. 82–89.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

НЕКЛАССИЧЕСКИЙ ПЕРЕНОС ТЕПЛА В МИКРОКАНАЛЕ И ОДНА ЗАДАЧА ДЛЯ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

© 2023 г. О. В. Ильин^{1,*}

¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 44, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: oilyin@gmail.com

Поступила в редакцию 28.03.2023 г.
Переработанный вариант 30.04.2023 г.
Принята к публикации 22.08.2023 г.

В работе рассмотрена одномерная задача о переносе тепла в ограниченной области (микроканале), заполненной разреженным газом. На левой границе в область направлены два молекулярных пучка, причем скорость частиц в каждом пучке одинакова. Правая граница считается твердой стенкой и для нее ставятся условия диффузного отражения. Используя кинетическую модель Шахова, показано, что изменяя отношения скоростей молекулярных пучков, можно задать в микроканале поток тепла разной величины и знака, при этом температуры левой правой границ в канале одинаковы, либо градиент температуры в приграничной зоне имеет тот же знак, что и поток тепла. С данной задачей связана проблема построения решеточных уравнений Больцмана с четырьмя скоростями, правильно воспроизводящими первые максвелловские полумоменты, что необходимо для моделирования микротечений. Показано, что в этом случае для решеточных моделей Больцмана оптимальным отношением дискретных скоростей является 1 : 4. Библ. 37. Фиг. 4.

Ключевые слова: решеточные уравнения Больцмана, неравновесные течения.

DOI: 10.31857/S0044466923120153, **EDN:** ZKVTJA

1. ВВЕДЕНИЕ

В неравновесных системах потоки тепла, нарушающие закон Фурье, наблюдаются достаточно часто. Действительно, уравнение сохранения энергии в газовой системе утверждает, что изменение внутренней энергии пропорционально градиенту теплоток и работе вязких сил [1]. Таким образом, вязкое трение может существенно влиять на градиенты температуры и теплоток. В качестве примера можно привести явление разогрева поверхности тела, погруженного в движущуюся жидкость [2]. Появление теплоток без градиента температуры, но зависящего от градиента квадрата тензора напряжений было детально изучено в ряде статей [3–5]. Неклассические эффекты обнаруживаются в течениях Куэтта и Пуазейля. В плоском течении Куэтта теплоток, направленные вдоль стенок, могут быть получены при моделировании с помощью уравнения Больцмана [6, 7]. Для плоского разреженного течения Пуазейля наблюдаются как продольный, так и поперечный теплоток, нарушающий закон Фурье. Профиль температуры имеет вид полинома четвертой степени относительно поперечной переменной, причем минимум температуры наблюдается в центре течения, тогда как теплоток направлен к стенкам (из холодной области в горячую). Данное свойство было предсказано аналитически [3, 5, 8, 9] и подтверждено численными экспериментами на основе методов молекулярной динамики [10], Монте-Карло [11], моментными уравнениями [12, 13], а также с помощью решеточных уравнений Больцмана [14] и гибридного метода на основе уравнения БГК и решеточных уравнений Больцмана [15]. Неклассический теплоперенос обнаруживается для течения газа в замкнутой полости с подвижной границей [16].

Существование аномального теплопереноса также было продемонстрировано для задач с мембранными граничными условиями для случая сверхзвукового течения газа [17]. В дальнейшем класс задач с неклассическим теплопереносом был значительно расширен [18–20], также было показано, что сверхзвуковое течение не является необходимым, теплоток и градиент

температуры могут иметь один знак для медленных течений в пристеночных слоях, данный результат может быть получен на основе линеаризованного уравнения БГК [21].

В настоящей работе рассматривается одномерное течение газа в микроканале, считается, что от левой границы в область направлены два молекулярных пучка, причем скорость частиц в каждом пучке одинакова. Правая граница считается твердой стенкой и для нее ставятся условия диффузного отражения частиц. Данная задача является модификацией задачи, в которой на одной из границ ставятся неравновесные условия в виде суммы двух максвелловских функций [22, 23]. Важно отметить, что в текущей задаче оказывается возможным аналитически найти условия, при которых аномальный теплопоток направлен как внутрь рассматриваемой области (увеличивает внутреннюю энергию газа), так и из микроканала (уменьшает внутреннюю энергию газа). Отметим, что граничные условия имеют вид дискретной по скоростям функции распределения, и с постановкой условий на левой границе связана задача из теории решеточных уравнений Больцмана. Для правильного описания неравновесных эффектов (например, скоростей скольжения) у твердых границ на основе решеточных уравнений Больцмана требуется, чтобы равновесная решеточная функция распределения правильно воспроизводила свойства максвелловского распределения (или сходилась к максвелловскому распределению при увеличении числа дискретных скоростей [24]). В частности, для локального равновесия решеточной модели первые моменты и первые полумоменты должны совпадать с максвелловскими [14, 25–29]. Рассматриваемая на левой границе функция распределения приводит к неклассическому теплопереносу в случае, если ее третий полумомент существенно отличается от максвелловского, т.е. эта функция максимально не похожа на максвелловскую. Таким образом, меняя отношение скоростей в молекулярных пучках на левой границе, можно получить условия, при которых граничная функция распределения ведет к неклассическому теплопереносу, либо применима для решеточных уравнений Больцмана. Показано, что для четырехскоростной решеточной модели Больцмана оптимальным отношением дискретных скоростей является 1 : 4.

2. НЕКЛАССИЧЕСКИЙ ТЕПЛОПЕРЕНОС В МИКРОКАНАЛЕ

Рассмотрим одномерное течение газа в ограниченной области (микроканал), состояние газа описывается функцией распределения $f(t, x, \xi)$, где t – время, x – пространственная переменная, направленная вдоль микроканала, ξ – молекулярная скорость. В данной работе считаем, что на поперечных стенках микроканала частицы отражаются зеркально. Функция $f(t, x, \xi)$ удовлетворяет модельному кинетическому уравнению Шахова (S-модель) [30–32], которое рассмотрим в безразмерной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{\tau} (f^{eq} - f), \quad (1)$$

где f^{eq} – локально-равновесная функция распределения, для S-модели она принимает следующий вид (в трехмерном пространстве):

$$f^{eq} = M(c) \left(1 + \frac{(1 - Pr)}{\rho T^2} \mathbf{q} \mathbf{c} \left(\frac{c^2}{5T} - 1 \right) \right), \quad (2)$$

где $M(c)$ – есть локально-максвелловская функция распределения:

$$M(c) = \frac{\rho}{\sqrt{(2\pi T)^3}} \exp\left(-\frac{c^2}{2T}\right),$$

а также $\mathbf{c} = \xi - \mathbf{u}$, $Pr = 2/3$ – число Прандтля для одноатомного газа, ρ , $\mathbf{u}$, T , $\mathbf{q}$ – плотность, потоковая скорость, температура и теплопоток соответственно. Время релаксации τ определяется из соотношения $\mu/\rho T$, где μ – вязкость, при этом для газа из твердых сфер длина свободного пробега равна $\lambda = \mu/\rho T_w \sqrt{\pi/(2T_w)}$, тогда

$$\tau = \sqrt{\frac{2T_w}{\pi}} \lambda = \sqrt{\frac{2T_w}{\pi}} Kn H,$$

где T_w – характерная температура течения (температура правой твердой стенки), которая считается равной температуре стенки на правой границе области, H – длина рассматриваемой области, $Kn = \lambda/H$ – число Кнудсена.

Рассмотрим граничные условия, для левой границы имеем для частиц, входящих в канал:

$$f|_{x=0, \xi_x > 0} \equiv f_l(\xi) = (w_1 \delta(\xi_x - v_1) + w_2 \delta(\xi_x - v_2)) (2\pi)^{-1} \exp\left(-\frac{\xi_y^2 + \xi_z^2}{2}\right), \quad (3)$$

где $\delta(\xi - v)$ — дельта функция. Веса w_1, w_2 и скорости v_1, v_2 считаются неотрицательными, значения этих величин влияют на профили температуры и теплопоток в микроканале. Для правой границы ставятся условия диффузного отражения:

$$f|_{x=H, \xi_x < 0} \equiv f_r(\xi) = \frac{K}{\sqrt{(2\pi T_w)^3}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_w}\right), \quad (4)$$

где коэффициент K получается из условия непротекания, т.е.

$$K = \frac{\int_{\xi_x > 0} f(t, x = H, \xi) \xi_x d^3 \xi}{\int_{\xi_x < 0} (2\pi T_w)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_w}\right) \xi_x d^3 \xi},$$

температуру правой стенки будем считать далее единичной, т.е. $T_w = 1$.

Приближенное решение задачи (1)–(4) можно получить из следующих соображений. Если считать, что длина канала H сравнима с длиной свободного пробега λ , то число Кнудсена $\text{Kn} \approx 1$. Известно, что для таких сильно разреженных течений функция распределения газа может быть разрывна при $\xi_x = 0$ и в первом приближении (свободномолекулярном) решение является суммой значений функции распределения на левой и правой границах ([1] и задача 2.8 в [33]), т.е. для $\xi_x > 0$ функция f выражается из (3), а для $\xi_x \leq 0$ из (4):

$$f(x, \xi) = f_l(\xi), \quad \xi_x > 0, \quad x \in [0, H], \quad (5)$$

$$f(x, \xi) = f_r(\xi), \quad \xi_x \leq 0, \quad x \in [0, H]. \quad (6)$$

Для удобства дальнейшего рассмотрения будем считать, что плотность входящего в канал пучка равна $1/2$, т.е. $\int_{\xi_x > 0} f_l(\xi) d^3 \xi = 1/2$, тогда $K = 1$ и плотность газа в свободномолекулярном приближении (5), (6) равна единице. Зададим веса w_1, w_2 и скорости v_1, v_2 таким образом, чтобы для свободномолекулярного приближения (5), (6) потоковая скорость $\mathbf{u}$ была равна нулю, а температура газа была равна 1. Имеем систему уравнений:

$$w_1 + w_2 = \frac{1}{2} = \int_{\xi_x \leq 0} f_r(\xi) d^3 \xi, \quad (7)$$

$$w_1 v_1 + w_2 v_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \int_{\xi_x \leq 0} f_r(\xi) \xi_x d^3 \xi, \quad (8)$$

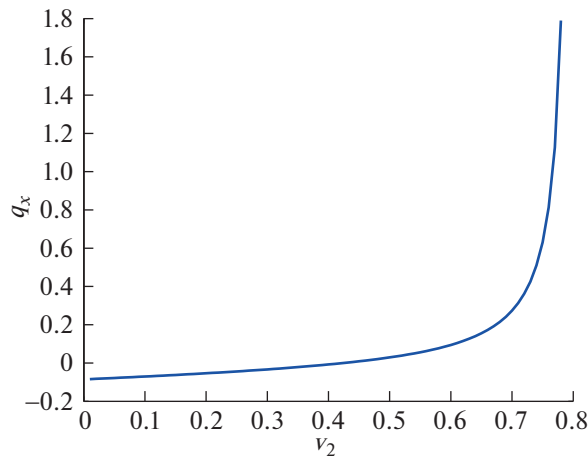
$$1 + w_1 v_1^2 + w_2 v_2^2 = \frac{3}{2} = \int_{\xi_x \leq 0} f_r(\xi) \xi^2 d^3 \xi, \quad (9)$$

получаем решение уравнений (7)–(9):

$$w_1 = \frac{\frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} - v_2 \right)^2}{1 - 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} v_2 + v_2^2}, \quad w_2 = \frac{1}{2} - w_1, \quad v_1 = \frac{1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} v_2}{\sqrt{\frac{2}{\pi}} - v_2}, \quad (10)$$

где скорость v_2 остается пока свободным параметром. Рассмотрим подробнее теплопоток:

$$q_x = \frac{1}{2} \int f(\xi) c^2 c_x d^3 \xi = \frac{1}{2} \left(w_1 v_1^3 + w_2 v_2^3 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \right), \quad (11)$$



Фиг. 1. Теплоток q_x (без градиента температуры) в зависимости от скорости v_2 в свободномолекулярном приближении для задачи (1)–(4), формула (2).

очевидно, что изменяя значение v_2 в (10) можно влиять на величину теплоток. Если $v_2 \in (\sqrt{2/\pi}, \sqrt{\pi/2}]$, тогда скорость v_1 неположительна и этот случай исключается из дальнейшего рассмотрения. Далее будем рассматривать случай $v_2 \in (0, \sqrt{2/\pi})$. Температура в микроканале постоянна в свободномолекулярном приближении, теплоток может быть существенно отличен от нуля. Значения теплоток для разных v_2 представлены на фиг. 1. Отношение скоростей v_2/v_1 в зависимости от v_2 показаны на фиг. 2. Отметим, что при $v_2 \approx 0.425$ и, соответственно, из (10) при $v_1 \approx 1.77$ (отношение скоростей v_1 и v_2 примерно равно 4.17) получаем, что аномальный теплоток отсутствует. В этом случае дискретное распределение (3) правильно описывает нужные моменты максвелловского распределения. При $v_2 > 0.425$ теплоток направлен внутрь микроканала, причем в свободномолекулярном приближении получаем, что его можно сделать сколь угодно большим при $v_2 \rightarrow \sqrt{2/\pi}$, в этом случае $v_1 \rightarrow \infty$. В этом случае функция распределения имеет бесконечный коэффициент асимметрии. Действительно, рассматривая подробнее слагаемое $w_1 v_1^3$ в (2), видно, что при $v_2 \rightarrow \sqrt{2/\pi}$ оно растет как $(\sqrt{2/\pi} - v_2)^{-1}$. При $v_2 < 0.425$ теплоток отрицателен, т.е. можно удалять тепло из канала, но значения q_x ограничены снизу.

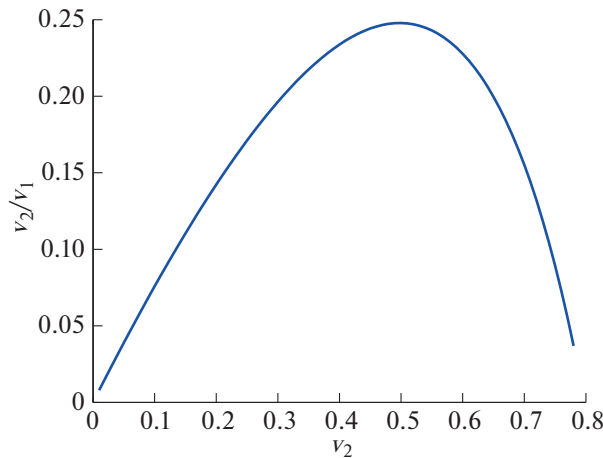
Отдельно следует подчеркнуть, что полученные результаты относятся к режиму течения, близкому к свободномолекулярному. Однако результаты численных экспериментов, представленные далее, показывают, что качественно поведение знака теплоток не меняется для чисел Кнудсена в режиме скольжения и переходном режиме течения ($\text{Kn} \sim O(10^{-1})$).

3. ЗАДАЧА О МОМЕНТАХ И ПОЛУМОМЕНТАХ ДЛЯ ЧЕТЫРЕХСКОРОСТНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ БОЛЬЦМАНА

Задача о нахождении отношений дискретных скоростей и весов для описания первых моментов и полумоментов распределения Максвелла имеет прямое отношение к теории построения решеточных уравнения Больцмана (РУБ). Решеточные уравнения Больцмана являются дискретизацией по пространственным и временным переменным кинетического уравнения Бхатнагара–Гросса–Крука [34]. Обычная форма локально максвелловского распределения для РУБ имеет следующий вид:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \mathbf{u}}{\theta} + \frac{\mathbf{u} \mathbf{u}}{2\theta^2} : (\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - \mathbf{I}\theta) \right), \quad i = 1, \dots, N,$$

где $w_i > 0$ — веса (аналоги абсолютно-максвелловского распределения), $\mathbf{c}_i = (c_{i,x}, c_{i,y}, c_{i,z})$ — дискретные скорости, N — число дискретных скоростей, ρ , $\mathbf{u}$, θ — плотность, объемная скорость,



Фиг. 2. Отношение скоростей v_2/v_1 в зависимости от v_2 , решения получены из равенств (10).

температура газа соответственно. Также определены скалярные произведения $\mathbf{c}_i \mathbf{u} = \sum_{\alpha} c_{i,\alpha} u_{\alpha}$ и следующие свертки $\mathbf{u} \mathbf{u} : \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i = \sum_{\alpha\beta} c_{i,\alpha} c_{i,\beta} u_{\alpha} u_{\beta}$, $\mathbf{u} \mathbf{u} : \mathbf{I} = \sum_{\alpha} u_{\alpha} u_{\alpha}$. В настоящей работе рассмотрим одномерную модель с четырьмя дискретными скоростями, которые удобно обозначить как $c_{\pm 2}$, $c_{\pm 1}$, причем $c_{-1,-2} = -c_{1,2}$, и весами $w_{\pm 2}$, $w_{\pm 1}$, где $w_{-1,-2} = w_{1,2}$. Будем также считать, что $\theta = 1$.

Умножая функции f_i^{eq} на 1, $\mathbf{c}_i$, c_i^2 и суммируя по i , получаем выражения для моментов нулевого, первого и второго порядка. Для того, чтобы они совпадали с максвелловскими моментами соответствующих порядков, необходимо, чтобы выполнялись равенства:

$$w_1 + w_2 = \frac{1}{2}, \quad w_1 c_1^2 + w_2 c_2^2 = \frac{1}{2}, \quad w_1 c_1^4 + w_2 c_2^4 = \frac{3}{2}, \quad (12)$$

для правильного диффузного отражения частиц газа у твердых стенок необходимо, чтобы модель описывала максвелловские полумоменты $\int_{c>0} M(c) c^n dc$, если потребовать, чтобы воспроизводился первый полумомент, то получаем дополнительное условие на веса и скорости решетки:

$$w_1 c_1 + w_2 c_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{c^2}{2}} c dc = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (13)$$

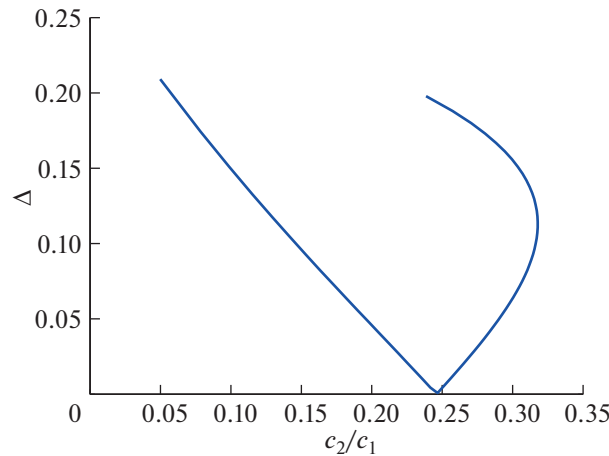
Из уравнений (12) получаем решения:

$$c_2^2 = 1 - \sqrt{2} \sqrt{\frac{2w_1}{(1-2w_1)}}, \quad c_1^2 = 1 + \sqrt{2} \sqrt{\frac{(1-2w_1)}{2w_1}}$$

и $w_2 = \frac{1}{2} - w_1$, причем w_1 пока остается свободным параметром. Подставляем эти выражения в левую часть уравнения (13) и получаем нелинейное уравнение относительно веса w_1 . Введем относительную ошибку для первого полумомента в зависимости от w_1 :

$$\Delta(w_1) = \sqrt{2\pi} \left| w_1 c_1 + \left(\frac{1}{2} - w_1 \right) c_2 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right|, \quad (14)$$

график $\Delta(w_1)$ для разных значений $c_2(w_1)/c_1(w_1)$ представлен на фиг. 3. Ошибка Δ практически равна нулю, если отношение скоростей $c_2/c_1 \approx 0.2467$. Так как для численных расчетов на основе РУБ удобно иметь целое отношение (или рациональное) между скоростями, то оптимальным целым отношением скоростей c_2/c_1 будет 1 : 4. Отметим, что для четырехскоростной модели со скоростями $\sqrt{3} \pm \sqrt{6}$ (отношение скоростей равно 0.318) [35–37], которая дополнительно правильно воспроизводит полный максвелловский третий момент, относительная ошибка для первого



Фиг. 3. Относительная ошибка Δ первого максвелловского полумомента (14) в зависимости от отношения скоростей v_2/v_1 для решеточной модели Больцмана четырьмя скоростями.

максвелловского полумомента $\approx 11\%$, что примерно в три раза меньше, чем у стандартной трехскоростной решеточной модели Больцмана и, следовательно, четырехскоростная модель будет иметь гораздо лучшую точность при моделировании разреженных течений, чем трехскоростная модель.

4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В МИКРОКАНАЛЕ

Для численного решения задачи (1)–(4) используется противопотоковая двухшаговая разностная схема. Рассмотрим сеточную функцию распределения:

$$f_m^n(\xi_i, \xi_j, \xi_k) \equiv f(t = t_n, x = x_m, \xi_x = \xi_i, \xi_y = \xi_j, \xi_z = \xi_k).$$

Для сеточной функции распределения вначале решается шаг адвекции:

$$f_m^{n+1/2} = f_m^n + 0.5\beta_i(-3f_m^n + 4f_{m+1}^n - f_{m+2}^n), \quad \xi_i \geq 0, \quad (15)$$

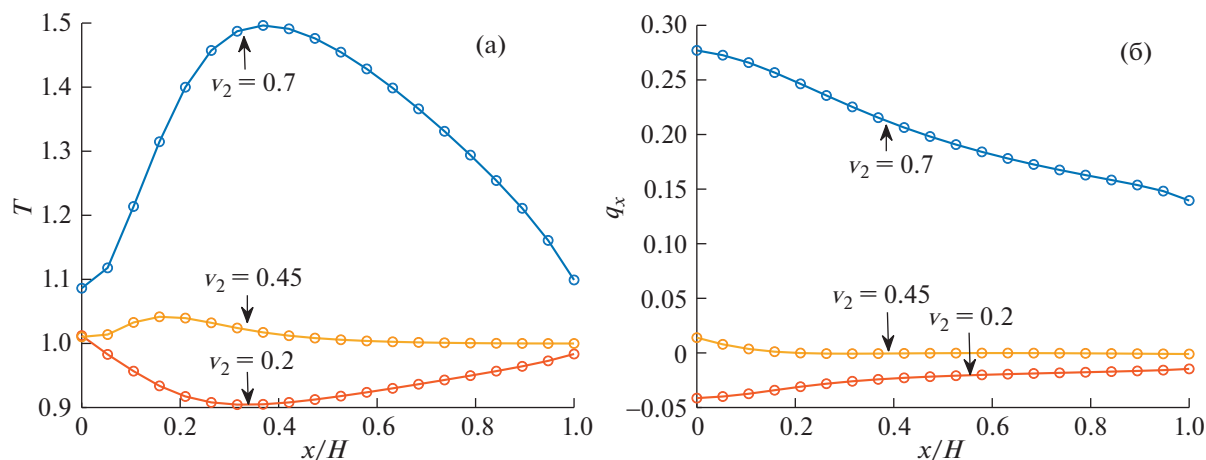
$$f_m^{n+1/2} = f_m^n - 0.5\beta_i(3f_m^n - 4f_{m-1}^n + f_{m-2}^n), \quad \xi_i < 0, \quad (16)$$

где $\beta_i = \Delta t \xi_i / \Delta x$ и $\Delta t, \Delta x$ – есть шаг по времени для разностной схемы и размер ячейки в физическом пространстве. Для приграничных узлов используются схема первого порядка и граничные условия (3), (4). Затем решается столкновительная часть для S-модели:

$$f_m^{n+1} = f_m^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{\tau} (f_m^{eq, n+1/2} - f_m^{n+1/2}), \quad (17)$$

где $f_m^{eq, n+1/2}$ – функция распределения (2), для которой плотность, потоковая скорость, температура и теплоток вычисляются с помощью $f_m^{n+1/2}$.

Расчеты проводились для числа Кнудсена $\text{Kn} = 0.1$, канал длиной $H = 1$ разбивался на 20 пространственных узлов, считается, что первый и последний узлы лежат на границах микроканала, тогда расстояние между пространственными узлами $\Delta x = 1/19$. Шаг по времени Δt вычислялся из числа Куранта, которое по определению равно $\Delta t \xi_{\max} / \Delta x$, где $\xi_{\max} = 5$ – есть максимальная рассматриваемая молекулярная скорость, число Куранта бралось равным 0.45. В качестве начальных данных бралось максвелловское распределение, расчет велся до установления стационарных решений.



Фиг. 4. Результаты численного моделирования течения в микроканале, задача (1)–(4), $\text{Kn} = 0.1$, а – профили температуры, б – профили теплопотока.

Рассматривалось несколько вариантов задания параметров для граничных условий (3): $v_2 = 0.2, 0.45, 0.7$, тогда из равенств (10) получаем, что соответствующие $v_1 \approx 1.41, 1.84, 4.51$. Теоретические предсказания для свободномолекулярного режима качественно верны для рассматриваемого случая $\text{Kn} = 0.1$. Теплопоток положителен при $v_2 = 0.7$, практически равен нулю при $v_2 = 0.45$ и отрицателен при $v_2 = 0.2$, что качественно соответствует решению (5), (6), фиг. 4. Профили температуры демонстрируют существенно неклассическое неравновесное поведение вблизи левой границы, а именно, градиент температуры имеет тот же знак, что и теплопоток, фиг. 4. Отметим, что в рассматриваемой задаче удастся контролировать поведение аномального теплопотока: можно задать условия, для которых теплопоток направлен из микроканала во внешнее пространство (с прикладной точки зрения это может быть интересно для охлаждения твердой правой границы), так и внутрь микроканала.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматривается задача о переносе тепла в ограниченной одномерной области (микроканале), заполненной разреженным одноатомным газом. На левой границе области размещена мембрана, которая пропускает частицы во внешнее пространство, при этом внутрь области направлены два молекулярных пучка, причем частицы в каждом пучке имеют одинаковую скорость. На правой границе канала находится твердая стенка, и ставятся граничные условия диффузного отражения. В свободномолекулярном приближении данная задача имеет аналитическое решение. Важно подчеркнуть, что, изменяя скорости в молекулярных пучках в свободномолекулярном приближении, можно получить:

а) сколь угодно большие положительные значения теплопотока в микроканале без градиента температуры (фиг. 1).

б) отрицательные значения теплопотока в микроканале без градиента температуры (фиг. 1).

На практике реализация сколь угодно большого теплопотока связана со значительными сложностями, так как необходимо создать молекулярные пучки практически с нулевой температурой и сверхзвуковой скоростью.

Численные расчеты на основе модели Шахова для числа Кнудсена, равного 0.1, качественно подтверждают теоретические результаты. Также показано, что вблизи левой границы градиент температуры имеет тот же знак, что и теплопоток.

Задача о выборе скоростей в молекулярных пучках имеет связь с задачей построения решеточных уравнений Больцмана, правильно воспроизводящих максвелловские полумоменты. Данное свойство необходимо для описания диффузного отражения частиц газа. В настоящей работе показано, что если ограничиться первым полумоментом, то для решеточных уравнений Больцмана с четырьмя скоростями, оптимальным отношением дискретных скоростей является 1 : 4.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коган М. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1986.
2. Ландау Л., Лифшиц Е. Гидродинамика. М.: Наука, 1984.
3. Baranyai A., Evans D., Davis P. Isothermal shear-induced heat flow// Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 7593.
4. Todd B., Evans D. The heat flux vector for highly inhomogeneous nonequilibrium fluids in very narrow pores// J. Chem. Phys. 1995. V. 103. P. 9804.
5. Todd B., Evans D. Temperature profile for Poiseuille flow// Phys. Rev. E. 1997. V. 55. P. 2800.
6. Sone Y., Takata S., Ohwada T. Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules// Eur. J. Mech B/Fluids. 1989. V. 9. P. 273.
7. Rogozin O. Numerical analysis of the nonlinear plane Couette-flow problem of a rarefied gas for hard-sphere molecules// Eur. J. Mech B/Fluids. 2016. Vol 60. P. 148.
8. Aoki K., Takata S., Nakanishi T. Poiseuille-type flow of a rarefied gas between two parallel plates driven by a uniform external force// Phys. Rev. E. 2002. V. 65. P. 026315.
9. Myong R.S. A full analytical solution for the force-driven compressible Poiseuille gas flow based on a nonlinear coupled constitutive relation// Phys. Fluids. 2011. V. 23. 012002.
10. Malek Mansour M., Baras F., Garcia A. On the validity of hydrodynamics in plane Poiseuille flows// Physica A. 1997. V. 240. P. 255.
11. Zheng Y., Garcia A., Alder B. Comparison of Kinetic Theory and Hydrodynamics for Poiseuille Flow // J. Stat. Phys. 2002. V. 109. P. 495.
12. Gu X.-G., Emerson D. A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime // J. Fluid Mech. 2009. V. 636. P. 177.
13. Taheri P., Torrilhon M., Struchtrup H. Couette and Poiseuille microflows: Analytical solutions for regularized 13-moment equations// Phys. Fluids. 2009. V. 21. P. 017102.
14. Ambrus V., Sofonea V. Application of mixed quadrature lattice Boltzmann models for the simulation of Poiseuille flow at non-negligible values of the Knudsen number// J. Comput. Sci. 2016. V. 17. P. 403.
15. Ilyin O. Relative entropy based breakdown criteria for hybrid discrete velocity Bhatnagar–Gross–Krook and lattice Boltzmann method// Phys. Fluids. 2020. V. 32. P. 112006.
16. Venugopal V., Praturi D., Girimaji S. Non-equilibrium thermal transport and entropy analyses in rarefied cavity flows// J. Fluid Mech. 2019. V. 864. P. 995.
17. Aristov V. A steady state, supersonic flow solution of the Boltzmann equation// Phys. Lett. A. 1998. V. 250. P. 354.
18. Aristov V., Frolova A., Zabelok S. A new effect of the nongradient transport in relaxation zones// Europhys. Lett. 2009. V. 88. P. 30012.
19. Aristov V., Frolova A., Zabelok S. Supersonic flows with nontraditional transport described by kinetic methods // Commun. Comput. Phys. 2012. V. 11. P. 1334.
20. Aristov V., Voronich I., Zabelok S. Nonequilibrium nonclassical phenomena in regions with membrane boundaries// Phys. Fluids. 2021. V. 33. P. 012009.
21. Ilyin O. Anomalous heat transfer for an open non-equilibrium gaseous system// J. Stat. Mech. 2017. P. 053201.
22. Аристов В., Забелок С., Фролова А. Возможность аномального теплопереноса в течениях с неравновесными граничными условиями// Докл. АН. 2017. Т. 473. С. 286.
23. Aristov V., Voronich I., Zabelok S. Direct methods for solving the Boltzmann equations: Comparisons with direct simulation Monte Carlo and possibilities// Phys. Fluids. 2019. V. 31. P. 097106.
24. Ilyin O. Gaussian Lattice Boltzmann method and its applications to rarefied flows// Phys. Fluids. 2020. V. 32. P. 012007.
25. Ambrus V., Sofonea V. Implementation of diffuse-reflection boundary conditions using lattice Boltzmann models based on half-space Gauss-Laguerre quadratures// Phys. Rev E. 2014. V. 89. P. 041301(R).
26. Ambrus V., Sofonea V. Lattice Boltzmann models based on half-range Gauss–Hermite quadratures // J. Comput. Phys. 2016. V. 316. P. 760.
27. Feuchter C., Schleifenbaum W. High-order lattice Boltzmann models for wall-bounded flows at finite Knudsen numbers// Phys. Rev. E. 2016. V. 94. P. 013304.
28. Aristov V., Ilyin O., Rogozin O. A hybrid numerical scheme based on coupling discrete-velocities models for the BGK and LBGK equations// AIP Conf. Proc. 2019. V. 2132. P. 060007.
29. Aristov V., Ilyin O., Rogozin O. Kinetic multiscale scheme based on the discrete-velocity and lattice-Boltzmann methods// J. Comput. Sci. 2020. V. 40. 101064.

30. *Shakhov E.* Generalization of the Krook kinetic relaxation equation // *Fluid Dyn.* 1968. V. 3. P. 95.
31. *Shakhov E.* Approximate kinetic equations in rarefied gas theory // *Fluid Dyn.* 1968. V. 3. P. 156.
32. *Titarev V.* Conservative numerical methods for model kinetic equations // *Comput. Fluids.* 2006. V. 36. P. 1446.
33. *Struchtrup H.* Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows. Approximation Methods in Kinetic Theory. Berlin: Springer-Verlag, 2005.
34. *Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Viggen E.* The Lattice Boltzmann Method. Principles and Practice. Springer, 2017.
35. *Chikatamarla S., Karlin I.* Entropy and Galilean invariance of lattice Boltzmann theories // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 190601.
36. *Bardow A., Karlin I., Gusev A.* Multispeed models in off-lattice Boltzmann simulations // *Phys. Rev. E.* 2008. V. 77. P. 025701(R).
37. *Chikatamarla S., Karlin I.* Lattices for the lattice Boltzmann method // *Phys. Rev. E.* 2009. V. 79. P. 046701.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКЛАССИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА
С ПРИМЕНЕНИЕМ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ
УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА¹⁾**

© 2023 г. В. В. Аристов^{1,*}, И. В. Воронич¹, С. А. Забелок¹

¹ 117333 Москва, ул. Вавилова, 44, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: aristovvl@yandex.ru

Поступила в редакцию 11.06.2023 г.

Переработанный вариант 15.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Рассмотрено современное состояние исследований неравновесных течений газа с неклассическим переносом, в которых принципиально нарушаются законы Стокса и Фурье (и соответственно метод Чепмена–Энскога неприменим). Для надежного подтверждения эффектов используются расчетные методы различной природы: прямое решение уравнения Больцмана и прямое моделирование Монте-Карло. Неклассический аномальный перенос проявляется на масштабах 5–10 длин свободного пробега, что подтверждает тот факт, что необходимым условием эффектов является сильная неравновесность течения. Рассмотрены двумерные задачи о сверхзвуковом течении около плоской пластины в переходном режиме, а также о сверхзвуковом потоке через мембраны (сетки), где за сеткой течение соответствует задаче о пространственно неоднородной релаксации. В этой области формируются неравновесные распределения, демонстрирующие аномальный перенос. Обсуждается связь эффекта со вторым началом термодинамики, рассматриваются возможности для экспериментальной проверки, а также намечаются перспективы создания на этой основе некоторых новых микроприборов.

DOI: 10.31857/S0044466923120050, EDN: JBERWO

ВВЕДЕНИЕ

Неклассические эффекты различного свойства, обнаруживаемые в разреженных газах, являются одним из важных направлений современных исследований, см. обзор [1]. Изучаемое нами нарушение известных закономерностей при переносе вязких напряжений и тепла существенно как в теоретическом плане, так и с точки зрения возможных приложений. Как правило, наибольшее внимание уделяется отклонению от закона Фурье, поскольку это связано с вопросами теплообмена в технических системах. В научном отношении внимание к потоку тепла связано и с трактовкой второго начала термодинамики. Наверное, первое упоминание о возможной аномальности приведено в работе [2], где на основе обобщенного метода Мотта–Смита предсказывалась локальная немонотонность (“перехлест”) в профиле температуры в структуре ударной волны. Изменение знака градиента температуры при сохранении знака теплового потока свидетельствует о качественно ином характере теплопереноса. В монографии М.Н. Когана [3] также упоминается аналогичный факт с акцентом на важность рассмотрения вопроса “из первых принципов”, имея в виду решение кинетического уравнения Больцмана. В 1980-е годы расчеты с использованием различных методов решения уравнения Больцмана показали, что в этой задаче эффект наблюдается в гиперзвуковом течении при достаточно большом числе Маха $M = 8$. В [4] было показано наличие продольного теплового потока при нулевом градиенте температуры в течении Куэтта (хотя, конечно, более важным было бы обнаружение возможности течения тепла в направлении градиента температуры). В 1990-е годы была сформулирована задача о неоднородной пространственной релаксации, в которой на входной границе функция распределения

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (код проекта 075-15-2020-799).

частиц неравновесная и соответствует сверхзвуковому потоку, и далее наблюдается релаксация вниз по потоку [5]. В таком течении тепловой поток направлен из холодной области в горячую, причем аномальность выявлена во всей изучаемой области. Продольная компонента напряжения также демонстрирует неклассическое поведение: величина ее имеет тот же знак, что и градиент продольной компоненты скорости. В дальнейшем данная задача была исследована для разных сред с изучением поведения различных моментов, включая энтропию [6–9]. Нарушения классического теплопереноса фиксировались и в других классах течений [10–15]. Подчеркнем, что в изучавшихся нами случаях в отличие от, допустим, течения Пуазейля (см., например, [11]) аномальность фиксируется не в некоторой локальной небольшой зоне, а во всей области вниз по потоку. При этом можно регулировать характер аномальности по пространству, меняя вид неравновесной функции распределения на границах изучаемых областей.

В настоящей работе обсуждаются принципиальные теоретические положения подхода. Рассматриваются несколько задач, связанных с условиями формирования и реализации неклассического переноса. Изучаемые течения характеризуются неравновесностью, сформированной в процессе сверхзвукового обтекания. Внимание сосредоточено на пространственно-двумерных задачах с использованием различных вариантов граничных условий. В частности, результаты, полученные для двумерной задачи о мембране, подтверждают основные положения одномерной мембранной модели с дополнительным пояснением и уточнением. Установлено соответствие аномальных эффектов вниз по потоку с аналогичными в одномерной неоднородной пространственной релаксации. Рассмотрены возможности экспериментальной проверки, которая могла бы дать измеримые количественные показатели, полезные и для технических применений.

1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НЕКЛАССИЧЕСКОГО АНОМАЛЬНОГО ПЕРЕНОСА

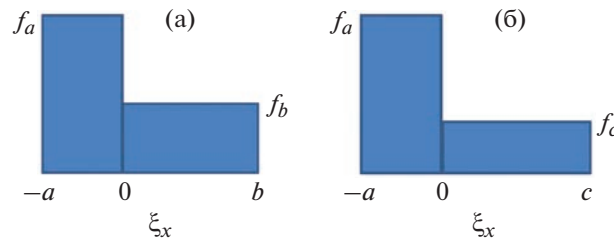
В настоящей работе исследуется так называемый аномальный (отличающийся качественно и количественно от классического) перенос вязких напряжений и тепла в неравновесных течениях. Описание ведется с помощью кинетической теории, важнейшим объектом математического и физического интереса является функция распределения (ФР). Все значимые величины: плотность, средняя скорость, тензор вязких напряжений, температура, давление, потоки тепла и энергии выражаются через ФР как соответствующие моменты и называются *макроскопическими параметрами*. Теоретическим базисом теории газов является кинетическое уравнение Больцмана и различные модельные его версии. Но прежде чем выписывать это уравнение, поясним суть рассматриваемого аномального эффекта переноса на простом примере.

Для одноатомного газа указанные моменты (макропараметры) от ФР $f(\xi)$ имеют следующий вид:

$$n = \int f d\xi, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{n} \int \xi f d\xi, \quad T = \frac{m}{3k_B n} \int c^2 f d\xi, \quad \mathbf{q} = \frac{m}{2} \int c^2 \mathbf{c} f d\xi.$$

Здесь представлены, соответственно, числовая плотность n , вектор средней скорости $\mathbf{u}$, температура T и вектор теплового потока $\mathbf{q}$, $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ – вектор молекулярной скорости, $\mathbf{c} = \xi - \mathbf{u}$, m – масса частицы, k_B – постоянная Больцмана.

Покажем на примере двух близких в пространстве неравновесных распределений (см. фиг. 1), как реализуется аномальный перенос тепла, а именно, что он направлен из холодной области в горячую. Это принципиально отличает такой процесс от традиционного переноса. Здесь в близких пространственных точках по x “приготовлены” две неравновесные функции распределения, для упрощения полагаем, что ФР $f(\xi_x)$ зависит от одной компоненты молекулярной скорости ξ_x . Вычислим соответствующие моменты. Полагаем, что $f(\xi_x) = f_a$ при $-a \geq \xi_x \leq 0$ для обоих распределений. Пусть $f(\xi_x) = f_b$ при $0 < \xi_x \leq b$ для первого (фиг. 1а) распределения, и $f(\xi_x) = f_c$ при $0 < \xi_x \leq c$ для второго (фиг. 1б) распределения. Пусть газ покоится, т.е. средняя скорость $\mathbf{u} = 0$ для обоих распределений. Заметим, что такое предположение проясняет возможную интерпретацию теплового переноса, поскольку часто возникает вопрос: что является физически измеримой величиной, поток тепла или поток энергии? В данном примере вопрос снимается, поскольку для нулевой средней скорости данные величины совпадают. Пусть также $b > a$, $c > b$.



Фиг. 1. Две ФР, зависящие от молекулярной скорости ξ_x (одномерный случай), (а) — неравновесное распределение в точке x , (б) — в точке x_1 , $x_1 > x$.

Для ФР (фиг. 1а) при условии $u = 0$ вычисляем числовую плотность n , температуру (здесь одна степень свободы) T и тепловой поток q :

$$u = \frac{1}{n} \int \xi_x f d\xi_x = \frac{1}{2n} (f_b b^2 - f_a a^2) = 0, \quad f_b = f_a \frac{a^2}{b^2},$$

$$n = \int f d\xi_x = f_b b + f_a a = f_a a \left(\frac{a}{b} + 1 \right),$$

$$T = \frac{1}{n} \int \xi_x^2 f d\xi_x = \frac{1}{3n} (f_b b^3 + f_a a^3) = \frac{a^2}{3n} f_a (b + a),$$

$$q = \frac{1}{2} \int \xi_x^3 f d\xi_x = \frac{1}{8} (f_b b^4 - f_a a^4) = \frac{a^2}{8} f_a (b + a)(b - a) > 0.$$

Для ФР (фиг. 1б) соответственно получаем

$$u_1 = \frac{1}{2n_1} (f_c c^2 - f_a a^2) = 0, \quad f_c = f_a \frac{a^2}{c^2},$$

из чего следует, что

$$n_1 = f_c c + f_a a = f_a a \left(\frac{a}{c} + 1 \right) < n,$$

$$T_1 = \frac{1}{3n_1} (f_c c^3 + f_a a^3) > \frac{1}{3n} (f_c c^3 + f_a a^3) > \frac{1}{3n} (f_b b^3 + f_a a^3) = T,$$

$$q_1 = \frac{1}{8} (f_c c^4 - f_a a^4) = \frac{a^2}{8} f_a (c + a)(c - a) > \frac{a^2}{8} f_a (b + a)(b - a) = q > 0.$$

Значит, $\text{grad } T > 0$ (так как $T_1 > T$), и тепловой поток также положителен, так как в близко расположенных точках $q > 0$ и $q_1 > 0$. Для других соотношений величин a, b, c путем аналогичных соображений можно получить, что $\text{grad } T < 0$ при $q > 0$, в частности, перестановкой по x расположения указанных неравновесных распределений. Приведенный выше пример двух ФР показывает, что в общем случае связь между величиной теплового потока и градиентом температуры не обязательно соответствует закону Фурье. Здесь неравновесные функции не получены как результат решения некоторого уравнения, поэтому важно будет показать, что такая ситуация возможна при решении задач для кинетического уравнения.

2. УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА И МЕТОДЫ ДЛЯ ЕГО РЕШЕНИЯ

Математической основой для исследований является кинетическое уравнение Больцмана, в стационарном случае записываемое в следующем виде:

$$\xi \frac{\partial f(\mathbf{x}, \xi)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{1}{\text{Kn}} I(f, f). \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{x} = (x, y, z)$ — пространственный вектор в декартовой системе координат, $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$, — вектор молекулярной скорости, $I(f, f)$ — интеграл столкновений, Kn — число Кнудсена. Урав-

нение (1) записано в безразмерном виде. При обезразмеривании используются следующие характерные значения: для длины, числовой плотности, температуры (распределения для входящих частиц) и скорости они равны, соответственно, L , n_{ref} , T_{ref} , $u_{\text{ref}} = \sqrt{2k_B T_{\text{ref}}/m}$. Принимается модель твердых сфер межмолекулярного взаимодействия. Число Кнудсена $\text{Kn} = \lambda/L$, где $\lambda = 1/(\sqrt{2}\pi\sigma^2 n_{\text{ref}})$ — длина свободного пробега (σ — диаметр молекулы). Величины в дальнейшем показаны в безразмерном виде.

В расчетах для надежности результатов применялись два взаимодополняющих подхода решения уравнения Больцмана. А именно метод прямого численного решения уравнения Больцмана (ПЧРУБ) с полным интегралом столкновений на основе программного комплекса UFS (Unified Flow Solver) [16] и вариант метода прямого статистического моделирования (ПСМ) в форме DSMC2D [17].

Сравнение решений по методам ПЧРУБ и ПСМ показывает хорошее соответствие результатов. В силу близости результатов на графиках профилей величин линии по каждому методу специально не отмечаются, приводятся только результаты, полученные методом ПЧРУБ. Для всех случаев фиксируется хорошее качественное и количественное совпадение. В двумерных случаях области неклассического теплопереноса по двум методам немного отличаются, но основные части этих зон совпадают.

3. ДВУМЕРНЫЕ НЕРАВНОВЕСНЫЕ ТЕЧЕНИЯ С АНОМАЛЬНЫМ ПЕРЕНОСОМ И АНАЛИЗ ЭФФЕКТОВ

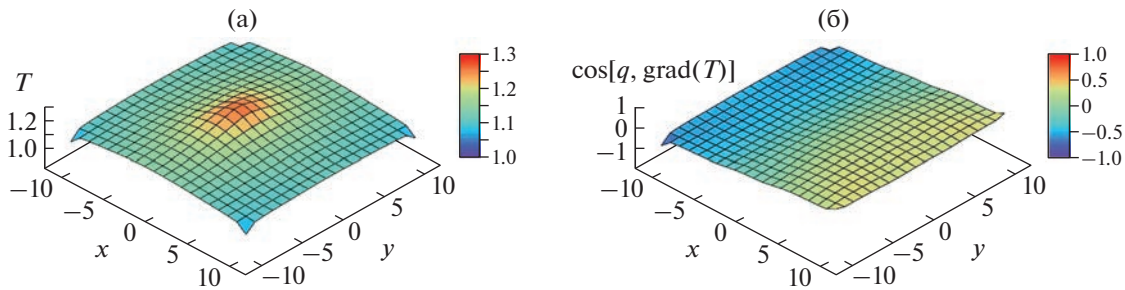
Проблема формирования неравновесной ФР на границе может быть решена двумя способами. Первый связан с заданием специальных граничных условий на поверхностях твердых тел, эти условия применяются в задаче о теплопередаче между двумя пластинами. Но реализуемость таких граничных условий вызывает вопросы. Более очевидный способ связан с взаимодействием сверхзвуковых потоков с некоторой структурой, состоящей из твердых тел, в частности, один из таких случаев соответствует потоку через мембрану. В [14, 15] были рассмотрены одномерные задачи. В настоящей работе мы исследуем двумерные задачи обтекания тел сверхзвуковым потоком разреженного газа, основное внимание уделяется зоне за телом, где формируется неравновесное распределение, которое далее вниз по потоку приближается к равновесному, что в определенном смысле соответствует реализации условий задачи о неоднородной релаксации.

Первая задача — обтекание бесконечной пластины нулевой толщины сверхзвуковым потоком разреженного газа. Рассматривается двумерная плоская постановка. Поток предполагается направленным слева направо, пластина располагается параллельно скорости потока, в расчетах используется симметрия относительно линии расположения пластины. За характерный масштаб L принимается длина пластины. Отметим, что данная классическая задача хорошо изучена методами прямого численного решения уравнения Больцмана с полным или модельным интегралом столкновений, а также методом прямого статистического моделирования [18–21], однако, тепловые потоки вблизи тела и за телом не изучались. Постановка следующая (она хорошо известна и поэтому описывается кратко). Для входящих в область молекул задается максвелловская ФР, для которой плотность и температура полагаются равными 1, скорость определяется с учетом числа Маха для набегающего сверхзвукового потока:

$$f_{\text{inf}} = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\xi - \mathbf{u})^2}{T}\right), \quad n = T = 1, \quad \mathbf{u} = (M\sqrt{\gamma T/2}, 0, 0). \quad (2)$$

Взаимодействие с твердой поверхностью пластины предполагается диффузным, температура пластины T_{wall} считается равной 1, ФР, отраженных от пластины молекул задается следующим образом:

$$f_{\text{refl}} = \frac{n_i}{(\pi T_{\text{wall}})^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_{\text{wall}}}\right), \quad n_i = -\frac{1}{(\pi T_{\text{wall}})^{-3/2}} \frac{\int_{(\xi, \mathbf{s}) < 0} f(\xi)(\xi, \mathbf{s}) d\xi}{\int_{(\xi, \mathbf{s}) > 0} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_{\text{wall}}}\right) d\xi},$$



Фиг. 2. Обтекание пластины при $\text{Kn} = 10$ и $M = 3$. Поля температуры (а) и косинуса угла между векторами теплового потока и градиента температуры (б). Положение центра пластины $x = 0$, $y = 0$.

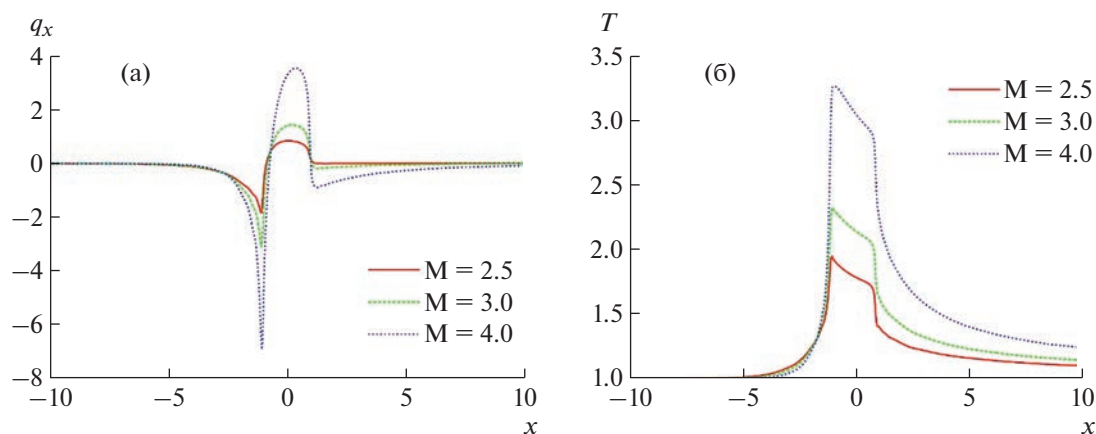
здесь $\mathbf{s}$ — вектор нормали к поверхности. При численных расчетах интегрирование заменяется суммированием по всем скоростям:

$$f_{\text{refl}} = \frac{n_i}{(\pi T_{\text{wall}})^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_{\text{wall}}}\right), \quad n_i = -\frac{1}{(\pi T_{\text{wall}})^{-3/2}} \frac{\sum_{(\xi, \mathbf{s}) < 0} f(\xi)(\xi, \mathbf{s}) \Delta \xi}{\sum_{(\xi, \mathbf{s}) > 0} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_{\text{wall}}}\right) (\xi, \mathbf{s}) \Delta \xi}. \quad (3)$$

Вторая задача описывает сверхзвуковой поток через решетку, образуемую бесконечными цилиндрическими прутками с квадратным сечением, центральные линии прутков полагаем эквидистантными и копланарными. Рассматривается двумерная плоская постановка задачи. Скорость потока, направленного слева направо, считаем перпендикулярной решетке, квадрат полагаем развернутым одной из сторон перпендикулярно потоку. Предполагается, что решение периодическое на периоде решетки. Для экономии ресурсов мы ищем решение на полупериоде задачи, задав 2 условия симметрии на верхней и нижней границах. Также, как и при обтекании пластины, ФР молекул, входящих в область, задается максвелловской (2) с плотностью и температурой, равными 1, и скоростью, определяемой по числу Маха. На твердой поверхности решетки задается диффузное граничное условие (3), температура поверхности полагается равной 1. В качестве характерного масштаба задачи выбрана сторона квадрата d , в задаче есть еще один параметр — период решетки $2H$, который связан с d через геометрическую проницаемость решетки $P_0 = 1 - d/2H$. Заметим, что для того, чтобы гарантировать прохождение потока сквозь решетку без формирования ударной волны за счет отражения от решетки навстречу потоку, величина P_0 должна быть близкой к 1, оптимальные значения $P_0 = 0.9-0.95$. Такую решетку можно рассматривать как высокопроницаемую мембрану, обладающую достаточно высокой прочностью для использования в экспериментах. Основное внимание сосредоточено на изучении неравновесного течения, возникающего в результате взаимодействия сверхзвукового потока с решеткой.

Для получения надежных результатов решения строятся с помощью двух указанных численных подходов, как это делалось ранее в [14, 15] при моделировании сложных течений с “мембраноподобными” граничными условиями.

Задача об обтекании пластины сверхзвуковым потоком разреженного газа рассматривается в переходных режимах: $M = 2-4$, $\text{Kn} = 1-10$. На фиг. 2 представлены поля температуры T (а) и косинуса угла между векторами градиента температуры и теплового потока (б) при $\text{Kn} = 10$, $M = 3$. Классический теплоперенос согласно закону Фурье соответствует значениям косинуса, равным -1 . Если косинус положителен, то угол между двумя векторами меньше 90° , и, значит, существует направление, в котором компоненты векторов градиента температуры и теплового потока имеют одинаковый знак, что мы называем *неклассическим переносом*. На фиг. 2б можно видеть большую область с неклассическим переносом за пластиной (желтый цвет на рисунке).



Фиг. 3. Обтекание пластины при $\text{Kn} = 1$ при различных числах Маха вблизи линии симметрии. Профили компоненты теплового потока q_x (а) и температуры (б). Центр пластины расположен при $x = 0$.

В одномерном случае пространственно-неоднородной релаксации anomальные соотношения переноса записываются в виде (см. [5, 22])

$$p_{xx} = \mu_U \frac{du_x}{dx},$$

$$q_x = \lambda_U \frac{dT}{dx}.$$

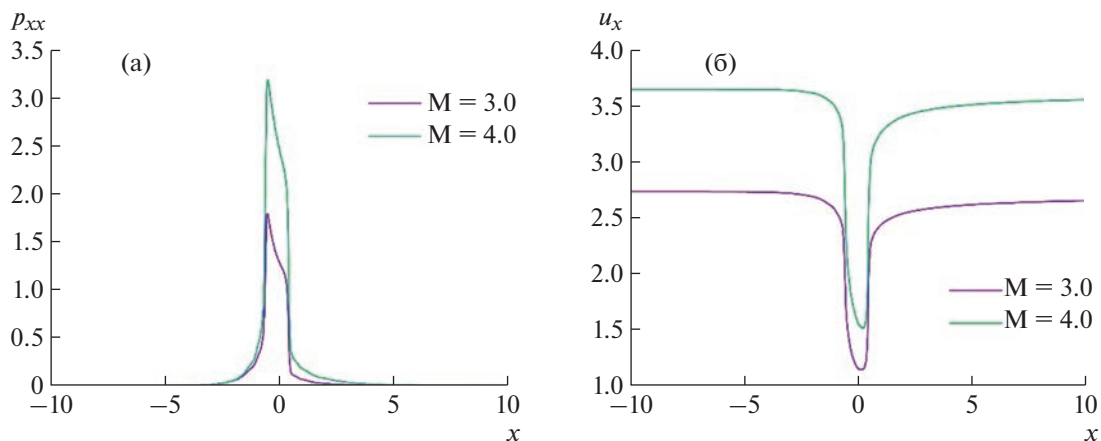
Здесь коэффициенты пропорциональности между диссипативными величинами и соответствующими градиентами μ_U и λ_U , конечно, отличаются от обычных коэффициентов вязкости и теплопроводности. Для приведенных выше результатов в двумерном случае аналогичные соотношения с anomальным соответствием знаков в левых и правых частях уравнений можно записать (в качестве эмпирических соотношений), если косинус угла между векторами теплового потока и градиента температуры положителен. Соотношения будут иметь более сложный вид и должны содержать, например, проекцию градиента температуры на ось, соответствующей вектору теплового потока (в многомерном случае anomальность вязких напряжений должна изучаться особо).

В этом смысле интерес представляют детали переноса тепла и неравновесных напряжений в направлении x на линии симметрии потока. На фиг. 3а,б представлены профили вблизи линии симметрии компоненты q_x теплового потока (компонента $q_y = 0$ в силу симметрии) и температуры для $\text{Kn} = 1$ и различных чисел Маха. Как видно, за пластиной компоненты теплового потока и градиента температуры отрицательны для изучаемых чисел Маха. На фиг. 4а,б представлены профили компонент тензора вязких напряжений p_{xx} и макроскопической скорости u_x при $\text{Kn} = 2$ для двух чисел Маха. Здесь также наблюдается anomальность, за пластиной градиент скорости и тензор вязких напряжений положительны (вблизи линии симметрии y -компоненту градиента скорости можно считать равной 0).

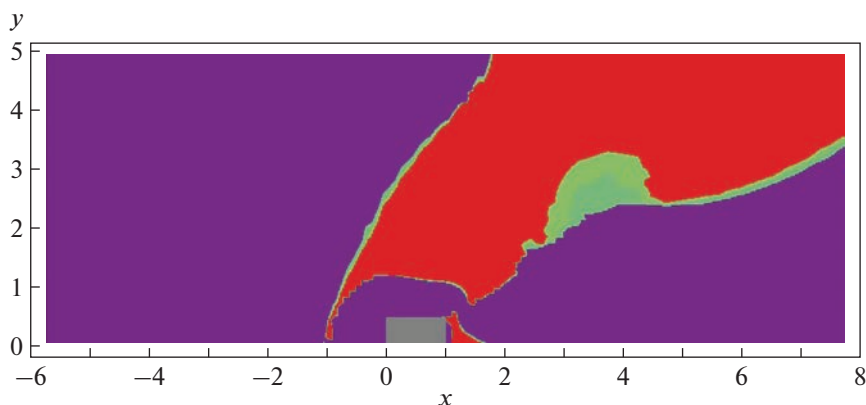
Заметим, что приведенные выше соотношения между диссипативными величинами и соответствующими градиентами могут служить основой для замыкания моментных уравнений. В этом случае система качественно отличается от системы Навье—Стокса. Такие уравнения в одномерном случае записывались в [23].

Для задачи о прохождении сверхзвукового потока через решетку рассмотрим следующие параметры: $M = 4$, $\text{Kn} = 1$ –5. Верхний предел для числа Кнудсена по порядку величины совпадает с H/d , что следует из оценок физической проницаемости решетки. На фиг. 5 представлено поле величины $\cos(\mathbf{q}, \text{grad}(T))$ для $\text{Kn} = 2$. Области положительных значений $\cos(\mathbf{q}, \text{grad}(T))$ показаны красным цветом, т.е. в этих зонах наблюдается теплоперенос “анти-Фурье”.

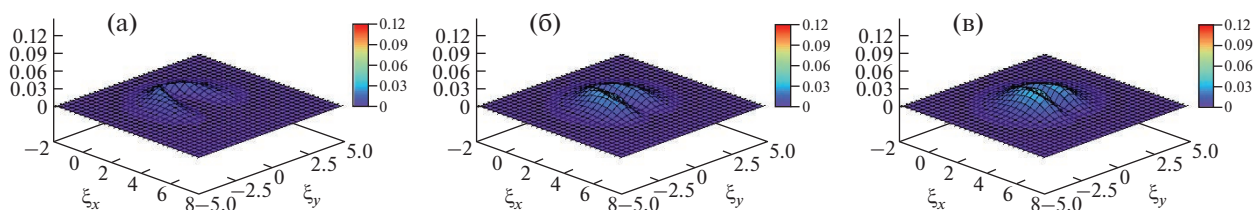
Таким образом, мы обнаруживаем, что в результате взаимодействия сверхзвукового потока с пластиной или решеткой возникает неравновесное течение, стремящееся к равновесному вниз по потоку, и при этом наблюдается anomальный перенос тепла. На фиг. 6, 7 показано, как происходит релаксация ФР вниз по потоку. Можно отметить, что несмотря на двугорбый вид функ-



Фиг. 4. Обтекание пластины при $Kn = 2$ при различных числах Маха вблизи линии симметрии. Профили компонент тензора вязких напряжений ρ_{xx} (а) и макроскопической скорости u_x (б). Центр пластины расположен при $x = 0$.



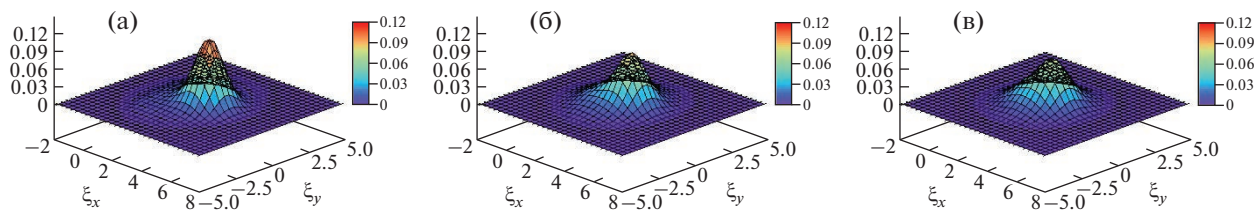
Фиг. 5. Поток через решетку, поле $\cos(\mathbf{q}, \text{grad}(\mathbf{T}))$ при $Kn = 2$. Фиолетовый цвет соответствует диапазону величины $[-1, -0.1]$, красный цвет — $[0.1, 1]$, зеленый и голубой цвета — $[-0.1, 0.1]$.



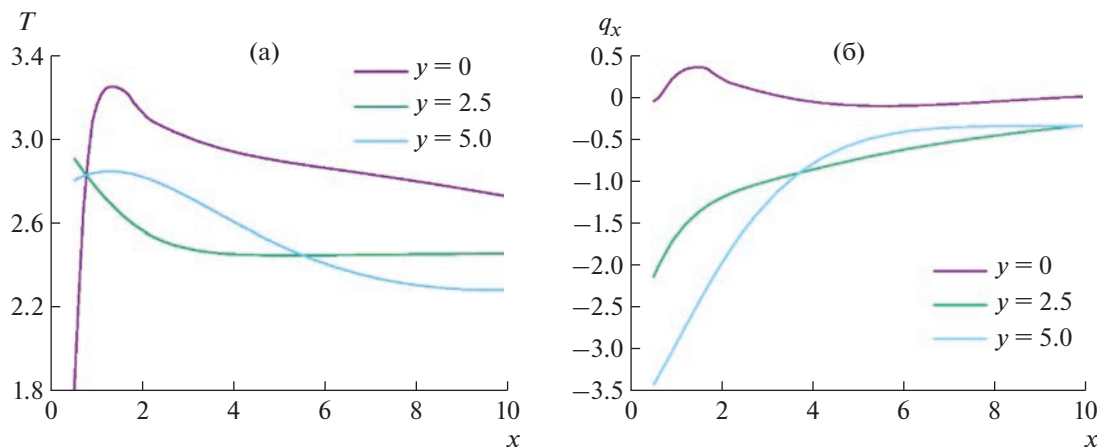
Фиг. 6. ФР в задаче течения через решетку на оси симметрии за элементами решетки: $y = 0$: $x = 1.5$ (а), $x = 3.5$ (б), $x = 5.5$ (в).

ции распределения на фиг. 6 неклассический перенос в этой области практически отсутствует (этот вопрос требует особого рассмотрения, но ясно, что не всегда даже сильно неравновесное распределение приводит к аномальному переносу).

На фиг. 8 представлены продольные профили температуры и компоненты q_x теплового потока в области за решеткой для различных y . Видно, что величина изменения температуры и компоненты теплового потока отличается для различных y . Но для каждого случая имеются зоны



Фиг. 7. ФР в задаче течения через решетку на оси симметрии между элементами решетки: $y = 5.0$: $x = 1.5$ (а), $x = 3.5$ (б), $x = 5.5$ (в).



Фиг. 8. Течение через решетку. Продольные профили температуры (а) и компоненты q_x теплового потока (б) в различных сечениях по y .

аномального теплопереноса. Это отчетливо заметно при $y = 5.0$ (что соответствует и фиг. 5). Здесь в области между элементами решетки при $2 < x < 9$ соответствующие компоненты градиента температуры и теплового потока отрицательны.

4. ОБЩЕТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ, ВОЗМОЖНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ

Нарушение классических микроскопических соотношений неизбежно требует обсуждения с точки зрения отношения данных эффектов ко второму началу термодинамики. Известна формулировка Клаузиуса, см. [24]: теплота не может спонтанно перейти от более холодного тела к более горячему. В нашем случае для соответствия формулировке можно сказать, что прохождение потока через мембрану (решетку) и создает “неспонтанность”, обеспечивающую аномальный перенос тепла в потоке. Исходя из приведенных результатов, ожидается, что подобные явления могут быть обнаружены при обтекании космических аппаратов и астрофизических объектов. Помимо таких возможных макроскопических проявлений данные эффекты допустимо реализованы и на микромасштабах.

В недавнее время возник интерес к экспериментальной проверке изучаемых эффектов. Этот интерес важен и с точки зрения развития методик эксперимента в разреженных газах. На фиг. 9 показана схема эксперимента, похожего на эксперименты в [25], хотя для измерения неравновесной ФР используется метод электронно-лучевой флуоресценции. Экспериментальная установка реализована в Марсельском университете под руководством доктора П. Перрье.

Адекватные условия на выходе из сопла могут быть реализованы соответствующей аэродинамической трубой, см. технический отчет [26]. Для этой цели группой П. Перрье создано специальное микросопло. Параметры установки следующие: входной диаметр аэродинамической трубы 23 мм, выходной 1 мм, давление на входе 1 атм ($\sim 100\,000$ Па), на выходе менее 100 Па. Это обеспечивает число Маха $M = 4$ для выходного сверхзвукового потока. Средняя длина свободного пробега равна примерно 0.1 мм. Решетка (гребенка) состоит из нитей диаметром 0.1 мм, рас-



Фиг. 9. Схема экспериментальной установки. Слева показано сверхзвуковое сопло, сразу за ним — решетка, электронный пучок и камера, позволяющая регистрировать частицы.

стояние между которыми составляет 1 мм, ее геометрическая проницаемость равна 0.9. Число Кнудсена в окрестности решетки в расчете на диаметр нити составляет $Kn \sim 1$.

Неклассический теплоперенос, наблюдаемый в сверхзвуковых течениях, может быть представлен не только в описанной схеме прохождения потока через решетки. В работе [10] ранее обсуждались возможности создания зон аномальной теплопередачи в покоящемся газе, при условии реализации специальных неравновесных граничных условий на стенках. Этот принцип может использоваться для охлаждения на микромасштабах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически и с помощью численных методов различной природы показаны возможности реализации неклассического переноса в сверхзвуковых потоках разреженного газа на масштабах 5–10 длин свободного пробега. Это подтверждает факт, что необходимым условием для таких явлений является сильная неравновесность течения. Течение за решеткой соответствует задаче о пространственно неоднородной релаксации. Обсуждается связь эффекта со вторым началом термодинамики, описаны возможности экспериментальной проверки.

Численные расчеты проводились на вычислительных ресурсах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Akhlaghi H., Roohi E., Stefanov S. A comprehensive review on micro- and nano-scale gas flow effects: slip-jump phenomena, Knudsen paradox, thermally-driven flows, and Knudsen pumps // Phys. Reports. 2023. 997. P. 1–60.
2. Holway L. Existence of kinetic theory solutions to the shock structure problem // Phys. Fluids. 1964. 7. P. 911–913.
3. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. Кинетическая теория. М.: Наука, 1967.
4. Бушаев А.М., Рыков В.А. О продольном потоке тепла в течении Куэтта // Изв. АН СССР. МЖГ. 1980. № 3. С. 162–166.
5. Aristov V.V. A steady state, supersonic flow solution of the Boltzmann equation // Phys. Letters A. 1998. 250. P. 354–359.
6. Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A. A new effect of the nongradient transport in relaxation zones // Europhys. Letters. 2009. V. 88. 30012.
7. Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A. Supersonic flows with nontraditional transport described by kinetic methods // Commun. Comput. Phys. 2012. V. 11. P. 1334–1346.
8. Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A. Nonequilibrium kinetic processes with chemical reactions and complex structures in open systems // Europhys. Letters. 2014. 106. 20002.

9. *Ilyin O.V.* Anomalous heat transfer for an open non-equilibrium gaseous system // J. Stat. Mech. Theory Exp. 2017. 053201.
10. *Аристов В.В., Фролова А.А., Забелок С.А.* Возможность аномального теплопереноса в течениях с неравновесными граничными условиями // Докл. АН. 2017. V. 473. № 3. С. 286–290.
11. *Myong R.S.* A full analytical solution for the force-driven compressible Poiseuille gas flow based on a non-linear coupled constitutive relation // Phys. Fluids. 2011. V. 23. 012002.
12. *Venugopal V., Praturi D.S., Girimaji S.S.* Non-equilibrium thermal transport and entropy analyses in rarefied cavity flows // J. Fluid Mech. 2019. V. 864. P. 995–1025.
13. *Todd B.D., Evans D.J.* The heat flux vector for highly inhomogeneous nonequilibrium fluids in very narrow pores // J. Chem. Phys. 1995. V. 103. 9804.
14. *Aristov V.V., Voronich I.V., Zabelok S.A.* Direct methods for solving the Boltzmann equations: Comparisons with direct simulation Monte Carlo and possibilities // Phys. Fluids. 2019. V. 31. 097106.
15. *Aristov V.V., Voronich I.V., Zabelok S.A.* Nonequilibrium nonclassical phenomena in regions with membrane boundaries // Phys. Fluids. 2021. V. 33. 012009.
16. *Kolobov V.I., Arslanbekov R.R., Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A.* Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement // J. Comp. Phys. 1997. V. 223. P. 589–608.
17. *Voronich I., Vershkov V.* Development of VRDSMC method for wide range of weakly disturbed rarefied gas flows // Proc. of 2nd European Conference on Non-equilibrium Gas Flows. 2015. P. 15–44.
18. *Bird G.A.* Aerodynamic properties of some simple bodies in the hypersonic transition regime // AIAA J. 1966. V. 4. № 1. P. 55–60.
19. *Черемисин Ф.Г.* Решение плоской задачи аэродинамики разреженного газа на основе кинетического уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. 1973. Т. 209(4). С. 811–814.
20. *Aoki K., Kanba K., Takata S.* Numerical analysis of a supersonic rarefied gas flow past a flat plate // Phys. Fluids. 1997. V. 9. P. 1144.
21. *Abramov A.A., Butkovskii A.V., Buzykin O.G.* Rarefied gas flow past a flat plate at zero angle of attack // Phys. Fluids. 2020. V. 32. 087108.
22. *Аристов В.В., Забелок С.А., Фролова А.А.* Моделирование неравновесных структур кинетическими методами. М.: Физматкнига, 2017.
23. *Aristov V.V.* Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001 (2nd ed. Springer, 2012).
24. *Кубо Р.* Термодинамика. М.: Мир, 1970.
25. *Nguyen N.N., Graur I., Perrier P., Lorenzani L.* Variational derivation of thermal slip coefficients on the basis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules and Cercignani-Lampis boundary conditions: Comparison with experimental results // Phys. Fluids. 2020. V. 32. 102011.
26. *Torrese M.* Rapport de stage de M1 Mécanique: Conception d'une tuyère pour des écoulements raréfiés. Dissertation. Marseille: Aix-Marseille Université Château-Gombert, 2022.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается 90-летию моего коллеги и друга Евгения Михайловича Шахова

УСКОРЕНИЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА С ПОМОЩЬЮ КОНТРОЛЯ ВЕЛИЧИНЫ ВКЛАДОВ В ИНТЕГРАЛ СТОЛКНОВЕНИЙ

© 2023 г. Ф. Г. Черемисин^{1,*}

¹ 119991 Москва, ул. Вавилова, 40, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: felix.tcher@yandex.ru

Поступила в редакцию 11.07.2023 г.

Переработанный вариант 12.08.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Предлагается способ уменьшения объема требуемых для вычисления интеграла столкновений Больцмана консервативным проекционным методом арифметических операций с помощью исключения вкладов, меньших некоторого заданного порогового уровня. Дается оценка максимальной величины такого уровня. Для четырех уровней, отличающихся на порядок, проведены расчеты течений разреженного газа при числах Маха от 0.5 до 10 и сравнение с решениями базовым методом. Во всех случаях имеются незначительные, в пределах нескольких процентов, отличие результатов для самого высокого порогового уровня и практически полное совпадение для остальных. Получено многократное ускорение решения уравнения Больцмана, наиболее значительное для больших чисел Маха. Библ. 35. Фиг. 20. Табл. 1.

Ключевые слова: решение уравнения Больцмана, консервативный проекционный метод, метод дискретных скоростей.

DOI: 10.31857/S0044466923120098, **EDN:** BQTKOD

ВВЕДЕНИЕ

При решении уравнения Больцмана основная нагрузка приходится на расчет многомерного интеграла столкновений. На раннем периоде развития вычислительной техники единственным способом преодоления огромного объема требуемых для этого вычислений было применение упрощенных моделей интеграла столкновений (см. [1–3]). Методы вычисления интеграла столкновений на основе техники Монте-Карло и решения точного уравнения Больцмана для простейших задач были представлены в [4–6]. Методы не были консервативными и не позволяли решать задачи, требующие большого числа итераций или шагов по времени. Впервые консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений на равномерной декартовой сетке в пространстве скоростей был представлен в работах [7, 8], усовершенствован и подробно описан в [9–11]. Этот метод использует двухточечное проецирование вкладов в узлы скоростной сетки и весьма экономичен по числу арифметических операций. Консервативные схемы на многоточечном шаблоне были предложены в [12–14]. Они намного более затратные при реализации, но позволяют использовать неравномерные скоростные сетки, адаптированные к решению (см. [15, 16]). Многоточечные консервативные схемы для моделирования течений смеси газов с большим отношением молекулярных масс компонентов смеси представлены в [17, 18]. В [19] предложено использовать в рамках многоточечного метода дискретных скоростей технику прямого статистического моделирования DSMC. Развиваются спектральные методы аппроксимации ядра интеграла столкновений (см. [20, 21]). Подробный обзор современных методов моделирования течений газа в микро- и наномасштабах дан в [22].

Эффективность двухточечного проекционного метода проявляется при параллельных вычислениях интегралов в большом числе узлов физического пространства, при котором наиболее трудоемкие вычисления выносятся за основной цикл. Такая организация вычислений применялась при моделировании большого числа течений разреженного газа (см. [23–29]). В этих расче-

тах без существенных изменений использовалась формулировка консервативного проекционного метода, описанная в [9–11]. В [30–32] был найден способ ускорения вычислений за счет уменьшения избыточной мощности кубатурной сетки.

В настоящей работе предлагается простая модификация алгоритма базового метода, учитывающая неоднородную структуру решения в фазовом пространстве и наличие в нем областей, вклады от которых в интеграл столкновений пренебрежимо малы.

При решении кинетического уравнения бесконечное пространство скоростей заменяется сферой, на границах которой функция распределения настолько мала, что не влияет на решение. Диаметр и расположение сферы определяются граничными и начальными условиями задачи. Типичным является задание в качестве начального условия и условия на внешней границе области решения максвелловской функции $f_{M,0}$ со скоростью потока $\mathbf{u}_0$, а на поверхности тела задание зеркально-диффузного условия, которое состоит из максвелловской функции $f_{M,w}$ с нулевой скоростью и температурой поверхности, и зеркально отраженной функции. Эти функции быстро убывают с расстоянием от их максимумов в $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$ и $\mathbf{u} = 0$. В скоростном пространстве возникают области, где функция распределения близка к нулю, и вклады от которых в интеграл столкновений можно пренебречь. При решении задачи методом установления, в начальный момент времени функция $f_{M,0}$ задана во всем физическом пространстве, а функция $f_{M,w}$ — только на границе тела. В процессе решения происходит распространение влияния граничного условия во внутренние узлы физического пространства, в то время как на внешней границе области поддерживается постоянное значение функции $f_{M,0}$. Конфигурация решения в скоростном пространстве меняется в зависимости от геометрической координаты и от времени. Вместе с этим меняются области, вклады от которых в интеграл столкновений пренебрежимо малы. Выделение этих областей представляет трудно решаемую задачу, однако можно предварительно оценивать величину вкладов в интеграл столкновений и исключать расчет пренебрежимо малых значений. Эта идея реализуется в предлагаемом методе.

1. ИЗМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА КОНСЕРВАТИВНОГО ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА

Вначале кратко опишем базовый метод. В ограниченной области Ω с объемом V пространства скоростей строится равномерная сетка из N_0 узлов $\xi_\gamma \in \Sigma_0$, которые являются центрами кубов с ребром h . На этой сетке с шагом по времени $\tau \ll \tau_0$, где τ_0 — время свободного пробега молекул, решается уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \xi_\gamma \frac{\partial f_\gamma}{\partial \mathbf{x}} = I(\xi_\gamma). \quad (1.1)$$

Используется симметричный метод расщепления второго порядка точности по времени

$$f_\gamma(\mathbf{x}, t + \tau) = \Lambda_{\tau/2}(\Theta_\tau(\Lambda_{\tau/2}f_\gamma(\mathbf{x}, t))), \quad (1.2)$$

где Λ_τ — оператор решения уравнения адвекции, Θ_τ — оператор решения уравнения релаксации.

Интеграл столкновений записывается в виде 8-кратного интеграла, содержащего дельта-функции Дирака

$$I(\xi_\gamma) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} d\xi \int_{\Omega} d\xi_* \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{b_m^2/2} \Phi_1(f' f'_* - f f_*) g d\sigma. \quad (1.3)$$

Здесь $f \equiv f(\xi, \mathbf{x}, t)$, $f' \equiv f(\xi', \mathbf{x}, t)$, $f_* \equiv f(\xi_*, \mathbf{x}, t)$, $f'_* \equiv f(\xi'_*, \mathbf{x}, t)$, ξ' и ξ'_* — скорости после столкновений молекул со скоростями ξ и ξ_* , $g = |\xi - \xi_*|$, b_m — максимальное значение прицельного параметра b , $\sigma = b^2/2$, $\delta(\xi - \xi_c)$ — трехмерная дельта-функция

$$\Phi_1 = \delta(\xi' - \xi_\gamma) + \delta(\xi'_* - \xi_\gamma) - \delta(\xi - \xi_\gamma) - \delta(\xi_* - \xi_\gamma). \quad (1.4)$$

Вычисление (1.3) осуществляется на кубатурной сетке Коробова (см. [33]) Σ_γ из N_γ узлов. Каждый узел сетки включает значения непрерывных переменных $\sigma_\gamma, \varphi_\gamma$ и сеточные узлы $\xi_{\alpha_\gamma} \in \Sigma_0$, $\xi_{\beta_\gamma} \in \Sigma_0$. Скорости после столкновения $\xi'_{\alpha_\gamma} \notin \Sigma_0$, $\xi'_{\beta_\gamma} \notin \Sigma_0$ заменяются двумя парами бли-

жайших симметрично расположенных сеточных узлов ξ_{λ_v} , $\xi_{\lambda_v+s_v}$ и ξ_{μ_v} , $\xi_{\mu_v-s_v}$, где s_v — вектор единичного сдвига по сетке Σ_0 .

В [9, 10] представлено два основных варианта консервативного проекционного метода вычислений интеграла столкновений: проекционно-интерполяционный метод (ПИМ) и симметричный проекционный метод (СПМ). В ПИМ произведение $f'_{\alpha_v} f'_{\beta_v}$ находится интерполяцией по значениям в узлах ξ_{λ_v} , $\xi_{\lambda_v+s_v}$ и ξ_{μ_v} , $\xi_{\mu_v-s_v}$. Следующая интерполяция является точной для максвелловской сеточной функции $f_{M,\gamma}$:

$$f'_{\alpha_v} f'_{\beta_v} = (f_{\lambda_v} f_{\mu_v})^{1-r_v} (f_{\lambda_v+s_v} f_{\mu_v-s_v})^{r_v}. \quad (1.5)$$

При такой интерполяции дискретная форма интеграла столкновений обладает важным асимптотическим свойством

$$I_\gamma[f_{M,\gamma}] = 0. \quad (1.6)$$

Для функции вида $f_\gamma = f_{M,\gamma} + \varepsilon f_\gamma^{(1)}$ погрешность формулы (1.5) имеет оценку $\varepsilon O(h)$, что важно для расчета течений вблизи режима сплошной среды. Эта оценка погрешности и выполнение условия (1.6) делают ПИМ предпочтительным основным методом. Для оптимизации и ускорения основного метода используется СПМ.

Оператор $\Theta_\tau(f)$ построен как решение интегрального уравнения по схеме непрерывного счета. Интервал τ делится на N_v равных частей и осуществляется решение уравнения релаксации по явной схеме

$$f_\gamma(t_{v+1}) = f_\gamma(t_v) + \tau \Delta I_v. \quad (1.7)$$

Здесь ΔI_v — вклад в интеграл столкновений (1.3) от v -го узла кубатурной формулы. В подробной записи уравнение (1.7) имеет вид

$$f_\gamma(t_{v+1}) = f_\gamma(t_v) + \tau B \left\{ \begin{array}{ll} -\Delta_v, & \gamma = \alpha_v, \beta_v \\ (1-r_v)\Delta_v, & \gamma = \lambda_v, \mu_v \\ r_v\Delta_v, & \gamma = \lambda_v + s_v, \mu_v - s_v \end{array} \right\}, \quad (1.8)$$

где B — коэффициент перед суммой, аппроксимирующей интеграл (1.3),

$$\begin{aligned} \Delta_v &= \left\{ f_{\alpha_v}(t_v) f_{\beta_v}(t_v) - [f_{\lambda_v}(t_v) f_{\mu_v}(t_v)]^{1-r_v} [f_{\lambda_v+s_v}(t_v) f_{\mu_v-s_v}(t_v)]^{r_v} \right\} g_v, \\ g_v &= |\xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v}|, \quad t_v = t + \frac{(v-1)\tau}{N_v}, \quad v = 1, N_v. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Входящее в (1.9) произведение функций распределения и относительной скорости можно представить в виде сеточной функции

$$D_{\eta_v, \rho_v}(t_v) = f_{\eta_v}(t_v) f_{\rho_v}(t_v) g_v. \quad (1.10)$$

Выражение для Δ_v примет вид (аргумент t_v опускаем)

$$\Delta_v = D_{\alpha_v, \beta_v} - D_{\lambda_v, \mu_v}^{1-r_v} D_{\lambda_v+s_v, \mu_v-s_v}^{r_v}. \quad (1.11)$$

Экономным способом вычисления интерполяции в (1.11) является преобразование

$$D_{\lambda_v, \mu_v}^{1-r_v} D_{\lambda_v+s_v, \mu_v-s_v}^{r_v} = D_{\lambda_v, \mu_v} (D_{\lambda_v+s_v, \mu_v-s_v} / D_{\lambda_v, \mu_v})^{r_v}.$$

Схема (1.8) используется для контроля не отрицательности получаемого решения: вклад в интеграл на шаге v отвергается, если решение $f_\gamma(t_{v+1})$ в одном из шести узлов скоростной сетки отрицательное. Отрицательные значения могут появляться из-за конечной величины шага τ . Недостатком ПИМ является отсутствие условия на мощность N_v кубатурной сетки, при которой отрицательные решения отсутствуют. Достижение приемлемо малого относительного числа исключенных вкладов требует увеличенной мощности кубатурной сетки.

В [30] было предложено пересчитывать отрицательные решения, возникающие в схеме (1.8) по формулам СПМ

$$f_\gamma(t_{v+1}) = f_\gamma(t_v) + \tau B \left\{ \begin{array}{ll} -D_{\alpha_v, \beta_v} + (1 - r_v^*)D_{\lambda_v, \mu_v} + r_v^*D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}, & \gamma = \alpha_v, \beta_v \\ (1 - r_v)D_{\alpha_v, \beta_v} - (1 - r_v^*)D_{\lambda_v, \mu_v}, & \gamma = \lambda_v, \mu_v \\ r_v D_{\alpha_v, \beta_v} - r_v^* D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}, & \gamma = \lambda_v + s_v, \mu_v - s_v \end{array} \right\}, \quad (1.12)$$

$$r_v^* = r_v D_{\alpha_v, \beta_v} / [r_v D_{\lambda_v, \mu_v} + (1 - r_v)D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}]. \quad (1.13)$$

Условие не отрицательности решения в СПМ следующее:

$$N_v / \tau \geq N_0 V \pi b_m^2 g_{\max} f_{\max} / 4. \quad (1.14)$$

Здесь $g_{\max}$ — максимальное значение относительной скорости при столкновении, равное диаметру области Ω пространства скоростей, $f_{\max}$ — максимальное по всем пространственным и скоростным узлам значение сеточной функции f_γ .

Алгоритм пересчета позволяет значительно уменьшить мощность кубатурной сетки и ускорить вычисления. Подробное описание оптимизированного метода дано в [32].

Рассмотрим другой способ ускорить вычисления, основанный на предварительной оценке величины вкладов в интеграл столкновений и исключении пренебрежимо малых изменений решения. В основном цикле (1.8) изменение решения на шаге цикла пропорционально величине Δ_v , определенной в (1.9). Справедливы оценки

$$\begin{aligned} \max(D_{\lambda_v, \mu_v}^{1-r_v} D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}^{r_v}) &\leq \max(D_{\lambda_v, \mu_v}, D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}), \\ |\Delta_v| &\leq \max(D_{\alpha_v, \beta_v}, D_{\lambda_v, \mu_v}, D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Условие (1.15) будем использовать для исключения пренебрежимо малых вкладов Δ_v . Введем уровень отсечения Z , ниже которого вклады Δ_v можно не учитывать. Тогда изменение алгоритма вычислений сводится к тому, что вначале вычисляются значения функций D_{α_v, β_v} , D_{λ_v, μ_v} , $D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}$, которые сравниваются с уровнем Z . Если одна из этих величин больше Z , то осуществляется переход к вычислениям по формулам (1.8)–(1.9), иначе решение не меняется и $f_\gamma(t_{v+1}) = f_\gamma(t_v)$. Объем арифметических операций сокращается при сохранении консервативности метода и асимптотического свойства (1.6).

В качестве характерной величины D_{ref} сеточной функции (1.10) возьмем ее значение, вычисленное на основе функции $f_{M,0} = (2\pi)^{-3/2} \exp(-c^2/2)$, где $\mathbf{c} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}_0$. При наиболее вероятной величине скорости $c_p = \sqrt{2}$ в обоих входящих в произведение функциях и наиболее вероятной величине скорости столкновения молекул $g_p = 2$ получим

$$D_{\text{ref}} = 2f(c_p)f(c_p) = 2(2\pi)^{-3} \exp(-2) \approx 1.1 \times 10^{-3}.$$

Величина уровня отсечения вкладов должна удовлетворять условию $Z \ll D_{\text{ref}}$. Чтобы оценить порядок величины максимального уровня отсечения, который существенно не влияет на точность решения, вычислим функцию (1.10) при значениях скорости $c = c_p$ для одной функции и $c = 3c_p$ — для другой. Второе значение соответствует величине функции распределения около границы области скоростного пространства. Получим оценку

$$D_{p,3p} = 2.8f(c_p)f(3c_p) = 2.8(2\pi)^{-3} \exp(-10) \approx 0.5 \times 10^{-6}.$$

Максимальный уровень отсечения должен быть близок к полученной оценке. Мы испытаем четыре уровня, отличающихся на порядок величины: $Z_1 = 10^{-6}$, $Z_2 = 10^{-7}$, $Z_3 = 10^{-8}$, $Z_4 = 10^{-9}$.

2. ПРОВЕРКА ВЫБРАННЫХ УРОВНЕЙ

Была проведена серия расчетов продольного и поперечного обтекания плоской пластины при числе Кнудсена $\text{Kn} = 0.1$ и нескольких числах Маха для четырех указанных выше уровней отсе-

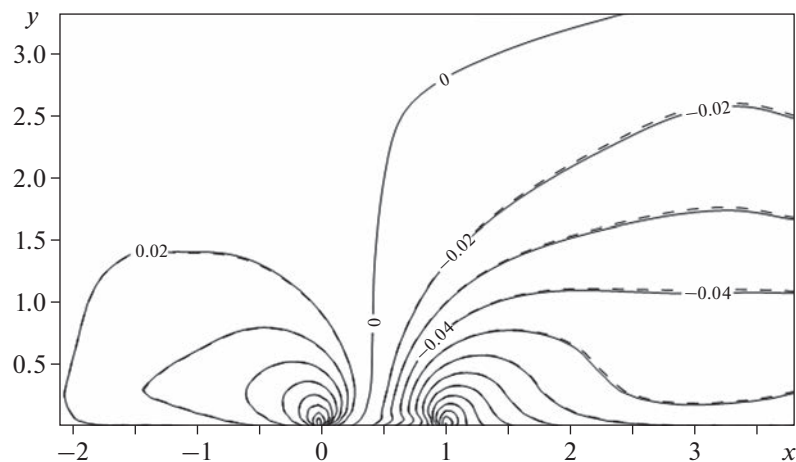
Таблица 1

M	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4
0.5	5	3.5	2.5	1.7
2	6	4	3	2
5	11 (15.5)	9	6.5	5
10	12 (17.5)	10	7.5	6.5

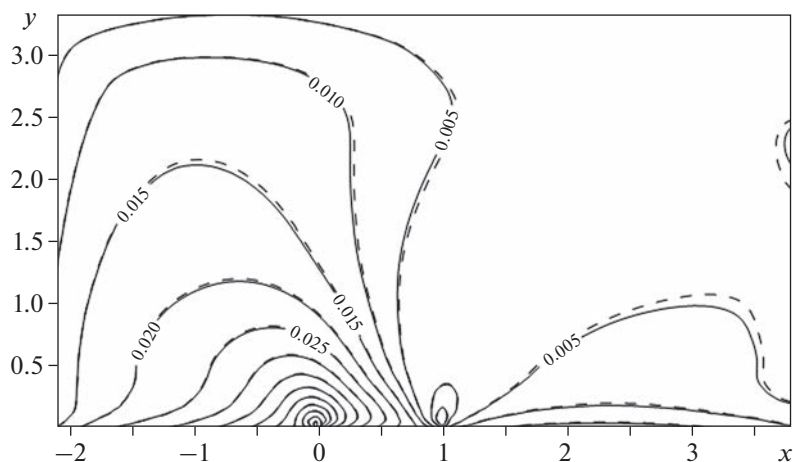
чения вкладов. Сравнение проводилось с решением без отсечения вкладов. Использовалась молекулярная модель твердых сфер. В основной серии расчетов рассматривалось продольное обтекание плоской пластины. Пластина расположена на линии симметрии течения $y = 0$, ее передняя кромка расположена в $x = 0$, поток газа натекает слева. На поверхности задано условие отражения молекул с полной аккомодацией и максвелловским распределением по скорости при температуре набегающего потока. В качестве масштаба длины на графиках выбрана длина пластины. Шаги пространственной сетки около пластины $h_x = 0.2\lambda$, $h_y = 0.2\lambda$, где λ — длина свободного пробега молекул в набегающем потоке. Ускорение на стадии релаксации $t_{\text{rel},0}/t_{\text{rel},z}$, где $t_{\text{rel},0}$ — время счета без отсечения вкладов, а $t_{\text{rel},z}$ — время счета с исключением вкладов, приведено для четырех значений Z в табл. 1, где в первом столбце указано число Маха. О значениях ускорения, приведенных в скобках, будет сказано ниже.

Приведем примеры расчета полей течения и распределения аэродинамических реакций по длине пластины для случая $M = 0.5$. Сплошными линиями всюду показаны значения, полученные без отсечения вкладов, а штриховыми — для уровня Z_1 . На фиг. 1 приведено поле плотности $n - 1$, а на фиг. 2 — поле температуры $T - 1$. Поля течения для указанных расчетов практически совпадают.

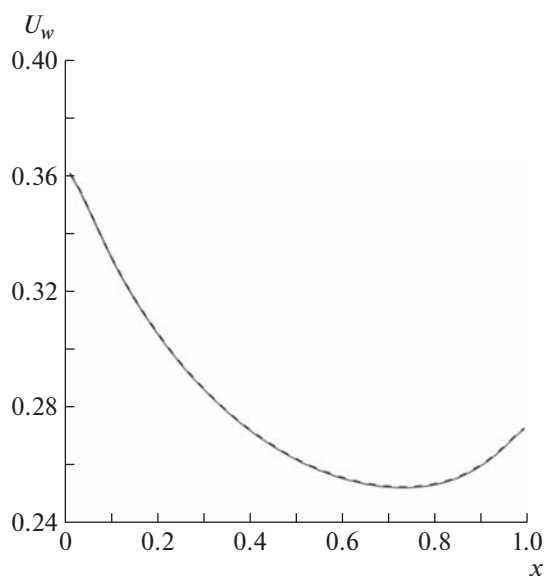
На фиг. 3–5 представлены скорость скольжения U_w , сила трения F и поток энергии на пластину E . Максимальное отклонение результатов с использованием уровня отсечения Z_1 находится в пределах 2%. Расчеты с применением уровня Z_2 дали полное совпадение полей течения и графиков аэродинамических реакций с решением без исключения вкладов. На фиг. 6 для уровней отсечения Z_1 (штриховая линия) и Z_2 (сплошная линия) приведена сумма по узлам пространственной сетки $R(t) = \sum_i (N_{a,i}/N_v)$ отношения числа оставшихся ненулевых вкладов $N_{a,i}$ к полному числу вкладов N_v .



Фиг. 1



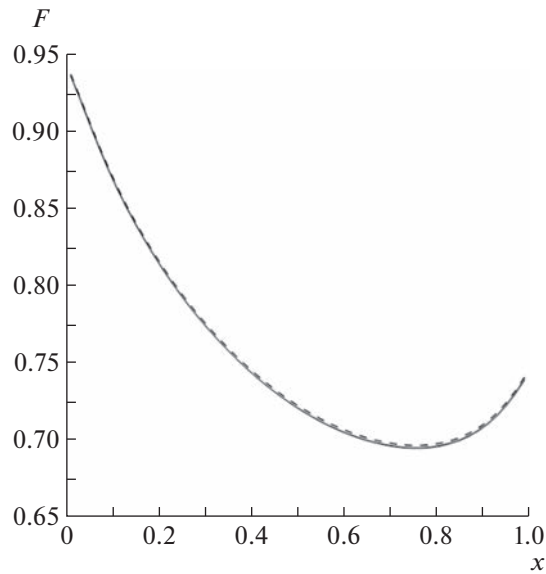
Фиг. 2



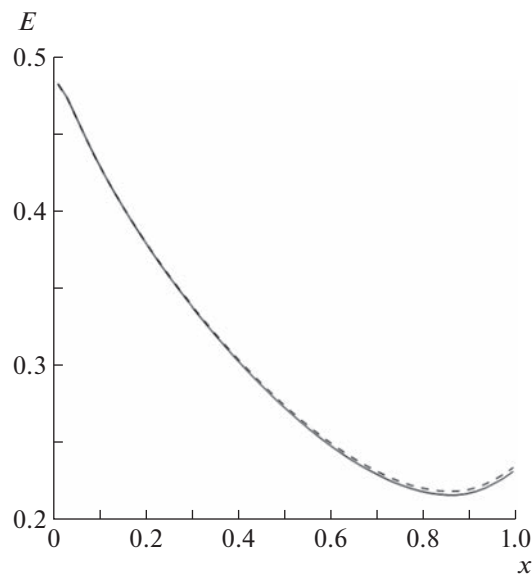
Фиг. 3

Площадь графика $S = \int_0^{t_{\max}} R(t)dt$ дает отношение числа учитываемых в расчетах ненулевых вкладов к полному числу вкладов за все время решения задачи $t_{\max}$. Видно, что число ненулевых вкладов намного меньше полного числа вкладов. Обратная величина $1/S$ показывает, во сколько раз уменьшился объем вычислений по формулам (1.8) и (1.9). Как видно из табл. 1, измеренное ускорение расчета стадии релаксации значительно меньше $1/S$, что объясняется затратами на отбор вкладов.

Приведем сравнение расчетов для сверхзвукового течения при $M = 5$. Сплошные линии на всех графиках показывают данные без отсечения вкладов, пунктирные — для уровня Z_1 . На фиг. 7 приведено поле плотности $n - 1$, а на фиг. 8 — поле температуры $T - 1$. На фиг. 9–11 приведены распределения по длине пластины скорости скольжения, трения и потока энергии на пластину. Как и для дозвукового течения с $M = 0.5$, поля течения при уровне отсечения Z_1 и с учетом всех вкладов практически совпадают. Реакции на пластину отличаются в пределах 1%.



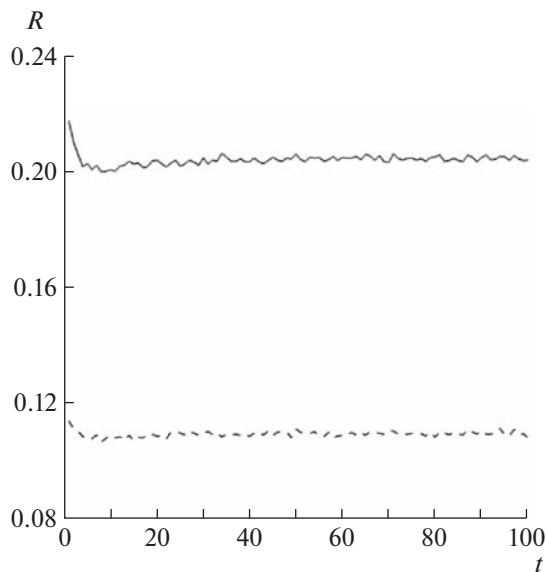
Фиг. 4



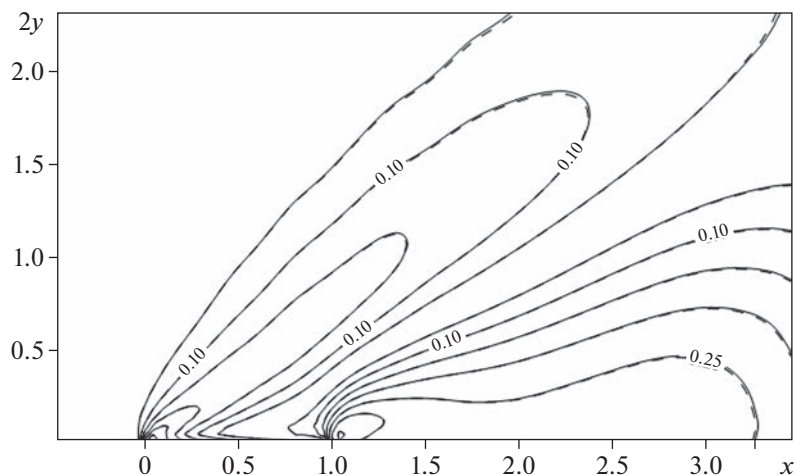
Фиг. 5

На фиг. 12 даны графики уменьшения числа обрабатываемых вкладов $R(t)$ для уровней Z_1 (штриховая кривая) и Z_2 (сплошная кривая). В отличие от дозвукового случая, число ненулевых вкладов растет со временем, оставаясь во много раз меньше полного числа вкладов. Для уровня Z_1 величина “идеального ускорения” $1/S \approx 30$, что почти в 3 раза больше реального ускорения из табл. 1. Простой оптимизацией отбора ненулевых вкладов является оценка в (1.15) только двух функций D_{α_v, β_v} и D_{λ_v, μ_v} , предполагая, что $D_{\lambda_v, \mu_v} \approx D_{\lambda_v + s_v, \mu_v - s_v}$. Время отбора сокращается в 1.5 раза. Достигнутые при этом ускорения счета для $M = 5$ и $M = 10$ приведены в табл. 1 в скобках.

На фиг. 13 показана функция распределения $f(\xi, \eta, \zeta, x, y)$ для $\zeta = h/2$, $x = 0.9$, $y = 0.1$. Горб на графике функции справа соответствует набегающему потоку, левый горб — отраженной от по-



Фиг. 6

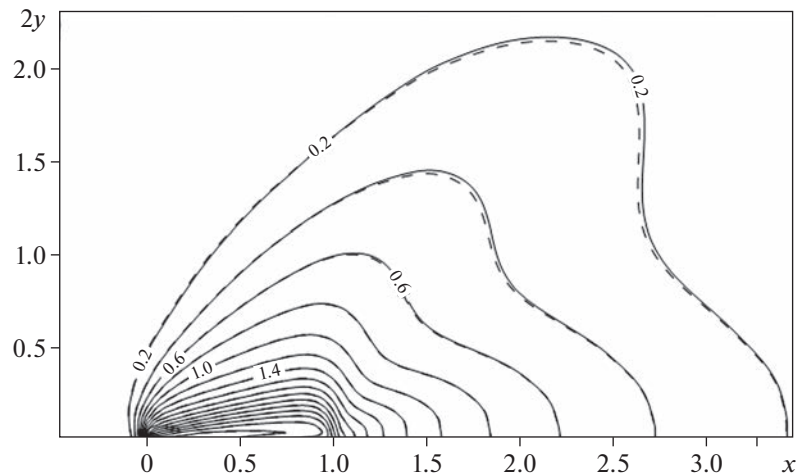


Фиг. 7

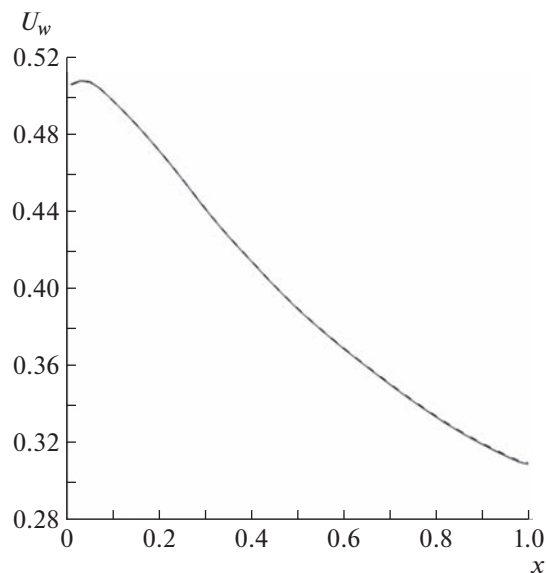
верхности функции. Видно, что в большей части скоростного пространства функция распределения близка к нулю, что объясняет преобладание нулевых вкладов на фиг. 12.

Анализ расчетов для случаев $M = 2$ и $M = 10$ приводит к тем же выводам: минимальное, в пределах 2% отличие результатов для уровня Z_1 и практически полное совпадение для уровня Z_2 . На фиг. 14 для $M = 10$ дано сравнение полей температуры, посчитанных при уровне Z_2 (штриховые линии) и без исключения вкладов (сплошные линии).

Рассмотрим обтекание поперечно расположенной к набегающему потоку, бесконечной по оси z плоской пластины при $M = 3$ и $Kn = 0.1$. Пластина расположена при $x = 0$, поток натекает слева. Ось $y = 0$ является линией симметрии течения. На поверхности пластины задано отражение молекул с максвелловским распределением по скорости при температуре набегающего потока. Шаги пространственной сетки около пластины $h_x = 0.15\lambda$, $h_y = 0.2\lambda$. Особенности течения являются значительное повышение плотности перед пластиной и разрежение газа с тыльной стороны. За пластиной возникает вихревое течение со скоростью скольжения на пластине, на-

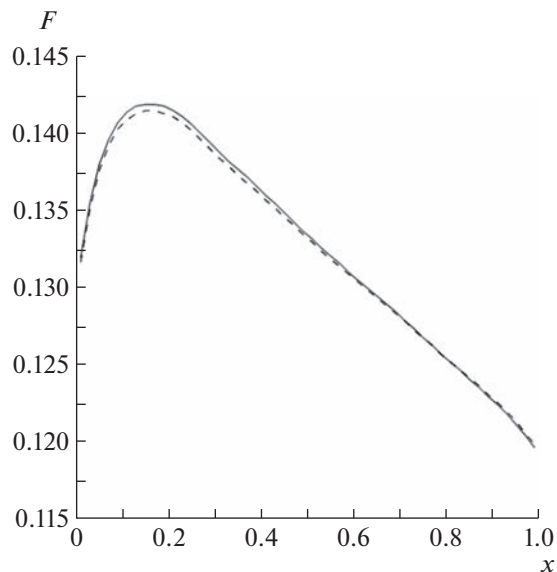


Фиг. 8

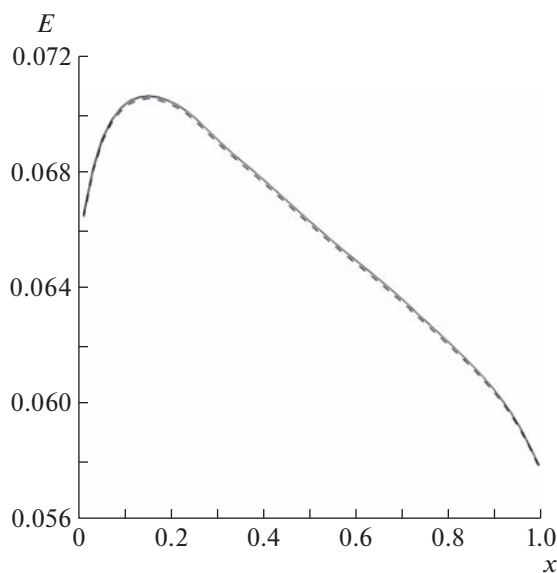


Фиг. 9

правленной вверх. На фиг. 15 показано поле плотности, а на фиг. 16 — поле температуры. Плотность увеличивается почти в 4 раза в ударной волне перед пластиной и резко падает около оси симметрии течения за пластиной. Температура возрастает в ударной волне и резко падает непосредственно за пластиной. Затем она возрастает по направлению x и меняется немонотонно по оси y . Детальное сравнение полей течения, полученных с применением исключения вкладов на уровне Z_1 и без исключения, которое мы не приводим, показывает практически полное их совпадение. На фиг. 17 показана скорость скольжения на фронтальной стороне пластины. Масштабом длины здесь выбрана длина свободного пробега молекул в набегающем газе. Результаты для уровня отсечения Z_1 и без исключения вкладов практически совпадают. Скорость скольжения на тыльной стороне пластины представлена на фиг. 18. Сплошной линией изображены результаты без исключения вкладов, которые совпадают с данными для уровня отсечения Z_3 , штриховой линией приведены данные для уровня Z_1 и длинными штрихами показаны результаты для уровня Z_2 . В отличие от фронтальной стороны пластины, применение уровня отсечения Z_1 дает



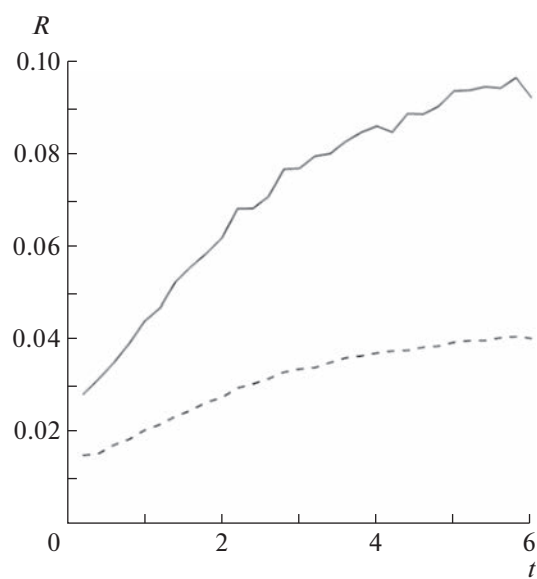
Фиг. 10



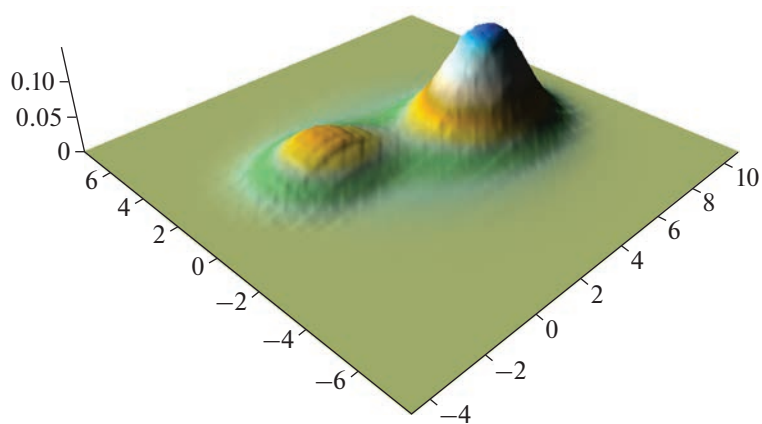
Фиг. 11

существенное различие результатов. Немонотонное поведение скорости скольжения может быть результатом отрыва пограничного слоя вблизи верхней кромки и образования сложного вихревого течения. Для сплошной среды явление “скручивания” оторвавшегося пограничного слоя в вихревую структуру показано на данных экспериментов в [34]. Для уровней Z_1 , Z_2 и Z_3 были получены ускорения счета стадии релаксации соответственно в 5.5, 4 и 3 раза.

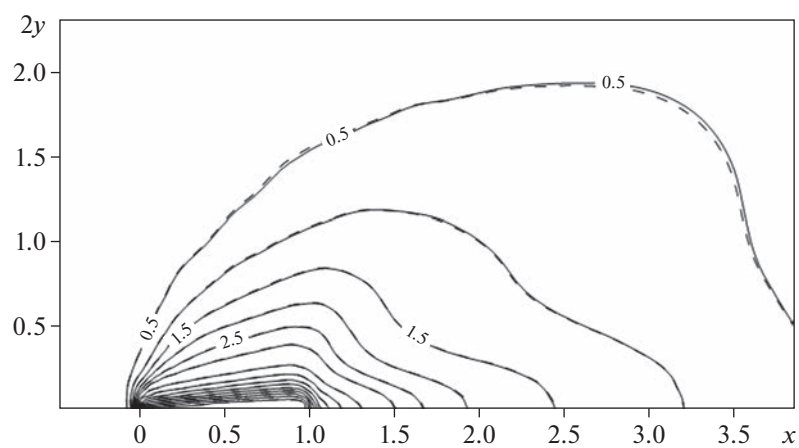
На примере обтекания поперечной пластины была испытана возможность применения разных уровней отсечения вкладов в разных областях физического пространства. Была выделена прямоугольная область вокруг пластины $-0.05 < x < 2$, $0 < y < 1.15$, площадь которой составляет около 15% от области решения задачи. В этой области применялся уровень Z_3 , а в остальной об-



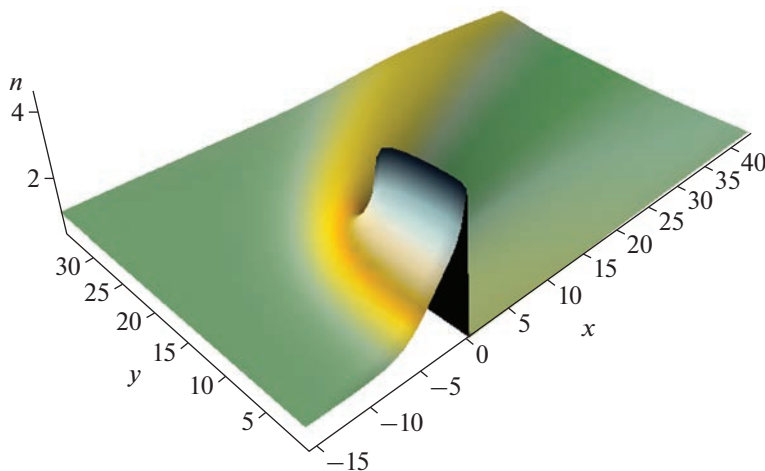
Фиг. 12



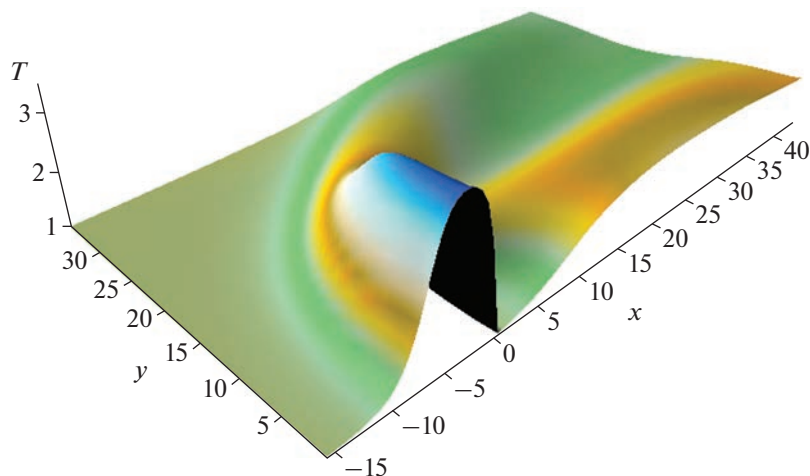
Фиг. 13



Фиг. 14



Фиг. 15

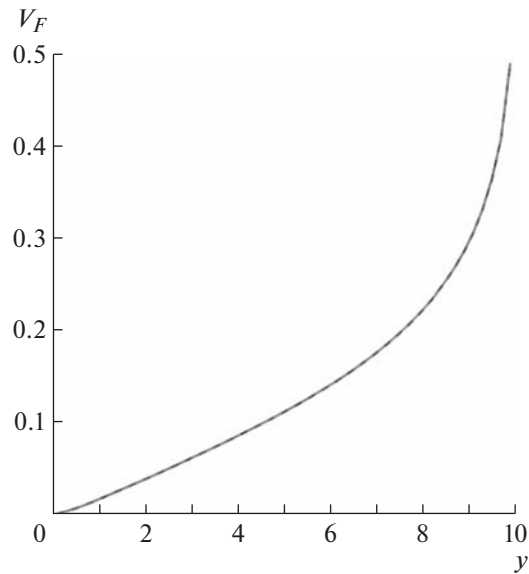


Фиг. 16

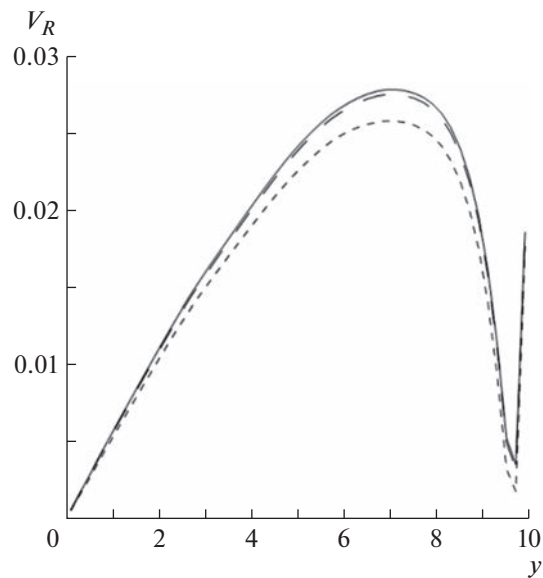
ласти использовался уровень Z_1 . Получено ускорение счета стадии релаксации в 5 раз при полном совпадении с результатами расчетов при уровне Z_3 во всей области.

На фиг. 19а—в изображена функция распределения $f(\xi, \eta, \zeta, x, y)$ при $\zeta = h/2$, $x = -0.1$, $y = h_y/2$ в моменты времени $t = 0.3$, $t = 3$ и $t = 20$. Единицей времени является $\tau = \lambda/\sqrt{kT/m}$. На фиг. 19а видны максвелловская функция распределения набегающего потока и небольшое проникновение (справа на изображении) быстрых молекул, отраженных от пластины. На фиг. 19б изображена промежуточная стадия взаимодействия падающего и отраженного потоков молекул. На фиг. 19в показана сформировавшаяся функция распределения при $t = 20$, которая не меняется на всем времени счета до $t = 60$. На фиг. 20 показана установившаяся функция распределения с тыльной стороны пластины при $\zeta = h/2$, $x = 0.1$, $y = h_y/2$. Она существенно отличается от равновесного распределения. Все изображенные функции занимают малую часть пространства скоростей.

Приведем отношение времен расчета стадии релаксации $t_{\text{rel},z}$ и стадии адвекции t_{adv} за период решения задачи. Для продольно расположенной пластины сравнение проведено для уровня Z_2 .



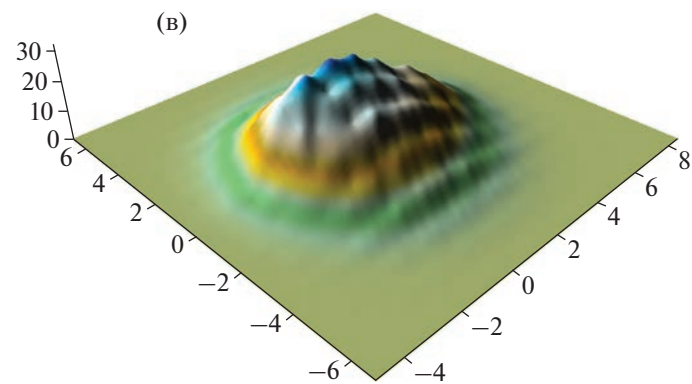
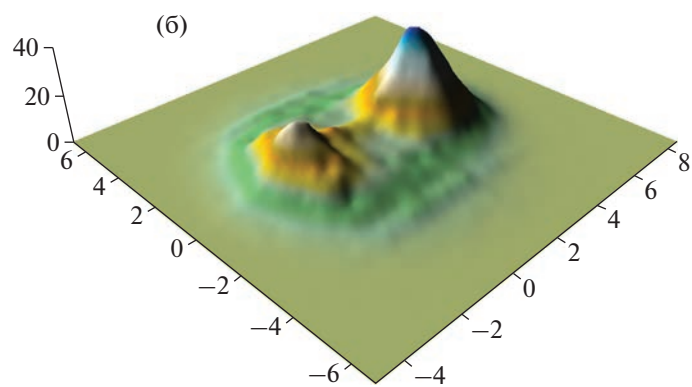
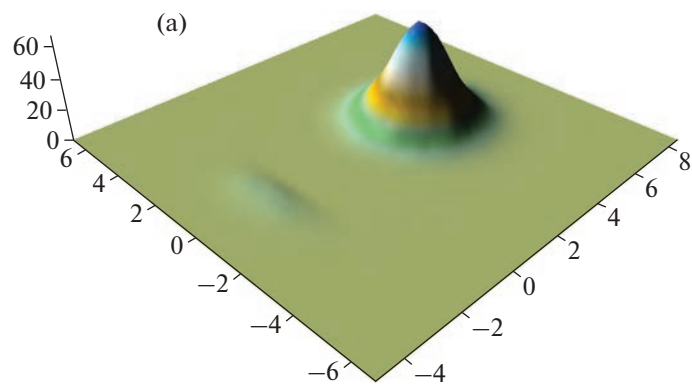
Фиг. 17



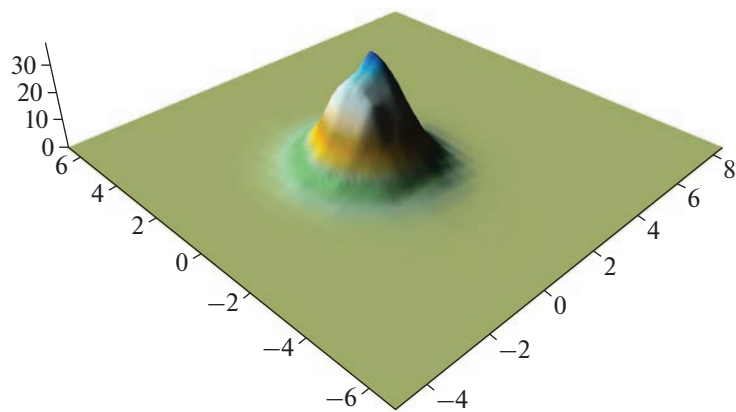
Фиг. 18

Расчет для $M = 0.5$ осуществлялся на $N_0 = 3604$ узлах скоростной сетки и $N_v = 75000$ узлах кубатурной сетки, получено отношение $t_{\text{rel},z}/t_{\text{adv}} \approx 3$. Результаты расчета для $N_v = 25000$ отличаются от предыдущих менее, чем на 1% и дают $t_{\text{rel},z}/t_{\text{adv}} \approx 1$. Для чисел Маха $M = 5$ и $M = 10$ использовалось $N_0 = 8628$ и $N_v = 125000$, получено $t_{\text{rel},z}/t_{\text{adv}} \approx 1.5$. Расчет обтекания нормальной к потоку пластины проводился при $N_0 = 7164$ и $N_v = 250000$. Для уровня отсечения Z_1 получено $t_{\text{rel},z}/t_{\text{adv}} \approx 6$. Для расчета адвекции в схеме симметричного расщепления использовалась схема SHASTA (см. [35]).

Таким образом, применение контроля вкладов в интеграл столкновений сокращает время расчета стадии релаксации до величины, сравнимой со временем расчета адвекции.



Фиг. 19



Фиг. 20

ВЫВОДЫ

Предложен способ значительного сокращения объема вычислений и многократного ускорения расчета интеграла столкновений Больцмана консервативным проекционным методом без потери точности. Сокращение объема вычислений достигается за счет исключения пренебрежимо малых вкладов в интегральную сумму, не влияющих на результат расчета. Дана оценка величины максимального уровня отсечения вкладов. Модифицированный алгоритм вычислений сохраняет основные свойства базового метода, обеспечивающие его стабильность: консервативность, положительную определенность решения, равенство нулю интеграла столкновений от максвелловской функции. В разных частях физической области решения могут быть применены разные уровни отсечения вкладов. Наибольшее ускорение решения уравнения Больцмана достигается при больших числах Маха, что частично компенсирует повышенную трудность его решения для сверхзвуковых течений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* A model for collision process in gases // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. P. 511–525.
2. *Holway L.H.* New statistical models for kinetic theory: Methods of construction // *Phys. Fluid.* 1966. V. 9. P. 1658–1673.
3. *Шахов Е.М.* Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // *Изв. АН СССР. МЖГ.* 1968. № 5. С. 142–145.
4. *Nordsiesk A., Hicks B.L.* Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral // *Proc. 5th Intern. Symp. on RGD.* 1966. V. 1. P. 695–710.
5. *Hicks B.L., Yen S.M.* Solution of the non-linear Boltzmann equation for plane shock waves // *Rarefied Gas Dynamics.* V. 1. New York: Acad. Press, 1969.
6. *Черемисин Ф.Г.* Численное решение кинетического уравнения Больцмана для одномерных стационарных движений газа // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1970. Т. 10. № 3. С. 654–665.
7. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // *Докл. АН.* 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.
8. *Tcheremissine F.G.* Conservative evaluation of Boltzmann collision integral in discrete ordinates approximation // *Comp. Math. Appl.* 1998. V. 35. № 1/2. P. 215–221.
9. *Tcheremissine F.* Direct numerical solution of the Boltzmann equation // *24th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics AIP Conf. Proceed.* 2005. P. 667–685.
10. *Tcheremissine F.G.* Solution of the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows // *Comp. Math. and Math. Phys.* 2006. V. 46. № 2. P. 315–329.
11. *Tcheremissine F.G.* Solution of the Boltzmann kinetic equation for low speed flows // *Transport Theory Stat. Phys.* 2008. № 37. P. 564–575.
12. *Varghese P.* Arbitrary post-collision velocities in a discrete velocity scheme for the Boltzmann equation // *25th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. AIP.* 2007. P. 225–232.
13. *Morris A., Varghese P., Goldstein D.* Improvement of a discrete velocity Boltzmann equation solver with arbitrary post-collision velocities // *AIP Conf. Proceed.* 2008. V. 1084. P. 458–463.
14. *Clarke P., Varghese P., Goldstein D., Morris A., Bauman P., Hegermiller D.* A novel discrete velocity method for solving the Boltzmann equation including internal energy and non-uniform grids in velocity space // *AIP Conf. Proceed.* 2012. V. 1501. P. 373–380.
15. *Arslanbekov R.R., Kolobov V.I., Frolova A.A.* Kinetic solvers with adaptive mesh in phase space // *Phys. Rev.* 2013. E 88, 063301.
16. *Kolobov V., Arslanbekov R., Frolova A.* Solving kinetic equations with adaptive mesh in phase space for rarefied gas dynamics and plasma physics // *Proceed. 29th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc.* 2014. V. 1628. P. 952–961.
17. *Dodulad O.I., Tcheremissine F.G.* Multipoint conservative projection method for computing the Boltzmann collision integral for gas mixtures // *Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Intern. Symp. AIP Conf. Proc.* 2012. V. 1501. P. 301–309.
18. *Anikin Yu.A., Dodulad O.I., Kloss Yu.Yu., Tcheremissine F.G.* Method of calculating the collision integral and solution of the Boltzmann kinetic equation for simple gases, gas mixtures and gases with rotational degrees of freedom // *Inter. J. Comput. Math.* 2014. 909033.
19. *Oblapenko G., Goldstein D., Varghese P., Moore C.* A velocity space hybridization-based Boltzmann equation solver // *J. Comput. Phys.* 2020. V. 408. 109302.
20. *Jaiswal Shashank, Alexeenko Alina A., Hu Jingwei,* A discontinuous Galerkin fast spectral method for the full Boltzmann equation with general collision kernels // *J. Comput. Phys.* 2019. V. 378. P. 178–208.

21. *Hu Jingwei, Shen Jie, Wang Yingwei*, A Petrov–Galerkin spectral method for the inelastic Boltzmann equation using mapped Chebyshev functions // *Kinetic and Related Model.* 2020. V. 13. № 4. P. 677–702.
22. *Akhlaghi Hassan, Roohi Ehsan, Stefanov Stefan*, A comprehensive review on micro- and nano-scale gas flow effects: Slip-jump phenomena, Knudsen paradox, thermally-driven flows, and Knudsen pumps // *Phys. Rep.* 2023. V. 997. P. 1–60.
23. *Popov S.P., Tcheremissine F.G.* A Method of joint solution of the Boltzmann and Navier-Stokes equations // *Rarefied Gas Dynamics. 24th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proceed.* 2005. P. 82–87.
24. *Kloss Yu.Yu., Tcheremissine F.G., Shuvalov P.V.* Solution of the Boltzmann equation for unsteady flows with shock waves in narrow channels // *Comp. Math. and Math. Phys.* 2010. V. 50. № 6. P. 1093–1103.
25. *Anikin A., Dodulad O.I., Kloss Y.Y., Martynov D.V., Shuvalov P.V., and Tcheremissine F.G.* Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // *Vacuum.* 2012. V. 86. № 11. P. 1770–1777.
26. *Dodulad O.I., Tcheremissine F.G.* Computation of a shock wave structure in monatomic gas with accuracy control // *Comp. Math. and Math. Phys.* 2013. V. 53. № 6. P. 827–844.
27. *Bazhenov I.I., Dodulad O.I., Ivanova I.D., Kloss Y.Y., Rjabchenkov V.V., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G.* Problem solving environment for gas flow simulation in micro structures on the basis of the Boltzmann equation // *Proc. 13th Inter. Conf. Math. Methods in Science and Engineering CMMSE.* 2013. P. 246–257.
28. *Dodulad O.I., Kloss Yu.Yu., Savichkin D.O., Tcheremissine F.G.* Knudsen pumps modeling with Lennard-Jones and ab initio intermolecular potentials // *Vacuum.* 2014. V. 109. P. 360–367.
29. *Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Потанов А.П., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В.* Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2016. Т. 56. № 6. С. 89–105.
30. *Tcheremissine F.G.* Testing and acceleration of the conservative projection method for solving Boltzmann kinetic equation // *AIP Conf. Proceed.* 2015. V. 1648. 23005.
31. *Tcheremissine F.G.* Solution of Boltzmann equation for extremely slow flows // *AIP Conf. Proceed.* 2020. V. 2293. 050008.
32. *Черемисин Ф.Г.* Решение уравнения Больцмана в режиме сплошной среды // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2023. Т. 63. № 2. С. 336–348.
33. *Коробов Н.М.* Тригонометрические суммы и их приложения. М.: Наука, 1989. с. 240.
34. *Milton van Dyke*, An album of fluid motion // *The Parabolik Press, Stanford, California*, 1982.
35. *Boris J.P., Book D.L.* Flux-corrected transport. 1. SHASTA, a fluid transport algorithm that works // *J. Comput. Phys.* 1973. V. 11. № 1. P. 38–69.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.635

90-летию доктора физико-математических наук,
профессора Евгения Михайловича Шахова посвящается

ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА В ТРУБЕ С РАЗРЕЖЕННЫМ ГАЗОМ¹⁾

© 2023 г. А. Н. Якунчиков^{1,*}, А. Р. Юлдашева^{1,**}

¹ 119991 Москва, Ленинские горы, МГУ, 1, Механико-математический факультет, Россия

*e-mail: art-ya@mail.ru,

**e-mail: a.r.iuldasheva@gmail.com

Поступила в редакцию 17.07.2023 г.

Переработанный вариант 25.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

В работе исследуется обтекание тела, которое движется с высокой дозвуковой скоростью в трубе, заполненной разреженным газом. Данная аэродинамическая задача рассматривается применительно к проблеме создания высокоскоростного вакуумного транспорта в условиях конечных чисел Кнудсена. Выбраны параметры, максимально приближенные к целевым характеристикам проектов таких систем, а именно: скорость порядка 1000 км/ч, значительный относительный поперечный размер тела, смесь азота и кислорода (воздух) в качестве газа. Задача решалась в трехмерной постановке. Библ. 31. Фиг. 7. Табл. 3.

Ключевые слова: разреженный газ, вакуумный транспорт, аэродинамическое сопротивление, событийное молекулярно-динамическое моделирование, Hyperloop, EDMD.

DOI: 10.31857/S0044466923120293, **EDN:** JKTTGR

ВВЕДЕНИЕ

Задача настоящего исследования тесно связана с идеей высокоскоростного вакуумного транспорта, которая впервые была сформулирована томским ученым Вейнбергом [1] еще в 1914 г. Данная идея была развита Маском [2] в его концепции вакуумной транспортной системы, которая получила название Hyperloop. В ее основе лежит создание сети наземных трубопроводов, внутри которых при пониженном давлении (0.001–0.01 атм) с высокой скоростью (порядка 1000 км/ч) двигаются капсулы с пассажирами или грузами. На данный момент несколько компаний, включая Hyperloop TT и Virgin Hyperloop, продолжают изучение конструкций и технологий, которые бы обеспечили безопасную работу такой транспортной системы. Например, компания Hyperloop One (в настоящее время – Virgin Hyperloop One), основанная в 2014 г., спроектировала полномасштабную пассажирскую капсулу длиной 8.7 м под названием XP-1 и провела эксперимент в трубе длиной 532 м в 2017 г., на тот момент без пассажиров [3]. Максимальная достигнутая скорость в ходе этого эксперимента составила 387 км/ч. Уже в 2020 г. компания провела тестовый запуск с пассажирами внутри обновленной капсулы XP-2. При давлении в трубе порядка 100 Па удалось достичь скорости 107 км/ч [3]. Компания Hyperloop TT также анонсировала полномасштабную пассажирскую капсулу длиной 32 м под названием Quintero One и провела аэродинамические эксперименты в трубе длиной 320 м [4]. Две другие компании, AIRTIFICIAL в Испании и TransPod в Канаде, также уже несколько лет работают над подобными системами [5].

¹⁾ Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, вычислительных ресурсов МСЦ РАН и инфраструктуры Центра коллективного пользования “Высокопроизводительные вычисления и большие данные” (ЦКП “Информатика”) ФИЦ ИУ РАН. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (код проекта № 20-71-10049).

Таблица 1. Условия теоретических и экспериментальных исследований, имеющих в литературе

Источник	Давление, Па	Скорость, м/с	Поперечное сечение тела	Подход
[6, 10]	10^3 – 10^5	417	0.1–0.5	Континуальный
[7]	10^3	300	0.1–0.4	Континуальный
[8]	10^2	170–350	0.01–0.3	Континуальный
[9]	10^2 – 10^3	25–350	0.25, 0.35	Континуальный
[11]	10^3 – 10^5	139, 194	0.2–0.75	Континуальный
[12]	10^2	100–350	0.25, 0.36	Континуальный
[13]	10^4	14	—	Эксперимент
[14]	10^5	170–520	0.08	Эксперимент
[15]	10^2	160, 320	0.34	Эксперимент

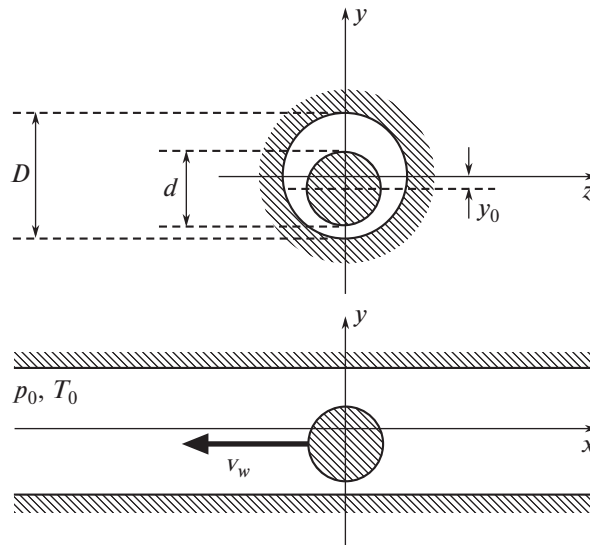
Были проведены многочисленные теоретические исследования, направленные на изучение аэродинамических характеристик таких систем, а также поиск оптимальной формы капсулы. Исследования [6–12] посвящены моделированию обтекания капсулы в континуальном режиме в широком диапазоне скоростей движения. Расчеты показали, что аэродинамическое сопротивление капсулы значительно возрастает с увеличением скорости и отношения поперечного размера капсулы к диаметру трубы, а также давления в трубе, тогда как влияние длины капсулы и температуры ее поверхности менее существенно. Условия расчетов перечисленных работ собраны в табл. 1.

Также в литературе имеются результаты экспериментальных исследований. В работе [13] удалось продемонстрировать работоспособность транспортной системы на магнитном подвесе при пониженном давлении (0.1 атм), но пока для совсем небольших скоростей движения (около 50 км/ч). В работе [14] проведено экспериментальное исследование движения снаряда, летящего в трубе, в широком диапазоне скоростей. Однако измерения проводились при атмосферном давлении и очень маленьком относительном размере тела (приблизительно 0.08). Было получено, что при этих условиях коэффициент сопротивления имеет максимум ($C_x \approx 2$) при числе Маха $M \approx 0.8$. Совсем недавно был проведен эксперимент [15] о движении капсулы в вакуумной трубе (0.001 атм) с двумя скоростями: 160 и 320 м/с, при этом относительный размер капсулы составил 0.34 от поперечного сечения трубы. К сожалению, коэффициенты сопротивления не высчитаны из эксперимента, а внимание было направлено на измерение скорости ударных волн, возникающих при влете капсулы в трубу.

Во всех перечисленных выше работах задача исследовалась в континуальном режиме течения. В настоящей работе задача ставится в условиях большего разрежения, т.е. при конечных значениях числа Кнудсена, с целью получения количественных оценок силы сопротивления и подъемной силы при данных условиях, а также описания картины возникающего течения. В описанных выше транспортных системах в качестве целевой рассматривается скорость порядка 1000 км/ч, что приблизительно соответствует числу Маха 0.8 в воздухе, поэтому для исследования была выбрана именно эта скорость. В качестве газа взята смесь азота и кислорода (объемная доля азота 0.78, т.е. воздух). Поперечный размер тела (относительно размера трубы) и его положение варьировались.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается задача о движении тела в цилиндрической трубе диаметра D . Труба заполнена покоящимся газом (смесью газов) с давлением p_0 и температурой T_0 . Тело движется с постоянной скоростью v_w , положение тела в сечении трубы фиксировано и определяется смещением y_0 (см. фиг. 1). Рассматриваются режимы течения, соответствующие конечным числам Кнудсена и высоким дозвуковым скоростям движения. Температура поверхности трубы и тела предполагалась постоянной и равной $T_w = T_0$. Взаимодействие молекул газа с твердыми поверхностями



Фиг. 1. Схема задачи.

моделировалось ядром рассеяния с полной аккомодацией энергии и импульса. В этом случае плотность вероятности для скорости после отражения будет

$$\rho(\mathbf{u}) = \frac{2\beta_w^4 u_n}{\pi} \exp(-\beta_w^2 u^2),$$

где $\beta_w = \sqrt{m/2kT_w}$, k — константа Больцмана, m — масса молекулы. Были введены следующие безразмерные параметры задачи:

- относительный поперечный размер тела d/D ,
- безразмерное смещение y_0/D ,
- параметр разрежения $\delta = Dp_0\beta_m/\mu_m$,
- безразмерная скорость тела (число Маха) $M = v_w/\sqrt{\gamma R_m T_0}$,

где $\beta_m = 1/\sqrt{2R_m T_0}$, μ_m — вязкость смеси газов при температуре $T = T_0$, R_m — газовая постоянная для смеси газов, γ — постоянная адиабаты (бралось значение $\gamma = 1.4$, так как рассматривалась смесь двухатомных газов). Сила сопротивления R_x и подъемная сила R_y (искомые величины) обезразмеривались стандартным образом:

- коэффициент сопротивления $C_x = R_x/(\rho_0 v_w^2 S/2)$,
- коэффициент подъемной силы $C_y = R_y/(\rho_0 v_w^2 S/2)$,

где $\rho_0 = p_0/(R_m T_0)$ — плотность покоящейся смеси, $S = \pi d^2/4$ — площадь поперечного сечения тела.

2. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Для решения задачи использовался метод событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD) [16–20], который является компромиссом между прямым статистическим моделированием Монте-Карло (DSMC) и классическим молекулярно-динамическим моделированием (MD) и по уровню детализации модели, и по вычислительной нагрузке. Событийный метод является полностью детерминированной и бесшумной (и по пространству, и по времени) реализацией выбранной модели столкновений молекул без стохастического выбора пары для столкновения (как в DSMC) или упрощения интеграла столкновений (как в методах с модельным интегралом столкновений). Таким образом, нет необходимости проводить большие серии тестовых расчетов с различными сетками, шагами по времени, моделями выбора пары для столкновения, алгоритмами измельчения пространственных сеток и т.п., чтобы выбрать кор-

ректный набор технических параметров для конкретной постановки задачи. Платой за это преимущество является заметно большая вычислительная нагрузка метода EDMD по сравнению с методом DSMC. При этом EDMD существенно превосходит классическое MD-моделирование по скорости расчета, что позволяет использовать EDMD для решения задач динамики разреженного газа.

Подробное описание метода EDMD, его реализация и верификация на двух классических задачах динамики разреженного газа даны в предыдущих статьях авторов [20]. Также метод EDMD успешно применялся для моделирования течения многокомпонентной смеси газов в области со сложными неизоэтермическими [21] и движущимися [22–24] границами. Для случая многоатомных газов была предложена модель столкновений [25], которая была успешно протестирована на задаче об истечении азота в вакуум. Ниже описаны основные положения метода EDMD, а также специфические особенности его применения к задаче настоящего исследования.

2.1. Основные положения метода

Основная идея метода состоит в том, что траектории движения молекул газа между столкновениями можно считать прямолинейными. Таким образом, нет необходимости численно интегрировать уравнения движения с малым шагом по времени, как это делается при решении задачи методом классического молекулярно-динамического моделирования. Это предположение позволяет существенно снизить вычислительную нагрузку: характерный размер шага интегрирования при молекулярно-динамическом моделировании — 10^{-15} с, характерная скорость молекулы порядка тепловой — 10^3 м/с, а характерная длина свободного пробега в газе при нормальных условиях порядка 10^{-7} м. Следовательно, даже при атмосферном давлении в среднем при классическом молекулярно-динамическом моделировании пришлось бы сделать около 10^5 шагов для расчета прямого пролета молекулы между столкновениями. В подходе событийного моделирования эти пролеты предполагаются прямолинейными с постоянной скоростью, которую молекула приобрела при столкновении, и выполняются “за один шаг”. Таким образом, основная задача заключается в нахождении времен столкновений частиц друг с другом. Для этого строится упорядоченный список событий (очередь), которые должны произойти в системе. Событиями здесь называются акты межмолекулярных столкновений, столкновения с поверхностью твердого тела, столкновения с плоскостью симметрии задачи (если имеется), вылет или влет молекулы через открытые границы задачи. События из списка последовательно выполняются, при этом список предстоящих событий частично перестраивается. Например, при столкновении двух частиц меняются их скорости, поэтому часть предстоящих столкновений с другими частицами отменяется, а по новым скоростям считаются новые потенциальные столкновения. Из вышесказанного следует, что время в моделируемой системе меняется дискретно — по временам событий из упорядоченного списка. При этом нет нужды пересчитывать положения всех молекул в системе при каждом таком изменении времени, так как их движение полностью детерминировано, если были известны координата и скорость молекулы на определенный момент времени и список предстоящих событий.

Каждой молекуле приписаны (1) ее сорт, (2) координаты $\mathbf{x}_i$, (3) скорость $\mathbf{u}_i$, (4) энергия $e_{in,i}$ ее внутренних степеней свободы и (5) время t последнего произошедшего с ней события. Между столкновениями молекулы движутся по прямым линиям. В настоящей работе используется модель столкновения [25], описанная в следующем разделе. В этом случае время столкновения двух молекул определяется из квадратного уравнения:

$$(\mathbf{x}_1(t) - \mathbf{x}_2(t))^2 = b_M^2, \quad (2.1)$$

$$\mathbf{x}_k(t) = \mathbf{x}'_k + \mathbf{u}'_k(t - t'_k), \quad k = 1, 2, \quad (2.2)$$

где t'_k — время последнего события k -й молекулы, $\mathbf{x}'_k$, $\mathbf{u}'_k$ — ее координаты и скорость после последнего столкновения, b_M — параметр модели столкновения (см. следующий раздел). Необходимо выбрать минимальный корень с условиями $t > t'_1$, $t > t'_2$. Если такого корня нет, то эти молекулы не столкнутся.

Аналогичным образом рассчитываются времена столкновений молекулы с поверхностями твердого тела и виртуальными границами (плоскости симметрии, периодические или открытые

границы). Эти поверхности задаются набором алгебраических поверхностей с ограничениями $(x_{\min}, x_{\max}, y_{\min}, y_{\max}, z_{\min}, z_{\max})$ на координаты. В настоящее время реализованы поверхности первого и второго порядка. В задаче настоящего исследования присутствуют плоские границы (входное и выходное сечение трубы), цилиндрическая поверхность (стенка трубы) и поверхность сферы (тело). Например, время столкновения i -й молекулы с k -м плоским элементом границы определяются из следующего линейного уравнения:

$$\mathbf{x}_i(t) \cdot \mathbf{n}_k = R_k,$$

где $\mathbf{n}_k$, R_k — нормаль и расстояние от начала координат, которые определяют плоскость k -го элемента границы. Аналогичным образом записываются квадратные уравнения для поверхностей второго порядка (цилиндр, сфера, конус).

Для реализации граничного условия на открытых границах задачи необходимо создавать молекулы, которые влетают в расчетную область. В терминах событийного метода это означает, что необходимо с некоторой частотой ω добавлять событие появления молекулы в определенном месте границы. Частота возникновения молекул ω и распределение их скоростей определяются давлением, температурой и макроскопической скоростью в резервуаре, из которого они попадают в расчетную область. Координата возникновения частицы выбирается случайным образом с равномерным распределением по площади данного элемента границы. В настоящей работе были реализованы равновесные граничные условия, т.е. когда расчетная область граничит с объемом газа, находящимся в термодинамическом равновесии с числовой плотностью n_0 , средней скоростью $\mathbf{v}_w$ и температурой T_0 . В этом случае поток молекул, влетающий в расчетную область, будет:

$$\begin{aligned} J_1 &= n_0 \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty u_n \exp(-\beta^2 (\mathbf{u} - \mathbf{v}_w)^2) d\mathbf{u} = \\ &= \frac{n_0}{2\sqrt{\pi}\beta} \left(\exp(-\beta^2 v_{wn}^2) + \sqrt{\pi}\beta v_{wn} \operatorname{erfc}(-\beta v_{wn}) \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\beta = \sqrt{m/2kT_0}$, $\operatorname{erfc}(x)$ — дополнительная функция ошибок. Тогда частота создания молекулы будет $\omega = J_1 S$, где S — площадь рассматриваемого элемента открытой границы. В соответствии с равновесным распределением Максвелла плотность вероятности для скорости создаваемой молекулы будет

$$\rho(\mathbf{u}) = \frac{n_0}{J_1} \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \right)^3 u_n \exp(-\beta^2 (\mathbf{u} - \mathbf{v}_w)^2) = \frac{2\beta^4 u_n \exp(-\beta^2 (\mathbf{u} - \mathbf{v}_w)^2)}{\pi (\exp(-\beta^2 v_{wn}^2) + \sqrt{\pi}\beta v_{wn} \operatorname{erfc}(-\beta v_{wn}))}. \quad (2.4)$$

События, которые должны произойти с молекулами системы, размещаются в сортированном списке, который называется очередью событий. Поскольку с каждой молекулой связано как минимум одно предстоящее событие (даже если столкновений с другими молекулами нет, есть столкновение с границами задачи — поверхностями твердого тела или вылет через открытую границу), то размер этой очереди будет как минимум порядка количества частиц в системе N . Самая затратная операция, которая выполняется с очередью — поиск места для вставки очередного события. С ростом числа частиц в системе вычислительная сложность поиска в сортированном списке будет расти как логарифм (например, при реализации бинарного дерева). Тестовые запуски показали, что при такой реализации даже при количестве частиц 10^5 (что неприемлемо мало для задач динамики разреженного газа) счет становится очень затратным. Поэтому для реализации очереди событий был выбран метод с использованием хеш-функций или хеш-таблицы. При такой реализации вычислительная сложность поиска постоянна и не увеличивается с ростом количества элементов в списке (при адекватном подборе параметров). Идея метода состоит в следующем. В памяти выделяется место под N_h элементов и выбирается параметр шага хеш-таблицы Δ_h . Когда требуется расположить событие со временем t в таблице, вычисляется хеш-функция:

$$H(t) = \frac{t}{\Delta_h} \bmod N_h.$$

Элемент добавляется по данному адресу. Ситуация, когда это место уже занято, называется коллизией хеш-функции. В этом случае элементы располагаются в обычный сортированный список, голова которого находится по данному адресу. Параметры хеш-таблицы Δ_h и N_h выбирают так (см. [20]), чтобы в среднем хеш-таблица была равномерно заполнена и почти не было коллизий. Данный подход позволил проводить расчеты с нагрузкой по 10^7 частиц на ядро процессора.

2.2. Модель межмолекулярных столкновений

Актуальной проблемой в динамике разреженного газа является учет многоатомности молекул, так как в части задач это приводит к существенному отличию результатов от случая течения бесструктурных частиц. Особенно показательными являются задачи об истечении газа в вакуум – в экспериментах получено [26, 27], что зависимость поступательных и вращательных температур существенно отличается от адиабатических зависимостей. Поэтому для корректного описания течения в таких задачах требуется учитывать обмен энергией между поступательными и вращательными степенями свободы молекулы, в результате которого распределение энергии по степеням существенно отличается от равновесного. В работах [28, 29] сделан вывод, что необходимо описывать перераспределение энергии в терминах микропараметров: хотя бы в зависимости от поступательной, вращательной энергии до столкновения и прицельного расстояния. В связи с этим используемый авторами настоящего исследования метод событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD) идеально подходит для таких задач, так как в рамках событийного подхода перечисленные микропараметры полностью детерминированы для каждого столкновения (в отличие от DSMC, где часть из них выбрасывается случайным образом в предположении равновесного распределения).

2.2.1. Поступательно-вращательная релаксация. Столкновение двух молекул обычно характеризуется вектором скорости $\mathbf{g}$ относительного движения центров масс молекул и энергиями $e_{in,1}$, $e_{in,2}$ внутренних степеней свободы первой и второй молекулы соответственно. В случае термодинамического равновесия можно получить вид плотности вероятности для модуля вектора относительной скорости g :

$$\rho_g(g) = 2\beta_r^4 g^3 \exp(-\beta_r^2 g^2),$$

где $\beta_r = \sqrt{m_r/2kT}$, $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, а m_1 , m_2 – массы молекул. Введем энергию относительного движения центров масс молекул до столкновения $e_r = m_r g^2 / 2$. Несложно получить выражение для плотности вероятности e_r :

$$\rho_{ir}(e_r) = e_r (kT)^{-2} \exp\left(-\frac{e_r}{kT}\right).$$

В случае если у молекулы две вращательных степени, плотность вероятности вращательной энергии $e_{in,i}$ одной молекулы будет

$$\rho_{in,i}(e_{in,i}) = (kT)^{-1} \exp\left(-\frac{e_{in,i}}{kT}\right).$$

Тогда плотность вероятности для общей энергии вращательных степеней двух молекул $e_{in} = e_{in,1} + e_{in,2}$ будет

$$\rho_{in}(e_{in}) = (kT)^{-2} e_{in} \exp\left(-\frac{e_{in}}{kT}\right).$$

Как видно, сформулировать корректную микроскопическую модель релаксации энергии при столкновении молекул в терминах $e_{in,1}$, $e_{in,2}$ и e_r не представляется возможным, так как равновесные распределения данных параметров зависят от температуры, а пара сталкивающихся молекул “не знает” температуру в данной точке пространства (как и другие моменты функции распределения скоростей). Поэтому авторами предложено (см. [25]) перейти к другой тройке параметров:

(1) $\varepsilon = e_r + e_{in}$ – полная энергия движения двух молекул относительно центра масс системы, которая, как следует из законов сохранения, не меняется при столкновении $\varepsilon = \varepsilon'$ (штрихом будем обозначать значения соответствующих параметров после столкновения);

(2) безразмерная величина $\gamma_r = e_r/\epsilon$, характеризующая долю энергии относительного движения центров масс молекул;

(3) безразмерная величина $\gamma_1 = e_{in,1}/e_{in}$, характеризующая долю энергии вращательных степеней первой молекулы в энергии вращательных степеней пары.

Равновесные плотности вероятности для введенных величин ϵ , γ_r и γ_1 получаются очень удобными для конструирования модели релаксации:

$$\rho_\epsilon(\epsilon) = \frac{1}{6(kT)^4} \epsilon^3 \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT}\right),$$

$$\rho_r(\gamma_r) = 6\gamma_r(1 - \gamma_r), \quad \rho_1(\gamma_1) = 1.$$

Как видно, равновесные плотности вероятности $\rho_r(\gamma_r)$ и $\rho_1(\gamma_1)$ не зависят от температуры T и других моментов функции распределения скоростей, а $\rho_\epsilon(\epsilon)$ — зависит, но это не важно, так как величина ϵ является инвариантом столкновения. Таким образом, в предложенных терминах появляется возможность корректно сформулировать микроскопическую модель релаксации энергии при межмолекулярном столкновении. Что и было сделано (см. [25]) на основе анализа траекторий столкновения молекул азота и кислорода. В результате получена модель межмолекулярных столкновений, которая описана ниже.

2.2.2. Модель межмолекулярных столкновений для азота и кислорода. В [25] была проведена серия траекторных молекулярно-динамических расчетов столкновений молекул азота и кислорода. На основе анализа результатов траекторных расчетов было принято решение описать рассеяние молекулы на молекуле (межмолекулярное столкновение) с помощью математической модели, аналогичной известному ядру рассеяния Максвелла, используемому для описания взаимодействия газа с поверхностью твердого тела. Важным преимуществом такого подхода является автоматическое выполнение условий детального баланса и нормировки для полученной модели, что чрезвычайно важно при ее последующем применении (в противном случае в расчетах может нарушаться термодинамическое равновесие).

Предлагается следующая модель релаксации для расчета изменения γ_r и γ_1 при столкновении:

$$R(\epsilon, b, \gamma_r, \gamma_1, \gamma'_r, \gamma'_1) = \left((1 - \alpha_r(\epsilon, b)) \delta(\gamma'_r - \gamma_r) + \alpha_r(\epsilon, b) \rho_r(\gamma'_r) \right) \times$$

$$\times \left((1 - \alpha_1(\epsilon, b)) \delta(\gamma'_1 - \gamma_1) + \alpha_1(\epsilon, b) \rho_1(\gamma'_1) \right),$$

где b — прицельное расстояние, $\alpha_r(\epsilon, b)$ и $\alpha_1(\epsilon, b)$ — коэффициенты релаксации для γ_r и γ_1 соответственно, зависящие от ϵ и b . Легко показать аналитически, что $R(\epsilon, b, \gamma_r, \gamma_1, \gamma'_r, \gamma'_1)$ удовлетворяет условиям детального баланса и нормировки для любых ϵ и b . Вид функций $\alpha_r(\epsilon, b)$ и $\alpha_1(\epsilon, b)$ был выбран, исходя из полученных в МД-расчетах результатов [25]:

$$\alpha(\epsilon, b) = \alpha_0 q(\epsilon) w_0(b) + \alpha_\infty (1 - q(\epsilon)) w_\infty(b),$$

где $q(\epsilon) = \exp(-\epsilon/\epsilon_0)$, $w_0(b) = \sqrt[n]{1 - (b/b_0)^n}$, $w_\infty(b) = \exp(-(b/b_M)^m)$, а величины α_0 , α_∞ , ϵ_0 , b_0 , b_M , n , m — набор констант (отличающийся для γ_r и γ_1), значения которых выбирались из условия минимизации невязки с результатами МД расчетов.

Угол отклонения χ вектора относительной скорости $\mathbf{g}$ был аппроксимирован следующим образом:

$$\chi(\epsilon, b, \gamma_r) = \begin{cases} \pi \left(1 + k_1(\epsilon, \gamma_r) b^{n_1} + k_2(\epsilon, \gamma_r) b^{n_2} \right), & b \leq b_1(e_r), \\ P_3(b), & b_1(e_r) < b \leq b_M, \end{cases}$$

где $b_1(e_r) = (b_M - b_m) \exp(-e_r/e_0) + b_m$, $k_i(\epsilon, \gamma_r) = k_{i,0} + k_{i,1}\gamma_r + k_{i,2}\epsilon$, а $P_3(b)$ — полином 3 степени, коэффициенты которого однозначно определяются из следующих условий: (1) непрерывности $\chi(\epsilon, b, \gamma_r)$ в точке $b = b_1(e_r)$, (2) гладкости $\chi(\epsilon, b, \gamma_r)$ в точке $b = b_1(e_r)$, (3) $\chi(\epsilon, b_M, \gamma_r) = 0$, (4) $\partial\chi/\partial b = 0$ в точке $b = b_M$. Величины b_m , e_0 , n_1 , n_2 , $k_{i,j}$ — набор констант, значения которых выбирались из условия минимизации невязки с результатами МД расчетов.

2.2.3. Программная реализация модели. Предложенная микроскопическая модель столкновений не усложняет алгоритм моделирования течения разреженного газа методами EDMD и DSMC. Наоборот, в предложенной модели упрощается процедура оценки количества необходимых столкновений по сравнению с популярными у исследователей моделями переменных твердых сфер (VHS) и переменных мягких сфер (VSS), так как эффективный размер частицы не зависит от относительной скорости молекул, а полагается равным b_M . Поэтому алгоритм в этой части совпадает с наиболее простой моделью твердых сфер (HS). Когда пара молекул для столкновения установлена, алгоритм обработки столкновения выглядит следующим образом:

(1) рассчитываются безразмерные величины $\gamma_r = e_r/\varepsilon$ и $\gamma_l = e_{in,l}/e_{in}$ (это значения до столкновения);

(2) в соответствии с описанным выше ядром $R(\varepsilon, b, \gamma_r, \gamma_l, \gamma'_r, \gamma'_l)$ разыгрываются значения γ'_r, γ'_l (значения после столкновения);

(3) рассчитывается угол отклонения χ вектора относительной скорости по введенному выше выражению $\chi(\varepsilon, b, \gamma_r)$.

(4) так как полная энергия ε молекул относительно центра масс системы в ходе столкновения не меняется, то $\varepsilon = \varepsilon'$. По параметрам $(\varepsilon, \gamma'_r, \gamma'_l, \chi)$ однозначно рассчитываются скорости центров масс и вращательные энергии молекул после столкновения.

Авторами настоящей статьи подготовлена и протестирована программная C++ реализация микроскопической модели столкновений (выложена в открытом доступе [30]), которую можно использовать в DSMC и EDMD расчетах. Несмотря на то, что с алгоритмической точки зрения существенных усложнений нет, вычислительные затраты при использовании новой модели возрастают. Это происходит из-за увеличения эффективного размера частицы (он полагается равным b_M), что приводит к заметному увеличению количества обрабатываемых столкновений.

2.3. Распараллеливание расчетов по областям

Предварительные расчеты в плоской постановке показали, что случай сверхзвукового движения значительно проще в вычислительном плане, так как ударная волна отходит от тела совсем на небольшое расстояние (1–2 калибра трубы), что позволяет существенно сократить размер расчетной области перед телом. В дозвуковом случае, напротив, возмущения от тела могут быть ощутимы на расстоянии в 5–7 и более калибров трубы перед телом, поэтому такие расчеты требуют значительного увеличения расчетной области. При этом с точки зрения перспектив высокоскоростного вакуумного транспорта наибольший практический интерес представляет трехмерная постановка именно в дозвуковом режиме. Вопрос существенного увеличения расчетной области стоит особенно остро в трехмерной постановке. Поэтому для проведения такого расчета потребовалось распараллелить метод событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD) по областям, что заслуживает отдельного внимания из-за известных проблем с распараллеливанием методов такого типа [31].

В настоящий момент не разработан алгоритм распараллеливания событийного подхода “без потерь” (т.е. без потери событий), который бы при этом оставался эффективным с вычислительной точки зрения [31]. Объясняется это следующим образом. Программная реализация подхода событийного молекулярно-динамического моделирования является бессеточной (нет сетки ни по пространству, ни шага по времени). Время в моделируемой системе меняется по временам происходящих событий. Поэтому введение искусственного временного интервала, на котором расчет на каждом ядре идет независимо, неотвратно ведет к накоплению событий с молекулами, которые должны были бы произойти на границах областей разных ядер, но остались не обработаны. Если придерживаться консервативного подхода “без потерь”, то после интервала параллельного счета необходимо откатиться назад по времени до первого такого необработанного “граничного события”, обработать его и запустить следующий интервал независимого счета. В итоге, из-за необходимости отката получить ускорение счета не удастся. Поэтому приходится выбирать менее консервативный подход с потерей событий. Легко сделать оценку доли таких событий — она определяется долей молекул газа, находящихся в слое границы области, по отношению ко всем молекулам области. Толщина этого слоя пропорциональна длине интервала независимого счета, т.е. легко регулируется. Следует оговориться, что даже при потере этой небольшой части событий расчетная схема всегда остается строго консервативной по массе, импульсу и энергии, поэтому с точки зрения макроскопических параметров результаты для одноядерного

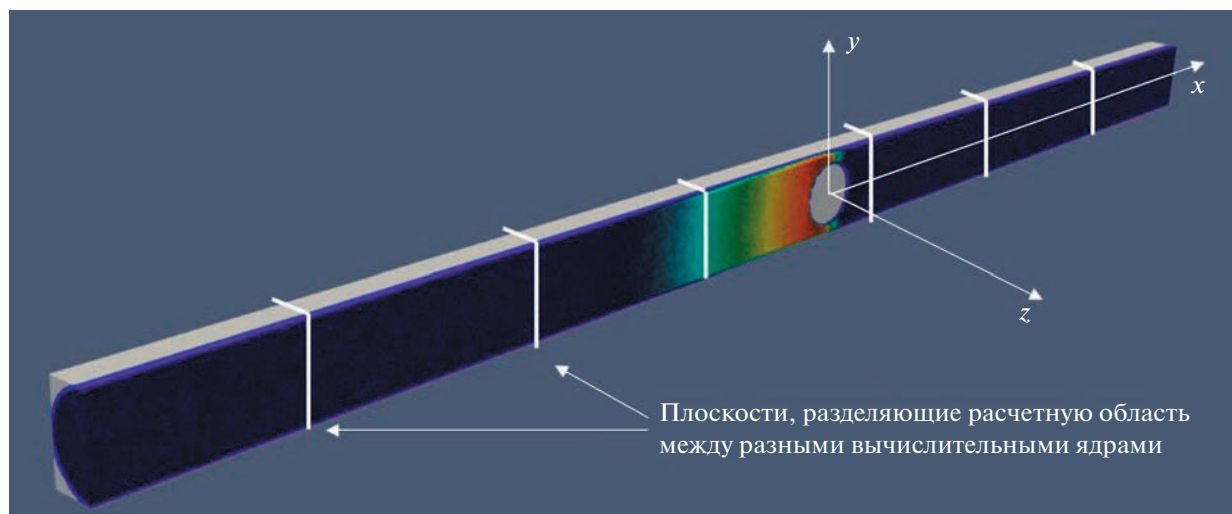
расчета и расчета с распараллеливанием получаются идентичными, а различия возникают только в индивидуальных траекториях чрезвычайно малой доли молекул. Данный подход был реализован (технология MPI, в синхронном режиме) и применялся для трехмерного расчета течения в данной работе. Разбивка на области была очень простой – труба нарезалась на куски ее поперечными сечениями (см. фиг. 2). Отношение времени расчета одной и той же задачи на одном ядре и на 5 ядрах (тесты проводились на процессоре Intel Core i7–9700) составило $\Delta_1/\Delta_5 = 3.55$, т.е. эффективность текущей параллельной реализации даже на таком небольшом количестве ядер порядка 0.7. Это объясняется тем, что балансировка нагрузки между ядрами осуществлялась в ручном режиме. Поэтому в период времени, когда течение устанавливается, часто возникала ситуация, что часть ядер простаивала, ожидая завершения интервала расчета на остальных. Чтобы повысить эффективность распараллеливания, авторы планируют реализовать автоматическое изменение размеров подобластей в процессе расчета, так как вычислительная нагрузка ядра напрямую зависит от количества молекул в конкретной подобласти, которое заранее не известно и меняется по мере установления течения.

3. РАСЧЕТЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Проведение расчетов

В качестве тела рассматривалась сфера диаметра d , которая движется в трубе с постоянной скоростью v_w . Температура всех твердых поверхностей бралась постоянной и равной $T_w = T_0 = 300$ К. Расчетная область представляла из себя половину трубы (см. фиг. 2), отрезанную по плоскости симметрии Oxy . Длина расчетной области по оси Ox бралась равной $L = 20D$ (20 калибров трубы). Трехмерная постановка задачи очень ресурсоемкая, поэтому вместо полноценного параметрического исследования были рассмотрены конкретные комбинации параметров, которые максимально приближены к требованиям для различных концепций вакуумного транспорта, известных из литературы.

- Рассмотрены следующие относительные размеры тела: $d/D = 0.2, 0.5, 0.8$. Наибольший практический интерес представляют высокие значения d/D .
- В качестве газовой среды взят воздух: смесь азота и кислорода с использованием модели столкновений, предложенной авторами в предыдущих работах [25] для учета вращательных степеней свободы в двухатомных газах.
- Целевая скорость для таких транспортных систем порядка 1000 км/час, в случае воздуха и температур около 300 К это соответствует числу Маха $M = 0.8$.



Фиг. 2. Расчетная область и способ ее разделения (качественно) между разными ядрами вычислителя.

• С точки зрения практических приложений результаты для чисел Кнудсена порядка 1 и более бесполезны, так как при реализации потребуют слишком глубокой откачки трубы. Поэтому расчеты проводились для K_n порядка 0.1 (параметр разрежения $\delta = 10$).

В начальный момент времени труба заполнялась газом с параметрами невозмущенного потока. Далее проводился EDMD расчет до выхода макроскопических параметров на стационарные значения. Выход решения на стационар происходил за время порядка $50D/a$, где a — скорость звука в смеси при $T = T_0$. При этом массовый расход во всех поперечных сечениях расчетной области выравнивался, а суммарное касательное напряжение, действующее на трубу, становилось равно по модулю силе сопротивления тела R_x . После установления течения вычислялись стационарные поля основных макропараметров и потоки к твердым границам задачи, значения которых представлены ниже.

3.2. Результаты расчетов

Сначала был рассмотрен случай движения тела с нулевым смещением $y_0 = 0$ тела относительно оси трубы. В этом случае задача осесимметрична, но расчеты все равно проводились трехмерным кодом в расчетной области, описанной выше. Было исследовано обтекание тела трех относительных размеров $d/D = 0.2, 0.5, 0.8$ при скорости движения тела $M = 0.8$. Полученные коэффициенты сопротивления приведены в табл. 2.

До проведения расчетов у авторов настоящей статьи были опасения, что при заметных размерах тела по отношению к поперечному размеру трубы (например, $d/D = 0.8$) и высоких дозвуковых скоростях (например, $M = 0.8$) не будет существовать стационарного решения, а будет реализовываться нестационарное течение, напоминающее эффект заклинивания аэродинамической трубы. Однако проведенные расчеты показали, что стационарное решение существует, соответствующие ему стационарные поля плотности, скорости и давления для него представлены на фиг. 3. Значимым отличием рассматриваемой задачи от аэродинамической трубы является наличие движущихся стенок (в системе координат, связанной с телом, труба набегаает вместе с потоком) и вызванных ими касательных напряжений в газе (см. фиг. 4). Эти касательные напряжения работают наподобие насоса, плавно повышая давление перед телом в 5–6 раз (см. фиг. 3). На расстояниях же в 6–7 калибров трубы от тела вверх по потоку течение оказывается почти невозмущено.

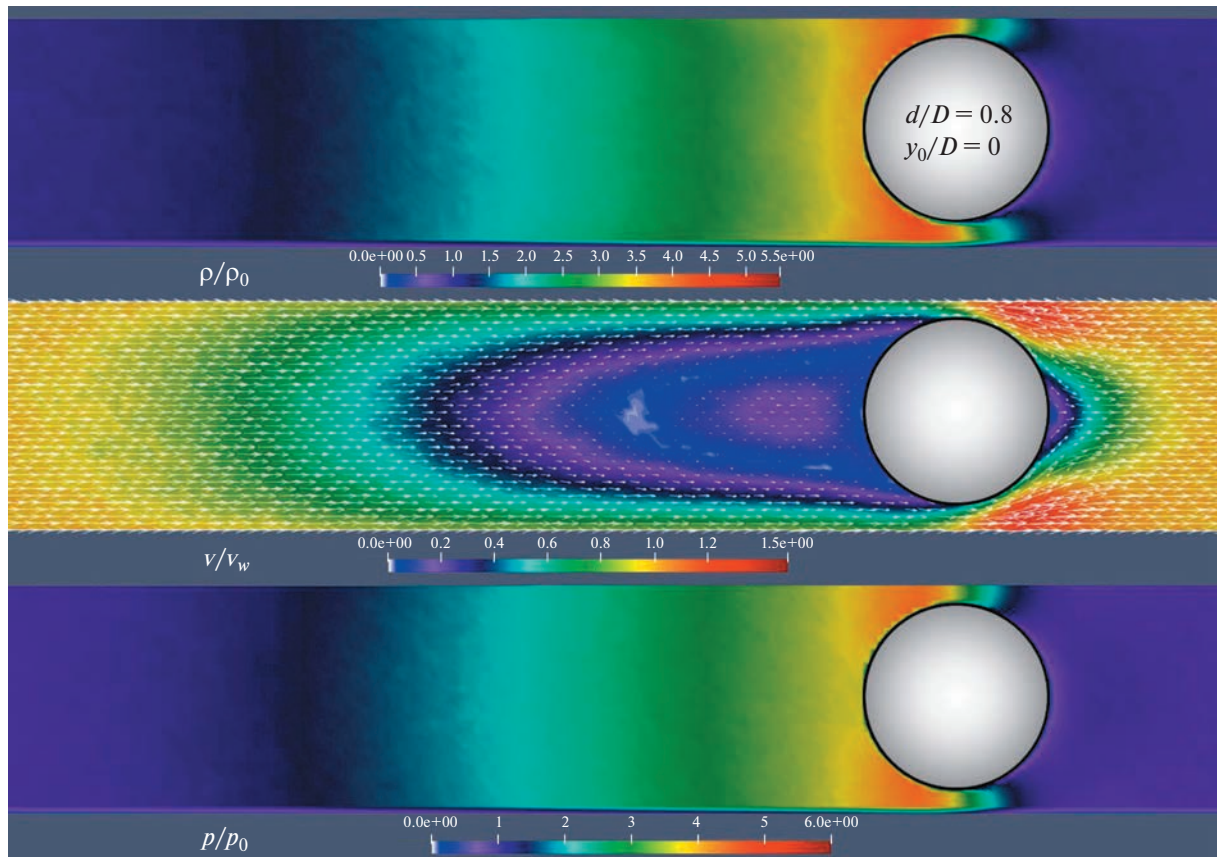
Далее были проведены расчеты для размера тела $d/D = 0.8$ и нескольких различных смещений $y_0/D = 0.01, 0.02, 0.05, 0.09$. В этом случае задача перестает быть осесимметричной и появляется подъемная сила R_y . Полученные коэффициенты сопротивления C_x и подъемной силы C_y представлены в табл. 3 и на фиг. 5 в зависимости от относительного смещения y_0/D . Подъемная сила направлена к оси трубы, т.е. центр поперечного сечения трубы является устойчивым положением равновесия (с точки зрения поперечной силы, действующей на тело со стороны газа, в реальности же есть еще сила тяжести). Характерные для несимметричного случая поля плотности, скорости и давления представлены на фиг. 6. Рассмотрим подробнее поля скорости, соответствующие симметричному и несимметричному случаю (см. фиг. 7). Видно, что перед телом возникает обратная струя, которая, взаимодействуя с набегающим потоком, образует кольцевую

Таблица 2. Коэффициенты сопротивления C_x при $M = 0.8$ для различных размеров тела

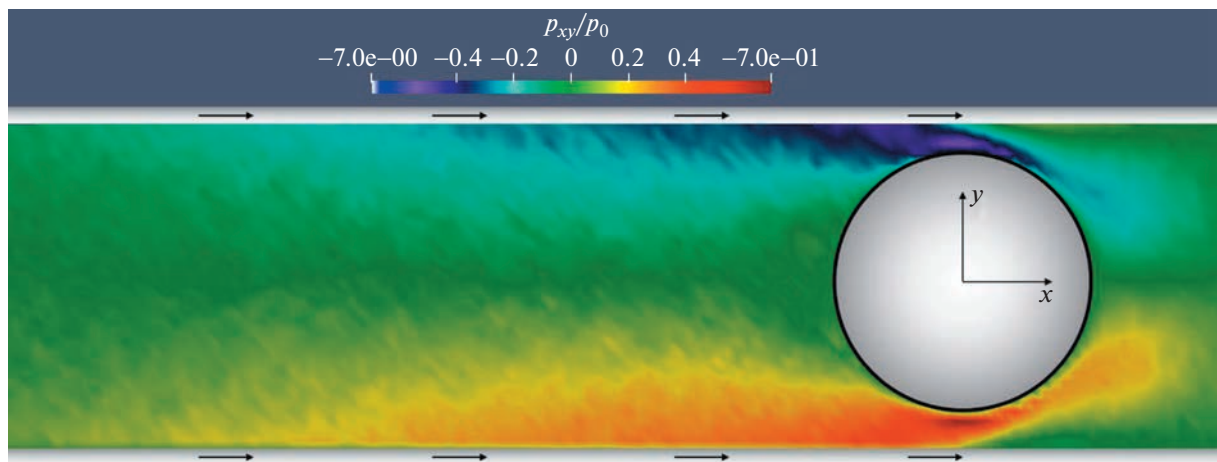
d/D	0.2	0.5	0.8
C_x	5.1	5.3	10.8

Таблица 3. Коэффициент сопротивления C_x и подъемной силы C_y при $d/D = 0.8$ и различных смещениях y_0/D тела относительно оси трубы

y_0/D	0	0.01	0.02	0.05	0.09
C_x	10.8	10.8	10.8	11.0	12.1
C_y	0	0.15	0.31	0.86	2.64

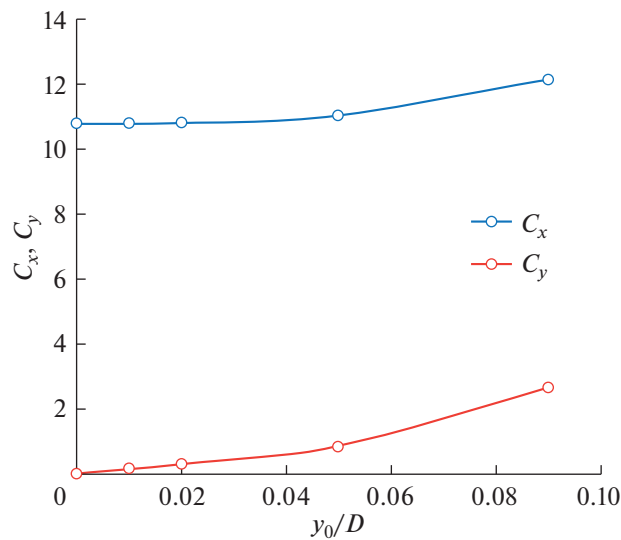


Фиг. 3. Поле плотности, скорости и давления при $d/D = 0.8$ и $y_0/D = 0$ (осесимметричный случай).

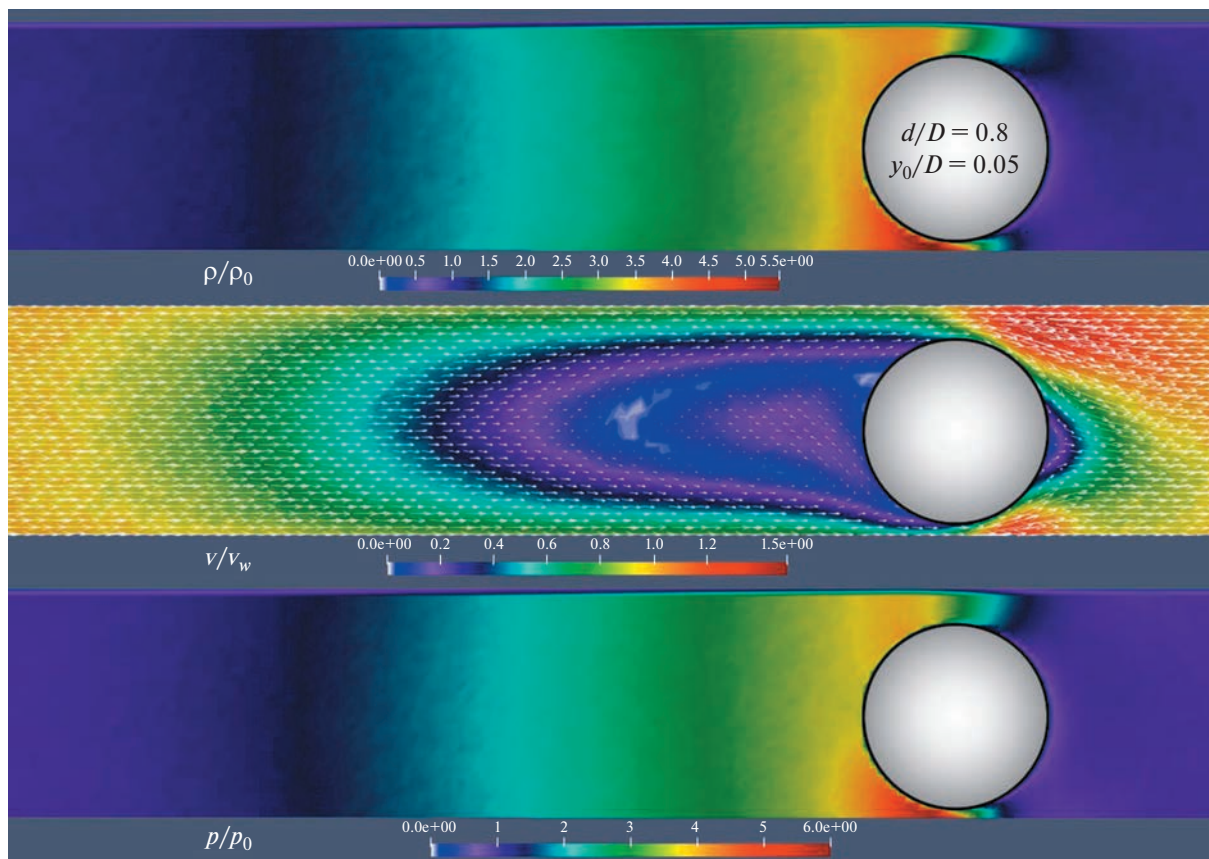


Фиг. 4. Поле касательных напряжений p_{xy} при $d/D = 0.8$ и $y_0/D = 0$ (осесимметричный случай).

струи, обтекающую тело. Еще одной интересной особенностью данного течения является наличие в потоке перед телом контура (на фиг. 7 нанесен штриховой линией), на котором модуль скорости практически нулевой. То есть, если бы этот контур был продолжением тела, то поле течения вне контура практически не изменилось. Более того, несложно получить из интегрального закона сохранения количества движения в стационарном случае, что и сопротивление такого те-

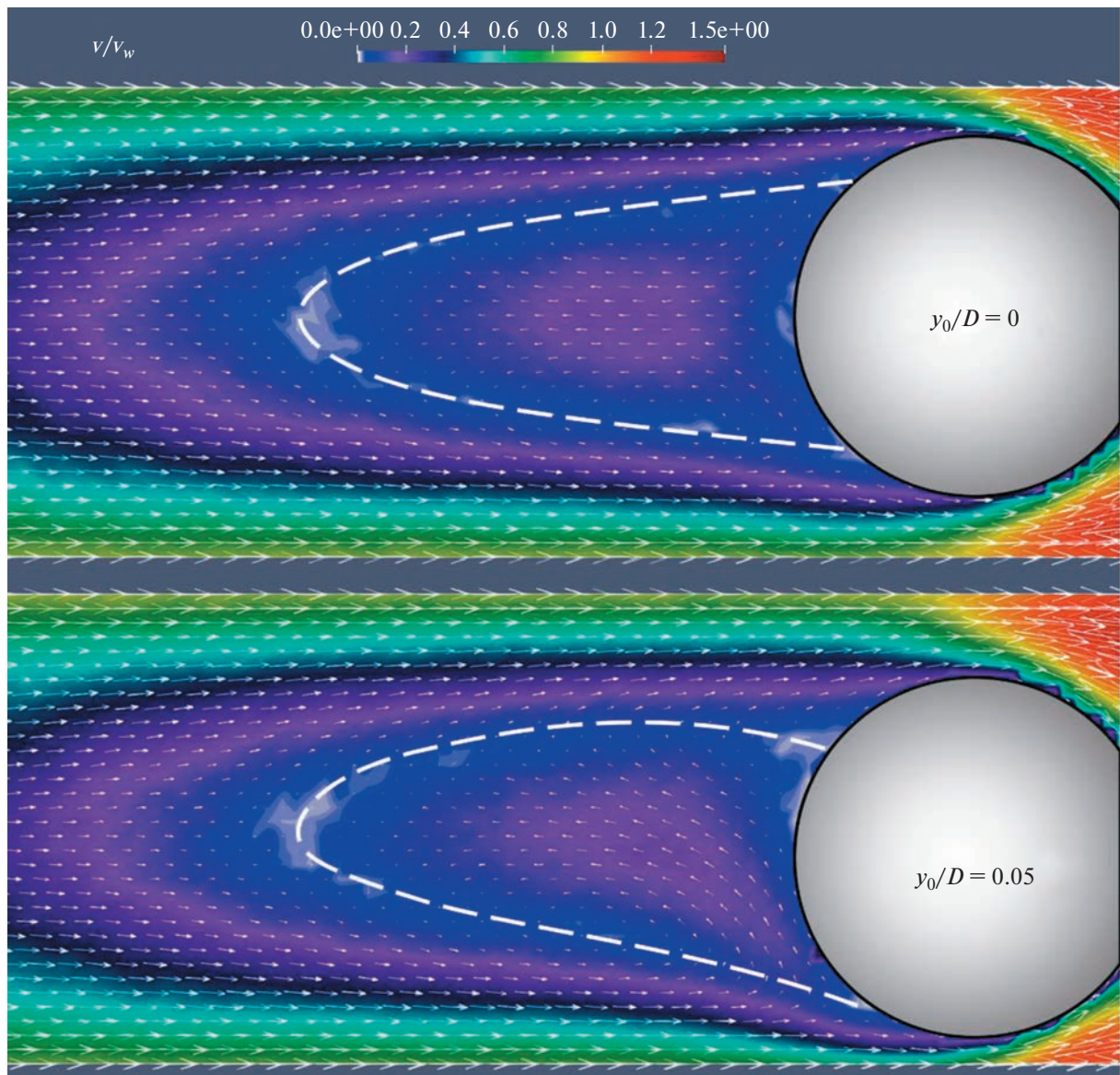


Фиг. 5. Коэффициент сопротивления и подъемной силы в зависимости от положения тела в сечении трубы.



Фиг. 6. Поле плотности, скорости и давления при $d/D = 0.8$ и $y_0/D = 0.05$.

ла равнялось бы сопротивлению тела исходной задачи. Таким образом, основываясь на результатах расчета данной задачи для сферического тела, можно построить более сложную форму тела, которая будет практически эквивалентна сфере с точки зрения аэродинамического сопротивления.



Фиг. 7. Поле скорости перед телом при $d/D = 0.8$ и двух различных смещений $y_0/D = 0$ и $y_0/D = 0.05$. Штриховой линией обозначен контур, на котором модуль скорости практически нулевой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD) исследовано течение разреженного газа, которое возникает в трубе при движении по ней тела с высокой дозвуковой скоростью. Рассмотрен случай, когда давление в трубе соответствует числам Кнудсена порядка 0.1 (параметр разрежения $\delta = 10$). Расчеты проводились в условиях, максимально приближенных к целевым параметрам концепций высокоскоростного вакуумного транспорта, которые известны из литературы.

- В качестве газа взят воздух (смесь азота и кислорода) с учетом вращательных степеней свободы в двухатомных молекулах.
- Скорость движения тела около 1000 км/ч, что соответствует числу Маха $M = 0.8$ в воздухе при температуре 300 К.
- Рассмотрены поперечные размеры тела вплоть до $d/D = 0.8$, т.е. перекрывающие 64% площади сечения трубы.

Получено, что даже для больших относительных поперечных размеров тела d/D существует стационарное решение. Характерными особенностями этого решения является (1) плавное нарастание давления перед телом за счет значительных касательных напряжений в газе, вызванных движущимися стенками трубы (в системе координат, связанной с телом, стенки трубы набегают вместе с потоком), (2) образование перед телом обратной струи, взаимодействующей с набегающим потоком, за счет чего перед телом образуется контур, на котором модуль скорости практически нулевой. В результате упомянутых касательных напряжений, которые работают наподобие компрессора, и увеличения давления перед телом (в 5–6 раз для $d/D = 0.8$), расчеты предсказывают высокие коэффициенты сопротивления: $C_x = 5.1, 5.3, 10.8$ для поперечных размеров тела $d/D = 0.2, 0.5, 0.8$ соответственно. В случае, если тело движется по прямой, смещенной относительно оси трубы, возникает подъемная сила, направленная к центру поперечного сечения трубы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вейнберг Б.П. Движение без трения. СПб.: Естествоиспытатель, 1914.
2. Musk E. Hyperloop Alpha Documents; SapceX: Hawthorne, CA, USA, 2013.
3. Hyperloop One Website, <https://hyperloop-one.com/>.
4. Hyperloop Transportation Technologies Website, <https://www.hyperlooptt.com/>.
5. Kim H., Oh S. Shape optimization of a hyperloop pod's head and tail using a multi-resolution morphing method // Int. J. Mech. Sci. 2022. V. 223. P. 107227.
6. Sui Y. et al. An aerothermal study of influence of blockage ratio on a supersonic tube train system // J. Therm. Sci. 2020. V. 1–12.
7. Chen X. et al. Aerodynamic simulation of evacuated tube maglev trains with different streamlined designs, J. Modern Transp. 2012. V. 20. № 2. P. 115–120.
8. Zhou P., Zhang J., Li T. Effects of blocking ratio and Mach number on aerodynamic characteristics of the evacuated tube train // Int. J. Rail Transport. 2020. V. 8. № 1. P. 27–44.
9. Oh J.-S. et al. Numerical Analysis of Aerodynamic Characteristics of Hyperloop System // Energies .2019. V. 12. № 3. P. 518.
10. Sui Y., Niu J., Ricco P., Yuan Y., Yu Q., Cao X., Yang X. Impact of vacuum degree on the aerodynamics of a high-speed train capsule running in a tube // Int. J. Heat Fluid Flow. 2022. V. 88. P. 108752.
11. Lluesma-Rodríguez F., González T., Hoyas S. CFD simulation of a hyperloop capsule inside a closed environment // Results Engng. 2021. V. 9. P. 100196.
12. Le T.T.G. et al. Numerical investigation of aerodynamic drag and pressure waves in hyperloop systems // Mathematics. 2020. V. 8. № 11.
13. Deng Z., Zhang W., Zheng J., Wang B., Ren Y., Zheng X., Zhang J. A high-temperature superconducting maglev-evacuated tube transport (HTS Maglev-ETT) test system // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2017. V. 27. № 6. P. 1–8.
14. Hruschka R., Klatt D. In-pipe aerodynamic characteristics of a projectile in comparison with free flight for transonic Mach numbers, Shock Waves. 2019. V. 29. № 2. P. 297–306.
15. Seo Y., Cho M., Kim D.H., Lee T., Ryu J., Lee C. Experimental analysis of aerodynamic characteristics in the Hyperloop system, Aerosp. Sci. Technol., 2023. V. 137. P. 108265.
16. Donev A., Garcia A.L., Alder B.J. Stochastic Event-Driven Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 2008. V. 227. P. 2644–2665.
17. Valentini P., Schwartzentruber T.E. A combined Event-Driven/Time-Driven molecular dynamics algorithm for the simulation of shock waves in rarefied gases // J. Comput. Phys. 2009. V. 228. P. 8766–8778.
18. Bannerman M.N., Sargant R., Lue L., Dynam O. A free O(N) general event-driven molecular-dynamics simulator // J. Comput. Chem. 2011. V. 32. P. 3329–3338.
19. Akkaya V.R., Kandemir I. Event-driven molecular dynamics simulation of hard-sphere gas flows in microchannels // Math. Probl. Eng. 2015. № 2015.
20. Yakunchikov A., Kosyanchuk V. Application of event-driven molecular dynamics approach to rarefied gas dynamics problems // Comput. Fluids. 2018. V. 170. P. 121–127.
21. Yakunchikov A., Kosyanchuk V. Numerical investigation of gas separation in the system of filaments with different temperatures // Int. J. Heat Mass Transf. V. 138. P. 144–151.
22. Yakunchikov A., Kosyanchuk V. A new principle of separation of gas mixtures in non-stationary transitional flows // Acta Astronaut. 2019.
23. Artem Yakunchikov. The outflow of gas mixture into vacuum, periodically interrupted by bodies moving towards the jet // Vacuum Volume 209, March 2023, 111778.

24. *Yakunchikov Artem*. Heat transfer in a rarefied gas between profiled surfaces moving relative to each other // International Journal of Heat and Mass Transfer Volume 184, March 2022. V. 122339.
25. *Yakunchikov A., Kosyanchuk V., Iuldasheva A.* Rotational relaxation model for nitrogen and its application in free jet expansion problem, *Phys. Fluids*. 2020. V. 32. P. 102006.
26. *Marrone P.V.* Temperature and Density Measurements in Free Jets and Shock Waves // *Phys. Fluids*. 1967. V. 10. P. 521.
27. *Mori H., Niimi T., Akiyama I., Tsuzuki T.* Experimental detection of rotational non-Boltzmann distribution in supersonic free molecular nitrogen flows // *Phys. Fluids*. 2005. V. 17. P. 117103.
28. *Valentini P., Zhang C. and Schwartzentruber T.E.* Molecular dynamics simulation of rotational relaxation in nitrogen: Implications for rotational collision number models // *Phys. Fluids*. 2012. V. 24. P. 106101.
29. *Tokumasu T. and Matsumoto Y.* Dynamic molecular collision (DMC) model for rarefied gas flow simulations by the DSMC method // *Phys. Fluids*. 1999. V. 11. P. 1907–20.
30. Реализация микроскопической модели столкновений для воздуха, <https://multiscale.ru/science/collisionmodel>.
31. *Miller S., Luding S.* Event-driven molecular dynamics in parallel // *J Comput Phys* 2004. V. 193. P. 306–16.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.635

Посвящается профессору Евгению Михайловичу Шахову в связи с его 90-летием

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РАСЧЕТА НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕПЛООБМЕНА ГАЗОВОГО ПОТОКА И ТВЕРДОГО ТЕЛА

© 2023 г. В. Т. Жуков^{1,*}, Н. Д. Новикова^{1,**}, О. Б. Феодоритова^{1,***}

¹ 125047 Москва, Миусская пл., 4, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Россия

*e-mail: vic.zhukov@mail.ru,

**e-mail: nn@kiam.ru,

***e-mail: feodor@kiam.ru

Поступила в редакцию 05.04.2023 г.
Переработанный вариант 03.07.2023 г.
Принята к публикации 22.08.2023 г.

Представлен метод расчета нестационарного теплового взаимодействия вязкого газового потока и твердого тела. Метод состоит в выполнении прямого совместного интегрирования по времени уравнений газодинамики многокомпонентной смеси и уравнения теплопроводности в твердом теле на многоблочных неструктурированных сетках. Для расчета одного временного шага используется расщепление системы определяющих уравнений на гиперболическую и параболическую подсистемы. Численный метод обеспечивает аппроксимацию условия сопряжения (непрерывность температуры и нормальной к границе компоненты вектора теплового потока) на интерфейсной границе между газом и твердым телом и эффективен для нестационарных расчетов. Результаты сравнения с аналитическим решением модельной задачи о взаимодействии высокоскоростного потока и нагреваемой пластины подтверждают эффективность предложенного метода. Библ. 23. Фиг. 4.

Ключевые слова: численное моделирование, уравнения Навье–Стокса, теплопроводность, сопряженный теплообмен, газовая смесь, твердое тело.

DOI: 10.31857/S0044466923120335, **EDN:** RIMZUD

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе рассматривается модель нестационарного взаимодействия вязкого теплопроводного многокомпонентного газового потока с твердым телом. В качестве твердого тела могут выступать элементы летательного аппарата (ЛА), двигательной установки и другие конструкции. Численный анализ теплообмена газового потока и обтекаемых конструкций является важным инструментом проектирования систем тепловой защиты аэрокосмических аппаратов [1, 2]. Известно, что процессы обтекания и нагрева являются в той или иной степени взаимосвязанными: твердая поверхность подвергается аэродинамическому нагреву, а нагретая твердая поверхность возвращает часть тепла в аэродинамический поток, и так далее. В математической модели теплообмена возникает новый объект — интерфейсная граница контакта “газ–твердое тело”, на которой задаются условия непрерывности температуры и нормальной к границе компоненты вектора теплового потока. Эта задача известна как задача сопряженного теплообмена, Conjugate Heat Transfer (СНТ) [3–8]. Распространенный подход к ее решению состоит в использовании двух компьютерных кодов: газодинамического и твердотельного теплового. Первый код обычно основан на уравнениях Навье–Стокса, второй служит для интегрирования нестационарного параболического уравнения, описывающего теплопроводность в твердом теле. Эти коды периодически обмениваются данными с целью достижения условий сопряжения на интерфейсной границе, см. [5, 8]. В таких алгоритмах есть опасность проявления численной неустойчивости [9, 10]. В пакете ЛОГОС [11] реализован иной подход. Он основан на неявной дискретизации уравнения теплопроводности с решением единой системы линейных уравнений для жидкости и твердых тел относительно температуры. Другие стратегии расчета приведены в [5].

Развиваемая нами новая методика основана на стратегии прямого интегрирования по времени определяющих уравнений на многоблочных неструктурированных конформных сетках без итерирования условий сопряжения и итераций по областям. В отличие от [11] единая дискретизация уравнения теплопроводности не строится, а используются парциальные дискретизации в областях. Последующая обработка интерфейсов обеспечивает эквивалентность предложенного многоблочного алгоритма и прямого подхода, основанного на интегрировании единой консервативной дискретизации уравнения теплопроводности. Следствием эквивалентности является аппроксимация условий сопряжения.

Заметим, что в вычислительной аэродинамике технология многоблочных сеток является эффективной для описания течений со сложной топологией, а в задачах сопряженного теплообмена с многосвязными телами сложной геометрической формы, по нашему мнению, практически необходимой.

Общая постановка задачи включает расширенную систему уравнений Навье—Стокса с добавлением уравнений для учета диффузии химических компонентов в газовой области, что продиктовано необходимостью учета сложных явлений, возникающих в пограничных слоях при высокоскоростном обтекании. В дополнение к выработке тепла через сжатие и трение, а также к переносу тепла теплопроводностью и конвекцией, в ряде приложений необходимо также учитывать перенос тепла молекулярной диффузией. Взаимодействие между конвекцией, теплопроводностью и диффузией осложняется наличием взаимно обратных эффектов: возникновение градиента концентрации из-за изменения температуры (термодиффузия) и появление градиента температуры вследствие изменения поля концентрации (диффузионная теплопроводность). В перспективе будут учтены и химические реакции, приводящие в задачах гиперзвукового обтекания к необходимости учета многокомпонентности газовой смеси, образующейся в результате химических превращений. Для интегрирования по времени определяющих уравнений нами используется явно-итерационная чебышёвская схема LINS (Local Iterations for Navier—Stokes) [12, 13], созданная для решения уравнений Навье—Стокса. Возможности схемы LINS расширены для учета диффузии компонентов и совместного интегрирования уравнения энергии в газе и твердом теле. Теоретическое обоснование чебышёвской схемы для линейного параболического уравнения дано в [14].

Схема LINS является альтернативой традиционным явной и неявной схемам, она не имеет обременительного ограничения на шаг по времени и в отличие от неявной схемы исключает необходимость решения системы линейных уравнений. Предложенная нами схема является консервативной, что важно для нестационарных исследований. В приложении к задаче сопряженного теплообмена схема LINS в силу прямого интегрирования уравнений по времени и консервативной дискретизации автоматически обеспечивает аппроксимацию условий сопряжения. Простая алгоритмическая структура схемы идеально подходит для массивно-параллельных вычислений.

Предложенный нами подход иллюстрируется на примере численного анализа газодинамических и тепловых процессов, возникающих в нестационарной сингулярной задаче сопряженного теплообмена [4, 5]. В этой задаче моделируется высокоскоростное ламинарное течение газа над нагреваемой пластиной. Аналитическое решение указанной задачи получено в [4] с помощью преобразования [15], позволяющего отделить уравнение энергии в газе от уравнений непрерывности и импульса. Сингулярность в аналитическом решении возникает в начальный момент времени. Аналитическое решение и численное моделирование демонстрируют хорошее согласие результатов нестационарного процесса сопряженного теплообмена, за исключением малого интервала времени, в течение которого сказывается влияние сингулярности.

2. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ТЕЧЕНИЯ СМЕСИ

Основной математической модели является система уравнений Навье—Стокса, записанная для смеси идеальных газов с учетом теплопроводности и диффузии химических компонентов. Уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии имеют соответственно вид, см. [12, 16, 17]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, & \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p)\mathbf{u}) &= \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{J}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь t — время, $\mathbf{u}$ — вектор скорости с компонентами u_1, u_2, u_3 , ρ — плотность смеси, $E = \rho(e + 0.5u^2)$ — полная энергия единицы объема, e — удельная внутренняя энергия (единицы массы), p — давление смеси, $\boldsymbol{\tau}$ — тензор вязких напряжений, $\mathbf{q}$ и $\mathbf{J}$ — векторы плотности теплового и диффузионного потоков соответственно.

Тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и вектор плотности теплового потока $\mathbf{q}$ имеют вид

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^T - \frac{2}{3} I \nabla \cdot \mathbf{u} \right), \quad \mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad (2)$$

здесь $\mu = \mu(T)$ и $\kappa = \kappa(T)$ — коэффициенты молекулярной вязкости и теплопроводности смеси газов соответственно, I — единичная 3×3 — матрица.

В широком смысле термин диффузионный перенос охватывает вязкость, теплопроводность, молекулярную диффузию, термодиффузию и перенос излучения. Два последних явления мы в данной работе не рассматриваем, ограничиваясь молекулярной (концентрационной) диффузией: каждый компонент, т.е. химически однородное вещество смеси, движется в направлении меньшей концентрации. Для смеси из $N_{sp} > 1$ компонентов с массовыми долями Y_m , $m = 1, \dots, N_{sp}$, уравнения переноса компонентов имеют вид

$$\frac{\partial(\rho Y_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_m. \quad (3)$$

В правой части каждого из уравнений (3), вообще говоря, может стоять источник — массовая скорость образования компонента m в химических реакциях (он опущен для упрощения изложения).

В уравнениях (3) вектор плотности диффузионного потока $\mathbf{J}_m$ компонента m определяется из закона Фика [16]: $\mathbf{J}_m = -\rho D_m \nabla Y_m$, где D_m — коэффициент диффузии компонента. Входящий в правую часть уравнения энергии вектор $\mathbf{J} = \sum h_m \mathbf{J}_m$ обусловлен диффузией компонентов смеси, здесь h_m — энтальпийные функции компонентов, см. [16]. Здесь и ниже суммирование ведется по индексу $m = 1, \dots, N_{sp}$.

Для смеси газов коэффициенты переноса (вязкости, теплопроводности, диффузии) в общем случае есть непрерывные функции температуры и концентрации. Они вычисляются по некоторым комбинаторным формулам [12]. В данной работе мы полагаем, что они являются скалярными функциями, но могут быть и тензорами.

Перед изложением алгоритма расчета сопряженного теплообмена дадим описание численной модели течения газовой смеси, т.е. основных этапов решения определяющей системы уравнений (1)–(3). Введем вектор консервативных переменных как $U \equiv \rho(1, u_1, u_2, u_3, e_{tot}, Y_m, m = 1, \dots, N_{sp})$, где $e_{tot} = e + 0.5u^2$ — полная энергия единицы массы. Запишем дифференциально-разностную схему, т.е. непрерывную по времени и дискретную по пространству аппроксимацию системы уравнений (1)–(3), на неструктурированной сетке в виде

$$U_t + C_h U + L_h U = 0, \quad (4)$$

где C_h, L_h — соответственно конвективный и диффузионный дискретные операторы, а нижний индекс h — параметр, характеризующий сеточную дискретизацию. В операторе L_h учитываются все диссипативные процессы, т.е. вязкость, теплопроводность и диффузия компонентов. Дискретизация проводится на сетке, состоящей из ячеек в виде многогранников. На такой сетке записывается конечно-объемная схема с определением консервативных переменных в узлах сетки. Ячейки интегрирования представляют собой дуальные объемы, ассоциированные с узлами геометрической сетки. Такая дискретизация называется часто узловой или вершинно-центрированной.

Для системы (4) можно записать двухслойную по времени явную схему с шагом τ : $(U_{j+1} - U_j)/\tau + C_h U_j + L_h U_j = 0$. Здесь U_j, U_{j+1} — сеточные функции на нижнем и верхнем слоях по времени соответственно. Операторы C_h, L_h в этой схеме зависят от решения U_j на нижнем слое по времени. Для устойчивости явная схема требует ограничения $\tau \leq (\tau_{conv}^{-1} + \tau_{dif}^{-1})^{-1}$, где τ_{conv}, τ_{dif} — шаги по времени, диктуемые соответственно гиперболическим (конвективным) и параболическим (диффузионным) ограничениями [18].

Для интегрирования по времени уравнения (4) нами предложена явно-итерационная чебышёвская схема LINS [12], первоначально созданная для решения уравнений Навье—Стокса [13]. Введение уравнений конвекции-диффузии компонентов принципиальных трудностей для схемы LINS не представляет. Эта схема обеспечивает автоматическую аппроксимацию условий теплообмена и эффективную реализацию расчета в многообластном случае, когда разностная дискретизация становится в целом нестандартной (так как шаблон дискретизации интерфейсного узла лежит в нескольких смежных областях). Гиперболический этап использует конвективный шаг $\tau = \tau_{\text{conv}}$, а параболический этап интегрируется с этим же временным шагом даже при доминировании диффузии над конвекцией. Если диффузия (включающая вязкость, диффузию компонентов и теплопроводность) не доминирует над конвекцией, то схема LINS переходит в традиционную явную схему. В дальнейшем мы планируем ввести для гиперболического этапа неявную схему по времени, при этом общая технология многоблочного расчета не изменится.

Методика интегрирования каждого шага по времени реализована на основе расщепления на два этапа. На этапе 1 полагаем $L_h \equiv 0$ и находим решение разностного гиперболического уравнения по явной схеме. Для выполнения этого этапа применяется метод Годунова с расчетом потоков на основе точного решения задачи Римана для многокомпонентной смеси [19]. На этапе 2 полагаем $C_h \equiv 0$ и формулируем разностную параболическую задачу для уравнения вида $U_t + L_h U = 0$ с новыми начальными данными. На этом этапе мы используем схему LINS. Этап 2 разбит на два подэтапа. Сначала выполняются совместно вязкий и диффузионный расчеты с помощью применения схемы LINS к редуцированным (без учета конвективных потоков) уравнениям импульса и многокомпонентного переноса. По завершении первого подэтапа определяются источниковые члены $\nabla \cdot (\tau \cdot \mathbf{u})$, $\nabla \cdot \mathbf{J}$, входящие в правую часть уравнения энергии. На втором подэтапе решается редуцированное уравнение энергии сквозным образом по всем теплопроводным областям, как газовым, так и твердотельным.

Конструкция схемы LINS диктуется исключительно требованием аппроксимации и устойчивости, что принципиально отличает эту схему от чебышёвского ускорения сходимости итерационных процессов, применяемых для решения эллиптических уравнений или для решения неявных схем для параболических уравнений, см. [14]. Для построения нужного многочлена Чебышёва $F_p(L_h)$ степени p необходимо задать верхнюю границу $\lambda_{\max}$ спектра сеточного оператора L_h . Эта граница находится по теореме Гершгорина о кругах спектра [20], т.е. на основе расчета сумм модулей шаблонных коэффициентов, отвечающих оператору L_h . Зависимость $\lambda_{\max}$ от h известна: $\lambda_{\max} \sim h^{-2}$ [21].

Многочлен $F_p(\lambda)$ строится на отрезке $[0; \lambda_{\max}]$, исходя из условий устойчивости и аппроксимации точного оператора послойного перехода $\exp(-\tau\lambda)$. В частности, выполнено $F_p(0) = 1$, $|F_p(\lambda)| \leq 1$. С помощью многочлена F_p строится оператор послойного перехода S схемы LINS как рациональная функция оператора L_h , см. [14]:

$$S(L_h) = (I - F_p^2(L_h))(I + \tau L_h)^{-1}.$$

Оператор S переводит решение U_j с нижнего слоя по времени на следующий слой и реализуется циклом, состоящим из $q = 2p - 1$ элементарных шагов. Каждый из них по трудоемкости эквивалентен одному шагу явной схемы. Множитель $(I + \tau L_h)^{-1}$ в операторе S есть оператор послойного перехода чисто неявной схемы. На спектре оператора L_h выполнено важное неравенство $0 \leq S(\lambda) \leq (1 + \tau\lambda)^{-1}$, что следует из свойств многочлена F_p .

В [14] приведено строгое изложение конструкции чебышёвского многочлена F_p . Важно, что степень многочлена определяется без участия эмпирических параметров формулой $p = \arg \min \left[\text{ctg}^2(0.25\pi/p) - \tau \cdot \lambda_{\max} \right]$, $p \in \mathbb{Z}^+$. Этой точной формулой следует пользоваться для акуратного перехода схемы LINS в явную схему при $\tau\lambda_{\max} \sim 1$. Вводя обозначение $\lceil x \rceil = \min \{n \in \mathbb{Z} : n \geq x\}$, можно записать удобную для практического использования приближенную формулу

$$p = \left\lceil 0.25\pi\sqrt{\tau\lambda_{\max} + 1} \right\rceil. \quad (5)$$

Запишем алгоритм схемы LINS для дифференциально-разностной линейной схемы $U_t + L_h U = f$ с самосопряженным неотрицательно-определенным оператором L_h . Предполагаем, что этот оператор действует в пространстве сеточных функций с однородными краевыми условиями Дирихле или Неймана, а неоднородности учтены в правой части. Схема LINS является двухслойной; алгоритм перехода от сеточной функции U_j к функции U_{j+1} на верхнем слое по времени $t_{j+1} = t_j + \tau$ представляет собой цикл по m , состоящий из $q = 2p - 1$ шагов, каждый из которых имеет вид

$$y^m = \frac{1}{1 + \tau \cdot b_m} \{U_j + \tau b_m y^{m-1} + \tau (-L_h y^{m-1} + f)\}. \quad (6)$$

Здесь начальные данные есть $y^0 = U_j$, а результат через q шагов есть $U_{j+1} = y^q$. Параметры в (6) определены формулами

$$\begin{aligned} \{b_1, \dots, b_q\} &= \{a_1, \dots, a_p, a_2, \dots, a_p\}, \\ a_m &= \lambda_{\max} \cdot (z_1 - \beta_m) / (1 + z_1), \quad z_1 = \cos(0.5\pi/p), \\ \beta_m &\in K_p = \{\cos((i - 0.5)\pi/p), \quad i = 1, 2, \dots, p\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Сеточная функция f включает правую часть и неоднородные составляющие краевых условий. Эта функция может определяться данными с нижнего слоя, либо, например, так $f = f_j$, $m = 1$, $f = 0.5(f_j + f_{j+1})$, $m > 1$.

Параметры $\{a_m, m = 1, \dots, p\}$ в формулах (7) выражаются через нули β_m многочлена Чебышёва T_p рода T_p на стандартном отрезке $-1 < z < 1$, в который отображается отрезок $\lambda_0 < \lambda < \lambda_{\max}$ при линейной замене переменных $z = z_1 - (z_1 + 1)\lambda/\lambda_{\max}$, где $\lambda_0 = \lambda_{\max} \cdot (z_1 - 1)/(z_1 + 1) \in [-1/\tau; 0]$. Нули многочлена $T_p(z)$ упорядочены для устойчивости [21].

Многочлен $F_p(\lambda)$ получается из многочлена $T_p(z)$ следующим образом:

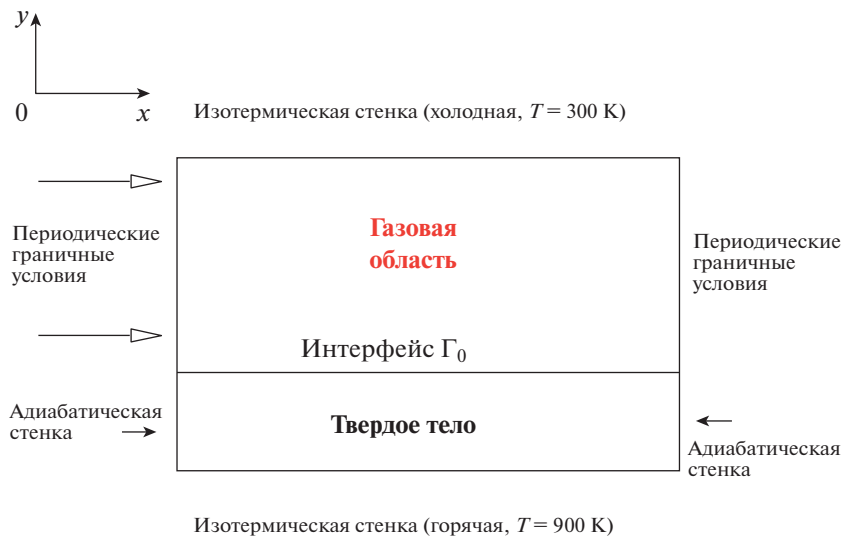
$$\begin{aligned} F_p(\lambda) &= H_p(\lambda)/H_p(-1/\tau), \\ H_p(\lambda) &= (a_1 - \lambda) \cdot (a_2 - \lambda) \cdot \dots \cdot (a_p - \lambda) \equiv T_p(z_1 - (z_1 + 1)\lambda/\lambda_{\max}). \end{aligned}$$

Заметим, что для явной схемы $(U_{j+1} - U_j)/\tau + L_h U_j = 0$ шаг τ ограничен условием устойчивости $\tau \leq 2/\lambda_{\max}$, т.е. $\tau \sim O(h^2)$. Для схемы LINS такого рода ограничения нет, но из аппроксимационных соображений следует брать шаг интегрирования τ не слишком большим. Мы выбираем $\tau = \tau_{\text{conv}} \sim O(h)$ из условия устойчивости конвективного, т.е. гиперболического этапа. При таком выборе τ применение LINS на каждом временном шаге эквивалентно числу явных шагов $q = 2p - 1$, асимптотически равному $O(h^{-1/2})$, так как в (5) $\lambda_{\max} \sim h^{-2}$. Можно сделать вывод, что по сравнению с явной схемой эффективный (в терминах вычислительных затрат) размер временного шага схемы LINS составляет $O(h^{3/2})$. Подчеркнем, что формально величина шага τ может быть произвольной, так как схема сохраняет устойчивость при любом значении $\tau > 0$ за счет выполнения цикла (7).

Заметим, что в практических расчетах по неявным схемам, разрешаемым методами подпространств Крылова, превышение гиперболического числа Куранта обычно не является слишком большим, особенно при расчетах переходных режимов. Конечно, в расчетах на установление, т.е. при отыскании стационарного состояния, особенно на заключительной стадии, шаг по времени может быть большим. Но в нестационарных задачах теплового нагрева аэродинамических поверхностей многокомпонентным газом интегрирование с шагом $\tau \sim \text{const} \cdot h$ является физически корректным.

3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ СОПРЯЖЕННОГО ТЕПЛООБМЕНА

Для изложения методики ограничимся рассмотрением течения сплошной среды в простейшей области, представленной на фиг. 1. В плоскости Oxy эта область является прямоугольником.



Фиг. 1. Область расчета.

Нижняя граница газовой области (интерфейс Γ_0 на фиг. 1) является обтекаемой поверхностью твердого тела, а верхняя граница — твердая изотермическая стенка. Горизонтальный размер обтекаемой пластины согласован с размером газовой области. В твердом теле записывается уравнение теплопроводности для температуры вместе с калорическим уравнением состояния:

$$\partial \varepsilon / \partial t = \operatorname{div}(\kappa(T) \operatorname{grad} T) + f, \quad \varepsilon = \varepsilon(T). \quad (8)$$

В простейшем случае $\varepsilon = c \cdot T$. Здесь теплопроводность $\kappa(T)$, теплоемкость c и источник тепла f являются функциями координат и температуры. Полагаем, что известны прямая и обратная зависимости внутренней энергии и температуры: $\varepsilon = \varepsilon(T)$, $T = T(\varepsilon)$.

На интерфейсной границе “твердое тело—газ” ставятся условия теплообмена в виде непрерывности температуры и теплового потока (идеальный контакт):

$$[T] = 0, \quad [\kappa \partial T / \partial n] = 0, \quad (x, y, z) \in \Gamma_0, \quad (9)$$

где через $[]$ обозначен скачок функции при переходе границы контакта, а производная вычисляется по нормали, внешней по отношению к газовой области. В случае анизотропной среды с тензорным коэффициентом теплопроводности условие непрерывности теплового потока имеет более сложный вид, см. [18].

Пластина обтекается ламинарным потоком, мгновенно ускоренным в начальный момент времени из состояния покоя до постоянной скорости с числом Маха $M_\infty = 3$. Детальные данные задачи приведены в разд. 5.

Как сказано в разд. 2, расчетная схема строится на основе расщепления определяющей системы уравнений на гиперболический и параболический этапы. На параболическом этапе сначала решаются уравнения импульса и многокомпонентной диффузии, т.е. происходит учет вязкости и диффузии в газе, а затем решается уравнение для внутренней энергии с учетом всех уже полученных результатов. Данное уравнение записывается в виде уравнения (8) и является единым для газовой среды и твердого тела.

4. МНОГООБЛОЧНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ

На примере сформулированной в разд. 3 задачи изложим алгоритм решения задачи сопряженного теплообмена. В нашей расчетной схеме уравнение теплопроводности (8) интегрируется по времени “сквозным”, “прямым” образом с автоматической аппроксимацией условий теплообмена (9). Точнее, мы строим схему, которая алгебраически эквивалентна алгоритму вида (6), записанному для уравнения теплопроводности (8). По форме эта схема является многообластной: каждый шаг цикла (7) производится по всем узлам многоблочной сетки с дальнейшей кор-

ректировкой сеточных значений внутренней энергии и температуры на интерфейсах. Но отдельная аппроксимация условий (9) не делается, она достигается автоматически. Точнее, условия сопряжения аппроксимируются на дискретном уровне в случае консервативной аппроксимации уравнения теплопроводности при следующих требованиях. Во-первых, сетка является согласованной с поверхностью контакта: в каждой из смежных областей может быть построена своя неструктурированная сетка, но на интерфейсе сетки состыкованы “узел в узел”. Во-вторых, сеточные функции определены в узлах сетки, а тепловые потоки вычисляются на гранях дуальных объемов.

Напомним, что для газовой области основными сеточными переменными являются полная энергия единицы объема $E = \rho(e + 0.5 u^2)$, где $e = e(T)$ — внутренняя энергия единицы массы газа, плотность ρ , компоненты вектора скорости среды u_1, u_2, u_3 . Нам удобно работать с внутренней энергией единицы объема $\varepsilon = \rho \cdot e$. Для этой функции записано уравнение теплопроводности (8), обеспечивающее аппроксимацию условий сопряжения. Именно это уравнение положено в основу сквозного расчета температуры в газовой среде и твердом теле. Заметим, что для идеального газа $e(T) = c_V \cdot T$, где $c_V = c_V(T)$ — теплоемкость газа при постоянном объеме, и, следовательно, $\varepsilon(\rho, T) = \rho e = \rho c_V \cdot T$. Теплоемкость идеального газа не зависит от температуры. Для реальных газов теплоемкость зависит, вообще говоря, также и от самой температуры. Но алгоритм схемы LINS (7) обоснован для линейного случая. В случае нелинейного калорического уравнения состояния мы проводим линеаризацию внутренней энергии $\varepsilon(T) \approx \varepsilon(T_d) + \varepsilon_T(T_d) \cdot (T - T_d) = B + A \cdot T$ при температуре T_d , взятой с нижнего слоя по времени, с коэффициентами $A = \varepsilon_T(T_d)$, $B = \varepsilon(T_d) - A \cdot T_d$. Здесь $\varepsilon_T = \partial \varepsilon / \partial T$.

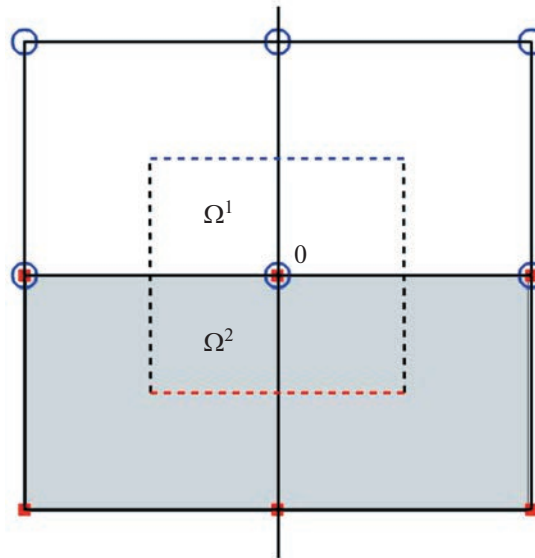
В алгоритме (6) под оператором D_h , в соответствии с разделением параболического этапа на две подзадачи, понимаются следующие операторы. В первой подзадаче — это оператор, отвечающий редуцированным уравнениям импульса и многокомпонентной диффузии. Он действует в пространстве сеточных вектор-функций вида $u_1, u_2, u_3, Y_m, m = 1, \dots, N_{sp}$. Во второй подзадаче этот оператор отвечает единому уравнению теплопроводности (8) для газовой и твердотельной областей. Он действует в пространстве сеточных функций, описывающих распределение температуры.

Запишем сначала для упрощения объяснения традиционную явную схему для уравнения теплопроводности (8) с помощью метода контрольных объемов в двумерном случае и в предположении, что в газовой области и твердом теле введена единая прямоугольная сетка. Полагаем, что сеточные функции T и ε заданы в узлах ячеек, а сетка согласована с линиями разрыва теплофизических свойств, т.е. коэффициентов c, κ, f уравнения (8). Пусть на плоскости Oxy линией разрыва коэффициентов (интерфейсом “газ–твердое тело”) является линия $y = 0$, см. фиг. 2, а вне линии разрыва коэффициенты и решение являются достаточно гладкими. Рассмотрим дуальную ячейку, ассоциированную с узлом сетки с номером 0, лежащим на интерфейсе. Она показана на фиг. 2 штриховой линией и состоит из двух половин — верхней части 1, лежащей в газе, и нижней части 2, лежащей в твердом теле (затененная область). Обозначим эти части через Ω^1 и Ω^2 . Объем дуальной ячейки является суммой парциальных объемов: $\Omega = \Omega^1 + \Omega^2$. Интегрируя уравнение (8) по дуальному объему, связанному с узлом с номером 0, получаем в этом узле схему:

$$\Omega \frac{\varepsilon_0^{n+1} - \varepsilon_0^n}{\Delta t} = \Delta(T^n) + f_0, \quad (10)$$

где $\Delta(T^n)$ — поток тепла через границу этой ячейки, T^n — температура, полученная на предыдущем шаге по времени обращением уравнения состояния, $\varepsilon_0^{n+1}, \varepsilon_0^n$ — новые и старые значения функции ε , f_0 — правая часть в интерфейсном узле. Дискретизация (10) использует сеточные значения функции T^n на 9-точечном шаблоне узлов, показанном на фиг. 2. Часть узлов шаблона лежит в газовой области, часть — в твердом теле. Эти узлы показаны на фиг. 2 кружками и квадратами соответственно.

Рассмотрим случай уравнения состояния $\varepsilon = c \cdot T$. Обобщение на случай нелинейного уравнения с учетом введенной линеаризации очевидно. Для консервативной аппроксимации (10) уравнения (8) в узлах сетки должны быть определены теплоемкость c_0 и правая часть f_0 . Чтобы



Фиг. 2. Дуальная ячейка (штриховая линия) узла 0.

не вводить обозначения, связанные с двумерностью, предположим, что сверху и снизу от разрыва c , f постоянны и равны c_0^1 , c_0^2 и f_0^1 , f_0^2 соответственно. Их аппроксимация c_0 , f_0 в узле на интерфейсе основана на следующих равенствах (см., например, [18]):

$$\int_{\Omega} c dV = c_0 \cdot \Omega; \quad \int_{\Omega} c dV = \int_{\Omega^1} c dV + \int_{\Omega^2} c dV = c_0^1 \cdot \Omega^1 + c_0^2 \cdot \Omega^2. \quad (11)$$

Отсюда $c_0 = c_0^1 \cdot \Omega^1 / \Omega + c_0^2 \cdot \Omega^2 / \Omega$, формула для расчета f записывается аналогично.

После расчета внутренней энергии ε^{n+1} по явной схеме во всех узлах сетки производим пересчет температуры обращением уравнения состояния. В случае идеального газа имеем $T^{n+1} = \varepsilon^{n+1} / c$ во всех узлах, включая интерфейсные узлы.

Видим, что при определении сеточных функций c , f в соответствии с формулой (11) сквозной алгоритм на единой сетке (с общей нумерацией узлов для газовой области и твердого тела) во всей расчетной области содержит обработку на интерфейсе сеточных функций c , f . Обычно для однородности пересчет коэффициентов из центров ячеек в узлы делается в каждом узле сетки.

Приступим к объяснению предлагаемого сквозного метода расчета сопряженного теплообмена между газодинамическими течениями и телами сложной геометрической формы. Метод пригоден для расчетов на многоблочных неструктурированных сетках (в том числе — для многосвязных тел). В многоблочном случае сетки для газовой области и твердого тела строятся независимо, но с одной оговоркой — на интерфейсе “газ–твердое тело” они состыкованы узел в узел. В будущем мы откажемся от этого ограничения. Метод может быть обобщен для произвольного расположения и сочетания многоблочных неструктурированных сеток. Граница одного блока может примыкать к нескольким блокам. Дополнительно указывается принадлежность узлов сетки интерфейсу для выполнения процедуры коррекции температуры с целью обеспечения консервативности схемы.

Идею метода мы сначала проиллюстрируем на примере построения явной схемы, которая алгебраически эквивалентна изложенному выше сквозному алгоритму, но по форме является многообластной: расчет производится единым циклом по всем узлам многоблочной сетки, затем корректируются сеточные значения внутренней энергии и температуры на интерфейсах “газ — твердое тело”.

Выполним интегрирование уравнения энергии (8) отдельно по верхней и нижней частям дуальной ячейки. Эти части с объемами Ω^1 , Ω^2 лежат по разные стороны интерфейса, в разных подобластях (см. фиг. 2). По-прежнему для простоты объяснения мы используем одномерную ин-

терпретацию алгоритма. Граница верхней части Ω^1 состоит из двух участков. Один участок лежит строго внутри газовой области, второй — на интерфейсе; обозначим эти участки как S^1 и S^0 . Соответствующие участки границы нижней части Ω^2 , лежащей по другую сторону интерфейса, обозначим как S^2 и S^0 . Обозначим поток энергии через границу S^0 как Q^0 , а потоки через границы S^1 и S^2 как Q^1 и Q^2 соответственно. Получаем парциальные разностные соотношения в интерфейсном узле с номером 0:

$$\Omega^1 \frac{\varepsilon_1^{n+1} - \varepsilon_0^n}{\Delta t} = Q^1 - Q^0 + \Omega^1 f_0, \quad \Omega^2 \frac{\varepsilon_2^{n+1} - \varepsilon_0^n}{\Delta t} = Q^0 - Q^2 + \Omega^2 f_0. \quad (12)$$

На нижнем слое по времени имеем по построению алгоритма $\varepsilon_1^n = \varepsilon_2^n = \varepsilon_0^n$ — это единое значение для двойного узла, имеющее смысл среднего значения по полной дуальной ячейке. Переменная ε_0^n вычисляется по формуле вида $\varepsilon_0^n = \varepsilon_1^n \Omega^1 / \Omega + \varepsilon_2^n \Omega^2 / \Omega$. Аналогично вычисляется правая часть f_0 по переменным f_1^n, f_2^n .

В уравнениях (12) поток Q^0 нам неизвестен, но его знание и не требуется. Для определенности полагаем $Q^0 = 0$, т.е. парциальные разностные уравнения теплопроводности вида (12) в газе и твердом теле записываются при адиабатическом краевом условии на интерфейсе, т.е. при равенстве нулю нормальной компоненты теплового потока. Парциальные уравнения не аппроксимируют по отдельности исходное уравнение теплопроводности (8), но при суммировании уравнений (12) аппроксимация обеспечивается.

Переменные $\varepsilon_1^{n+1}, \varepsilon_2^{n+1}$ являются сеточными атрибутами первой и второй областей; они представляют внутреннюю энергию единицы объема в парциальных ячейках Ω^1 и Ω^2 .

Суммируя первое и второе уравнения (12), получаем

$$\Omega \frac{\varepsilon_1^{n+1} \Omega^1 / \Omega + \varepsilon_2^{n+1} \Omega^2 / \Omega - \varepsilon_0^n}{\Delta t} = Q^2 - Q^1 + \Omega f_0. \quad (13)$$

Из сопоставления (13) и с учетом равенства $\Delta(T^n) = Q^2 - Q^1$ получаем, что следует определить новую переменную на верхнем слое в узле на интерфейсе в виде

$$\varepsilon_0^{n+1} = \varepsilon_1^{n+1} \Omega^1 / \Omega + \varepsilon_2^{n+1} \Omega^2 / \Omega. \quad (14)$$

При таком определении парциальные дискретизации (12) в областях с последующим расчетом интерфейсных значений по формуле (14) алгебраически тождественны схеме сквозного счета (10). Если интерфейсный узел лежит на границе l областей (двух и более), то формула обработки парциальных значений ε_i^{n+1} (и им аналогичных) принимает вид

$$\varepsilon_0^{n+1} = \sum_{i=1}^{i=l} \gamma_i \varepsilon_i^{n+1}, \quad \gamma_i = \Omega_i / \Omega, \quad i = 1, \dots, l. \quad (15)$$

Так как алгоритм LINS (6), (7) основан на цикле, каждый шаг которого подобен одному шагу явной схемы, то изложенная выше многоблочная процедура решения задачи сопряженного теплообмена легко реализуется при использовании схемы LINS.

Приведем ее алгоритм для случая прямого интегрирования уравнения энергии (8) в газе и твердом теле с выделением интерфейсов между ними. Алгоритм реализован для многоблочных трехмерных неструктурированных сеток, конформных на интерфейсах. Единственный входной параметр схемы LINS (помимо шага τ) — это оценка на текущем слое по времени верхней границы $\lambda_{\max}$ сеточного аналога дифференциального оператора

$$L \cdot T = (\partial \varepsilon / \partial T)^{-1} \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T). \quad (16)$$

В отличие от обычной реализации схемы LINS, для задачи сопряженного теплообмена оценка $\lambda_{\max}$ находится на многоблочной сетке.

Переход к новой итерации схемы LINS делается после завершения каждого шага цикла вида (6) по всей сетке. Необходимая для проведения итераций температура T (для расчета тепловых

потоков) на всех промежуточных итерациях определяется по внутренней энергии с помощью линеаризованного уравнения состояния.

Явная структура алгоритма обеспечивает автоматическую аппроксимацию условий теплообмена и элегантную аддитивную форму метода в многообластном случае, когда разностная дискретизация становится в целом нестандартной (так как шаблон дискретизации интерфейсного узла может лежать в нескольких смежных областях).

Детализируем алгоритм LINS для случая пары областей “газ – твердое тело”. Пусть дискретизация построена в каждой области, включая сеточные узлы, лежащие на интерфейсе. Дискретизация на интерфейсе является парциальной, она будет полноценной после пересчета в каждом узле на интерфейсе единых значений внутренней энергии и температуры, см. пункт 6 алгоритма ниже в этом же разделе.

В газовой области определен шаг интегрирования τ из условия устойчивости конвективного, т.е. гиперболического этапа. Сначала проведен расчет этого этапа, затем выполнен параболический подэтап – совместно вязкий и диффузионный. Этот подэтап состоит из явно-итерационной процедуры (7), примененной к редуцированным уравнениям импульса и уравнениям многокомпонентного переноса. По их завершении готовятся источники членов $\nabla \cdot (\tau \cdot \mathbf{u})$, $\nabla \cdot \mathbf{J}$, входящие в правую часть уравнения энергии.

На втором параболическом подэтапе решается редуцированное уравнение энергии сквозным образом по всем теплопроводным областям, как газовым, так и твердотельным.

Заметим, что такое разделение удобно для включения в схему уравнений химической кинетики, так как уравнение энергии является замыкающим законом сохранения с учетом суммарного теплового потока.

Алгоритм расчета сопряженной задачи теплопроводности имеет следующий вид.

1. Инициализация. До начала расчета первого временного шага проводится обработка интерфейсных границ с определением на этих границах кратностей узлов l , весовых множителей $\gamma_i = \Omega_i / \Omega$, $i = 1, \dots, l$, значений внутренней энергии ϵ по формулам (15) и температуры по уравнению состояния $\epsilon = \epsilon(T)$, нелинейному в общем случае.

На каждом шаге по времени производится переход на следующий временной слой: выполняются нижеследующие пункты 2–7:

2. Расчет в газовой области гиперболического этапа и параболического (вязкого и диффузионного) этапов.

3. Вычисление по всем областям коэффициентов вида $A = \epsilon_T(T_d)$, $B = \epsilon(T_d) - A \cdot T_d$, получаемых линеаризацией внутренней энергии $\epsilon(T)$ по температуре T_d с нижнего слоя. Пересчет этих коэффициентов на интерфейсе по смежным областям имеет вид $A = \sum \gamma_i A_i$, $B = \epsilon(T_d) - A \cdot T_d$, где суммирование ведется по индексу $i = 1, \dots, l$, как в формулах (15).

4. Нахождение оценки $\lambda_{\max}$ максимального собственного числа оператора L_h на основе сумм модулей шаблонных коэффициентов, расчет числа итераций $q = 2p - 1$ схемы.

5. Расчет в цикле по $m = 1, \dots, q$ одной итерации схемы LINS (два этапа).

5.1. Определение функции ϵ^m по значениям ϵ_{conv} и ϵ^{m-1} , T^{m-1} во всех узлах сетки:

$$\epsilon^m = \frac{1}{1 + \tau_{\text{conv}} b_m} \left\{ \epsilon_{\text{conv}} + \tau_{\text{conv}} b_m \epsilon^{m-1} + \frac{\tau_{\text{conv}}}{\Omega} \Delta(T^{m-1}) + f \right\}.$$

Здесь $\Delta(T^{m-1})$ – тепловой поток через границу ячейки с объемом Ω . По завершении цикла в каждом узле на интерфейсе получаем набор значений ϵ_i^m , $i = 1, \dots, l$.

5.2. Коррекция интерфейсных значений для обеспечения аппроксимации уравнения энергии: на каждой итерации m в каждом узле на интерфейсе единые значения внутренней энергии и температуры вычисляются по формулам $\epsilon_f = \sum \gamma_i \epsilon_i^m(T)$, $\gamma_i = \Omega_i / \Omega$, $T^m = (\epsilon_f - B)/A$; занесение полученных общих значений в основные сеточные переменные: $\epsilon_f \rightarrow \epsilon_i^m$, $T^m \rightarrow T_i^m$, $i = 1, \dots, l$.

6. Завершение итераций по m : используя найденную внутреннюю энергию ϵ , находим новую температуру T с помощью уравнения состояния. Например, в случае аппроксимации уравнения

состояния многочленом 5-й степени, находим во всех узлах сетки сеточную функцию T из решения методом Ньютона нелинейного уравнения типа $b_0 + b_1T + \dots + b_5T^5 = \varepsilon/\rho$.

7. Если шаг по времени не последний, то делается переход к п. 2.

В вышеприведенном алгоритме в неявном виде используется разностный аналог дифференциального оператора (16), записанного для уравнения теплопроводности в газовой среде и твердом теле, с линеаризацией по нижнему слою.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Для верификации представленного метода выбрана модельная задача об обтекании пластины конечной толщины внезапно ускоренным потоком [4]. Этот тест является существенно нестационарным и используется для оценки методов расчета сопряженного теплообмена, см., например, [5]. Здесь мы ограничимся изложением модельной задачи и демонстрационными результатами. Систематическому исследованию точности предложенного метода будет посвящена отдельная работа.

На фиг. 1 показаны геометрия задачи и наглядная формулировка краевых условий. Расчетная двумерная область состоит из горизонтальной пластины $d \times b$ длиной d , толщиной b и расположенной над ней газовой областью размера $d \times b$. На нижней границе пластины поддерживается постоянная температура T_e . В газовой области верхняя граница — стенка с постоянной температурой $T_b = 300$, нижняя — это интерфейсная граница “газ—твердое тело”. Здесь и далее значения размерных величин приводятся в системе СИ, в частности, температура измеряется в градусах Кельвина. В рамках газодинамической задачи на интерфейсной границе ставится условие непротекания, в полной задаче — непрерывность температуры и нормальной к границе компоненты вектора теплового потока (условия сопряжения). На боковых границах расчетной области заданы условия периодичности. В направлении оси Oz область расчета считаем однородной и бесконечной, т.е. решение задачи от координаты z не зависит. В силу краевых условий решение не зависит также от координаты x , но первые две компоненты u_1, u_2 вектора скорости $\mathbf{u}$ являются ненулевыми функциями координаты y .

При $t = 0$ температура однородна как в газе, так и в твердом теле: $T(x, y, z, 0) = T_0 = T_\infty$, газ покоится, давление в газе $p = p_\infty = 101\,325$. В начальный момент времени $t = 0$ газ мгновенно ускоряется от состояния покоя до постоянной скорости U_∞ (число Маха M_∞). Референсная скорость звука в газе равна 347 м/с, параметры набегающего потока $M_\infty = 3$, $Pr = 0.72$, $\gamma = 1.4$, характерный линейный размер задачи $L = b$. Число Рейнольдса $Re_\infty = \rho_\infty \cdot L \cdot U_\infty / \mu(T_\infty) \approx 3.4 \times 10^6$, где $\mu(T_\infty)$ — вязкость газа при $T = T_\infty$.

В [4] предложено использовать для характеристики сопряженного теплообмена два безразмерных параметра

$$P = (b/L) \sqrt{Re_\infty} \cdot \lambda_f(T_\infty) / \lambda_s, \quad t_{fs} = Lb^{-2} \alpha_s / U_\infty. \quad (17)$$

Параметр t_{fs} — это отношение характерных временных масштабов основных процессов в газе и твердом теле (в данной задаче $t_{fs} = 1$), $\alpha_s = \kappa_s / c_s$ — коэффициент температуропроводности твердого тела, равный отношению коэффициента теплопроводности к теплоемкости единицы объема. Параметр P из формул (17) является аналогом числа Бюна $Bu = \Lambda = P \cdot \sqrt{Pr}$, введенного А.В. Лыковым [6].

В газе коэффициенты вязкости и теплопроводности заданы линейными функциями температуры: $\mu(T) = \mu^0 \cdot T / T_\infty$, $\lambda_f(T) = \lambda_f^0 \cdot T / T_\infty$. Для каждого компонента (кислород и азот) смеси взяты одинаковые константы $\mu_0 = 1.8 \times 10^{-5}$, $\lambda_f^0 = 0.025437$ и коэффициент диффузии $D = \mu / (\rho Sc)$, где $Sc = 0.9$ — число Шмидта. Удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме задана константой $c_v = 725$. Для твердого тела в уравнении (8) плотность, удельная теплоемкость и теплопроводность заданы постоянными $c = \rho_s c_s = 0.8981$, $\kappa = \lambda_s = 46.7$, что соответствует постановке задачи в [4, 5].

Параметры задачи подобраны так, что сопряженный теплообмен является существенным процессом. Принято считать, что при $Bu < 0.1$ эффектами теплообмена через интерфейс можно

пренебречь, т.е. задача может быть решена как несопряженная [6]. В сформулированной выше задаче число Бюня $Bu \approx 0.80$. Иногда для характеристики теплообмена используют число Нуссельта $Nu = \chi \cdot b / \lambda_f$, где χ — коэффициент теплообмена газа с твердой средой, для нас величина χ неизвестна. Число Нуссельта в данной задаче найдено с помощью аналитического решения, см. ниже (20).

Рассматриваемая задача является нестационарной, хорошо подходит для проверки расчетных схем и близка по постановке работам [4, 5]. Отличие состоит в задании на верхней границе газовой области краевого условия “изотермическая стенка” вместо экстраполяционных условий, а также рассмотрение воздуха как двухкомпонентной смеси кислорода и азота в целях методической отладки новой численной модели.

Интерес представляют несколько вариантов задачи в зависимости от задания краевых условий на нижней границе пластины: а) изотермический случай, задана постоянная температура T_e ; б) адиабатический случай, тепловой поток равен 0. Случай а) включает режимы нагревания $T_e > T_0$ и охлаждения $T_e < T_0$. Случай б) дает решение важной задачи, состоящей в симметричном обтекании толстой пластины (толщиной $2d$), обтекаемой газом с двух сторон.

Ниже рассмотрена задача только для режима нагревания $T_e > T_0$ с параметрами $T_e = 900$, $T_0 = 300$. Отметим, что на малом начальном отрезке времени пластина нагревается с двух сторон, как с горячей нижней стороны, так и со стороны газа. С течением времени в газе формируется узкий пограничный слой, от интерфейса вверх со звуковой скоростью движется волна сжатия. Она отражается от верхней границы и достигает интерфейса уже в конце изучаемого переходного процесса.

Для получения аналитического решения используется преобразование координат, позволяющее отделить уравнение энергии от уравнений непрерывности и импульса и придать уравнениям пограничного слоя форму, близкую к форме уравнений пограничного слоя несжимаемой жидкости (преобразование Дородницына [15]). В [4] это преобразование распространено на сжимаемый случай. Замена переменных имеет вид

$$\eta = \left(\sqrt{Re_\infty} / b \right) \int_0^y \rho / \rho_\infty dy, \quad t^* = t U_\infty / b. \quad (18)$$

Аналитическое решение $\theta_{anal} = \theta(\tau)$ для безразмерной температуры $\theta = (T - T_\infty) / T_\infty$ как функции безразмерного времени $\tau = t^* = t U_\infty / b$ приведено в [4, 5]:

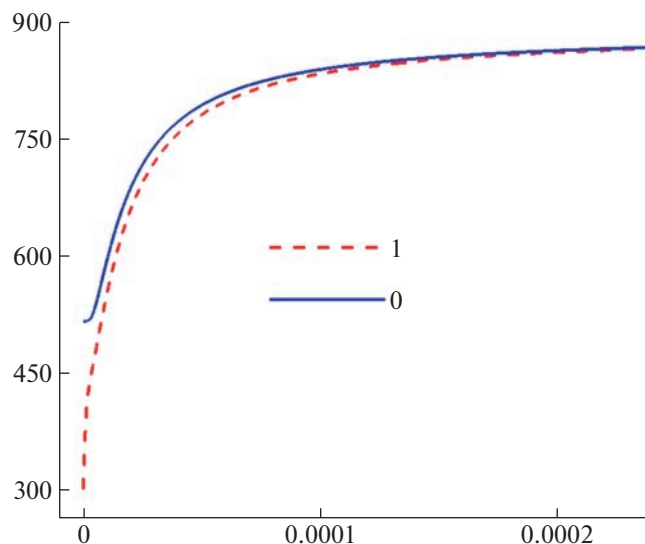
$$\theta_{anal}(\tau) = \theta_{w0} \left[1 - \kappa \sum_{n=0}^{\infty} (-A)^n \operatorname{erfc} \left(\frac{n+1}{\sqrt{\tau}} \right) \right] + k \theta_e \sum_{n=0}^{\infty} (-A)^n \operatorname{erfc} \left(\frac{2n+1}{2\sqrt{\tau}} \right), \quad (19)$$

где $\Lambda = P \sqrt{Pr}$, $A = (1 - \Lambda) / (1 + \Lambda)$, $\theta_{w0} = \theta_{aw} \Lambda / (1 + \Lambda)$, $\theta_e = T_e / T_\infty - 1$, $k = 2 / (1 + \Lambda)$, $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$ — дополнительная функция ошибок, θ_{aw} — безразмерная температура стенки, получающаяся при установлении процесса обтекания пластины с заменой условия сопряженного теплообмена на условие теплоизолированной стенки. В рассматриваемом случае $\theta_{aw} = 1.6$ согласно [5], т.е. $T_{aw} = 780$. Ряды в (19) сходятся абсолютно, так условие $\Lambda = P \sqrt{Pr} > 0$ обеспечивает ограниченность модуля $A = (1 - \Lambda) / (1 + \Lambda)$ единицей. Следуя [5], на интерфейсе определим число Нуссельта как $Nu = P \cdot \partial \theta / \partial \eta$, где аргумент η определен в (18):

$$Nu(\tau) = \frac{\Lambda}{\sqrt{\pi} \cdot \sqrt{\tau}} \left[\theta_{aw} - \theta_{w0} + k \cdot \theta_{w0} \sum_{n=0}^{\infty} (-A)^n \exp \left(-\frac{(n+1)^2}{\tau} \right) - \right. \\ \left. - k \cdot \theta_e \sum_{n=0}^{\infty} (-A)^n \exp \left(-\frac{(2n+1)^2}{4\tau} \right) \right]. \quad (20)$$

Из (20) следует, что точка $\tau = 0$ является особой, в решении возникает сингулярность. При $\tau \rightarrow 0$ решение является конечным: $\theta_{anal}(0) \approx 0.73$, т.е. $T_{anal}(0) = 517$, а тепловой поток Q_{anal} , вычисляемый с помощью (20) по формуле $Q_{anal} = Nu \cdot \lambda_s T_\infty / L$, бесконечен.

Априори определить интервал времени, в котором сингулярность значима, а также найти физические параметры, управляющие длительностью начального интервала, достаточно трудно,



Фиг. 3. Температура на интерфейсе: 0 — аналитическое решение (сплошная линия), 1 — численный расчет (штриховая линия).

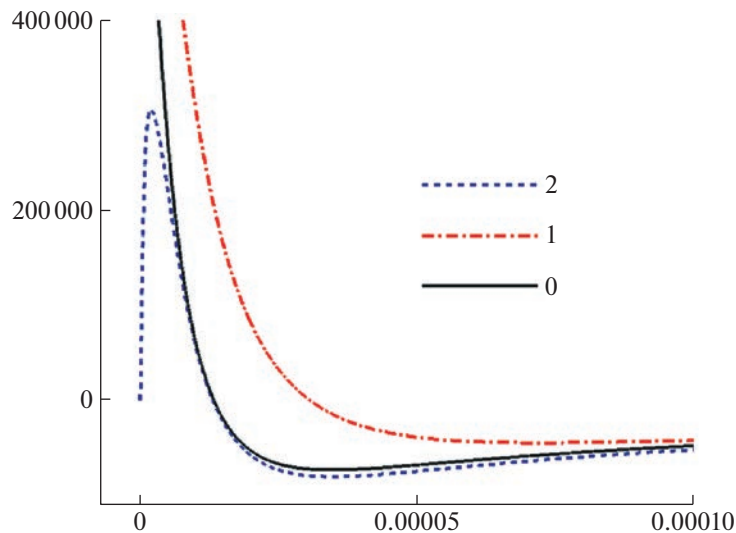
особенно в трехмерных математических моделях импульсного обтекания. В одномерном случае это легко сделать с помощью формулы (19), которая описывает в явном виде зависимость решения от параметров задачи и является хорошим тестом для верификации методов. Отметим, что из-за сингулярности мы можем наблюдать сходимость численных решений к точному вне малого начального интервала. При заданных параметрах хорошее соответствие аналитического и численных потоков наблюдается уже при $t > 2.4 \times 10^{-6}$, что отвечает безразмерному времени $t^* > 0.05$.

Расчеты проведены на прямоугольных сетках с числом ячеек $N_x \times N_y$. Число шагов N_x по оси Ox взято постоянным и небольшим (решение от x не зависит), $N_x = 5$. По оси Oy сетка измельчалась до достижения разумного совпадения с аналитическим решением в интервале наблюдения $t > 2.4 \times 10^{-6}$. В итоге численный анализ задачи проводился на достаточно подробной равномерной сетке с числом узлов $N_y = 10^4$ с шагом $h = 10^{-5}$.

На фиг. 3 приведены профили по времени температуры на интерфейсе при $0 < t < 2.4 \times 10^{-4}$. Показано численное (штриховая линия) и аналитическое решение (сплошная линия), получаемое с помощью (19). Видно, что при $t = 0$ приближенное расчетное значение равно 0, но с ростом t оно достаточно быстро (в масштабе времени переходного процесса) сближается с аналитическим.

На фиг. 4 показаны профили по времени аналитического теплового потока, определенного с помощью формулы (19), и односторонних потоков, вычисленных по приближенному решению с помощью трехточечных аппроксимаций второго порядка точности по шагу сетки. Обозначения: 0 — аналитический поток (сплошная линия), 1 — поток со стороны твердого тела (штрихпунктир), 2 — поток со стороны газа (штриховая линия). Графики показаны для $t < 10^{-4}$, далее в выбранном масштабе они практически сливаются.

При $t > 2.4 \times 10^{-4}$ относительное различие односторонних тепловых потоков и их отклонение от аналитического потока составляют менее 5%, а погрешность расчета температуры — менее 0.3%. Односторонние численные потоки заметно различаются в начальный момент времени. Тепловая волна от горячей нижней границы достигает интерфейса не мгновенно, а за несколько шагов по времени (в силу свойств схемы LINS). В частности, это происходит из-за ограниченности фактического разностного шаблона узлов. Влияние горячей точки распространяется за шаг по времени на $q = 2p - 1$ узлов в разные стороны, где p — степень чебышёвского многочлена, см. формулу (5). К тому же, в газе в близких к интерфейсу узлах сетки возникает газодинамический нагрев. Но основная причина различий односторонних тепловых потоков — проявление сингу-



Фиг. 4. Тепловые потоки на интерфейсе: 0 — аналитический (сплошная линия), 1 — поток со стороны пластины (штрих-пунктир), 2 — поток со стороны газа (штриховая линия).

лярности. Для контроля выполнена имитация одномерного расчета с использованием неявной схемы, реализуемой прогонкой и схемой LINS. Результаты оказались практически одинаковыми.

Шаг по времени выбирался из условия устойчивости конвективной подзадачи с коэффициентом запаса 0.5. Параболический диффузионно-вязкий этап интегрировался по схеме LINS, т.е. редуцированные уравнения импульса и многокомпонентной диффузии решались совместно. Так как на выбранной сетке верхняя граница спектра совместного диффузионно-вязкого оператора $\lambda_{\max} = 1.4 \times 10^7$ обеспечивает устойчивость явного счета, то схема LINS автоматически переходит в явную схему. Для дискретного оператора, отвечающего аппроксимации уравнения теплопроводности в газе и твердом теле $\lambda_{\max}^T = 4 \times 10^{12}$. Поэтому сквозной расчет теплопроводного этапа в газе и твердом теле в соответствии с формулой (5) требует $q = 161$ явных итераций схемы LINS. В этом случае явная схема потребовала бы более 10 тысяч шагов.

Более детальное описание результатов решения модельной задачи приведено в [22]. Алгоритм совместного решения расширенной системы Навье—Стокса и теплопроводности в твердом теле работает в общей среде кода NOISEtte—MCFL [23].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенный в данной работе метод решения задачи сопряженного теплообмена относится к прямой стратегии расчета. Он основан на сквозном интегрировании по времени уравнения теплопроводности в газовой области и твердом теле. Метод автоматически обеспечивает аппроксимацию условий сопряженного теплообмена на интерфейсных границах между газом и твердотельной конструкцией. Алгоритм пригоден для расчета задач сопряженного теплообмена между газодинамическими течениями и телами сложной геометрической формы при использовании многоблочных неструктурированных сеток. В многоблочном случае сетки для газовой области и твердого тела строятся независимо, но на интерфейсах они состыкованы узел в узел. В будущем это ограничение может быть снято.

Получен надежный, высокоточный, консервативный метод для решения задачи нестационарного сопряженного теплообмена. Анализ нестационарной задачи о нагреве высокоскоростного потока горячей пластиной, представленный в данной работе, подтверждает перспективность предлагаемого подхода к решению нестационарных задач сопряженного теплообмена. Планируемое включение в состав компьютерного кода процессов химической кинетики усилит роль диффузионных процессов, повысит практическое значение метода и расширит область его прикладного применения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Dimitrienko Y.I., Zakharov A.A., Koryakov M.N.* Coupled problems of high-speed aerodynamics and thermomechanics of heat-shielding structures // *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2018. V. 1141. P. 012094.
2. *Зинченко В.И., Гольдин В.Д.* Решение сопряженной задачи нестационарного теплообмена при сверхзвуковом обтекании затупленного по сфере конуса // *Инженерно-физический журнал*. 2020. Т. 93. № 2. С. 431–442.
3. *Meng F., Banks J.W., Henshaw W.D., Schwendeman D.W.* A stable and accurate partitioned algorithm for conjugate heat transfer // *J. Computational Physics*. 2017. V. 344. № 1. С. 51–85.
4. *Pozzi A., Tognaccini R.* Time singularities in conjugated thermo-fluid-dynamic phenomena // *J. Fluid Mech.*, 2005. V. 538. С. 361–376.
5. *Radenac E., Gressier J., Millan P.* Methodology of numerical coupling for transient conjugate heat transfer // *Computers & Fluids*. 2014. V. 100. С. 95–107.
6. *Luikov A.V.* Conjugate convective heat transfer problems // *Int. J. of Heat and Mass Transfer*. 1974. V. 17. P. 1207–1214.
7. *Feodoritova O.B., Krasnov M.M., Novikova N.D., Zhukov V.T.* A Numerical Method for Conjugate Heat Transfer Problems in Multicomponent Flows // *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021. V. 2028. P. 012024.
8. *Galanin M.P., Zhukov V.T., Klyushnev N.V. et al.* Implementation of an iterative algorithm for the coupled heat transfer in case of high-speed flow around a body // *Comput. & Fluids*. 2018. V. 172. P. 483–491.
9. *Загускин В.Л., Кондрашов В.Е.* О счете уравнений теплопроводности и газовой динамики прогонкой по отдельным областям // *Докл. АН СССР*. 1965. Т. 163. № 5. С. 1107–1109.
10. *Giles M.B.* Stability analysis of numerical interface conditions in fluid structure thermal analysis // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 1997. V. 25. № 4. С. 421–436.
11. *Коротков А.В.* Конечно-объемная дискретизация прямого метода решения задач сопряженного теплообмена в пакете программ “ЛОГОС” // *Труды НГТУ им. П.Е. Алексеева*. 2022. № 3. С. 7–21.
12. *Feodoritova O.B., Novikova N.D., Zhukov V.T.* An explicit iterative scheme for 3D multicomponent heat conducting flow simulation // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 2028. P. 012022.
13. *Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.* Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье–Стокса // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2020. Т. 60. № 2. С. 267–280.
14. *Жуков В.Т.* О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // *Матем. моделирование*. 2010. Т. 22. № 10. С. 127–158.
15. *Дородницын А.А.* Пограничный слой в сжимаемом газе // *Прикл. матем. и механика*. 1942. Т. 6. № 6. С. 449–486.
16. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
17. *Суржигов С.Т.* Компьютерная аэрофизика спускаемых космических аппаратов. Двухмерные модели. М.: Физматлит, 2018.
18. *Самарский А.А., Вабищевич П.Н.* Вычислительная теплопередача. М: Едиториал УРСС, 2003.
19. *Борисов В.Е., Рыков Ю.Г.* Моделирование течений многокомпонентных газовых смесей с использованием метода двойного потока // *Матем. моделирование*. 2020. Т. 32. № 10. С. 3–20.
20. *Гантмахер Ф.Р.* Теория матриц. М.: Наука, 1966.
21. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
22. Программный комплекс NOISEtte–MCFL для расчета многокомпонентных реагирующих течений / В.Е. Борисов [и др.] // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2023. № 6. 23 с.
23. *Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.* О прямом методе решения задачи сопряженного теплообмена газовой смеси и твердого тела // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2023. № 12. 36 с.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

ФОРМИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТИ В НЕСЖИМАЕМОМ
ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ НА ДВИЖУЩЕЙСЯ ВВЕРХ ПО ПОТОКУ
СТЕНКЕ ПРИ ЗАДАННОМ ВНЕШНЕМ ДАВЛЕНИИ© 2023 г. С. И. Безродных^{1,*}, В. Б. Заметаев^{1,**}, Тэ Ха Чжун²¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 44, корп. 2, ФИЦ ИУ РАН, Россия² 141701 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, МФТИ, Россия

*e-mail: sbezrodnykh@mail.ru

**e-mail: zametaev.vb@mipt.ru

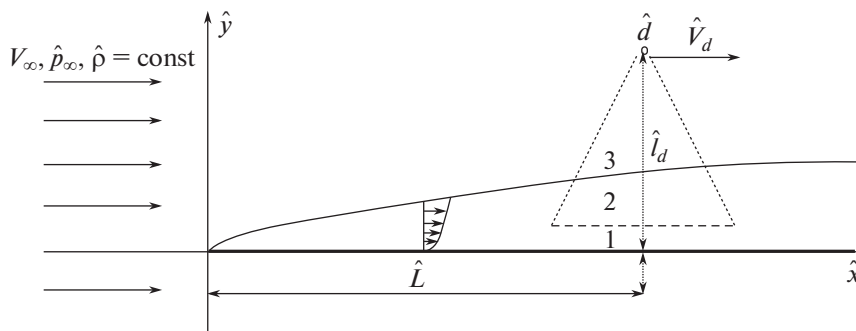
Поступила в редакцию 17.03.2023 г.
Переработанный вариант 28.04.2023 г.
Принята к публикации 20.06.2023 г.

Рассматривается двумерное ламинарное обтекание плоской пластины вязкой несжимаемой жидкостью при больших числах Рейнольдса. В рамках асимптотической теории исследуется влияние тела, сносимого вниз по потоку с малой скоростью относительно пластины, на пограничный слой Блазиуса. Исследуется случай, в котором внешнее малое тело, моделируемое потенциальным диполем, движется вниз по потоку с постоянной скоростью. Эта классическая задача формально нестационарна, однако в результате перехода в подвижную систему координат, связанную с диполем, она описывается стационарными решениями уравнений пограничного слоя на движущейся вверх по потоку стенке. Найденные численно решения этой задачи содержат закрытые и открытые висячие отрывные зоны в поле течения. В работе рассчитаны нелинейные режимы влияния диполя на пограничный слой с противотоками и обнаружено, что по мере возрастания интенсивности диполя растет и заданное им давление, действующее на пограничный слой, что вызывает по достижении некоторой критической интенсивности диполя особенность внутри поля течения. Изучена асимптотика решения задачи вблизи уединенной особой точки поля течения и найдено, что вертикальная составляющая скорости обращается в ней в бесконечность, вязкое напряжение в нуль, а при больших интенсивностях диполя решение задачи не существует. Библ. 16. Фиг. 6.

Ключевые слова: ламинарный пограничный слой, отрыв, асимптотический метод.**DOI:** 10.31857/S0044466923120074, **EDN:** UWBYWN

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена исследованию квазистационарного вязко-невязкого взаимодействия ламинарного пограничного слоя на плоской поверхности с движущимся выше пограничного слоя двумерным малым телом, создающим возмущения давления и скорости. Подобное малое цилиндрическое тело удобно моделировать классическим потенциальным диполем, что позволяет выписать аналитическую формулу для возмущения давления, воздействующего на медленные токи жидкости вблизи дна пограничного слоя. Традиционно в таких нестационарных течениях переходят в подвижную систему координат, связанную с движущимся с постоянной скоростью источником возмущений, и получают стационарную задачу, но на подвижной поверхности. Задача о движении обтекаемой стенки по потоку или против потока в стационарном пограничном слое является частным случаем нестационарного отрыва пограничного слоя вязкой несжимаемой жидкости при больших числах Рейнольдса. Широкий класс плоских отрывных ламинарных течений вязкой несжимаемой жидкости описан в [1], где, в частности, изложены основы асимптотической теории отрыва стационарного и нестационарного пограничных слоев и подробно описан случай стенки, движущейся вниз по потоку. В деталях изложено формирование особенности Мура–Рота–Сирса (см. [2–4]) в решении уравнений пограничного слоя при воздействии на него неблагоприятного, тормозящего градиента давления. Похожая задача была рассмотрена и в [5], в которой величину неблагоприятного градиента давления можно было регулировать. Причем удалось найти решение задачи с более слабой особенностью “кро-



Фиг. 1. Схема течения.

мочного” типа, нежели особенность Мура–Рота–Сирса, далее которой вниз по потоку решение не существует. Случай слабой ударной волны, движущейся вверх по потоку газа, в рамках теории свободного взаимодействия при больших числах Рейнольдса изучался в [6]. Случай движущейся вниз по течению слабой ударной волны рассчитывался с использованием тех же уравнений в [7] и [8]. Недавно Рубан и соавт. (2020) опубликовали еще одну статью [9] о влиянии движущегося вниз по потоку сверхзвукового веера разрежения Прандтля–Майера на отрыв пограничного слоя. Установлен интересный эффект, что именно убывающее вниз по потоку давление вызывает рост развитой зоны отрыва, а растущее давление не влияет на отрыв. Анализ отрывных течений в канале с подвижной стенкой с использованием метода сращиваемых асимптотических разложений выполнен в статье [10]. Численный расчет полных уравнений Навье–Стокса для чисел Маха больше единицы в случае подвижного скачка уплотнения, падающего на пограничный слой вязкого совершенного газа, выполнен в работе [11]. В [12] выполнены расчеты полных несжимаемых уравнений Навье–Стокса для течения около пластины с поверхностью, движущейся вверх по потоку. Подобные расчеты являются убедительным средством проверки и подтверждения результатов применения асимптотических теорий. Обобщение указанной асимптотической теории на несжимаемый пограничный слой, текущий вдоль пластины, движущейся вверх по потоку, и подверженный воздействию заданного локального распределения давления, предложено в [13]. Дальнейшее развитие теории развитых отрывных течений на подвижной стенке было выполнено в [14], где также рассматривалась поверхность, медленно движущаяся вверх по потоку.

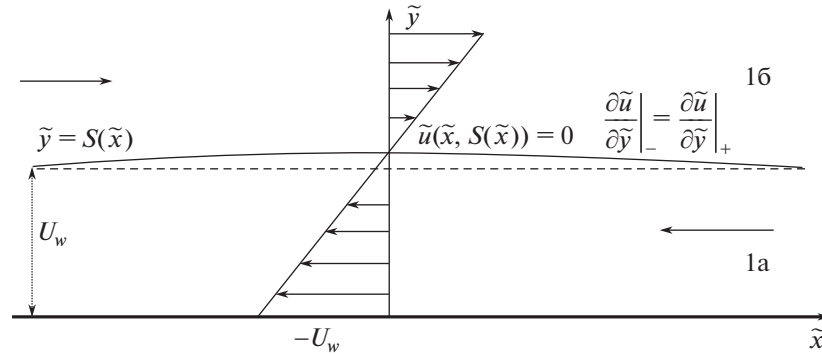
В настоящей работе продолжено исследование [13], а именно, изучается численно и аналитически влияние заданных, более значительных возмущений давления на пограничный слой, содержащий противотоки. Рассматриваются критические величины возмущения давления, при которых в поле течения формируется особенность, а при дальнейшем увеличении заданного давления решение задачи не существует.

2. ПОСТАНОВКА И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ

В качестве базового течения в работе рассматривается двумерное ламинарное обтекание плоской пластины потоком вязкой несжимаемой жидкости при больших числах Рейнольдса. На расстоянии $\hat{L}$ от передней кромки пластины и на высоте $\hat{l}_d = \hat{L} \cdot l$ выше обтекаемой поверхности расположено малое тело, движущееся вниз по потоку с заданной постоянной скоростью $\hat{V}_d = \hat{V}_\infty u_W$, где $\hat{V}_\infty$ – скорость внешнего потока (фиг. 1). Для анализа течения все переменные обезразмерены традиционно: $\{\bar{x}, \bar{y}, \bar{u}, \bar{v}\} = \{\hat{x}/\hat{L}, \hat{y}/\hat{L}, u/V_\infty, v/V_\infty\}$, $\hat{p} = \hat{p}_\infty + \rho \hat{V}_\infty^2 \bar{p}$.

При переходе в систему координат, движущуюся вместе с диполем вниз по потоку с малой постоянной скоростью u_W , заданное диполем распределение давления будет воздействовать на вязкий пристенный подслой (область 1, фиг. 1), развивающийся на стенке, которая движется против потока со скоростью $-u_W$. При ненулевой интенсивности диполя наблюдатель, движущийся вместе с ним, увидит вблизи обтекаемой стенки стационарное возмущенное течение с противотоками, качественно изображенное на фиг. 2.

Асимптотику решения уравнений Навье–Стокса в вязком подслое 1а–1б, содержащем противотоки и расположенном на дне пограничного слоя Блазиуса вблизи точки $\bar{x} = 1$ с известным



Фиг. 2. Противотоки в вязком подслое, разделенные неизвестной границей.

напряжением трения $u'_{BLAS}(0) = \lambda$, будем искать, совершая двойной предельный переход $l \rightarrow 0$, $Re \rightarrow \infty$. Высота размещения диполя над поверхностью $l \ll 1$ используется для нормировки продольного размера изучаемого слоя, а число Рейнольдса $Re = \rho \hat{V}_\infty \hat{L} / \mu$ введено традиционно:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= 1 + l\tilde{x}, & \bar{y} &= Re^{-1/2} l^{1/3} \lambda^{-1/3} \tilde{y}, & Re^{-3/8} \ll l \ll 1, \\ \bar{u} &= l^{1/3} \lambda^{2/3} \tilde{u} + \dots, & \bar{v} &= Re^{-1/2} l^{-1/3} \lambda^{1/3} \tilde{v} + \dots, & \bar{p} = l^{2/3} \tilde{p} + \dots, \\ u_w &= \lambda^{2/3} l^{1/3} U_w, & m &= \lambda^{4/3} l^{8/3} M. \end{aligned} \quad (2.1)$$

В результате подстановки одночленных асимптотических разложений решения (2.1) в уравнения Навье—Стокса задача в вязком подслое (область 1a–16, фиг. 1) сведется к обычным уравнениям пограничного слоя с заданным внешним давлением, условиями прилипания на поверхности и условиями срачивания с набегающим потоком:

$$\begin{aligned} \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}} &= -\frac{d\tilde{p}}{d\tilde{x}} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{y}^2}, & \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{y}} &= 0, & \tilde{p} &= M \frac{2(\tilde{x}^2 - 1)}{(\tilde{x}^2 + 1)^2}, \\ \tilde{u}(\tilde{x}, 0) &= -U_w, & \tilde{v}(\tilde{x}, 0) &= 0, & \tilde{u}|_{\tilde{y} \rightarrow +\infty} &= \tilde{y} + A(\tilde{x}) + \dots, & \tilde{u}|_{|\tilde{x}| \rightarrow \infty} &= -U_w + \tilde{y} + \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

Задача (2.2) содержит нормированные независимые параметры M (интенсивность диполя) и U_w (скорость стенки), а $\tilde{p}(\tilde{x})$ — давление, заданное диполем. Уравнения вязкого подслоя (2.2) являются уравнениями параболического типа, однако из-за наличия противотоков начальные условия должны быть заданы с двух сторон: при $\tilde{x} \rightarrow +\infty$ и $\tilde{x} \rightarrow -\infty$.

Обозначим через $\tilde{y} = S(\tilde{x})$ заранее неизвестную кривую, в каждой точке которой горизонтальная скорость $\tilde{u}$ принимает нулевое значение. Таким образом, кривая $S(\tilde{x})$ делит исходную область на две подобласти 1a и 16 (см. фиг. 2), причем в 1a, $\tilde{y} \in [0; S(\tilde{x})]$, поток движется только в отрицательном направлении оси $O\tilde{x}$, а в 16, $\tilde{y} \in [S(\tilde{x}); +\infty)$, — только в положительном направлении. В результате в случае заданного давления и известной функции $S(\tilde{x})$ можно сформулировать следующие начально-краевые задачи в каждой из введенных областей по отдельности:

$$\begin{aligned} 1a. \quad \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}} &= -\frac{d\tilde{p}}{d\tilde{x}} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{y}^2}, & \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{y}} &= 0, \\ \tilde{u}(\tilde{x}, 0) &= -U_w, & \tilde{v}(\tilde{x}, 0) &= 0, & \tilde{u}(\tilde{x}, S(\tilde{x})) &= 0, & \tilde{u}|_{\tilde{x} \rightarrow +\infty} &= -U_w + \tilde{y}, & S|_{\tilde{x} \rightarrow +\infty} &= U_w, \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} 16. \quad \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}} &= -\frac{d\tilde{p}}{d\tilde{x}} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{y}^2}, & \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{y}} &= 0, \\ \tilde{u}(\tilde{x}, S(\tilde{x})) &= 0, & \tilde{v}(\tilde{x}, S(\tilde{x})) &= \tilde{v}^-(\tilde{x}, S(\tilde{x})), & \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}}|_{\tilde{y} \rightarrow +\infty} &= 1, & \tilde{u}|_{\tilde{x} \rightarrow -\infty} &= -U_w + \tilde{y}, & S|_{\tilde{x} \rightarrow -\infty} &= U_w, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где $\tilde{v}^-(\tilde{x}, S(\tilde{x}))$ – вертикальная скорость на линии раздела, найденная из расчета течения в области 1а. Отметим, что на линии $\tilde{y} = S(\tilde{x})$ справедливо дополнительное краевое условие, которое в выбранных переменных имеет вид

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}} \right|_- = \left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{y}} \right|_+. \quad (2.5)$$

Выполним преобразование координат и искомых скоростей, которое упрощает численное решение рассматриваемой задачи (2.3)–(2.5):

$$x = \tilde{x}, \quad Y = \frac{\tilde{y}}{S(\tilde{x})}, \quad \tilde{u} = \frac{U(x, Y)}{S(x)}, \quad \tilde{v} = \frac{S'(x)}{S(x)} Y \cdot U(x, Y) + V(x, Y). \quad (2.6)$$

После преобразований (2.6) структура областей в вязком подслое существенно упрощается, так как граница раздела разнонаправленных потоков (областей 1а и 1б) в новых координатах проходит по прямой линии $Y = 1$, а задача (2.3)–(2.5) принимает следующий вид:

$$1a. \quad U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = -S^2(x) \frac{dp}{dx} + \frac{1}{S(x)} \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{S'(x)}{S(x)} U^2, \quad \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0, \quad (2.7)$$

$$U(x, 0) = -S(x) \cdot U_w, \quad V(x, 0) = 0, \quad U(x, 1) = 0, \quad U|_{x \rightarrow +\infty} = -SU_w + S^2 Y,$$

$$1b. \quad U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = -S^2(x) \frac{dp}{dx} + \frac{1}{S(x)} \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{S'(x)}{S(x)} U^2, \quad \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0, \quad (2.8)$$

$$U(x, 1) = 0, \quad V(x, 1) = V^-(x, 1), \quad \left. \frac{\partial U}{\partial Y} \right|_{Y \rightarrow +\infty} = S^2(x), \quad U|_{x \rightarrow -\infty} = -SU_w + S^2 Y, \quad \left. \frac{\partial U}{\partial Y} \right|_- = \left. \frac{\partial U}{\partial Y} \right|_+.$$

Результаты численных расчетов показали существенный рост вертикальной скорости V на линии раздела потоков и наклона функции $S(x)$ вблизи точки $x_* \approx -0.48$ при стремлении параметра к критическому значению $M \rightarrow M_* \approx 0.7$ (фиг. 3а,б). При дальнейшем увеличении параметра M численное решение задачи перестает сходиться, что свидетельствует об отсутствии решений с противотоками при сильном отрицательном градиенте давления. В расчетах использовался метод, развитый в [13] и [15].

В предельном решении наблюдается существенное уменьшение касательного напряжения на границе противотоков вблизи указанной точки. Картина поля течения в трансформированных переменных представляет собой две открытые и одну крупную замкнутую висячую отрывную область, а в целом течение обладает локальной симметрией относительно линии раздела потоков (фиг. 4). Внутри замкнутой отрывной области формируется заметное сгущение вертикальных линий тока, именно около точки $x_* \approx -0.48$, в которой достигается максимальная вертикальная скорость течения. Как и в работе [9], сингулярная точка формируется на фоне отрицательного градиента давления, который является неблагоприятным для пристенного возвратного течения.

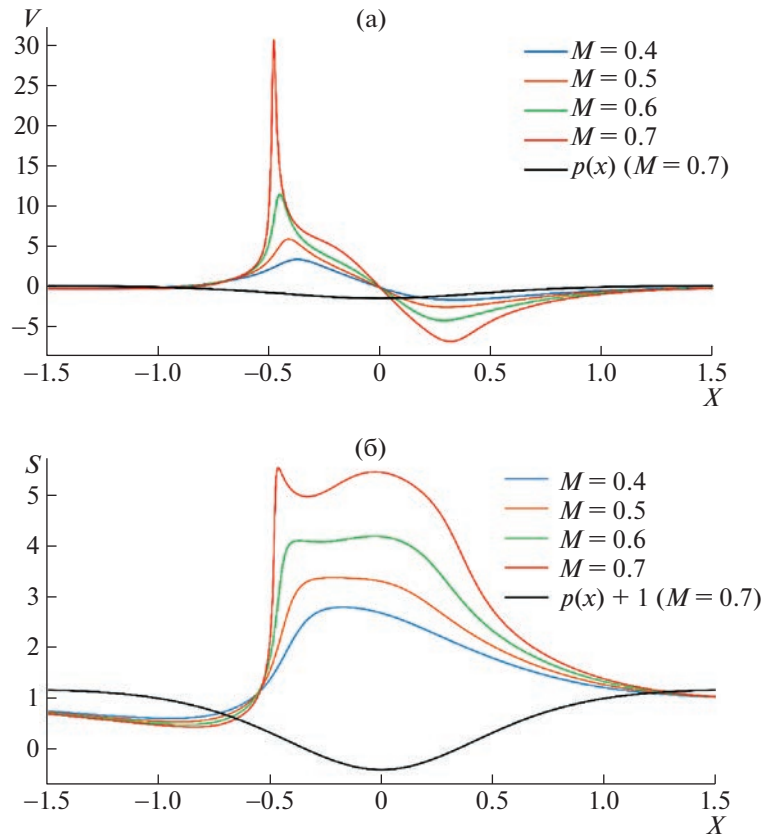
Однако, в отличие от результатов [9], анализ в представленном исследовании не содержит дополнительных предположений о структуре течения, а непосредственно вычисляется координата особенности, и она заметно отстоит от точки торможения, которой обычно приписывают начало зоны отрыва. Можно также сделать вывод об определяющем влиянии пристенного возвратного течения на все области вязкого подслоя.

3. АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕШЕНИЯ ВБЛИЗИ ОСОБОЙ ТОЧКИ

3.1. Поведение решения около линии раздела потоков

Прежде всего необходимо проанализировать решение задачи (2.7), (2.8) вблизи линии раздела противотоков. Для этого введем функцию тока ψ и будем искать для нее асимптотику при $Y \rightarrow 1$ в следующем виде:

$$\psi = \psi_0(x) + \frac{1}{2} \lambda(x) (Y-1)^2 + B(x) (Y-1)^3 + C(x) (Y-1)^4 + D(x) (Y-1)^5 + \dots \quad (3.1)$$



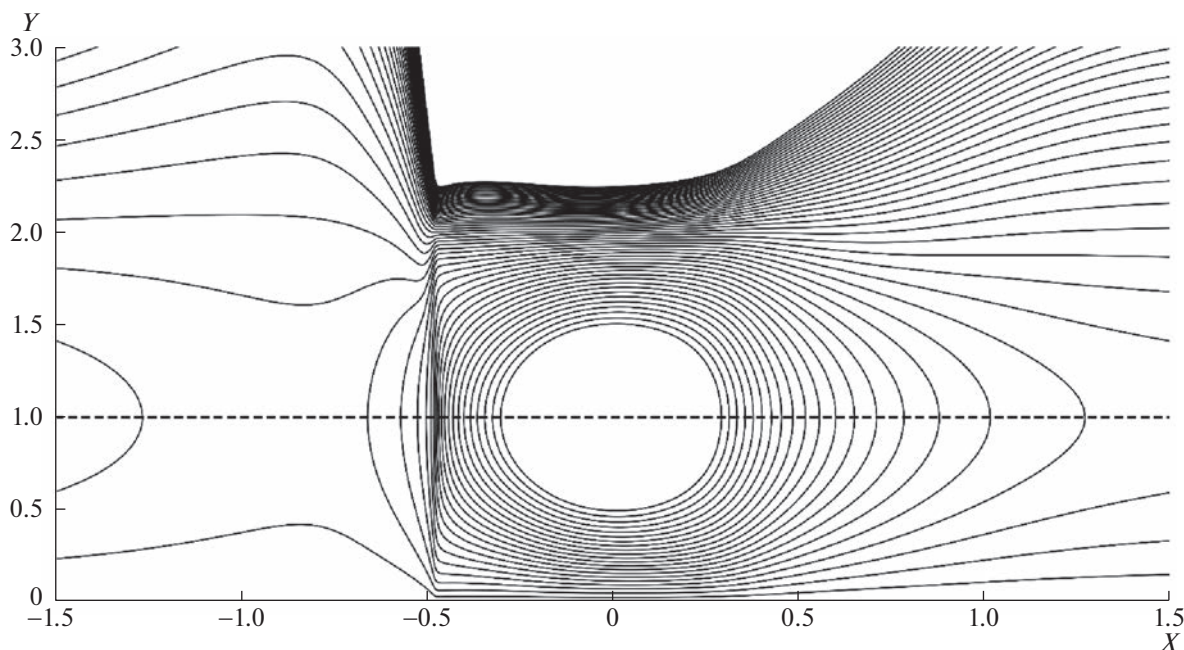
Фиг. 3. (а) – Распределение вертикальной скорости на линии раздела потоков, (б) – форма границы раздела потоков.

Подставим указанное разложение в уравнение импульса и, выделяя последовательно главные члены уравнения по переменной $(Y - 1)$, получим

$$\begin{aligned}
 O(1): \quad -\psi'_0 \cdot \lambda &= -S^2 \frac{dp}{dx} + \frac{6B}{S} \Rightarrow 6B(x) = S \left[S^2 \frac{dp}{dx} - \lambda \psi'_0 \right], \\
 O(Y - 1): \quad -6B\psi'_0 &= \frac{24C}{S} \Rightarrow 24C(x) = -S^2 \psi'_0 \left[S^2 \frac{dp}{dx} - \lambda \psi'_0 \right], \\
 O((Y - 1)^2): \quad \frac{1}{2} \lambda \lambda' - \psi'_0 12C &= \frac{60D}{S} + \frac{S'}{S} \lambda^2 \Rightarrow 60D(x) = S \left[\frac{1}{2} \lambda \lambda' - \psi'_0 12C \right] - S' \lambda^2.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Таким образом, зная $\psi_0(x)$, $\lambda(x)$, $S(x)$ и dp/dx , можно вычислить последовательно все остальные функции в искомом ряду Тейлора. Но нас интересует решение, в котором при приближении к точке $x_* \approx -0.48$ вязкое напряжение $\lambda(x)$ стремится к нулю, вертикальная скорость $-\psi'_0(x)$ — в бесконечность, а их произведение балансируется заданным конечным градиентом давления. Такое поведение решения следует из численных расчетов при $M \rightarrow M_* \approx 0.7$. Будем искать асимптотики искомых коэффициентов в представлении (3.1) при $x \rightarrow x_* + 0$ в виде

$$\begin{aligned}
 S(x) &= S_0 + S_1(x - x_*)^\delta + \dots, \quad S_0 = 4.85, \quad S_1 > 0, \\
 \lambda(x) &= \lambda_1(x - x_*)^\alpha + \lambda_2(x - x_*)^{2\alpha} + \lambda_3(x - x_*)^{\alpha+\delta} + \dots, \quad \lambda_1 > 0, \quad \alpha \leq \delta < 1, \\
 \psi_0(x) &= \psi_{00} + c_1(x - x_*)^{1-\alpha} + c_2(x - x_*) + c_3(x - x_*)^{1-\alpha+\delta} + \dots, \quad \psi_{00} = -1.16, \\
 \psi'_0 &= (1 - \alpha)c_1(x - x_*)^{-\alpha} + c_2 + (1 - \alpha + \delta)c_3(x - x_*)^{-\alpha+\delta} + \dots \quad c_1 < 0.
 \end{aligned}$$



Фиг. 4. Поле течения при критическом значении параметра.

Подставляя данные разложения в формулы (3.2) для вычисления коэффициентов ряда по $(Y - 1)$, потребуем баланс градиента давления и произведения напряжения на вертикальную скорость, а также дадим оценки следующих членов разложения:

$$\lambda_1(1 - \alpha)(-c_1) = S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) \Big|_0, \quad B = O((x - x_*)^\alpha), \quad C = O(1).$$

С учетом сказанного, получаем представление функции тока вблизи линии раздела в окрестности точки $x = x_*$

$$\Psi = \Psi_{00} + c_1(x - x_*)^{1-\alpha} + \frac{1}{2}\lambda_1(x - x_*)^\alpha(Y - 1)^2 + \text{const} \cdot (x - x_*)^\alpha(Y - 1)^3 + \text{const} \cdot (Y - 1)^4 + \dots \quad (3.3)$$

Таким образом, найдено решение общего вида, справедливое для вязких уравнений вблизи линии раздела (сверху и снизу) и вблизи особой точки с почти нулевым трением и почти бесконечной вертикальной скоростью. Любая асимптотика из нижнего или верхнего слоев не должна противоречить указанному представлению (3.3). Что же касается показателей степеней в данном выражении, то они отыскиваются традиционно при рассмотрении более полной асимптотики, что и будет проделано далее. Отметим, что при $x = x_*$ асимптотика функции тока (3.3) примет вид $\Psi_0(Y) = \Psi_{00} + C_0(Y - 1)^4 + \dots$ при $Y \rightarrow 1$, где константа C_0 определяется развитием всего пограничного слоя, а функция $(Y - 1)^4$ соответствует симметричному решению в численном расчете.

3.2. Поведение решения в области возвратных токов

На следующем этапе целесообразно проанализировать основной слой жидкости, текущий вверх по потоку, при подходе к особой точке $x \rightarrow x_* + 0$, $Y \in [0; 1]$, учитывая, что в систему уравнений и граничные условия на стенке входит функция $S(x)$:

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_0(Y) + (x - x_*)^\delta \Psi_1(Y) + (x - x_*)^{2\delta} \Psi_2(Y) + \dots + (x - x_*)^\delta \Psi_3(Y) + \dots, \\ S &= S_0 + S_1(x - x_*)^\delta + \dots, \quad S_0 > 0, \quad S_1 > 0, \quad \delta < 1, \\ U(x, 0) &= \frac{\partial \Psi}{\partial Y} = -S(x) \cdot U_w = -S_0 U_w - (x - x_*)^\delta S_1 U_w + \dots \end{aligned} \quad (3.4)$$

Подставляя данные координатные разложения в уравнения, последовательно найдем

$$\underline{O((x - x_*)^{\delta-1})}: \quad \Psi'_0 \Psi'_1 - \Psi_1 \Psi''_0 = \frac{S_1}{S_0} (\Psi'_0)^2 \quad \Rightarrow \quad \Psi_1 = \frac{S_1}{S_0} Y \Psi'_0 \Big|_{Y \rightarrow 1-} = 4C_0 \frac{S_1}{S_0} (Y-1)^3 + \dots,$$

$$\underline{O((x - x_*)^{2\delta-1})}: \quad \Psi'_0 2\Psi'_2 + \Psi'_1 \Psi'_1 - \Psi_1 \Psi''_1 - 2\Psi_2 \Psi''_0 = -\left(\frac{S_1}{S_0}\right)^2 (\Psi'_0)^2 + \frac{S_1}{S_0} 2\Psi'_0 \Psi'_1,$$

$$\Psi_2 = D(Y) \Psi'_0 \Big|_{Y \rightarrow 1-} = 6C_0 \left(\frac{S_1}{S_0}\right)^2 (Y-1)^2 + \dots,$$

$$D = \frac{1}{2} \left(\frac{S_1}{S_0}\right)^2 \int_0^Y \left[2 \frac{\Psi'_0 \Psi''_0}{(\Psi'_0)^2} Y + \frac{\Psi'_0 \Psi'''_0}{(\Psi'_0)^2} Y^2 - \left(\frac{\Psi''_0}{\Psi'_0} Y\right)^2 \right] dY,$$

$$\underline{O(1)}: \quad \Psi'_0 \Psi'_3 - \Psi_3 \Psi''_0 = -S_0^2 \frac{dp}{dx} \Big|_0 + \frac{1}{S_0} \Psi'''_0 \quad \Rightarrow \quad \Psi_3 = R(Y) \Psi'_0 \Big|_{Y \rightarrow 1-} = \frac{S_0^2}{20C_0} \frac{dp}{dx} \Big|_0 \frac{1}{(y-1)^2} + \dots,$$

$$R(Y) = \int_0^Y \left[-S_0^2 \frac{dp}{dx} \Big|_0 \frac{1}{(\Psi'_0)^2} + \frac{1}{S_0} \frac{\Psi'''_0}{(\Psi'_0)^2} \right] dY.$$

Нетрудно увидеть, что равномерная пригодность координатного разложения (3.4) нарушается при приближении к линии раздела $Y \rightarrow 1-$, а именно, поведение функции тока следующее:

$$\begin{aligned} \Psi = & \Psi_{00} + C_0 (Y-1)^4 + \frac{4C_0 S_1}{S_0} (x - x_*)^\delta (Y-1)^3 + \\ & + 6C_0 \left(\frac{S_1}{S_0}\right)^2 (x - x_*)^{2\delta} (Y-1)^2 + \frac{S_0^2}{20C_0} \frac{dp}{dx} \Big|_0 \frac{(x - x_*)}{(Y-1)^2} + \dots, \end{aligned} \quad (3.5)$$

поэтому необходимо рассмотреть отдельно тонкий слой жидкости в области вблизи самой линии раздела при $x \rightarrow x_* +$. Из (3.5) следует, что в слое $(Y-1) \sim (x - x_*)^{1/6}$ течение является невязким, нелинейным и зависит от свойств $\Psi_0(y)$ и градиента давления. Параметр $\delta > 1/6$ остается произвольным.

3.3. Асимптотика решения в тонком невязком слое

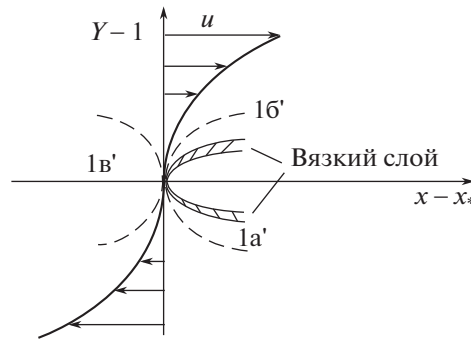
Отталкиваясь от (3.5), введем координатное разложение в слое 1a' (фиг. 5) и найдем

$$\Psi = \Psi_{00} + (x - x_*)^{2/3} f(\eta) + \dots, \quad \eta = \frac{Y-1}{(x - x_*)^{1/6}}, \quad \eta = O(1),$$

$$u = \frac{\partial \Psi}{\partial y} = (x - x_*)^{1/2} f'(\eta) + \dots, \quad v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = (x - x_*)^{-1/3} \left[-\frac{2}{3} f + \frac{1}{6} \eta f' \right], \quad (3.6)$$

$$\frac{1}{2} (f'')^2 - \frac{2}{3} f f''' = S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \Big|_0 \right) \quad \Rightarrow \quad g(f) = f'(\eta) \quad \Rightarrow \quad f''(\eta) = g'_f g.$$

Функция тока $f(\eta)$ положительна во внешней части слоя 1a', разделенного заштрихованной тонкой вязкой областью, и при $\eta \rightarrow -\infty$ должна срачиваться с решением в основной части возвратного течения, и отрицательна во внутренней части слоя 1a' вблизи самой линии, что следует из результатов расчета. Уместно искать решение задачи раздельно в областях с разными знаками функции тока и требовать равенство нулю продольной скорости u на линии раздела противото-



Фиг. 5. Структура течения вблизи особой точки.

ков при $\eta = 0$. Отметим, что найдется точка $\eta = \eta_s < 0$, в которой $f(\eta_s) = 0$, и тогда решение во внешней части слоя $1a'$ примет вид

$$\eta = (-\infty; \eta_s]; \quad f = (+\infty; 0], \quad \eta_s < 0, \quad f(\eta_s) = 0, \quad f_{\eta \rightarrow -\infty} = C_0 \eta^4 + \dots, \quad (3.8)$$

$$f'(\eta) = -\left[16\sqrt{C_0}f^{3/2} + 2S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)\right]^{1/2}, \quad f'' = 12\sqrt{C_0}f^{1/2}, \quad f''' = 6\sqrt{C_0}f^{-1/2}f',$$

и во внутренней —

$$\eta = [\eta_s; 0]; \quad f = [0; f_0], \quad f_0 = f(0) < 0, \quad f'(\eta) = -\sqrt{2S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)}\left[1 - \frac{(-f)^{3/2}}{(-f_0)^{3/2}}\right]^{1/2}, \quad (3.9)$$

$$f'' = S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)\frac{3(-f)^{1/2}}{2(-f_0)^{3/2}}, \quad f''' = -S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)\frac{3(-f)^{-1/2}}{4(-f_0)^{3/2}}f'.$$

Таким образом, найдено решение в тонком нелинейном слое, которое сращивается с основным возвратным течением, и во внутреннем слое, в котором удастся выполнить условие равенства нулю продольной скорости на линии раздела противотоков. Отметим, что во внутреннем слое течение развивается исключительно благодаря действию заданного градиента давления, а во внешнем слое поток испытывает совместное влияние основного возвратного течения и тормозящего градиента давления. Найдена линия $\eta = \eta_s < 0$, разделяющая изучаемую область на два таких слоя. На этой линии переменная часть функции тока принимает нулевое значение, продольные скорости выше и ниже ее равны друг другу, а завихренность обращается локально в нуль. Однако производные завихренности f''' принимают бесконечно большие значения, что требует введения еще одного, но вязкого подслоя для сглаживания решения.

3.4. Вязкий подслой, сглаживающий завихренность в невязком потоке

Введем вязкий подслой внутри зоны $1a'$ (заштрихованная область) около линии разрыва производной завихренности $Y_s = 1 + (x - x_*)^{1/6} \eta_s$. Физическое объяснение для появления такого слоя очень простое: завихренность в возвратном течении порождается на движущейся стенке и на границе раздела противотоков, а их согласование возможно только с учетом вязкой диффузии. Для оценки его толщины выпишем поведение функции тока во внешней части слоя $1a'$ вблизи линии $\eta = \eta_s$:

$$f(\eta)|_{\eta \rightarrow \eta_s-} = -\sqrt{2S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)}(\eta - \eta_s) + c(\eta_s - \eta)^{5/2} + \dots, \quad c = \frac{16}{5}\sqrt{C_0}\left[2S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)\right]^{1/4},$$

$$f'(\eta)|_{\eta \rightarrow \eta_s-} = -\sqrt{2S_0^2\left(-\frac{dp}{dx_0}\right)} - \frac{5}{2}c(\eta_s - \eta)^{3/2} + \dots, \quad f''(\eta)|_{\eta \rightarrow \eta_s-} = \frac{15}{4}c(\eta_s - \eta)^{1/2},$$

и во внутренней части слоя

$$f(\eta)|_{\eta \rightarrow \eta_s+} = -\sqrt{2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right)} (\eta - \eta_s) + d(\eta - \eta_s)^{5/2} + \dots, \quad d = \frac{1}{5} \frac{1}{(-f_0)^{3/2}} \left[2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) \right]^{5/4},$$

$$f'(\eta)|_{\eta \rightarrow \eta_s+} = -\sqrt{2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right)} + \frac{5}{2} d(\eta - \eta_s)^{3/2} + \dots, \quad f''(\eta)|_{\eta \rightarrow \eta_s+} = \frac{15}{4} d(\eta - \eta_s)^{1/2} + \dots$$

Подстановка полученных выражений в исходное уравнение импульсов (2.3), (2.8) и сравнение его инерционных и вязких членов (подчеркнуты снизу):

$$S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) + \frac{5}{2} c \sqrt{2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right)} (\eta_s - \eta)^{3/2} - \frac{5}{2} c \sqrt{2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right)} (\eta_s - \eta)^{3/2} =$$

$$= -S_0^2 \frac{dp}{dx} - \frac{1}{S_0} \frac{15}{8} c (x - x_*)^{1/6} (\eta_s - \eta)^{-1/2},$$

даёт оценку толщины вязкого слоя

$$(\eta_s - \eta) \sim (x - x_*)^{1/12} \Rightarrow \eta = \eta_s + (x - x_*)^{1/12} \sigma,$$

$$Y = 1 + (x - x_*)^{1/6} \eta = 1 + (x - x_*)^{1/6} \eta_s + (x - x_*)^{3/12} \sigma, \quad \sigma \in (-\infty; +\infty),$$

$$\sigma = \frac{Y - 1 - (x - x_*)^{1/6} \eta_s}{(x - x_*)^{6/24}} = O(1).$$

Подставляя новые переменные в линеаризованное представление функции тока, укажем иско-
мое координатное разложение функции тока в этом вязком слое при $x \rightarrow x_* +$:

$$\Psi = \Psi_{00} - (x - x_*)^{18/24} \sqrt{2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right)} \sigma + (x - x_*)^{21/24} F(\sigma) + \dots, \quad (3.10)$$

$$F(\sigma)|_{\sigma \rightarrow -\infty} = c(-\sigma)^{5/2} + \dots, \quad F(\sigma)|_{\sigma \rightarrow +\infty} = d\sigma^{5/2} + \dots, \quad \sigma = \frac{y - 1 - (x - x_*)^{1/6} \eta_s}{(x - x_*)^{6/24}} = O(1).$$

Подстановка разложения в уравнение импульса и совершение предельного перехода позволяет сформулировать задачу в вязком слое относительно функции $F(\theta)$:

$$\sigma = E\theta, \quad E = \frac{2\sqrt{2}}{3S_0} \left(2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) \right)^{-1/4}, \quad (3.11)$$

$$F''' - \frac{2}{3} \theta F'' + F' = 0, \quad F(\theta)|_{\theta \rightarrow -\infty} = E^{5/2} c (-\theta)^{5/2} + \dots, \quad F(\theta)|_{\theta \rightarrow +\infty} = E^{5/2} d (\theta)^{5/2} + \dots$$

У сформулированной задачи можно понизить порядок дифференциального уравнения заменой переменных $g = F'$:

$$g'' - \frac{2}{3} \theta g' + g = 0, \quad g(\theta)|_{\theta \rightarrow -\infty} = -\frac{5}{2} E^{5/2} c (-\theta)^{3/2} + \dots, \quad g(\theta)|_{\theta \rightarrow +\infty} = \frac{5}{2} E^{5/2} d (\theta)^{3/2} + \dots, \quad (3.12)$$

а также свести его к вырожденному гипергеометрическому уравнению еще одной заменой, и в результате получим краевую задачу

$$g = \theta \cdot g_1(\xi), \quad \xi = \frac{\theta^2}{3}, \quad \theta \cdot g_1|_{\theta \rightarrow -\infty} = -\frac{5}{2} E^{5/2} c (-\theta)^{3/2} + \dots, \quad \theta \cdot g_1|_{\theta \rightarrow +\infty} = \frac{5}{2} E^{5/2} d (\theta)^{3/2} + \dots,$$

$$\xi \frac{d^2 g_1}{d\xi^2} + \left(\frac{3}{2} - \xi \right) \frac{dg_1}{d\xi} + \frac{1}{4} g_1 = 0, \quad (3.13)$$

$$g_1|_{\theta \rightarrow -\infty} = \frac{5}{2} E^{5/2} c (-\theta)^{1/2} + \dots = \frac{5}{2} E^{5/2} c [(-\theta)^2]^{1/4} + \dots = \frac{5 \cdot 3^{1/4}}{2} E^{5/2} c \xi^{1/4} + \dots,$$

$$g_1|_{\theta \rightarrow +\infty} = \frac{5}{2} E^{5/2} d (\theta)^{1/2} + \dots = \frac{5}{2} E^{5/2} d [\theta^2]^{1/4} + \dots = \frac{5 \cdot 3^{1/4}}{2} E^{5/2} d \xi^{1/4} + \dots$$

У этого уравнения есть решение, растущее алгебраически (см. [16]):

$$g_1 = U(a, b, \xi) = U\left(-\frac{1}{4}, \frac{3}{2}, \frac{\theta^2}{3}\right), \quad U(a, b, \xi)|_{\xi \rightarrow +\infty} = \xi^{-a} + \dots = \xi^{1/4} + \dots = \left(\frac{\theta^2}{3}\right)^{1/4} + \dots,$$

$$U(a, b, \xi)|_{\xi \rightarrow 0} = \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} \xi^{1-b} + \dots = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(-\frac{1}{4})} \xi^{-1/2} + \dots = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(-\frac{1}{4})} \left(\frac{\theta^2}{3}\right)^{-1/2} + \dots$$

В результате найдено решение, удовлетворяющее обоим граничным условиям, если $d = c$:

$$F' = g = 3^{1/4} \frac{5}{2} c \cdot E^{5/2} \cdot \theta \cdot U\left(-\frac{1}{4}, \frac{3}{2}, \frac{\theta^2}{3}\right). \quad (3.14)$$

Получен принципиально важный результат — гладкое решение в вязком подслое существует на всей действительной оси, а это означает непротиворечивость построенной асимптотики во всей области возвратного течения. Указано условие разрешимости задачи

$$d = c \Rightarrow S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx_0} \right) = 8\sqrt{C_0} (-f_0)^{3/2}. \quad (3.15)$$

3.5. Асимптотика решения в тонком слое выше линии раздела

Функция тока $f(\eta)$ положительна во внешней части слоя $16'$ и при $\eta \rightarrow +\infty$ должна сражаться с решением в основной части прямого течения и отрицательна в некоторой области вблизи самой линии раздела (внутренняя часть слоя $16'$), что соответствует симметричной картине линий тока. Решение задачи полностью аналогично невязкой зоне ниже линии раздела, необходимо лишь заменить знак скорости. Отметим, что найдется точка $\eta = -\eta_s > 0$, в которой $f(-\eta_s) = 0$, и тогда решение во внешней части слоя $16'$ примет вид

$$\eta = [(-\eta_s); +\infty); \quad f = (0; +\infty], \quad (-\eta_s) > 0, \quad f(-\eta_s) = 0, \quad f_{\eta \rightarrow +\infty} = C_0 \eta^4 + \dots,$$

$$f'(\eta) = \left[16\sqrt{C_0} f^{3/2} + 2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx_0} \right) \right]^{1/2}, \quad f'' = 12\sqrt{C_0} f^{1/2}, \quad f''' = 6\sqrt{C_0} f^{-1/2} f', \quad (3.16)$$

и во внутренней —

$$\eta = [0; (-\eta_s)]; \quad f = [f_0; 0], \quad f_0 = f(0) < 0, \quad f'(\eta) = \sqrt{2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx_0} \right)} \left[1 - \frac{(-f)^{3/2}}{(-f_0)^{3/2}} \right]^{1/2},$$

$$f'' = S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx_0} \right) \frac{3(-f)^{1/2}}{2(-f_0)^{3/2}}, \quad f''' = -S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx_0} \right) \frac{3(-f)^{-1/2}}{4(-f_0)^{3/2}} f'. \quad (3.17)$$

Найдена линия $\eta = (-\eta_s) > 0$, разделяющая изучаемую область на два таких слоя. На этой линии переменная часть функции тока принимает нулевое значение, продольные скорости выше и ниже ее равны друг другу, а завихренность обращается локально в нуль. Однако производные завихренности, пропорциональные f''' , принимают бесконечно большие значения, что требует введение еще одного, но вязкого подслоя для сглаживания решения (заштрихованная область на фиг. 5 в слое $16'$). Решение задачи в вязком подслое существует и его можно найти схожим образом, как и в п. 3.4.

3.6. Асимптотика решения слева перед особой точкой в области $1в'$

Для полного рассмотрения решения задачи вблизи особой точки в поле течения необходимо изучить поток слева от точки $x = x_*$. В соответствии с численными расчетами возвратное течение ниже линии раздела потоков проходит зону влияния особой точки, вертикальная скорость заметно убывает и постепенно течение выравнивается. Выше линии раздела протокотоков ситуация обратная: прямое течение при приближении слева к особой точке испытывает влияние растущей вертикальной скорости и благоприятного градиента давления одновременно. Вязкое на-

пряжение убывает в соответствии с условием равенства напряжений (2.5) ниже и выше линии раздела, а произведение напряжения на вертикальную скорость должно оставаться конечной величиной согласно (3.3).

Введем тонкий невязкий слой слева от особой точки (1в', фиг. 5), в нем координатное разложение решения имеет вид, схожий с разложением справа от особой точки, и после подстановки в задачу получим уравнение

$$\begin{aligned}\Psi &= \Psi_{00} + (x_* - x)^{2/3} f(\eta) + \dots, \quad \eta = \frac{Y - 1}{(x_* - x)^{1/6}}, \quad \eta = O(1), \\ u = \frac{\partial \Psi}{\partial Y} &= (x_* - x)^{1/2} f'(\eta) + \dots, \quad v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = (x_* - x)^{-1/3} \left[\frac{2}{3} f - \frac{1}{6} \eta f' \right], \\ -\frac{1}{2}(f')^2 + \frac{2}{3} f f'' &= S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) \Rightarrow g(f) = f'(\eta) \Rightarrow f''(\eta) = g'_f g, \\ \frac{1}{3} f(g^2)' - \frac{1}{2} g^2 &= S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right).\end{aligned}\tag{3.18}$$

Функция тока $f(\eta)$ положительна при стремлении и вниз, и вверх от линии раздела потоков и при $\eta \rightarrow \pm\infty$ должна срачиваться с решением в основной части возвратного течения и в основной части прямого течения. Значение продольной скорости на линии раздела должно обнуляться, и тогда решение имеет вид

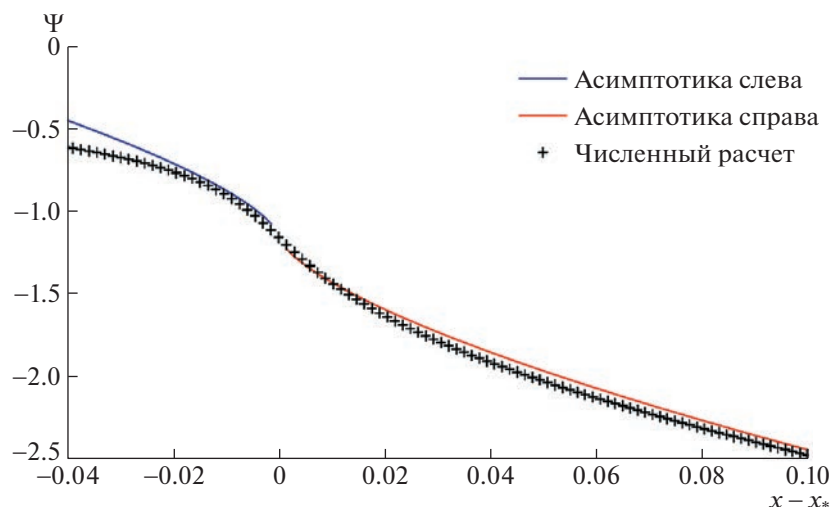
$$\begin{aligned}\eta = (-\infty; 0]: \quad f'(\eta) &= -\left[16\sqrt{C_0} f^{3/2} - 2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) \right]^{1/2}, \\ \eta = [0; +\infty): \quad f'(\eta) &= \left[16\sqrt{C_0} f^{3/2} - 2S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) \right]^{1/2}, \\ f_{\eta \rightarrow \pm\infty} &= C_0 \eta^4 + \dots, \quad f'' = 12\sqrt{C_0} f^{1/2}, \quad f''' = 6\sqrt{C_0} f^{-1/2} f', \\ f'(0) = 0 &\Rightarrow \left[f_0^- \right]^{3/2} = \frac{S_0^2}{8\sqrt{C_0}} \left(-\frac{dp}{dx} \right).\end{aligned}\tag{3.19}$$

Таким образом, формулы (3.18), (3.19) дают асимптотическое представление решения в тонком нелинейном невязком слое; такое представление срачивается как с основным возвратным течением, так и с основным прямым течением. Каких-либо разрывов, требующих участия вязких сил, в решении нет, в отличие от возвратного течения справа от особой точки. Выполнив условие равенства нулю продольной скорости на линии раздела, удалось вычислить величину коэффициента в поведении функции тока на самой линии раздела $f(0) = f_0^-$. Если воспользоваться условием разрешимости задачи в вязком подслое (3.15), то получим связь между функциями тока слева и справа от особой точки:

$$\begin{aligned}S_0^2 \left(-\frac{dp}{dx} \right) &= 8\sqrt{C_0} (-f_0)^{3/2}, \quad (f_0^-)^{3/2} = \frac{S_0^2}{8\sqrt{C_0}} \left(-\frac{dp}{dx} \right), \\ f_0^- &= -f_0.\end{aligned}\tag{3.20}$$

Функция тока на линии раздела противотоков из численного расчета и ее асимптоты, вычисленные по формулам (3.6), (3.9), (3.18) и (3.20), приведены на фиг. 6. Величина $f_0 = -6$ взята из расчетных данных.

Следует отметить, что для завершения подробного асимптотического анализа течения при стремлении интенсивности диполя M к критическому значению, необходимо определить поведение функции $S(x)$ вблизи особой точки, а именно, найти показатель степени δ в (3.4). Это не-



Фиг. 6. Сравнение функции тока на линии раздела противотоков с асимптотами, вблизи особой точки.

сложно сделать, если выписать двучленную асимптотику решения (3.8) при $\eta \rightarrow -\infty$ и подставить ее в разложение для функции тока:

$$f'(\eta) = -\left[16\sqrt{C_0}f^{3/2} + 2S_0^2\left(-\frac{dp}{dx}\right)\right]^{1/2}, \quad f_{\eta \rightarrow -\infty} = C_0\eta^4 + R_0\eta^3 + \dots, \quad \eta = \frac{Y-1}{(x-x_*)^{1/6}},$$

$$\Psi = \Psi_{00} + (x-x_*)^{2/3}f(\eta) + \dots \Big|_{\eta \rightarrow -\infty} = \Psi_{00} + C_0(Y-1)^4 + (x-x_*)^{1/6}R_0(Y-1)^3 + \dots$$

Поскольку функция тока в возвратном течении определяется именно поведением функции $S(x)$, то можно заключить, что $\delta = 1/6$.

3. ВЫВОДЫ

Изучено двумерное ламинарное течение в несжимаемом пограничном слое на поверхности, движущейся с постоянной малой скоростью вверх по потоку, и подверженное воздействию заданного градиента давления, индуцированного внешним диполем. Выполнены расчеты краевой задачи для вязкого подслоя с противотоками, и получено поле течения, содержащее крупную висячую замкнутую зону отрыва и две открытые области отрыва. С ростом интенсивности диполя обнаружено формирование предельного решения задачи, и для амплитуд диполя выше критической величины решение рассчитать не удастся.

Выполнен асимптотический анализ предельного состояния течения вблизи точки сгущения вертикальных линий тока внутри замкнутой зоны отрыва на фоне локально убывающего давления. В указанной точке на линии раздела противотоков вертикальная скорость неограниченно возрастает, а вязкое напряжение стремится к нулю, в то же время их произведение в точности балансируется заданным от диполя градиентом давления. Получено равномерно пригодное координатное разложение решения задачи во всех областях вокруг особой точки. Положение сингулярной точки заметно отличается от точки ветвления потоков, которой обычно приписывают начало зоны отрыва.

В отличие от особенности Гольдштейна, которая формируется в однонаправленном пограничном слое при воздействии заданного растущего давления, в случае течения с противотоками висячие отрывы возникают при любом сколь угодно малом возмущении давления. Поэтому в нашем случае заданное давление действует именно на отрывную картину течения, деформирует ее и порождает особую точку на линии раздела противотоков. Найденное решение означает доминирующую роль пристенного возвратного потока, подверженного действию неблагоприятного градиента давления. Прямое течение выше линии раздела носит подчиненный характер при формировании особенности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сычев В.В., Рубан А.И., Сычев Вук.В., Королев Г.Л. Асимптотическая теория отрывных течений. Под ред. Сычева В.В. М.: Наука. Гл. ред. Физ. Мат. литер., 1987.
2. Moore F.K. On the separation of the unsteady laminar boundary-layer. In Boundary Layer Research (ed. H. Görtler). Springer, 1958. P. 296–311.
3. Rott N. Unsteady viscous flow in the vicinity of a stagnation point // Q. Appl. Math. 1956. V. 13. № 4. P. 444–451.
4. Sears W.R. Some recent developments in airfoil theory // J. Aeronaut. Sci. 1956. V. 23. № 5. P. 490–499.
5. Timoshin S. Concerning marginal singularities in the boundary-layer flow on a downstream-moving surface // J. Fluid Mech. 1996. V. 308. P. 171–194.
6. Ruban A.I., Araki D., Yapalparvi R., Gajjar J.S.B. On unsteady boundary-layer separation in supersonic flow. Part 1. Upstream moving separation point // J. Fluid Mech. 2011. V. 678. P. 124–155.
7. Жук В.И. О локальных рециркуляционных зонах в сверхзвуковом пограничном слое на движущейся поверхности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1982. Т. 22. № 5. С. 249–255.
8. Yapalparvi R., Van Dommelen L. Numerical solution of unsteady boundary-layer separation in supersonic flow: Upstream moving wall // J. Fluid Mech. 2012. V. 706. P. 413–430.
9. Ruban A.I., Djehizian A., Kirsten J., Kravtsova M.A. On quasi-steady boundary-layer separation in supersonic flow. Part 2. Downstream moving separation point // J. Fluid Mech. 2020. V. 900. A9-1–A9-32.
10. Timoshin S.N., Thapa P. On-wall and interior separation in a two-fluid boundary layer // J. Engineer. Math. 2019. V. 199. P. 1–21.
11. Egorov I.V., Ilukhin I.M., Neiland V.Ya. Numerical modeling of the interaction between shock wave and boundary layer past moving surface // Fluid Dyn. 2020. V. 55. P. 110–117.
12. Gaifullin A.M., Zubtsov A.V. Asymptotic structure of unsteady flow over a semi-infinite plate with a moving surface // Fluid Dyn. 2013. V. 48. P. 77–88.
13. Чжун Т.Х., Безродных С.И., Заметаев В.Б. Несжимаемый пограничный слой с противотоками при заданном градиенте давления // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62. № 6. С. 1007–1015.
14. Сычев Вук.В. О ламинарном отрыве на медленно движущейся вверх по потоку поверхности // Ученые записки ЦАГИ. 2016. Т. 47. Вып. 3. С. 1–26.
15. Kravtsova M.A., Zametaev V.B., Ruban A.I. An effective numerical method for solving viscous-inviscid interaction problems // Philosophic. Transact. 2005. V. 363. № 1830. P. 1157–1167.
16. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука. Физматлит, 1979.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.63

STABILITY ANALYSIS OF POLYMERIZATION FRONTS¹⁾

© 2023 г. Y. Joundy¹, H. Rouah^{2,*}, A. Taik²

¹*Polydisciplinary Faculty of Sidi Bennour, Chouaib Doukkali University, El Jadida, Morocco*

²*Department of Mathematics, FSTM, Laboratory of Mathematics and Applications,
University Hassan II-Casablanca, PO Box 146, Mohammedia, Morocco*

**e-mail: rouah.hamzaa@gmail.com*

Поступила в редакцию 07.07.2023 г.

Переработанный вариант 07.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Анализ устойчивости фронтов полимеризации. В статье исследуется влияние некоторых параметров на условия устойчивости фронта реакции в жидкой среде. Математическая модель состоит из уравнения теплопроводности, уравнения концентрации и уравнения Навье—Стокса в приближении Буссинеска. Асимптотический анализ проводился с использованием приближения, предложенного Зельдовичем и Франк-Каменецким для решения проблемы интерфейса. Анализ стабильности был проведен для получения линеаризованной задачи, которая будет решаться численно с использованием мультикватерного радиального базиса методом функции для нахождения конвективного порога. Это позволит сделать вывод о влиянии каждого параметра на стабильность фронта, в частности амплитуду и резонансную частоту.

Ключевые слова: анализ устойчивости, асимптотический анализ, метод мультикватерных радиальных базисных функций, фронтальный анализ, полимеризация, уравнения реакции-диффузии.

DOI: 10.31857/S0044466923120165, **EDN:** UTZEDY

¹⁾Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.635

GENERALISATION OF THE PENALISED WALL FUNCTION METHOD FOR THE SIMULATION OF TURBULENT FLOWS WITH UNFAVOURABLE PRESSURE GRADIENTS¹⁾

© 2023 г. O. V. Vasilyev^{1,*}, N. S. Zhdanova^{1,**}

¹*Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS, Miusskaya sq., 4, Moscow, 125047, Russia*

**e-mail: oleg.v.vasilyev@gmail.com,*

***e-mail: nat.zhdanova@gmail.com*

Поступила в редакцию 08.03.2023 г.

Переработанный вариант 17.08.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Обобщение метода пенализированных пристеночных функций для моделирования турбулентных течений с неблагоприятным градиентом давления. Метод пенализированных пристеночных функций разработан для расчета пристеночных областей турбулентных течений в задачах численного моделирования вязких сжимаемых течений. В основе метода — дифференциальное условие сшивки внешнего решения с пристеночной функцией, в котором используется обобщение метода характеристических штрафных функций для переноса касательного напряжения из внешней области пограничного слоя на поверхность тела. В работе представлены модификации метода относительно его первоначальной формулировки, которые позволили расширить область его применения на задачи моделирования течений в присутствии внешнего градиента давления, вызывающего формирование зон отрыва и присоединения, а также использовать расчетные сетки более грубого пристеночного разрешения. Эти преимущества продемонстрированы на примере решения двух тестовых задач: задач безградиентного обтекания пластины и обтекания пластины в присутствии неблагоприятного градиента давления.

Ключевые слова: характеристические штрафные функции, турбулентное течение, закон Рейхарда, метод пристеночных функций.

DOI: 10.31857/S0044466923120268, **EDN:** AQAJTQ

¹⁾Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.632

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ И ПОСТРОЕНИЕ ГАРМОНИЧЕСКИХ СЕТОК В ОБЛАСТЯХ С УГЛАМИ И ВЫЕМКАМИ¹⁾

© 2023 г. С. И. Безродных^{1,*}, В. И. Власов^{1,**}¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 44, корп. 2, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: sbezrodnykh@mail.ru

**e-mail: vlasovvi46@gmail.com

Поступила в редакцию 10.03.2023 г.

Переработанный вариант 08.04.2023 г.

Принята к публикации 14.05.2023 г.

Представлен обзор ряда работ, посвященных трудностям построения гармонических сеток в плоских областях с углами и выемками, а также приведены некоторые новые результаты. Известно, что гармоническая сетка, построенная с помощью общепринятых методов в областях с выемками или входящими (т.е. большими π) углами, может содержать такие дефекты, как ее самопересечение или выход за пределы области. Установлено, что вблизи вершины входящего угла эти дефекты вытекают из построенной в работе асимптотики используемого гармонического отображения, согласно которой изолиния, исходящая из этой вершины, касается в ней одной из сторон угла (т.е. возникает эффект “прилипания”), за исключением особого случая. Для трех типов областей $\mathcal{L}$ с углами или выемками (L -образной, подковообразной и области с прямоугольным вырезом), применение к которым общепринятых методов построения гармонической сетки наталкивается на известные трудности, дан обзор известных результатов. Применение к этим областям метода мультиполей позволило получить их гармоническое отображение с высокой точностью: апостериорная оценка погрешности отображения в норме $C(\mathcal{L})$ составила 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций. Библ. 53. Фиг. 19.

Ключевые слова: гармонические отображения, области g с углами и выемками, асимптотика отображения вблизи вершин углов, аналитико-численный метод построения гармонического отображения, апостериорная оценка погрешности в норме $C(\bar{g})$, метод мультиполей.

DOI: 10.31857/S0044466923120062, EDN: RDOLTG

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. Общие замечания

Распространенный способ генерации регулярных четырехугольных расчетных сеток $\mathfrak{Z}$ в плоских областях $\mathcal{L}$ сложной формы, использующий гармоническое отображение (см. [1–8]), основан на подходе Уинслоу (см. [9]), который сводит построение такого отображения $\mathcal{F}$ к решению квазилинейной эллиптической системы уравнений второго порядка в канонической области (например, в прямоугольнике). Для решения этой системы были предложены как конечно-разностные (см. [10, 11]), так и вариационные методы (см. [12–16]), получившие глубокое развитие и позволившие успешно применить генерируемую сетку к широкому кругу научно-технических проблем (см. [10–43]).

Вместе с тем в ряде случаев такой подход наталкивается на серьезные вычислительные трудности (см. [17–26, 33, 35–40]), которые проявляются в том, что генерируемая сетка имеет низкое качество или у нее возникают такие дефекты, как самоналегание или выход за пределы расчетной области, что делает такую сетку непригодной для использования.

Здесь рассмотрены некоторые из таких трудностей и проведен аналитический обзор работ, где они встречались. Одна из трудностей (см. [15, 22, 23–40]), возникающая вблизи вершины входящего угла (рассмотренная в подпункте 2.2.2), вызвана эффектом “прилипания”, когда изо-

¹⁾ В.И.Власовым работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках реализации программы Московского центра фундаментальной и прикладной математики по соглашению № 075-15-2022-284.

линия отображения, исходящая из вершины угла, касается в ней одной из сторон угла, за исключением особого случая. Дано теоретическое объяснение этого эффекта (см. подпункт 3.3.4), основанное на проведенном (см. разд. 3) исследовании сингулярного поведения отображения $\mathcal{F}$ вблизи вершины угла, включающем получение соответствующих асимптотик; исследование является развитием работ [48, 49].

Такие же трудности при построении отображения $\mathcal{F}$ (и, как следствие, дефекты сетки $\mathfrak{Z}$) возникают и для областей с выемками (см. [14–17, 19, 20, 22–26, 33–39]).

Для известной области с полукруговой выемкой (такую область называют подковообразной) в работах [22, 33, 36–39] проводились исследования по изучению и преодолению трудностей, возникающих при построении в ней гармонической сетки (см. подпункты 2.3.1 и 2.3.2). Применение к этой задаче метода мультиполей (см. [44–46]), кратко изложенного в п. 4.1, позволило в работах [34, 47] получить ее решение (см. п. 4.3) с высокой точностью.

Применение этого метода в п. 4.2 к ряду областей L -образной формы (такие области широко используются в различных задачах) обеспечило генерацию их гармонического отображения с высокой точностью (см. подпункт 2.2.3) и позволило численно проиллюстрировать эффект “прилипания”, возникающий вблизи вершины входящего угла этих областей.

Те же трудности при построении гармонической сетки – ее самоналегание или выход за пределы исходной области – возникают, как показано в работах [15, 19, 22, 25], для областей, содержащих прямоугольный вырез. Применение и к этим областям метода мультиполей позволило, согласно результатам из [53] и их развитию в п. 4.4, построить высокоточное отображение: апостериорная оценка его погрешности в норме $C(\overline{\mathcal{L}})$ составила, как и для рассмотренных L -образной и подковообразной областей, величину 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций.

Отметим, что численные результаты, приведенные на фиг. 6–10, заимствованы из работ Б.Н. Азаренка, а часть других результатов и иллюстраций – из работ авторов.

1.2. Гармоническое отображение

Пусть жордановы области $\mathcal{L}$ и $\mathcal{W}$ расположены соответственно на комплексных плоскостях $z = x + iy = re^{i\varphi}$ и $w = u + iv = \rho e^{i\theta}$ (здесь i , как обычно, – мнимая единица), и пусть $B : \partial\mathcal{L} \xrightarrow{\text{hom}} \partial\mathcal{W}$ есть заданный гомеоморфизм их границ, сохраняющий ориентацию. Если функция

$$\mathcal{F}(z) = u(x, y) + iv(x, y) \in C(\overline{\mathcal{L}}) \quad (1.1)$$

представляет собой решение (векторной) задачи Дирихле для уравнения Лапласа:

$$\Delta \mathcal{F}(z) = 0, \quad z \in \mathcal{L}; \quad \mathcal{F}(z) = B(z), \quad z \in \partial\mathcal{L}, \quad (1.2)$$

обеспечивающее гомеоморфизм замыканий областей, $\mathcal{F} : \overline{\mathcal{L}} \xrightarrow{\text{hom}} \overline{\mathcal{W}}$ (достаточным условием для этого, согласно теореме Радó–Кнезера–Шоке (см. [1–4]), является выпуклость области $\mathcal{W}$), то говорят, что эта функция $w = \mathcal{F}(z)$ осуществляет гармоническое отображение области $\mathcal{L}$ на $\mathcal{W}$, и пишут $\mathcal{F} : \mathcal{L} \xrightarrow{\text{harm}} \mathcal{W}$.

Отметим, что в литературе имеются и несколько иные определения гармонического отображения, в том числе соответствующие более общим ситуациям (см. [5–8] и приведенную там библиографию). Заметим еще, что отображение $\mathcal{F}$ является квазиконформным (см. [4, 8]).

На границах областей $\mathcal{L}$ и $\mathcal{W}$ можно ввести натуральную параметризацию координат точек через длины дуг ($s(z)$ на $\partial\mathcal{L}$ и $\sigma(w)$ на $\partial\mathcal{W}$) с направлением отсчета длин, соответствующим правильному порядку обхода областей (при котором они остаются слева). Связь между s и σ при граничном гомеоморфизме $w = B(z)$ запишем в виде зависимости $\sigma = \mathfrak{B}(s)$.

1.3. Приложение гармонических отображений к построению сеток

Важным приложением гармонических отображений является построение расчетных сеток $\mathfrak{Z}$ в областях $\mathcal{L}$ сложной конфигурации; созданные с помощью таких отображений сетки называют гармоническими. Подразумевается, что сетка $\mathfrak{Z}$ соответствует форме области $\mathcal{L}$, т.е. она постро-

ена на основе такого отображения $\mathcal{F}$ из (1.1), для которого граница $\partial\mathcal{L}$ области состоит из линий уровня его вещественной или мнимой части. Отметим, что проблематике построения гармонических и адаптивно-гармонических сеток посвящено большое число работ (см. [9–40] и приведенную там библиографию).

В качестве образа области $\mathcal{L}$ в таких приложениях часто берут прямоугольник

$$\Pi := \{w = u + iv : u \in (-L, L), v \in (0, H)\}, \quad L, H > 0, \quad (1.3)$$

либо квадрат $\mathcal{Q} := \{u \in (0, 1), v \in (0, 1)\}$, поскольку эти области являются выпуклыми, что по теореме Радо–Кнезера–Шоке обеспечивает гомеоморфизм $\mathcal{F} : \mathcal{L} \xrightarrow{\text{hom}} \Pi$ используемого отображения. Кроме того, эти области удобны для реализации конечно-разностных схем, так как обладают естественной декартовой сеткой. Остановимся на случае прямоугольника Π (рассмотрение квадрата $\mathcal{Q}$ проводится аналогично).

Декартова сетка $\mathfrak{Z}$ в прямоугольнике Π образована узлами $w_{m,n}$ с шагом h :

$$w_{m,n} = u_m + iv_n := h(m + in), \quad m = -M, -M + 1, \dots, M, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad (1.4)$$

и состоит из квадратных ячеек $\pi_{m,n}$ (см. фиг. 1а) со сторонами

$$(w_{m,n}, w_{m+1,n}), \quad (w_{m+1,n}, w_{m+1,n+1}), \quad (w_{m+1,n+1}, w_{m,n+1}), \quad (w_{m,n+1}, w_{m,n}), \quad (1.5)$$

называемыми ребрами. Здесь и далее порядок перечисления точек в обозначениях граничных дуг соответствует правильному порядку обхода области — в данном случае ячейки $\pi_{m,n}$. Сетка $\mathfrak{Z}$ играет роль базовой, т.е. на ее основе строится требуемая расчетная сетка $\mathfrak{Z}$. Полуширина L и высота H прямоугольника Π при заданных h , M и N , очевидно, равны $L = hM$, $H = hN$.

В задачах построения сетки граничный гомеоморфизм $w = B(z)$, входящий в краевое условие (1.2), обычно задают таким образом, что если его переписать (как сказано в п. 1.1) через текущие длины дуг в виде $\sigma = \mathfrak{B}(s)$, то производная $d\mathfrak{B}/ds$ будет кусочно-постоянной на границе $\partial\mathcal{L}$, которая в этих задачах предполагается кусочно-гладкой. Иначе говоря, $\partial\mathcal{L}$ состоит из конечного числа таких звеньев l_k (тогда $\partial\mathcal{L} = \bigcup_k l_k$), что при равномерном движении точки z по каждому из них ее образ $w = B(z)$ будет перемещаться по $\partial\mathcal{W}$ с постоянной скоростью $d\mathfrak{B}/ds$, своей для каждого звена l_k .

Если отображение

$$\mathcal{F} : \mathcal{L} \xrightarrow{\text{hom}} \Pi \quad (1.6)$$

найденно, то требуемая (регулярная) расчетная сетка $\mathfrak{Z}$ в области $\mathcal{L}$ строится с помощью обратного отображения

$$z = \mathcal{F}^{-1}(w) = x(u, v) + iy(u, v) : \Pi \xrightarrow{\text{harm}^{-1}} \mathcal{L} \quad (1.7)$$

как совокупность четырехугольных ячеек $\sigma_{m,n}$ (см. фиг. 1б) со следующими (прямолинейными) ребрами:

$$(z_{m,n}, z_{m+1,n}), \quad (z_{m+1,n}, z_{m+1,n+1}), \quad (z_{m+1,n+1}, z_{m,n+1}), \quad (z_{m,n+1}, z_{m,n}), \quad (1.8)$$

где узлы $z_{m,n}$ генерируемой сетки $\mathfrak{Z}$ задаются как образы узлов $w_{m,n}$ базовой сетки $\mathfrak{Z}$, т.е.

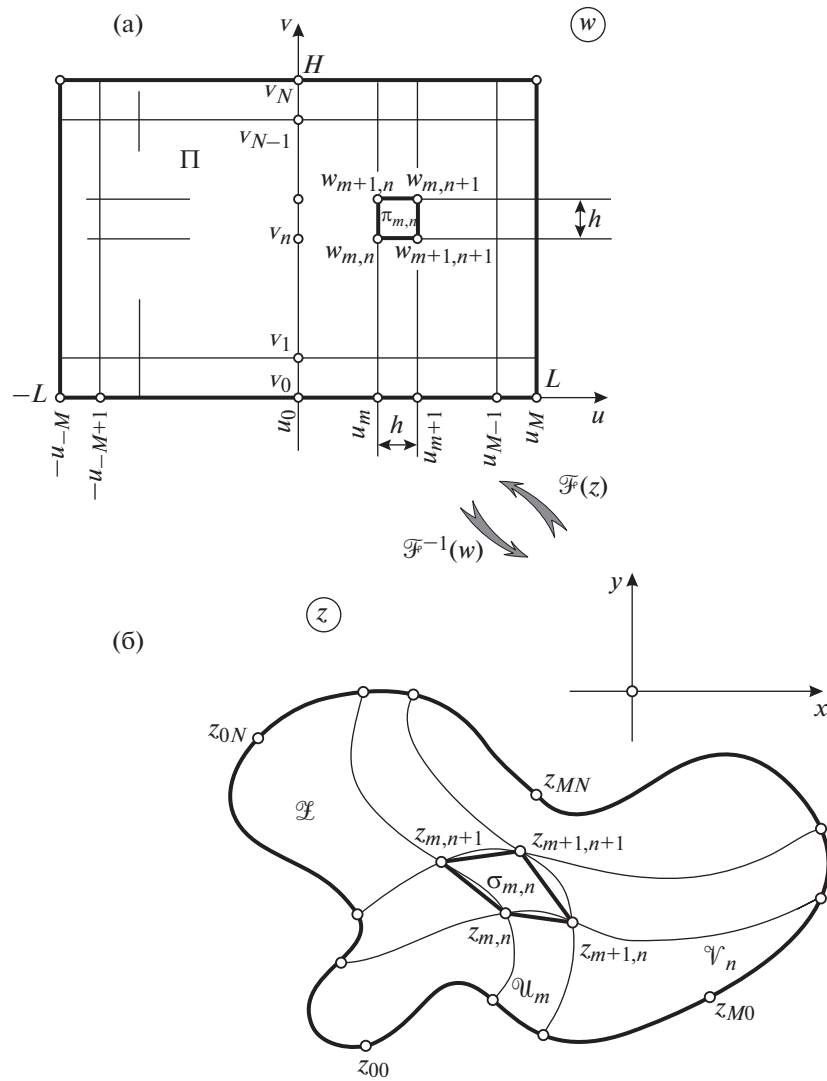
$$z_{m,n} := \mathcal{F}^{-1}(w_{m,n}), \quad m = -M, -M + 1, \dots, M, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

Таким образом, изображенная на фиг. 1а ячейка $\pi_{m,n}$ с ребрами (1.5) является базовой для изображенной на фиг. 1б ячейки $\sigma_{m,n}$ с ребрами (1.8).

Если все ячейки $\sigma_{m,n}$ построенной сетки

$$\mathfrak{Z} = \{\sigma_{m,n}\}_{m=-M, n=0}^{M-1, N-1}$$

не имеют наложений, самопересечений и не выходят за пределы исходной области $\mathcal{L}$, то такую сетку называют невырожденной (см. [17, 18]). Построенная таким образом регулярная четырехугольная сетка $\mathfrak{Z}$ может служить основой для применения разностных или конечноэлементных методов (о них см., например, [17, 41–43]) к решению задач математической физики в области $\mathcal{L}$.



Фиг. 1

Очевидно, что узлы $z_{m,n}$ сетки $\mathfrak{Z}$ можно рассматривать и как точки пересечения u -изолиний $\mathcal{U}_m$ с v -изолиниями $\mathcal{V}_n$ гармонического отображения (1.6); эти линии определяются по формулам

$$\mathcal{U}_m := \{z = \mathcal{F}^{-1}(u + iv) : u = u_m, v \in [0, H]\}, \quad (1.9)$$

$$\mathcal{V}_n := \{z = \mathcal{F}^{-1}(u + iv) : u \in [-L, L], v = v_n\}, \quad (1.10)$$

где согласно (1.4) $u_m = hm$, $v_n = hn$. На фиг. 1б (криволинейные) изолинии $\mathcal{U}_m$, $\mathcal{V}_n$ изображены тонкими, а (прямолинейные) ребра, ограничивающие ячейку $\sigma_{m,n}$, — более жирными линиями. Из (1.9), (1.10) ясно, что изолинии

$$\mathcal{V}_0 = (z_{-M,0}, z_{M,0}), \quad \mathcal{U}_M = (z_{M,0}, z_{M,N}), \quad \mathcal{V}_N = (z_{M,N}, z_{-M,N}), \quad \mathcal{U}_{-M} = (z_{-M,N}, z_{-M,0})$$

представляют собой образы (при отображении $\mathcal{F}^{-1}$) сторон прямоугольника Π и являются последовательно соединенными звеньями границы $\partial\mathcal{L}$. Расположенные на ней узлы сетки $\mathfrak{Z}$ называем, естественно, *граничными узлами*.

Заметим еще, что распределение по области $\mathcal{L}$ изолиний $\mathcal{U}_m, \mathcal{V}_n$ при $m = \overline{1, M-1}, n = \overline{1, N-1}$ дает наглядное представление о рассматриваемом отображении $\mathcal{F} : \mathcal{L} \xrightarrow{\text{harm}} \mathcal{W}$; это распределение будем называть *картиной отображения* $\mathcal{F}$ в области $\mathcal{L}$ (примеры приведены ниже).

2. НЕКОТОРЫЕ ТРУДНОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ СЕТОК

2.1. Вычислительный подход Уинслоу и возникающие трудности

Итак, требуемое отображение $\mathcal{F}$ может быть найдено как решение задачи (1.2) для уравнения Лапласа. Но так как область $\mathcal{L}$ имеет сложную конфигурацию (ставится вопрос о построении сеток именно в таких областях), то для решения этой задачи пришлось бы применить численные методы, реализация которых, в свою очередь, требует наличия сетки, отражающей форму области. Получается, что для построения сетки, соответствующей данной области, нужно уже иметь такую сетку!

Выход из этого порочного круга был указан А. Уинслоу (см. [9]), который предложил строить не прямое $w = \mathcal{F}(z)$, а обратное гармоническое отображение $\mathcal{F}^{-1}(w) = x(u, v) + iy(u, v)$ как решение в прямоугольнике Π следующей (квазилинейной) системы уравнений для его компонент:

$$\begin{aligned} (x_v^2 + y_v^2)x_{uu} - 2(x_u x_v + y_u y_v)x_{uv} + (x_u^2 + y_u^2)x_{vv} &= 0, \\ (x_v^2 + y_v^2)y_{uu} - 2(x_u x_v + y_u y_v)y_{uv} + (x_u^2 + y_u^2)y_{vv} &= 0, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где нижние индексы u, v означают соответствующие частные производные. Система (2.1) получается путем обращения оператора Лапласа из постановки (1.2), примененного к векторной функции (1.1), а краевая задача в прямоугольнике Π для системы (2.1) включает граничное условие Дирихле

$$x(u, v) + iy(u, v) = B^{-1}(w), \quad w = u + iv \in \partial\Pi, \quad (2.2)$$

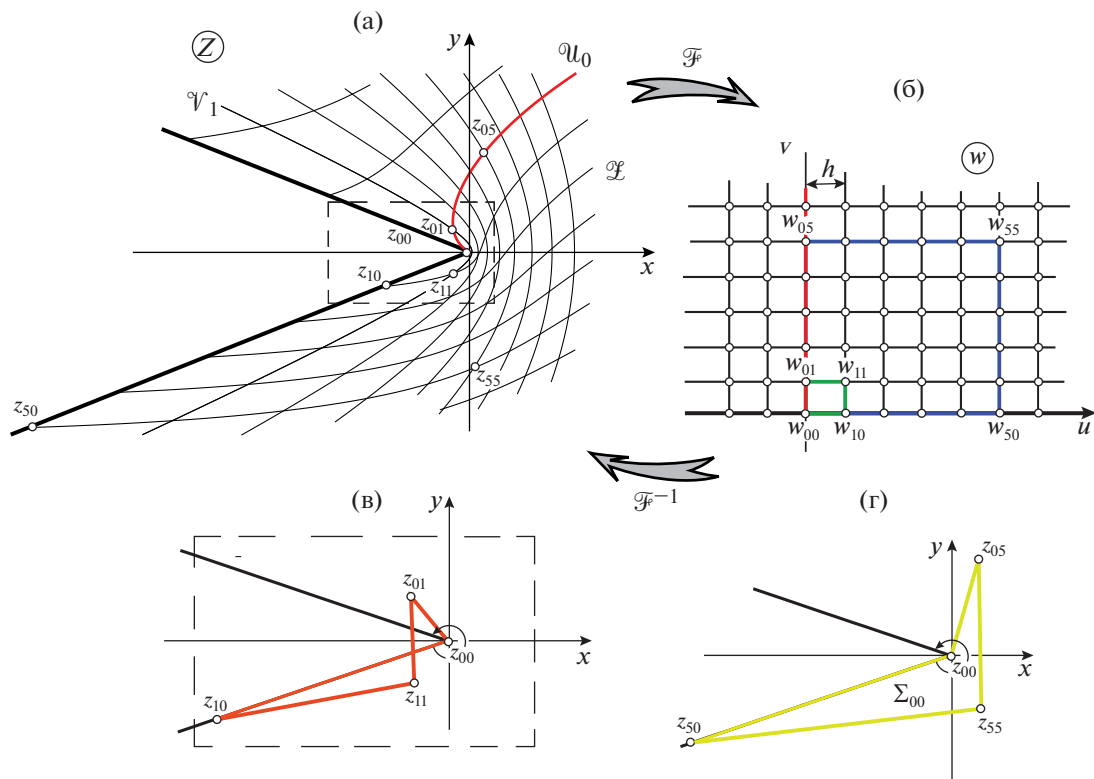
где $B^{-1} : \partial\Pi \xrightarrow{\text{hom}} \partial\mathcal{L}$ есть граничный гомеоморфизм, обратный по отношению к гомеоморфизму B , фигурирующему в постановке (1.2).

Чтобы построить искомую расчетную сетку $\mathfrak{Z}$, достаточно найти ее узлы $z_{m,n} = \mathcal{F}^{-1}(w_{m,n})$, представляющие собой значения решения краевой задачи (2.1), (2.2) в узлах базовой сетки $\mathfrak{B}$. Используя удобство этой декартовой сетки для формирования численных схем, были разработаны две группы методов построения (дискретизированного приближенного) решения данной задачи: конечно-разностные методы, берущие начало в работах [10, 11], и вариационные (см. [12–16]), основанные на минимизции дискретизированного (на базовой сетке $\mathfrak{B}$) функционала Дирихле для системы (2.1) или родственного функционала. Обе группы методов, развивающие описанный подход Уинслоу, получили широкое распространение и достигли значительного прогресса (см., в частности, монографии [17, 18, 19–26] и обзоры [27–34]).

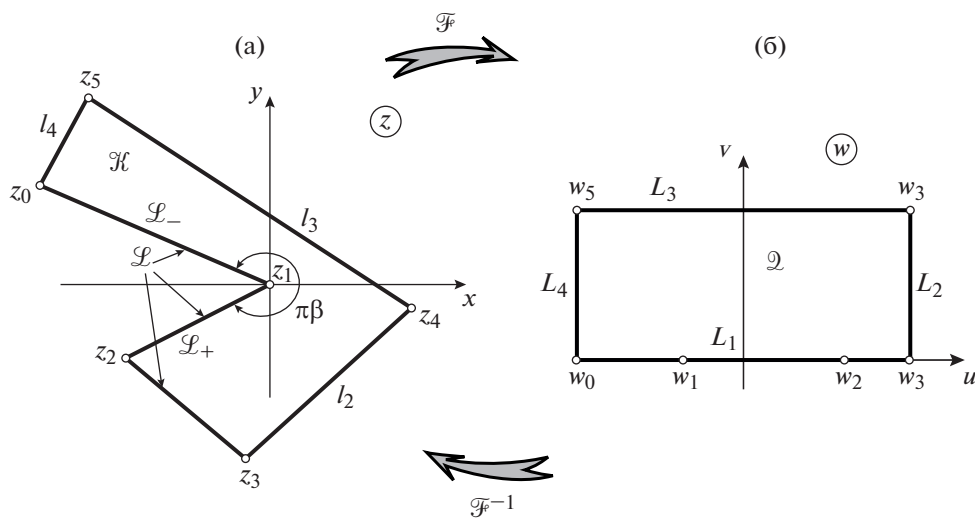
Вместе с тем было обнаружено, что в ряде случаев (см., например, [17, 22–26, 33, 35–40]) генерируемая сетка $\mathfrak{Z}$ имеет низкое качество и может содержать такие серьезные дефекты, как самоналегание и выход за пределы расчетной области $\mathcal{L}$, что делает сетку $\mathfrak{Z}$ непригодной для использования.

Появление этих затруднений часто связывают (см. [17, 10, 19–23, 35] и др.) с обращением в нуль якобиана или нарушением гомеоморфизма гармонического отображения (1.6), с помощью которого строится сетка. Оказывается, однако, что указанные трудности могут возникать и тогда, когда отображение обеспечивает гомеоморфизм замкнутых областей (т.е. $\mathcal{F} : \mathcal{L} \xrightarrow{\text{hom}} \overline{\Pi}$), и даже тогда, когда дополнительно якобиан отображения положителен в замыкании $\overline{\mathcal{L}}$ исходной области. Подчеркнем, что здесь речь идет не о дискретизированном приближенном решении задачи (2.1), (2.2), а об отображении $\mathcal{F}$, рассматриваемом теоретически. Различие между дискретизированным и континуальным представлениями в проблеме построения сеток обсуждается в [36].

В настоящей работе мы рассматриваем следующие три ситуации (на практике их гораздо больше, см. приведенную выше литературу), когда могут возникать указанные трудности:



Фиг. 2



Фиг. 3

1) граница области содержит входящий угол, т.е. превышающий π ; типичным примером является L -образная область (см. фиг. 3а);

2) область содержит полукруговую выемку, как в случае подковообразной области (см. фиг. 10а);

3) область имеет прямоугольный вырез (см. фиг. 14а).

Эти ситуации обсуждаются ниже соответственно в п. 2.2 (см. подпункты 2.3.1–2.3.3).

2.2. Дефекты гармонической сетки вблизи вершины входящего угла

2.2.1. Эффект “прилипания”. Возникновение вблизи вершины входящего угла таких негативных явлений, как невыпуклость ячеек гармонической сетки или их самоналегание, представляет собой следствие эффекта “прилипания”, характерного для отображения (1.6), используемого при построении сетки $\mathfrak{Z}$, вблизи входящих углов. Эффект заключается в том, что изолиния отображения, выходящая из указанной вершины, касается в ней одной из сторон угла, за исключением особого случая.

Пример проявления этого эффекта приведен на фиг. 2а, где изображен фрагмент области $\mathcal{L}$, содержащей входящий угол с контуром

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_- \cup \{0\} \cup \mathcal{L}_+, \quad \mathcal{L}_\pm := \{r \in (0, R_\pm), \varphi = \mp \pi\beta/2\}, \quad \beta \in (1, 2), \quad (2.3)$$

а также представлена картина гармонического отображения $u(z) + iv(z) = \mathcal{F}(z)$ области $\mathcal{L}$ на прямоугольник Π , подчиненного граничному гомеоморфизму

$$u(z) = -\sigma_- r, \quad z \in \mathcal{L}_-, \quad u(0) = 0, \quad u(z) = \sigma_+ r, \quad z \in \mathcal{L}_+, \quad v(z) = 0, \quad z \in \mathcal{L}, \quad (2.4)$$

где σ_- и σ_+ — положительные числа.

На фиг. 2а видно, что изображенная красным цветом изолиния

$$\mathcal{U}_0 = \{z = \mathcal{F}^{-1}(u + iv) : u = 0, v \in [0, H]\}, \quad (2.5)$$

исходящая из вершины $z = 0$, касается в ней стороны $\mathcal{L}_-$. Соответствующий фрагмент базовой сетки $\mathfrak{Z}$ дан на фиг. 2б, где красным цветом изображен образ $\mathcal{F}(\mathcal{U}_0) = \{w : u = 0, v \in [0, H]\}$ этой изолинии на плоскости w .

Объяснение этого эффекта дано в подпункте 3.3.4 на базе предварительно проведенного в пп. 3.2 и 3.3 исследования сингулярного поведения отображения $w = \mathcal{F}(z)$ вблизи указанной вершины, включая получение соответствующей асимптотики. С помощью этой асимптотики в подпункте 3.3.4 показано, что угол, под которым линия $\mathcal{U}_0$ исходит из вершины входящего угла, дается формулой

$$\arg \mathcal{U}_0 = \begin{cases} \frac{\pi\beta}{2}, & \theta^* \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right), \\ \varphi^*, & \theta^* = \frac{\pi}{2}, \\ -\frac{\pi\beta}{2}, & \theta^* \in \left(\frac{\pi}{2}, \pi\right), \end{cases} \quad (2.6)$$

где величины $\theta^* \in (0, \pi)$ и $\varphi^* \in (-\pi\beta/2)$ определены в пп. 3.2, 3.3 через характеристики отображения $\mathcal{F}(z)$. Забегая вперед, отметим, что если φ^* выражается через параметры β , σ_- , σ_+ из (2.3) и (2.4), то θ^* определяется общими характеристиками отображения $\mathcal{F}(z)$ (см. п. 3.2).

Из формулы (2.6) вытекает, что действительно изолиния $\mathcal{U}_0$ должна касаться одной из сторон входящего угла в его вершине, за исключением особого случая, наступающего при $\theta^* = \pi/2$. В этом особом случае угол наклона изолинии $\mathcal{U}_0$, исходящей из вершины входящего угла, будет равен φ^* . В таком поведении угла наклона изолинии $\mathcal{U}_0$, описываемом формулой (2.6), и заключается обсуждаемый эффект “прилипания”. Это свойство гармонического отображения отличает его от конформного, о чем более подробно сказано в п. 3.1.

2.2.2. Дефекты сетки как следствие эффекта “прилипания”. Продолжим рассмотрение картины отображения $\mathcal{F}$ на фиг. 2. Узлы w_{00} , w_{10} , w_{11} , w_{01} базовой ячейки π_{00} (очерченной на фиг. 2б красным-зеленым контуром) переходят при отображении (1.7) соответственно в узлы z_{00} , z_{10} , z_{11} , z_{01} генерируемой ячейки σ_{00} , изображенные на фиг. 2а. Отдельно (и в увеличенном виде) эта ячейка (с оранжевым контуром) и ее узлы показаны на фиг. 2в. Тогда из данного рассмотрения с учетом следующих очевидных положений:

- 1) $\arg z_{10} = -\pi\beta/2$, где $\beta > 1$,
- 2) $\arg z_{01}$ близок к $\pi\beta/2$ при достаточно малом h ,

вытекает тот факт, что ребра (z_{00}, z_{10}) и (z_{11}, z_{01}) пересекаются, т.е. возникает самоналегание ячейки σ_{00} ; это и подтверждает фиг. 2в.

Нетрудно убедиться, что угол между ребрами (z_{00}, z_{10}) и (z_{01}, z_{00}) , измеряемый по области $\mathcal{L}$ и отмеченный дужкой со стрелкой на фиг. 2в, 2г, уменьшается при увеличении шага h , так что при достаточно большом h дефект самоналегания преодолевается, но при этом качество сетки остается неудовлетворительным. Например, узлы базовой ячейки $(w_{00}, w_{50}, w_{55}, w_{05})$, выделенной на фиг. 2б красным и голубым цветами, шаг которой увеличен по сравнению с предыдущим вариантом в 5 раз, перейдут в узлы $z_{00}, z_{50}, z_{55}, z_{05}$ новой ячейки Σ_{00} (с желтым контуром), которая, как видно на фиг. 2г, хотя и избавлена от пересечения ребер (z_{00}, z_{50}) и (z_{55}, z_{05}) , но все равно непригодна для использования, поскольку является невыпуклой.

Заметим, что явление самоналегания ячейки с узлом в вершине входящего угла впервые было отмечено, по-видимому, в работе [36], где был дан и рисунок пересечения противоположных ребер этой ячейки, аналогичный фиг. 2в (см. также [40]).

В следующем подпункте даются примеры построения гармонического отображения областей со входящим углом, демонстрирующие обсуждаемый эффект.

2.2.3. Области L -образной формы. Популярным тестовым примером (для многих задач математической физики) является L -образная область. Обычно берут простейший ее вариант, составленный из трех квадратов. Гармоническая сетка в такой области строилась, в частности, в работах [21–23, 40].

Здесь мы рассматриваем не отдельную область, а класс областей L -образной формы. Типичная область $\mathcal{K}$ из этого класса шестиугольных областей изображена на фиг. 3а. Гармоническое отображение $w = \mathcal{F}(z)$ области $\mathcal{K}$ на прямоугольник Π ,

$$\mathcal{F} : \mathcal{K} \xrightarrow{\text{harm}} \Pi, \quad (2.7)$$

подчиним условию постоянства на звеньях l_n , $n = \overline{1, 6}$, величины $d\mathfrak{B}/ds$, определенной в п. 1.2. Это условие согласуется с гомеоморфизмом (2.4), а с точки зрения техники построения сеток оно означает, что граничные узлы расставлены на каждом звене l_n равномерно по его текущей длине (как это обычно и принимается в практике сеточной генерации).

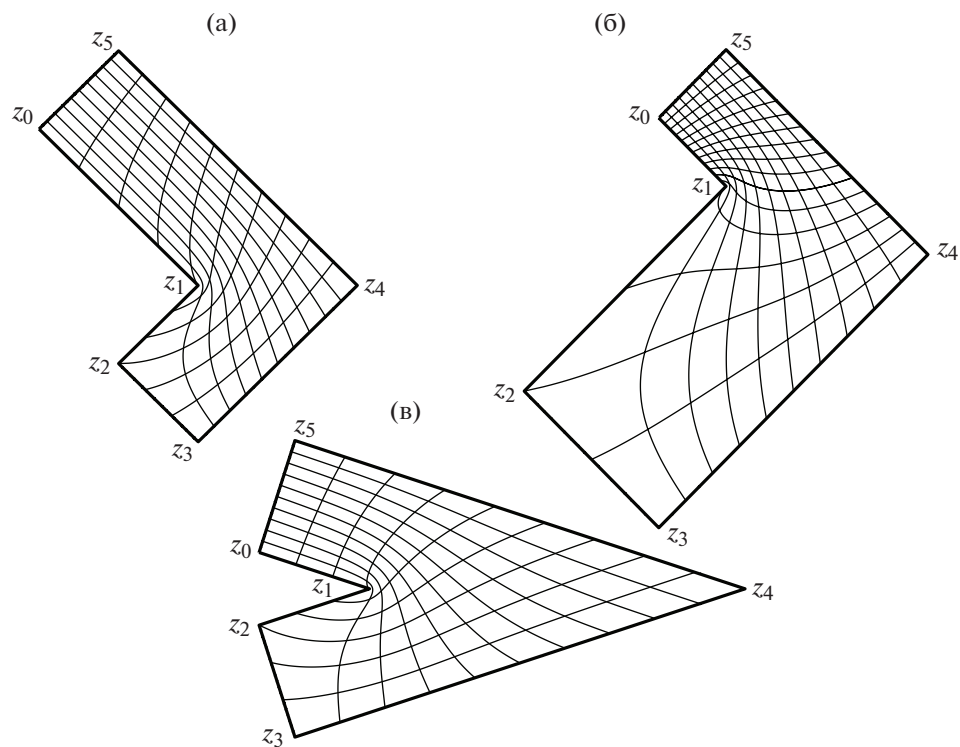
Отображение (2.7) построено в п. 4.2, где дана формулировка задачи для областей L -образной формы. Для получения отображения $\mathcal{F}(z)$ применен аналитико-численный метод мультиполей (см. [46–48]), изложение которого дано в п. 4.1. Схема его использования для построения гармонического отображения областей $\mathcal{K}$ кратко описана в п. 4.2. Результаты численной реализации метода мультиполей приведены для трех вариантов области $\mathcal{K}$, обозначенных через $\mathcal{K}_{(j)}$, $j = \overline{1, 3}$, в виде картины их гармонического отображения, представленной соответственно на фиг. 4а–4в. Апостериорная оценка (относительной) погрешности построенных отображений в норме $C(\overline{\mathcal{K}_{(j)}})$ составила менее 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций.

На фиг. 4а видно, что изолиния отображения, выходящая из вершины $z = 0$, касается в ней стороны $\mathcal{L}_-$ угла, а из фиг. 4б — что эта изолиния касается в данной вершине стороны $\mathcal{L}_+$ угла. Таким образом, помещенные на фиг. 4а, 4б численные результаты иллюстрируют положения, сформулированные в подпункте 2.2.1. Отметим, что на фиг. 4в (так же, как и на ряде других) этот эффект виден не так отчетливо, потому что для этой области “зона прилипания” около вершины невелика.

2.3. Дефекты гармонической сетки в областях с выемками

Во многих работах (см. [14–17, 19, 20, 22–26, 33–39] и приведенную там библиографию) отмечалось, что если область содержит выемки, то гармоническая сетка, создаваемая в таких областях с помощью общепринятых методов (упомянутых в п. 2.1), нередко имеет низкое качество и содержит указанные выше дефекты.

В настоящем разделе — и в целом в работе — рассматриваются области с выемками двух типов: полукруговой (в подпунктах 2.3.1 и 2.3.2) и прямоугольной (в подпункте 2.3.3).



Фиг. 4

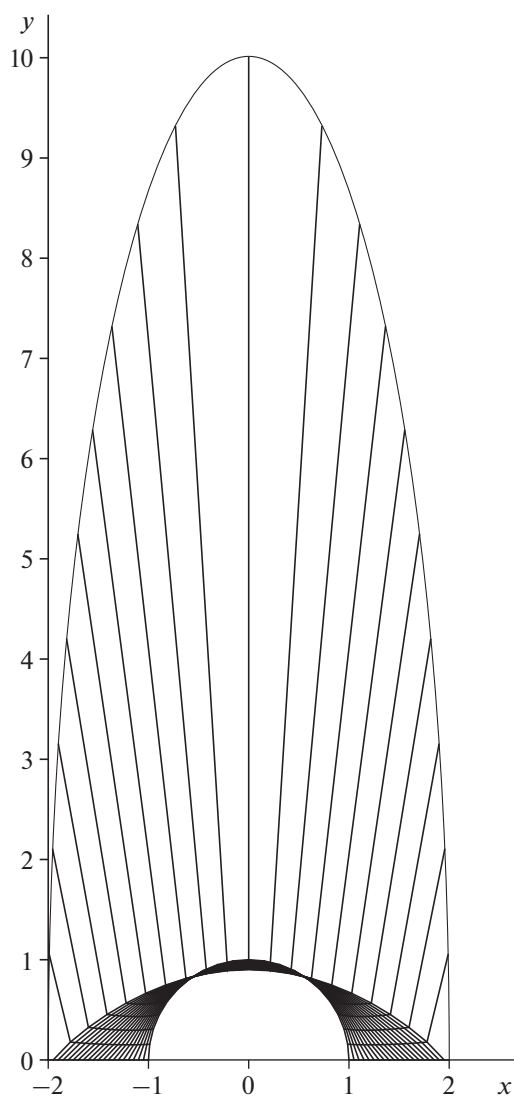
2.3.1. Подковообразная область и ее гармоническое отображение. Известным примером области с полукруговой выемкой является подковообразная область $S_{(1)}$, изображенная на фиг. 10а, где приведена и картина гармонического отображения, полученного в [34, 47]. Граница $\partial S_{(1)}$ этой области состоит из двух отрезков l_1, l_3 вещественной оси, а также из полуэллипса l_2 и полуокружности l_4 . Задачу (нередко используемую в качестве тестовой) о построении гармонической сетки $\mathfrak{S}$ в этой области обычно решают на основе ее отображения на квадрат $\mathcal{Q}$:

$$F : S_{(1)} \xrightarrow{\text{harm}} \mathcal{Q}, \quad F(l_n) = L_n, \quad n = \overline{1, 4}; \quad (2.8)$$

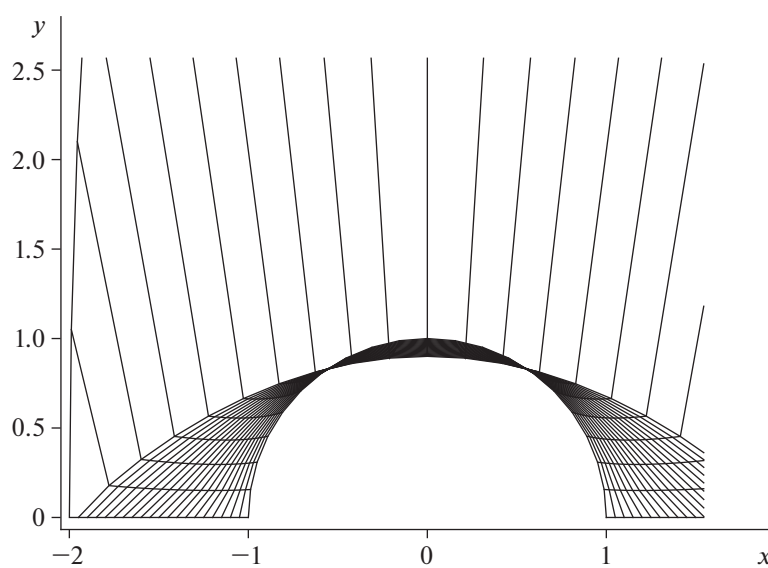
соответствие между границами $\partial S_{(1)}$ и $\partial \mathcal{Q}$, видное на фиг. 10, подчинено условию постоянства величины $d\mathfrak{B}/ds$ на l_n ; оно аналогично требованию, сформулированному в подпункте 2.2.3 для отображения (2.7).

Показательно, что данное отображение $w = F(z)$ обеспечивает гомеоморфизм $F : \overline{S_{(1)}} \xrightarrow{\text{hom}} \overline{\mathcal{Q}}$, а его якобиан положителен в $\overline{S_{(1)}}$. Вопреки этим обстоятельствам, сетка $\mathfrak{S}$, полученная в [36, 38], имела участки, где наблюдались ее самоналегание и выход за границу $\partial S_{(1)}$, в целом же $\mathfrak{S}$ характеризовалась неприемлемо низким качеством. В этих расчетах половина высоты подковообразной области $S_{(1)}$ полагалась равной $A = 4.5$, а разбиение базовой сетки $\mathcal{Q}$, содержащейся в квадрате $\mathcal{Q}$, на которой решалась система (2.1), принималось равным 31×31 .

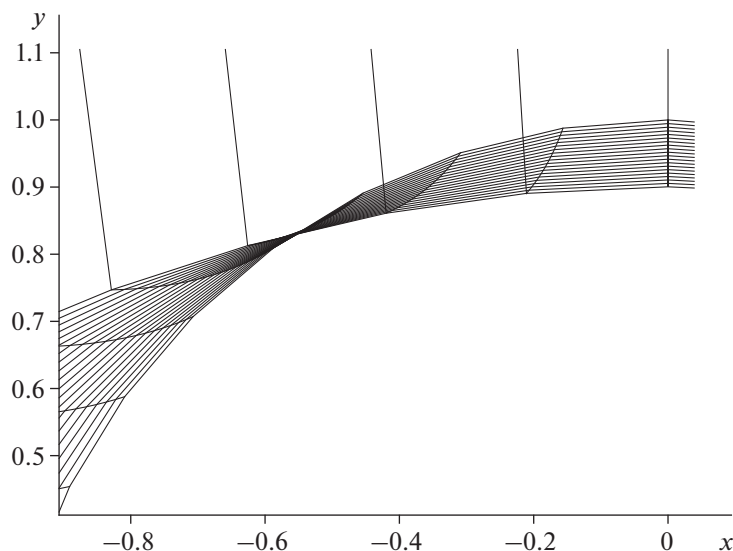
В работе Б.Н. Азаренка [39] была сделана попытка преодоления указанных трудностей. Поскольку их причиной была названа (в [37, 38]) потеря точности решения нелинейной системы (2.1), то автор статьи [39] предпринял усилия по повышению этой точности прежде всего за счет измельчения базовой сетки $\mathcal{Q}$ в квадрате $\mathcal{Q}$, увеличив ее разбиение до 101×101 ; при этом использовалась разностная схема (см. [10]) второго порядка, а половина высоты области $S_{(1)}$ полагалась равной $A = 5$. Однако эта мера не привела к улучшению качества генерируемой сетки $\mathfrak{S}$, как показывают полученные им детальные изображения структуры этой сетки в местах ее самоналегания и выхода за пределы расчетной области $S_{(1)}$. Эти изображения, соответствующие постепенному увеличению масштаба, последовательно даны на фиг. 5–8.



Фиг. 5



Фиг. 6



Фиг. 7

Еще большее измельчение базовой сетки Ω до величины 501×501 , выполненное в статье [39], позволило избавиться от самоналегания генерируемой в $S_{(1)}$ сетки (результат приведен на фиг. 9) и от ее выхода за пределы области $S_{(1)}$, однако оно не обеспечило повышение качества сетки Ξ до уровня, пригодного для ее использования в приложениях, что подчеркнул и сам автор этой статьи.

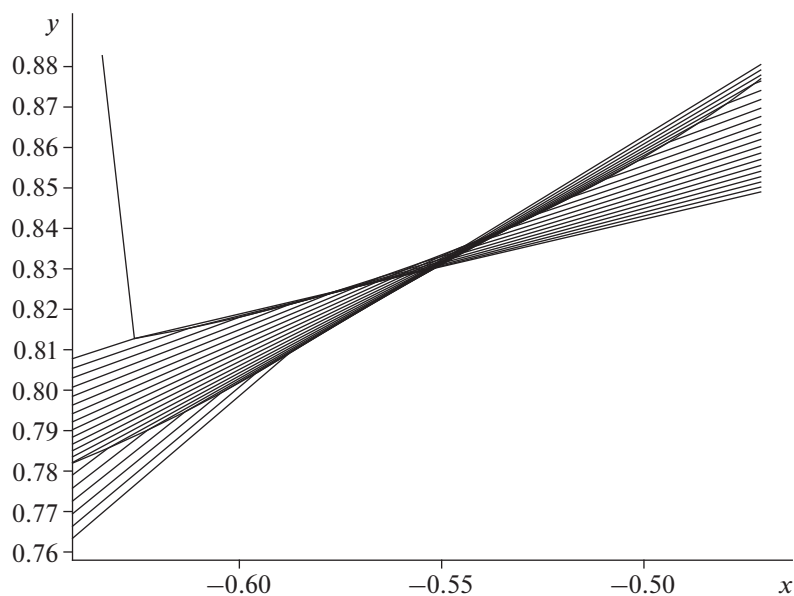
Последующие предпринятые им в работе [39] попытки улучшить качество генерируемой сетки Ξ (в рамках подхода Уинслоу) показали, что ни дальнейшее измельчение базовой сетки Ω в прямоугольнике, ни увеличение сеточного шаблона до 25-точечного и модификация разностной схемы с повышением порядка аппроксимации до четвертого и выше, ни привлечение вариационного метода из [16, 23] не привели ни к улучшению сетки Ξ , ни даже к сколько-нибудь заметному изменению положения ее узлов.

2.3.2. Погрешность построения сетки в подковообразной области. Из последнего замечания вытекает следующий интересный факт: два приближенных решения задачи о построении гармонического отображения в $S_{(1)}$, полученные двумя различными численными методами — конечно-разностным (см. [9, 10]) и вариационным (см. [16, 23]), — будучи ошибочными (как показано ниже), совпали с высокой точностью во всех узлах сетки Ω , соответствующей разбиению 501×501 . Картина этого приближенного дискретизированного отображения $F_{\text{dis}}(z)$, полученного в [39] — вернее, соответствующая гармоническая сетка — представлена (как уже было отмечено выше) на фиг. 9, где изображена каждая 25-я сеточная линия по индексам m и n .

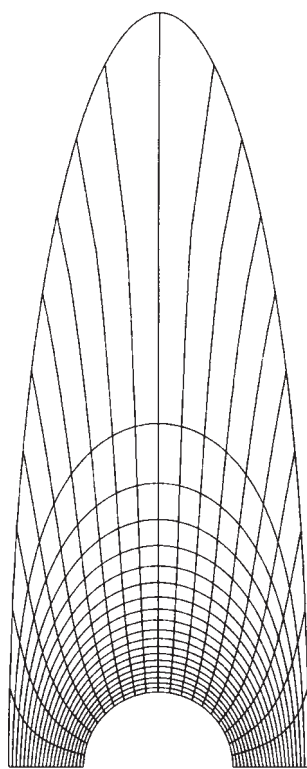
Чтобы вычислить погрешность этого приближенного гармонического отображения $F_{\text{dis}}(z)$, проведем его сравнение с высокоточным отображением $F(z)$ области $S_{(1)}$, которое было построено в [34, 49] с помощью метода мультиполей. Результаты представлены на фиг. 10 в виде картины отображения $F(z)$ области $S_{(1)}$.

Постановка и решение задачи о нахождении такого отображения изложены в п. 4.3; там же описан подход к созданию алгоритма вычисления отображения $F(z)$ для класса областей S с полукруговой выемкой, включающего и подковообразную область; типичная область из этого класса изображена на фиг. 11.

Апостериорная оценка погрешности этого отображения в норме $C(\bar{S}_{(1)})$ составила 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций. Отметим еще, что затраченное при этом машинное время было на много порядков меньше, чем в [39], на компьютерах той же производительности.



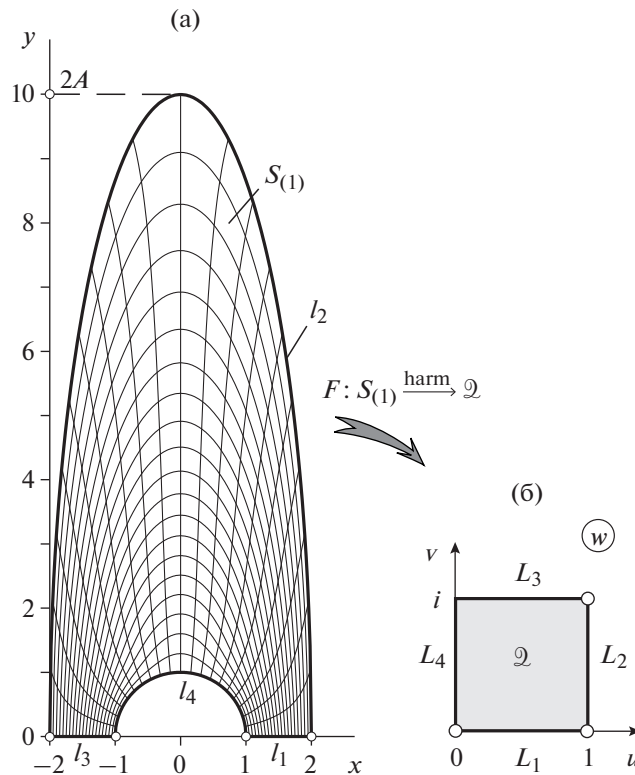
Фиг. 8



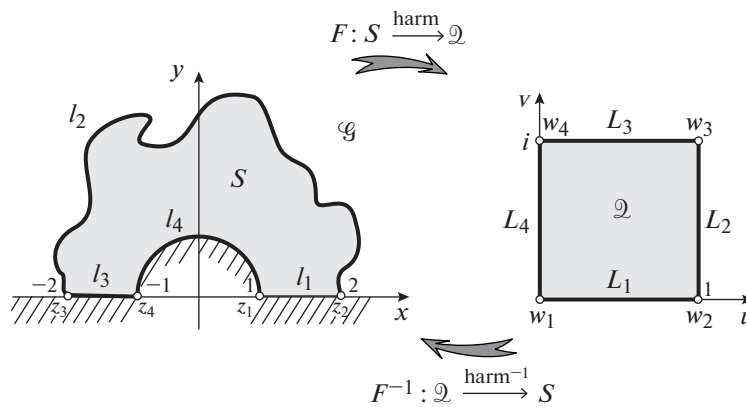
Фиг. 9

Принимая функцию $F(z)$ из [34] в качестве “эталонного” отображения (на том основании, что оно получено с высокой и гарантированной точностью), введем для приближенного отображения $F_{\text{dis}}(z)$ из [39] величину его поточечной относительной погрешности по формуле

$$\delta(x, y) = \frac{|F(z) - F_{\text{dis}}(z)|}{\max_{S(1)} |F(z)|}, \quad z = x + iy.$$



Фиг. 10



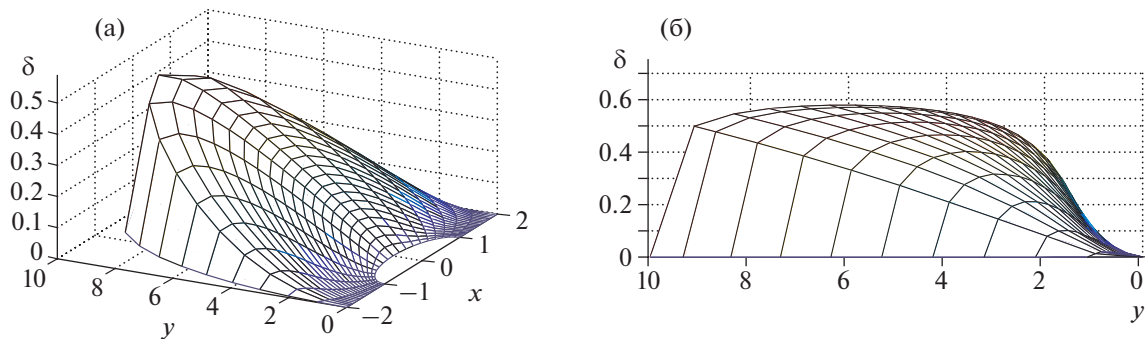
Фиг. 11

График величины $\delta(x, y)$ как поверхности над областью $S_{(1)}$, расположенной на плоскости (x, y) , изображен на фиг. 12а, а проекция этой поверхности на плоскость (y, δ) представлена на фиг. 12б.

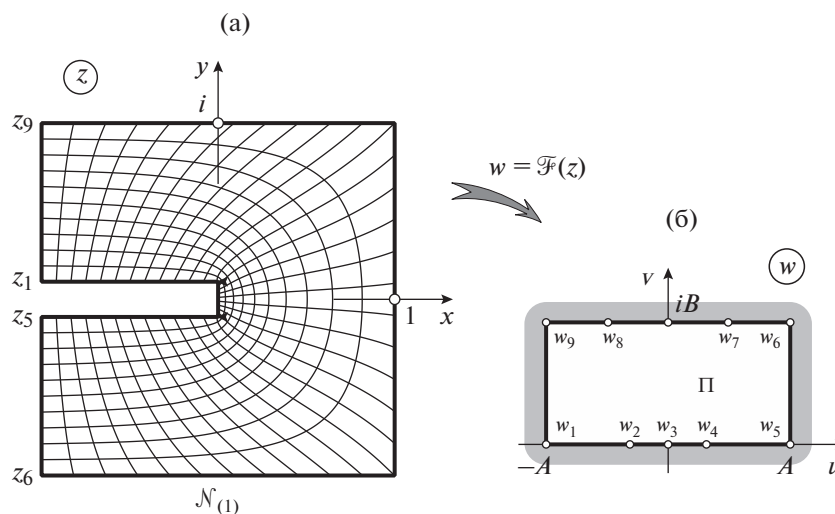
Из этих графиков видно, что величина относительной погрешности $\delta(z)$ составляет около 50% в большей части области $S_{(1)}$, а ее максимум достигает примерно 60%.

Столь высокая величина погрешности говорит о серьезных вычислительных трудностях, которые могут возникать при использовании подхода Уинслоу в сочетании с разностными схемами, примененными в [36, 38, 39].

2.3.3. Область с прямоугольным вырезом. Другим примером области, проблемной для тематики сеточной генерации, является единичный квадрат с прямоугольным вырезом, обозначенный



Фиг. 12



Фиг. 13

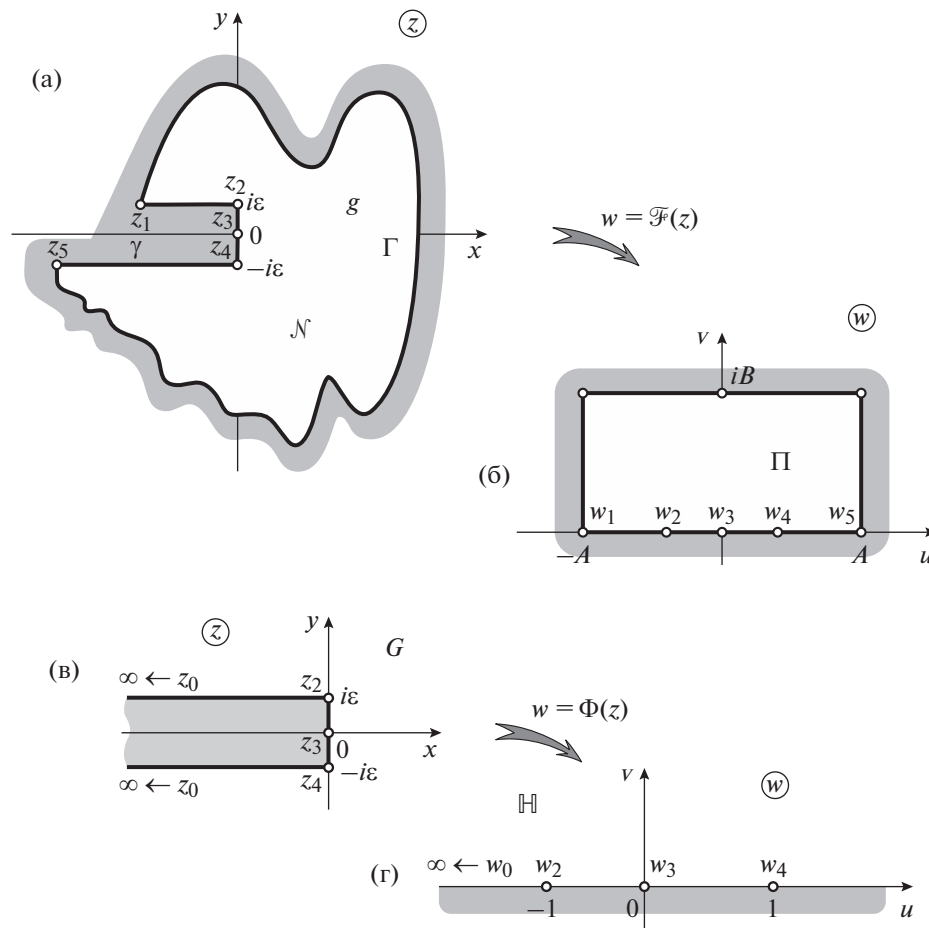
через $\mathcal{N}_{(1)}$ и изображенный на фиг. 13а. В монографии [22], где область $\mathcal{N}_{(1)}$ принималась в качестве тестовой, показано, что построение гармонической сетки в ней на основе подхода Уинслоу наталкивается на вычислительные трудности, аналогичные указанным выше; такие трудности были отмечены и в [16, 19], где строились другие области с подобным вырезом.

Мы рассматриваем здесь не одну область с прямоугольным вырезом, а некоторый класс таких областей, который включает и область $\mathcal{N}_{(1)}$ (фиг. 13а). Произвольную область из этого класса обозначим через $\mathcal{N}$; ее пример изображен на фиг. 14а. Для областей из этого класса мы даем в п. 4.4 общую схему решения задачи о построении отображения

$$\mathfrak{F} : \mathcal{N} \xrightarrow{\text{harm}} \Pi \quad (2.9)$$

такой области на прямоугольник (см. фиг. 14), где отражено также соответствие между границами $\partial\mathcal{N}$ и $\partial\Pi$.

Решение задачи о построении отображения (2.9) получено в п. 4.4 с помощью метода мультиполей (там же дана и точная постановка задачи). Результаты численной реализации этого решения представлены для двух вариантов области с прямоугольным вырезом — областей $\mathcal{N}_{(1)}$ и $\mathcal{N}_{(2)}$ — в виде картин соответствующих отображений $\mathfrak{F}_{(1)}(z)$ и $\mathfrak{F}_{(2)}(z)$, приведенных на фиг. 13, 15. Априорная оценка погрешности этих отображений в норме $C(\overline{\mathcal{N}})$ составила 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций.



Фиг. 14

3. ПОВЕДЕНИЕ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОТОБРАЖЕНИЯ ВБЛИЗИ ВЕРШИНЫ УГЛА И ОБРАТНОГО К НЕМУ ВБЛИЗИ ЕЕ ОБРАЗА

3.1. Рассматриваемые характеристики отображения

Пусть область $\mathcal{L}$, расположенная на плоскости z , содержит на своей границе угол $\mathcal{L}$, определяемый формулой (2.3), который может быть как выходящим, т.е. $\beta \in (0, 1)$, так и входящим, т.е. $\beta \in (1, 2)$. Рассмотрим схематически представленное на фиг. 16 гармоническое отображение

$$\mathcal{F} : \mathcal{L} \xrightarrow{\text{harm}} \mathcal{H} \quad (3.1)$$

области $\mathcal{L}$ на подобласть $\mathcal{H}$ полуплоскости $\{\text{Im } w > 0\}$, примыкающую к интервалу $\mathcal{J} = \mathcal{J}_- \cup \{0\} \cup \mathcal{J}_+$ вещественной оси $\mathbb{R}$, со следующим соответствием:

$$\mathcal{F}(\mathcal{L}_+) =: \mathcal{J}_+ \subset \mathbb{R}_+, \quad \mathcal{F}(\mathcal{L}_-) =: \mathcal{J}_- \subset \mathbb{R}_-, \quad \mathcal{F}(0) = 0. \quad (3.2)$$

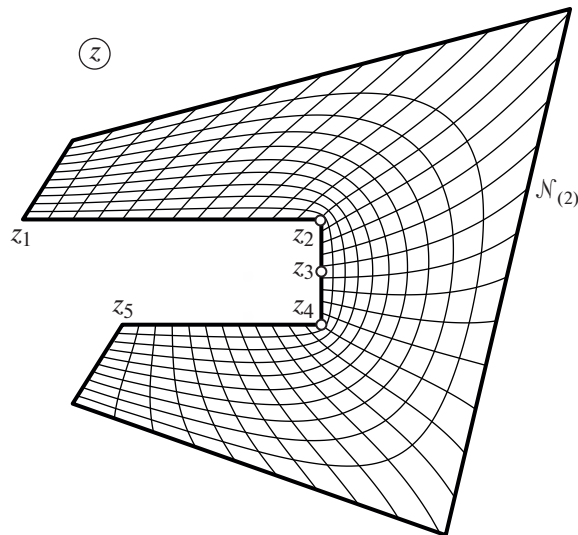
Областью $\mathcal{H}$ может быть, например, прямоугольник (1.3), а соответствие (3.2) может быть на контуре $\mathcal{L}$ уточнено в виде (2.4).

Важной характеристикой поведения этого отображения вблизи вершины угла является зависимость $\varphi = \varphi(\theta)$ между углом θ наклона луча

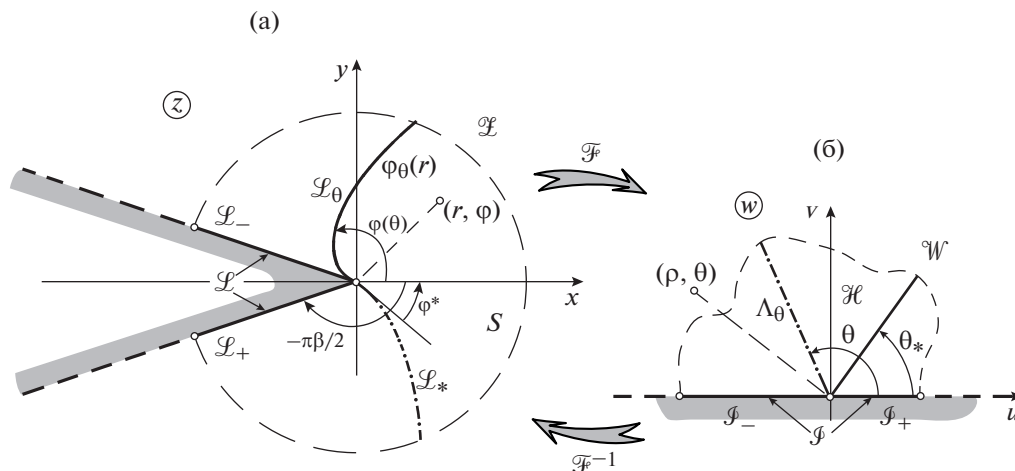
$$\Lambda_\theta := \{|w| > 0, \arg w = \theta\}, \quad (3.3)$$

исходящего из точки $w = 0$ (см. фиг. 16б), и углом φ , под которым его прообраз

$$\mathcal{L}_\theta := \mathcal{F}^{-1}(\Lambda_\theta) \quad (3.4)$$



Фиг. 15



Фиг. 16

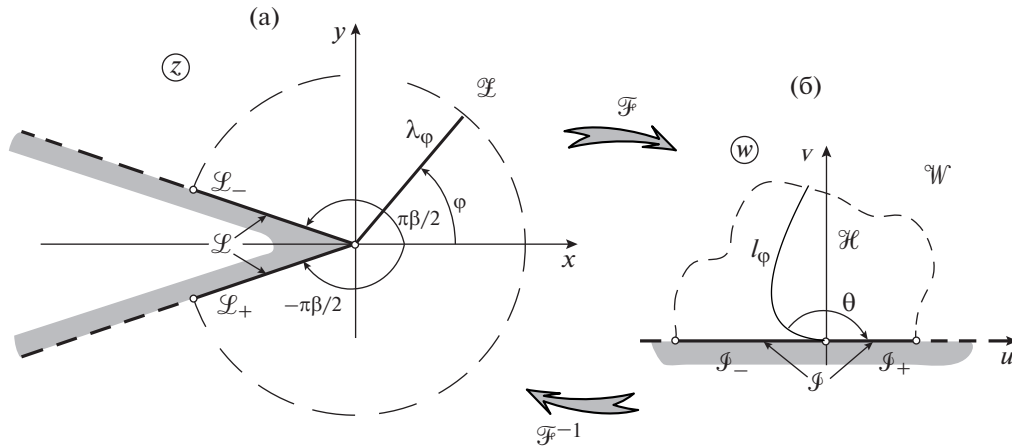
(точнее, касательная к $\mathcal{L}_\theta$) выходит из вершины $z = 0$ (см. фиг. 16a); величины углов отмечены на рисунках дужками со стрелками. Напомним, что (r, φ) и (ρ, θ) суть полярные координаты соответственно на плоскостях z и w .

Для случая, когда $\mathcal{L}$ — входящий угол, именно из зависимости $\varphi(\theta)$ и следует эффект “прилипания” изолинии $\mathcal{U}_0$ отображения $\mathcal{F}$, исходящей из вершины $z = 0$, к одной из сторон угла $\mathcal{L}$. Этот эффект рассмотрен в подпунктах 2.2.1 и 3.3.4, а в подпункте 2.2.2 и на фиг. 2 показано, каким образом это “прилипание” приводит к негативным последствиям для гармонической сетки, генерируемой с помощью отображения (3.1).

Обсуждаемая зависимость $\varphi(\theta)$ вытекает из полученной в п. 3.3 асимптотики линии $\mathcal{L}_\theta$, определяемой равенством (3.4), вблизи вершины $z = 0$ (см. фиг. 16a).

В следующем п. 3.4 установлен вид обратной зависимости $\theta = \theta(\varphi)$, т.е. вид формулы связи между углом φ наклона луча

$$\lambda_\varphi := \{ |z| > 0, \arg z = \varphi \}, \quad (3.5)$$



Фиг. 17

исходящего из вершины $z = 0$ (см. фиг. 17a), и углом θ , под которым его образ

$$l_\varphi := \mathcal{F}(\lambda_\varphi) \quad (3.6)$$

(точнее, касательная к l_φ) выходит из точки $w = 0$ (см. фиг. 17b). В п. 3.4 найден также вид асимптотики линии l_φ вблизи точки $w = 0$, из которой вытекает зависимость $\theta = \theta(\varphi)$.

Говоря о соотношениях, характеризующих поведение гармонического отображения $\mathcal{F}(z)$ вблизи вершины угла $z = 0$ и обратного к нему вблизи ее образа $\mathcal{F}(0)$, мы имеем в виду прежде всего зависимости $\varphi(\theta)$, $\theta(\varphi)$, а также служащие основой для них асимптотики линий $\mathcal{L}_\theta$, l_φ и асимптотику отображения (3.1) вблизи вершины угла. Все эти результаты получены ниже в настоящем разд. 3; они являются развитием результатов из [48, 49].

Необходимо отметить, что обе найденные функции, $\varphi(\theta)$ и $\theta(\varphi)$, носят разрывный характер, тогда как соответствующие зависимости для аналогичного конформного отображения — обозначим их соответственно через $\varphi_{\text{conf}}(\theta)$ и $\theta_{\text{conf}}(\varphi)$ — являются линейными. Действительно, для конформного отображения $f: \mathcal{Z} \xrightarrow{\text{conf}} \mathcal{H}$, $f(0) = 0$, справедлива асимптотика вблизи вершины угла

$$w = f(z) = Aiz^{1/\beta} + \mathcal{O}(z^{2/\beta}), \quad |z| \rightarrow 0, \quad A > 0,$$

из которой вытекает следующий, линейный вид указанных функций:

$$\varphi = \varphi_{\text{conf}}(\theta) = \beta(\theta - \pi/2), \quad \theta = \theta_{\text{conf}}(\varphi) = \pi/2 + \varphi/\beta.$$

Отмеченное отличие в поведении гармонического и конформного отображений вблизи угловых точек границы области является проявлением общего существенного различия между этими типами отображений (см. также [4–8, 34]).

3.2. Асимптотика гармонического отображения вблизи вершины угла

Приведенное в п. 3.1 определение отображения (3.1) дополним условием, что оно устанавливает гомеоморфизм $w = B(z)$ между контуром угла $\mathcal{Z}$ и интервалом $\mathcal{J} = \mathcal{J}_- \cup \{0\} \cup \mathcal{J}_+$ по правилу (2.4), которое согласуется с условием (3.2). Очевидно, что область $\mathcal{Z}$ включает сектор

$$\Upsilon = \{r \in (0, R), \quad \varphi \in (-\pi\beta/2, \pi\beta/2)\} \quad (3.7)$$

некоторого радиуса $R > 0$, т.е. $\Upsilon \subset \mathcal{Z}$.

В области $\mathcal{Z}$ при $\beta \in (0, 1) \cup (1, 2)$ зададим (вещественную) гармоническую функцию $Q(z)$ с помощью выражения

$$Q(re^{i\varphi}) := -\mu r \sin(\varphi - \varphi^*) \quad (3.8)$$

с параметрами μ , φ^* , определяемыми раствором $\pi\beta$ угла и “скоростями” σ_- и σ_+ гомеоморфизма (2.4) по формулам

$$\mu := |\sin \pi\beta|^{-1} \sqrt{\sigma_+^2 + \sigma_-^2 + 2\sigma_+\sigma_- \cos \pi\beta}, \quad \varphi^* := \operatorname{arctg} \left(\frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_+ + \sigma_-} \operatorname{tg} \frac{\pi\beta}{2} \right). \quad (3.9)$$

Отсюда с учетом положительности величин σ_+ и σ_- вытекают соотношения

$$\mu > 0, \quad \varphi^* \in (-\pi\beta/2, \pi\beta/2). \quad (3.10)$$

Нетрудно убедиться с помощью непосредственной проверки, что при всех $\beta \in (0,1) \cup (1,2)$ функция (3.8) удовлетворяет условию (2.4) на контуре $\mathcal{L}$ угла, т.е.

$$Q(re^{i\varphi}) = \begin{cases} \sigma_+ r, & \varphi = -\pi\beta/2, \\ -\sigma_- r, & \varphi = \pi\beta/2. \end{cases} \quad (3.11)$$

Поэтому гармоническая в секторе (3.7) и непрерывная в $\bar{\Upsilon}$ функция $\mathcal{F} - Q$ обращается в нуль на $\mathcal{L}$ и, следовательно, представима на множестве $\bar{\Upsilon}$ в виде сходящегося на нем ряда

$$\mathcal{F}(z) - Q(z) = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n + ib_n) \operatorname{Im}(iz^{1/\beta})^n. \quad (3.12)$$

Правая часть этого равенства представляет собой, очевидно, ряд Фурье левой части с подстановкой

$$z = z(t) := r \exp[i(t - \pi\beta/2)] \quad (3.13)$$

на отрезке $t \in [0, \pi\beta]$ по функциям $r^{n/\beta} \sin nt/\beta$. Тогда числа $a_k + ib_k$ суть его коэффициенты Фурье, вещественная и мнимая часть которых вычисляется по формуле

$$a_n = \frac{2r^{-n/\beta}}{\pi\beta} \int_0^{\pi\beta} \operatorname{Re} [\mathcal{F}(z) - Q(z)]|_{z=z(t)} \sin \frac{nt}{\beta} dt. \quad (3.14)$$

Из однолистности отображения $\mathcal{F}$ и сохранения им ориентации следует, что

$$a_1 \neq 0, \quad b_1 > 0. \quad (3.15)$$

Переносим функцию Q , определяемую равенством (3.8), в правую часть (3.12) и обрывая в ней ряд на первых двух его членах, находим асимптотику рассматриваемого гармонического отображения $w = \mathcal{F}(z)$ вблизи вершины $z = 0$ угла. При $\beta \in (0,1)$ она дается формулой

$$\mathcal{F}(re^{i\varphi}) = -\mu \sin(\varphi - \varphi^*) \cdot r + (a_1 + ib_1) \cos \frac{\varphi}{\beta} \cdot r^{1/\beta} - (a_2 + ib_2) \sin \frac{2\varphi}{\beta} \cdot r^{2/\beta} + \mathcal{O}(r^{3/\beta}), \quad r \rightarrow 0. \quad (3.16)$$

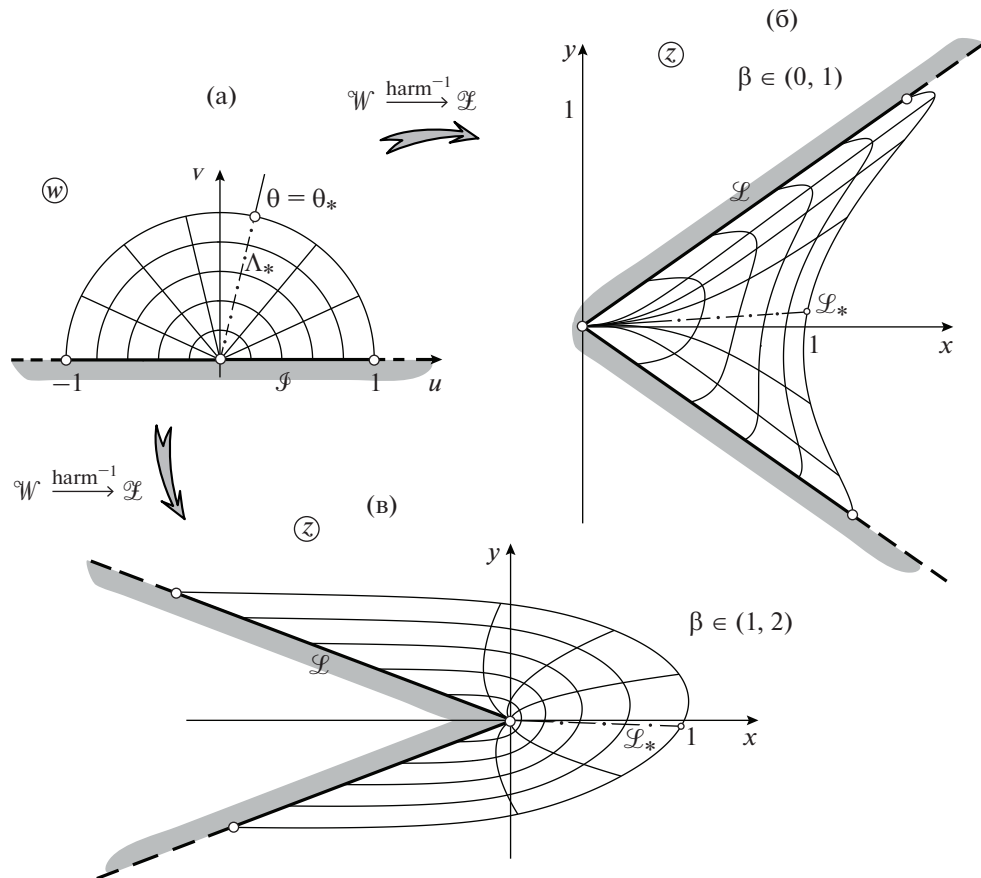
Эта же формула справедлива и при $\beta \in (1,2)$, но с переменой мест первых двух слагаемых, так чтобы они были расположены в порядке убывания.

3.3. Асимптотика линий $\mathcal{L}_\theta$, исходящих из вершины угла

3.3.1. Уравнение для функции $\varphi_\theta(r)$. Обозначим через $\varphi = \varphi_\theta(r)$ уравнение в полярных координатах (r, φ) линии $\mathcal{L}_\theta$, определяемой равенством (3.4) (см. фиг. 16а). Асимптотику этой линии вблизи вершины $z = 0$ угла $\mathcal{L}$, понимаемую как асимптотику функции $\varphi_\theta(r)$ при $r \rightarrow 0$, найдем, исходя из уравнения для $\varphi_\theta(r)$.

Для его вывода запишем тождество $\operatorname{Im}[\mathcal{F}(z)e^{-i\theta}] = 0$, $z \in \mathcal{L}_\theta$, которому линия $\mathcal{L}_\theta$ отвечает по определению. Выражая в этом тождестве координату точек на дуге $\mathcal{L}_\theta$ в виде $z = re^{i\varphi_\theta(r)}$, получим для функции $\varphi_\theta(r)$ следующее равенство:

$$\operatorname{Im}[\mathcal{F}(re^{i\varphi_\theta(r)})e^{-i\theta}] = 0, \quad (3.17)$$



Фиг. 18

а подставляя сюда соотношение (3.16) для отображения $\mathcal{F}(z)$, придем к асимптотическому уравнению относительно искомой функции $\varphi_\theta(r)$:

$$0 = -\mu \sin(\varphi_\theta(r) - \varphi^*) \cdot r + (a_1 - b_1 \operatorname{ctg} \theta) \cos \frac{\varphi_\theta(r)}{\beta} \cdot r^{1/\beta} - (a_2 - b_2 \operatorname{ctg} \theta) \sin \frac{2\varphi_\theta(r)}{\beta} \cdot r^{2/\beta} + \mathcal{O}(r^{3/\beta}), \quad r \rightarrow 0. \quad (3.18)$$

При $\beta \in (0, 1)$ здесь слагаемые в правой части расположены в порядке убывания. Для соблюдения этого же принципа при $\beta \in (1, 2)$ необходимо в формуле (3.18) переставить два первых члена.

3.3.2. Особый случай, $\theta = \theta^*$. Анализ уравнения (3.18) показывает, что прежде всего следует выделить особый случай, когда величина угла наклона луча Λ_θ принимает такое значение, что выражение во вторых скобках правой части (3.18) обращается в нуль, т.е. выполняется равенство

$$a_1 - b_1 \operatorname{ctg} \theta = 0. \quad (3.19)$$

Удовлетворяющий ему угол обозначим через

$$\theta^* = \frac{\operatorname{arctg} b_1}{a_1}, \quad (3.20)$$

соответствующую этому случаю кривую $\mathcal{L}_\theta$ — через $\mathcal{L}^*$, а уравнение для нее — через $\varphi = \varphi^*(r)$; ниже показано, что по своим геометрическим свойствам она отличается от кривых $\mathcal{L}_\theta$ при $\theta \neq \theta^*$. Другие величины и объекты, соответствующие особому случаю, будем также отмечать “звездочкой” (знаком *).

Подставив (3.19) в формулу (3.18) и разделив обе части на μr , приходим к асимптотическому уравнению для $\varphi^*(r)$:

$$\sin(\varphi^*(r) - \varphi^*) = -\frac{(a_2 - b_2 \operatorname{ctg} \theta)}{\mu} \sin \frac{2\varphi^*(r)}{\beta} \cdot r^{2/\beta-1} + \mathcal{O}(r^{3/\beta-1}), \quad r \rightarrow 0.$$

Если учесть, что правая часть здесь стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, так как $\beta < 2$, то получим асимптотику для $\varphi^*(r)$ в виде

$$\beta \in (0,1) \cup (1,2), \quad \theta = \theta^*: \quad \varphi^*(r) = \varphi^* + E^* \cdot r^{2/\beta-1} + \mathcal{O}(r^{3/\beta-1}), \quad r \rightarrow 0, \quad (3.21)$$

где

$$E^* := -\mu^{-1}(a_2 - b_2 \operatorname{ctg} \theta^*) \sin \frac{2\varphi^*}{\beta}. \quad (3.22)$$

Асимптотика (3.21) определяет поведение “особой” линии $\mathcal{L}^*$ вблизи вершины $z = 0$ угла $\mathcal{L}$.

3.3.3. Общий случай, $\theta \neq \theta^*$. Предположим теперь, что угол θ , под которым луч (3.3) выходит из точки $w = 0$, принимает произвольные значения $\theta \in (0, \pi)$, $\theta \neq \theta^*$. Здесь, в свою очередь, следует выделить два случая:

$$\text{I) } \beta \in (0,1), \quad \text{II) } \beta \in (1,2). \quad (3.23)$$

Рассмотрим первый из них.

I) Пусть $\beta \in (0,1)$. Разделив обе части (3.18) на μr , получаем уравнение

$$\begin{aligned} \sin(\varphi_\theta(r) - \varphi^*) &= \mu^{-1}(a_1 - b_1 \operatorname{ctg} \theta) \cos \frac{\varphi_\theta(r)}{\beta} \cdot r^{1/\beta-1} - \\ &- \mu^{-1}(a_2 - b_2 \operatorname{ctg} \theta) \sin \frac{2\varphi_\theta(r)}{\beta} \cdot r^{2/\beta-1} + \mathcal{O}(r^{3/\beta-1}), \quad r \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Его правая часть стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, а следовательно, $\varphi_\theta(r)$ стремится к φ^* при $r \rightarrow 0$. Используя этот факт, находим требуемую асимптотику для рассматриваемого случая I в следующем виде:

$$\beta \in (0,1), \quad \theta \in (0, \pi) \setminus \{\theta^*\}: \quad \varphi_\theta(r) = \varphi^* + E_1(\theta) \cdot r^{1/\beta-1} + \mathcal{O}(r^{2/\beta-1}), \quad r \rightarrow 0, \quad (3.25)$$

где

$$E_1(\theta) = \mu^{-1}(a_1 - b_1 \operatorname{ctg} \theta) \cos \frac{\varphi^*}{\beta}.$$

Используя представление (3.12) для отображения $\mathcal{F}(z)$, нетрудно увидеть, что при всех $r > 0$ справедливы соотношения $\mathcal{F}(re^{-i\pi\beta/2}) > 0$, $\mathcal{F}(re^{i\pi\beta/2}) < 0$, и, таким образом, линии $\varphi = -\pi\beta/2$ и $\varphi = \pi\beta/2$ переходят соответственно в линии $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. Поэтому вместо асимптотики (3.24) имеем точные равенства

$$\varphi_0(r) = -\frac{\pi\beta}{2}, \quad \varphi_\pi(r) = \frac{\pi\beta}{2}, \quad r \in (0, +\infty). \quad (3.26)$$

Таким образом, зависимость $\varphi(\theta)$ между углом θ , под которым луч Λ_θ выходит из образа $w = 0$ вершины угла, и углом φ , под которым прообраз $\mathcal{L}_\theta = \mathcal{F}^{-1}(\Lambda_\theta)$ луча Λ_θ выходит из вершины $z = 0$, имеет при $\beta \in (0,1)$ следующий вид:

$$\beta \in (0,1): \quad \varphi(\theta) = \begin{cases} -\pi\beta/2, & \theta = 0, \\ \varphi^*, & \theta \in (0, \pi), \\ \pi\beta/2, & \theta = \pi. \end{cases} \quad (3.27)$$

II) Пусть теперь $\beta \in (1, 2)$, т.е. угол $\mathcal{L}$ является входящим. Будем при этом по-прежнему считать, что $\theta \neq \theta^*$. Для получения асимптотики функции $\varphi_\theta(r)$, описывающей кривую $\mathcal{L}_\theta$, разделим уравнение (3.18) на отличную от нуля величину $(a_1 - b_1 \operatorname{ctg} \theta) r^{1/\beta}$ и перепишем его следующим образом:

$$\cos \frac{\varphi_\theta(r)}{\beta} = F_1(\theta) \sin(\varphi_\theta(r) - \varphi^*) \cdot r^{1-1/\beta} + \mathcal{O}(r^{1/\beta}), \quad r \rightarrow 0; \quad \theta^* \neq \theta \in (0, \pi), \quad (3.28)$$

где введено обозначение

$$F_1(\theta) = \mu(a_1 - b_1 \operatorname{ctg} \theta)^{-1}. \quad (3.29)$$

Поскольку правая часть равенства (3.28) стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, то $\cos(\varphi_\theta(r)/\beta)$ также стремится к нулю, а следовательно, главным членом асимптотики функции $\varphi_\theta(r)$ может быть либо $\pi\beta/2$, либо $-\pi\beta/2$. Согласно сказанному получаем, что

$$\varphi_\theta(r) = \mp \pi\beta/2 \pm \varepsilon(r), \quad 0 < \varepsilon(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0.$$

Подставляя эту формулу в (3.28) и учитывая, что

$$\cos(\mp \pi/2 + \varepsilon) = \pm \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad \varepsilon \rightarrow 0,$$

находим асимптотику функции $\varphi_\theta(r)$, $r \rightarrow 0$, при $\theta \neq \theta^*$. Добавляя еще соотношение (3.21), устанавливаем требуемую асимптотику для $\varphi_\theta(r)$ при $\beta \in (1, 2)$ во всем диапазоне $\theta \in (0, \pi)$:

$$\beta \in (1, 2): \quad \varphi_\theta(r) = \begin{cases} -\frac{\pi\beta}{2} - \left[\beta F_1(\theta) \sin\left(\frac{\pi\beta}{2} + \varphi^*\right) \right] r^{1-1/\beta} + \mathcal{O}(r^\gamma), & \theta \in (0, \theta^*), \\ \varphi^* + E^* r^{2/\beta-1} + \mathcal{O}(r^{3/\beta-1}), & \theta = \theta^*, \\ \frac{\pi\beta}{2} - \left[\beta F_1(\theta) \sin\left(\frac{\pi\beta}{2} - \varphi^*\right) \right] r^{1-1/\beta} + \mathcal{O}(r^\gamma), & \theta \in (\theta^*, \pi), \quad r \rightarrow 0; \end{cases} \quad (3.30)$$

здесь показатель γ дается формулой $\gamma = \min\{1/\beta, 2(1-1/\beta)\}$, а коэффициенты E^* и $F_1(\theta)$ определяются соответственно равенствами (3.22) и (3.29).

Из асимптотики (3.30) вытекает зависимость $\varphi(\theta)$ между углом θ , под которым луч Λ_θ выходит из образа $w = 0$ вершины угла, и углом φ , под которым прообраз луча $\mathcal{L}_\theta := \mathcal{F}^{-1}(\Lambda_\theta)$ выходит из вершины $z = 0$ (см. фиг. 18). Эта зависимость, являющаяся первым членом асимптотики (3.30), дается при $\beta \in (1, 2)$ формулой

$$\beta \in (1, 2): \quad \varphi(\theta) = \begin{cases} -\pi\beta/2, & \theta \in (0, \theta^*), \\ \varphi^*, & \theta = \theta^*, \\ \pi\beta/2, & \theta \in (\theta^*, \pi). \end{cases} \quad (3.31)$$

Объединяя соотношения (3.30), (3.31), справедливые для случая II, с аналогичными результатами (3.25), (3.27) для случая I, приходим к следующему утверждению.

Теорема 1. 1) Асимптотика функции $\varphi = \varphi_\theta(r)$, описывающей в полярных координатах линию $\mathcal{L}_\theta := \mathcal{F}^{-1}(\Lambda_\theta)$, имеет при $\beta \in (0, 1)$ вид (3.25), а при $\beta \in (1, 2)$ — вид (3.30).

2) Зависимость $\varphi(\theta)$ между углом θ , под которым луч Λ_θ выходит из образа $w = 0$ вершины угла, и углом φ , под которым его прообраз $\mathcal{L}_\theta$ выходит из вершины $z = 0$, имеет при $\beta \in (0, 1)$ вид (3.27), а при $\beta \in (1, 2)$ — вид (3.31).

Иллюстрацией к этой теореме служит фиг. 18. На фиг. 18а изображена полярная сетка Ξ на плоскости $w = re^{i\theta}$, определяемая по формуле

$$\Xi = \left\{ \rho = \frac{n}{5}, n = \overline{1, 5}; \theta = \frac{\pi n}{7}, n = \overline{0, 7} \right\};$$

на фиг. 18б дан ее прообраз $\mathcal{F}^{-1}(\Xi)$ на плоскости z при некотором $\beta < 1$, т.е. для случая I, когда $\mathcal{L}$ — выходящий угол, а на фиг. 18в дан ее прообраз при некотором $\beta > 1$, т.е. для случая II, когда угол $\mathcal{L}$ — входящий.

Из фиг. 18б видно, что при $\beta < 1$ прообразы $\mathcal{L}_\theta := \mathcal{F}^{-1}(\Lambda_\theta)$ всех лучей Λ_θ , за исключением лежащих на контуре угла $\mathcal{L}$ (соответствующих $\theta = 0$ и $\theta = \pi$), “прилипают” в вершине $z = 0$ к особой линии $\mathcal{L}^*$. С другой стороны, из фиг. 18б следует, что при $\beta > 1$ все линии Λ_θ , соответствующие $\theta \in (0, \theta^*)$, “прилипают” к стороне $\mathcal{L}_-$ угла, а все Λ_θ , соответствующие $\theta \in (\theta^*, \pi)$, — к стороне $\mathcal{L}_+$.

Эти численные иллюстрации подтверждают положения теоремы 1.

3.3.4. Объяснение эффекта “прилипания”. Из сравнения определения (2.5) изолинии $\mathcal{U}_0$ и определения (3.4), (3.3) линии $\mathcal{L}_\theta$ (см. также фиг. 2 и фиг. 16) очевидно, что

$$\mathcal{U}_0 = \mathcal{L}_\theta \quad \text{при} \quad \theta = \frac{\pi}{2}.$$

Тогда из равенства (3.31) для угла наклона линии $\mathcal{L}_\theta$ в вершине $z = 0$ следует, что изолиния $\mathcal{U}_0$ не касается ни одной из сторон угла, только если ее образ $\{w : u = 0, v \in [0, H]\}$ исходит из вершины под углом θ^* , иначе говоря, только если $\theta^* = \pi/2$, и в этом “особом” случае угол наклона нашей изолинии в вершине будет равен $\arg \mathcal{U}_0 = \varphi^*$. Если же $\theta^* \neq \pi/2$, то согласно формуле (3.31) изолиния $\mathcal{U}_0 = \mathcal{L}_{\pi/2}$ будет касаться одной из сторон угла, а именно, стороны $\mathcal{L}_-$ при $\theta^* \in (0, \pi/2)$ и стороны $\mathcal{L}_+$ при $\theta^* \in (\pi/2, \pi)$. Эти положения отражены в формуле (2.6).

Отметим, что величины φ^* и θ^* определяются через параметры отображения соответственно по второй формуле (3.9) и формуле (3.20), где a_1 и b_1 вычисляются с помощью (3.14) при $n = 1$.

3.4. Асимптотика линий l_φ , исходящих из образа вершины угла

Напомним, что λ_φ — луч на плоскости z , исходящий из вершины $z = 0$ под углом φ , а линия $l_\varphi = \mathcal{F}(\lambda_\varphi)$ — его образ на плоскости $w = u + iv = \rho e^{i\theta}$ (см. фиг. 17). Уравнение линии l_φ в декартовых координатах обозначим через $v = v_\varphi(u)$, в полярных координатах — через $\theta = \theta_\varphi(\rho)$ при $\theta \neq \theta^*$ и через $\theta = \theta^*(\rho)$ при $\theta = \theta^*$, а декартовы координаты u, v линии l_φ , рассматриваемые как функции радиальной координаты r на прообразе — луче λ_φ , обозначим соответственно через $u = u_\varphi(r)$ и $v = v_\varphi(r)$.

Найдем асимптотику линии l_φ вблизи точки $w = 0$, понимаемую как асимптотику одной из функций $v_\varphi(u)$ или $\theta_\varphi(\rho)$. Получим также зависимость $\theta(\varphi)$ между углом φ , под которым луч λ_φ выходит из вершины $z = 0$, и углом θ , под которым его образ l_φ выходит из точки $w = 0$. Вывод этих соотношений так же, как изученных в подпункте 3.3.3, следует проводить отдельно для двух случаев (3.23).

3.4.1. Случай I. Пусть выполняется условие $\beta \in (0, 1)$.

Асимптотики для $u_\varphi(r)$ и $v_\varphi(r)$ получаем, отделяя в формуле (3.16) вещественную и мнимую части:

$$\begin{aligned} u_\varphi(r) &= -\mu \sin(\varphi - \varphi^*) \cdot r + a_1 \cos \frac{\varphi}{\beta} \cdot r^{1/\beta} - a_2 \sin \frac{2\varphi}{\beta} \cdot r^{2/\beta} + O(r^{3/\beta}), \\ v_\varphi(r) &= b_1 \cos \frac{\varphi}{\beta} r^{1/\beta} - b_2 \sin \frac{2\varphi}{\beta} \cdot r^{2/\beta} + O(r^{3/\beta}), \quad r \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Из первого уравнения находим

$$u_\varphi(r) = -\mu r \sin(\varphi - \varphi^*) \left[1 - \frac{a_1 \cos \varphi / \beta}{\mu \sin(\varphi - \varphi^*)} \cdot r^{1/\beta-1} + O(r^{2/\beta-1}) \right], \quad r \rightarrow 0. \quad (3.33)$$

Здесь, в свою очередь, следует выделить три подслучая:

$$1) \quad \varphi \in (-\pi\beta/2, \varphi^*), \quad 2) \quad \varphi \in (\varphi^*, \pi\beta/2), \quad 3) \quad \varphi = \varphi^*. \quad (3.34)$$

1) Рассмотрим первый из них, т.е. предположим, что $\varphi < \varphi^*$. Тогда, замечая, что в этом случае $u_\varphi(r) > 0$ при малых r , получаем из (3.33)

$$[u_\varphi(r)]^{1/\beta} = [\mu r \sin(\varphi^* - \varphi)]^{1/\beta} \cdot r^{1/\beta} \left[1 + \frac{a_1 \cos \varphi / \beta}{\beta \mu \sin(\varphi^* - \varphi)} \cdot r^{1/\beta-1} + \mathcal{O}(r^{2/\beta-1}) \right], \quad r \rightarrow 0.$$

Выражая отсюда величину $r^{1/\beta}$ через u :

$$r^{1/\beta} = \frac{u^{1/\beta}}{[\mu \sin(\varphi^* - \varphi)]^{1/\beta}} + \mathcal{O}(u^{2/\beta-1}), \quad u \rightarrow 0,$$

и подставляя ее во второе равенство (3.32), получаем асимптотику функции $v_\varphi(u)$:

$$\beta \in (0, 1), \quad \varphi \in (-\pi\beta/2, \varphi^*) : \quad v_\varphi(u) = \frac{b_1 \cos \varphi / \beta}{[\mu \sin(\varphi^* - \varphi)]^{1/\beta}} u^{1/\beta} + \mathcal{O}(u^{2/\beta-1}), \quad u \rightarrow 0. \quad (3.35)$$

2) Рассмотрим второй случай (3.34), т.е. предположим, что $\varphi > \varphi^*$. Замечая, что в этом случае величина $[-u_\varphi(r)] > 0$ при малых r , выражаем через нее, используя (3.33), степень радиальной координаты:

$$r^{1/\beta} = \frac{(-u)^{1/\beta}}{[\mu \sin(\varphi - \varphi^*)]^{1/\beta}} + \mathcal{O}(|u|^{2/\beta-1}), \quad |u| \rightarrow 0;$$

подставляя ее во второе равенство (3.32), получаем асимптотику функции $v_\varphi(u)$:

$$\beta \in (0, 1), \quad \varphi \in (\varphi^*, \pi\beta/2) : \quad v_\varphi(u) = \frac{b_1 \cos \varphi / \beta}{[\mu \sin(\varphi - \varphi^*)]^{1/\beta}} (-u)^{1/\beta} + \mathcal{O}(|u|^{2/\beta-1}), \quad |u| \rightarrow 0. \quad (3.36)$$

3) Рассматривая теперь третий случай (3.34), полагаем $\varphi = \varphi^*$ в представлениях (3.32). Обозначая для этого случая функции $u_\varphi(r)$ и $v_\varphi(r)$ соответственно через $u^*(r)$ и $v^*(r)$, имеем

$$u^*(r) = \left(a_1 \cos \frac{\varphi^*}{\beta} \right) r^{1/\beta} + \mathcal{O}(r^{2/\beta}), \quad v^*(r) = \left(b_1 \cos \frac{\varphi^*}{\beta} \right) r^{1/\beta} + \mathcal{O}(r^{2/\beta}), \quad r \rightarrow 0.$$

Отсюда, исключая зависимость от r , находим

$$v^*(u) = \frac{b_1}{a_1} u + \mathcal{O}(u^2). \quad (3.37)$$

Отметим, что $b_1/a_1 = \theta^*$.

Итак, объединяя (3.35), (3.36) и (3.37), мы получили для функции $v_\varphi(u)$ следующую асимптотику, описывающую поведение линии l_φ вблизи точки $w = 0$:

$$\beta \in (0, 1) : \quad v_\varphi(u) = \begin{cases} \frac{b_1 \cos \varphi / \beta}{[\mu \sin(\varphi^* - \varphi)]^{1/\beta}} u^{1/\beta} + \mathcal{O}(u^{2/\beta-1}), & \varphi \in (-\pi\beta/2, \varphi^*), \\ \frac{b_1}{a_1} u + \mathcal{O}(u^2), & \varphi = \varphi^*, \\ \frac{b_1 \cos \varphi / \beta}{[\mu \sin(\varphi - \varphi^*)]^{1/\beta}} (-u)^{1/\beta} + \mathcal{O}(|u|^{2/\beta-1}), & \varphi \in (\varphi^*, \pi\beta/2), \quad |u| \rightarrow 0. \end{cases} \quad (3.38)$$

Приведем вывод зависимости $\theta(\varphi)$. Нетрудно увидеть, что

$$\rho(u) = |u| + \mathcal{O}(|u|^{2/\beta-1}), \quad |u| \rightarrow 0,$$

откуда следует $|u(\rho)| = \rho + \mathcal{O}(\rho^{2/\beta-1})$. Подставляя эту асимптотику в (3.38), переходя к полярным координатам и устремляя $\rho \rightarrow 0$, находим следующие соотношения для предельного значения $\theta_\varphi(\rho)$, $\rho \rightarrow 0$, которое и представляет собой зависимость $\theta(\varphi)$:

$$\beta \in (0, 1): \quad \theta(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi \in (-\pi\beta/2, \varphi^*), \\ \theta^*, & \varphi = \varphi^*, \\ \pi, & \varphi \in (\varphi^*, \pi\beta/2). \end{cases} \quad (3.39)$$

3.4.2. Случай II. Пусть выполняется условие $\beta \in (1, 2)$. Введем повернутую систему декартовых координат $\mathcal{U} + i\mathcal{V} = e^{-i\theta^*}(u + iv)$ и рассмотрим отображение

$$\mathcal{U} + i\mathcal{V} := e^{-i\theta^*}\mathcal{F}(z) = (a_1 + ib_1)e^{-i\theta^*}r^{1/\beta} \cos \frac{\varphi}{\beta} - \mu r e^{-i\theta^*} \sin(\varphi - \varphi^*) + \mathcal{O}(r^{2/\beta}),$$

вещественная и мнимая часть которого имеют следующие асимптотики:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(r, \varphi) &= \sqrt{a_1^2 + b_1^2} \cos \frac{\varphi}{\beta} \cdot r^{1/\beta} \mu \sin(\varphi - \varphi^*) \cos \theta^* \cdot r + \mathcal{O}(r^{2/\beta}), \quad r \rightarrow 0, \\ \mathcal{V}(r, \varphi) &= -\mu \sin(\varphi - \varphi^*) \cos \theta^* \cdot r + \mathcal{O}(r^{2/\beta}), \quad r \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Уравнение линии l_φ в повернутых декартовых координатах обозначим через $\mathcal{V} = \mathcal{V}_\varphi(\mathcal{U})$.

Рассмотрим диапазон изменения $\varphi \in (-\pi\beta/2, \pi\beta/2) \setminus \{\varphi^*\}$. Из первого равенства (3.40) находим

$$\mathcal{U}^\beta(r, \varphi) = (\sqrt{a_1^2 + b_1^2})^\beta r \left[1 - \beta \frac{\mu \sin(\varphi - \varphi^*) \cos \theta^*}{\sqrt{a_1^2 + b_1^2} \cos(\varphi/\beta)} r^{1-1/\beta} \right] + \mathcal{O}(r^{1/\beta}), \quad r \rightarrow 0, \quad (3.41)$$

откуда получаем асимптотику

$$r = (\sqrt{a_1^2 + b_1^2} \cos \varphi/\beta)^{-\beta} + \mathcal{O}(\mathcal{U}^{2\beta-1}), \quad \mathcal{U} \rightarrow 0. \quad (3.42)$$

Подставляя (3.42) во второе соотношение (3.40) и учитывая равенство $\sin \theta^* = b_1/\sqrt{a_1^2 + b_1^2}$, находим требуемую асимптотику

$$\mathcal{V}_\varphi(\mathcal{U}) = \frac{\mu b_1 \sin(\varphi - \varphi^*)}{(a_1^2 + b_1^2)^{(1+\beta)/2} (\cos(\varphi/\beta))^\beta} \mathcal{U}^\beta + \mathcal{O}(\mathcal{U}^{2\beta-1}), \quad \mathcal{U} \rightarrow 0. \quad (3.43)$$

Построим теперь асимптотику для $\tilde{\theta}(\rho) := \theta(\rho) - \theta^*$. Нетрудно показать, что

$$\rho(\mathcal{U}) = \mathcal{U} + \mathcal{O}(\mathcal{U}^{2\beta-1}), \quad \mathcal{U} \rightarrow 0,$$

откуда следует $\mathcal{U}(\rho) = \rho + \mathcal{O}(\rho^{2\beta-1})$. Подставляя это соотношение в (3.43) и переходя к полярным координатам

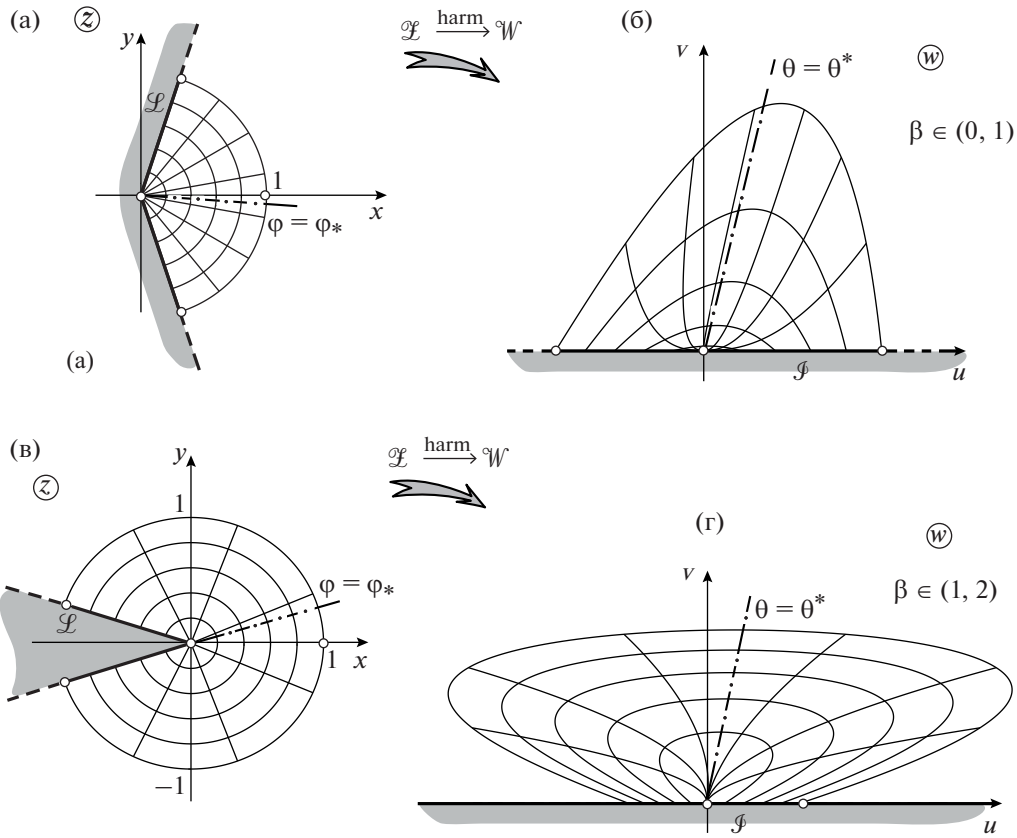
$$\tilde{\theta} = \arg(\mathcal{U} + i\mathcal{V}), \quad \rho = \sqrt{\mathcal{U}^2 + \mathcal{V}^2},$$

находим асимптотику для $\theta = \theta^* + \tilde{\theta}$:

$$\begin{aligned} \beta \in (1, 2), \quad \varphi \in (-\pi\beta/2, \pi\beta/2) \setminus \{\varphi^*\}: \\ \theta_\varphi(\rho) = \theta^* + \frac{\mu b_1 \sin(\varphi - \varphi^*)}{(a_1^2 + b_1^2)^{(1+\beta)/2} (\cos(\varphi/\beta))^\beta} \rho^{\beta-1} + \mathcal{O}(\rho^{2\beta-1}), \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Рассмотрим теперь случай $\varphi = \varphi^*$. Проводя аналогичные рассуждения, основанные на анализе асимптотик (3.40), приходим к следующему соотношению:

$$\mathcal{V}_\varphi(\mathcal{U}) = 2 \frac{a_1 b_2 - b_1 a_2}{(a_1^2 + b_1^2)^{3/2}} \frac{\varphi^*}{\beta} \mathcal{U}^2 + \mathcal{O}(\mathcal{U}^3), \quad \mathcal{U} \rightarrow 0. \quad (3.45)$$



Фиг. 19

Отсюда, переходя к полярным координатам, получаем требуемую асимптотику для $\theta^*(\rho)$:

$$\beta \in (1, 2), \quad \varphi = \varphi_*: \quad \theta^*(\rho) = \theta^* + 2 \frac{a_1 b_2 - b_1 a_2}{(a_1^2 + b_1^2)^{3/2}} \operatorname{tg} \frac{\varphi_*}{\beta} \rho + \mathcal{O}(\rho^2), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (3.46)$$

Из нее с учетом граничного гомеоморфизма (2.4) вытекает следующий вид зависимости $\theta(\varphi)$:

$$\beta \in (1, 2): \quad \theta(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi = -\pi\beta/2, \\ \theta^*, & \varphi \in (-\pi\beta/2, \pi\beta/2), \\ \pi, & \varphi = \pi\beta/2. \end{cases} \quad (3.47)$$

Объединяя соотношения (3.38), (3.39), справедливые для случая I, с аналогичными результатами (3.44), (3.46), (3.47) для случая II, приходим к следующему утверждению.

Теорема 2.1 Если $\beta \in (0, 1)$, то асимптотика функции $v = v_\varphi(u)$, описывающей линию $l_\varphi = \mathcal{F}(\lambda_\varphi)$ в декартовых координатах, имеет вид (3.38); если же $\beta \in (1, 2)$, то асимптотика функции $\theta = \theta_\varphi(\rho)$, описывающей линию l_φ в полярных координатах, имеет при $\theta \neq \theta^*$ вид (3.44), а при $\theta = \theta^*$ – вид (3.46).

2) Зависимость $\theta(\varphi)$ между углом φ , под которым луч λ_φ выходит из вершины $z = 0$, и углом θ , под которым его образ l_φ выходит из точки $w = 0$, имеет при $\beta \in (0, 1)$ вид (3.39), а при $\beta \in (1, 2)$ – вид (3.47).

Иллюстрацией к этой теореме служит фиг. 19. Полярная сетка T на плоскости $z = re^{i\varphi}$ вблизи контура угла $\mathcal{L}$, определяемая по формуле

$$T = \left\{ r = \frac{n}{5}, n = \overline{1, 5}; \varphi = \frac{\pi\beta}{2} \left(\frac{2n}{7} - 1 \right), n = \overline{0, 7} \right\},$$

изображена на фиг. 19а и фиг. 19в соответственно для некоторых значений $\beta < 1$ и $\beta > 1$. Для этих же случаев I и II даны образы (при отображении $\mathcal{F}$) этой сетки соответственно на фиг. 19б и фиг. 19г.

На фиг. 19б видно, что при $\beta < 1$ образы $l_\varphi = \mathcal{F}(\lambda_\varphi)$ всех лучей λ_φ , соответствующих $(-\pi\beta/2, \varphi^*)$, “прилипают” к граничному отрезку $\mathcal{J}_+$, особая линия l^* — образ луча, соответствующего $\varphi = \varphi^*$, выходит из точки $w = 0$ под углом θ^* , а образы l_φ всех лучей λ_φ , соответствующих $(\varphi^*, \pi\beta/2)$, “прилипают” к граничному отрезку $\mathcal{J}_-$. На фиг. 19г видно, что при $\beta > 1$ все l_φ , за исключением лежащих на граничном отрезке $\mathcal{J}$ (т.е. соответствующих $\varphi = -\pi\beta/2$ или $\varphi = \pi\beta/2$), “прилипают” в вершине $z = 0$ к особой линии l^* .

Эти численные иллюстрации подтверждают положения теоремы 2.

4. ПОСТРОЕНИЕ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОТОБРАЖЕНИЯ

4.1. Метод мультиполей

4.1.1. Предварительные замечания. Для решения краевых задач типа (1.2), к которым сводится построение гармонического отображения рассматриваемых областей, т.е. L -образной области $\mathcal{K}$ (фиг. 1), области S с полукруглой выемкой (фиг. 2) и области $\mathcal{N}$ с прямоугольным вырезом (фиг. 3), в работе применяется метод мультиполей (см. [46–48]).

Характерной чертой метода является выделение той части границы области, вблизи которой решение имеет сложный (резко переменный или сингулярный) характер, и где требуется получение решения (а часто и его дифференциальных характеристик) с высокой точностью.

Называя g любую из рассматриваемых областей $\mathcal{K}$, S или $\mathcal{N}$, обозначим выделенный участок границы через γ . Для L -образной области $\mathcal{K}$ таким участком естественно считать контур $\mathcal{L}$ угла (см. фиг. 3а), для области S — дугу $l_3 \cup l_4 \cup l_1$, содержащую полукруговую выемку (фиг. 10а и 11а), а для области $\mathcal{N}$ — контур прямоугольного выреза $(z_1 z_2 z_3 z_4 z_5)$ (см. фиг. 14а и 15). Оставшийся участок границы $\partial g \setminus \gamma$ назовем Γ .

Эффективность применения метода мультиполей для рассматриваемых задач основана на том, что для данных областей g легко указать такое их расширение G через дугу Γ , для которого можно в явном аналитическом виде найти его конформное отображение Φ на верхнюю полуплоскость. Ниже показано, что с помощью этого отображения легко строится система функций $\{\Omega_k\}_{k \in \mathbb{N}}$, где $\mathbb{N}$ — множество натуральных чисел, обладающая хорошими аппроксимативными свойствами. (Эти аппроксимативные функции родственны мультиполям из комплексного анализа и теории потенциала (см. [51]), откуда и название метода.) С помощью данной системы находятся решения соответствующих краевых задач и в итоге строится требуемое гармоническое отображение.

4.1.2. Общая схема метода. Общая схема этого метода заключается в следующем. Пусть граница ∂g односвязной области g на комплексной плоскости z состоит из двух дуг, Γ и γ , из которых первая является жордановой кусочно-гладкой, а для области g существует ее расширение G через дугу Γ , т.е. такая односвязная область G , что выполняются условия: 1) $G \supset g$, 2) $\partial G \supset \gamma$, 3) $G \supset \text{Int } \Gamma$. Точки дуги Γ обозначаем через z' , а (произвольную) жорданову дугу λ без концевых точек — через $\text{Int } \lambda$.

В области g рассмотрим задачу Дирихле

$$\Delta \psi(z) = 0, \quad z \in g, \quad (4.1)$$

$$\psi(z) = 0, \quad z \in \gamma, \quad (4.2)$$

$$\psi(z') = h(z'), \quad z' \in \Gamma, \quad (4.3)$$

где функция $h(z')$ принадлежит $L_2(\Gamma)$; однозначная разрешимость этой задачи в функциональном пространстве типа Харди установлена в [47].

Пусть выполняются указанные выше геометрические условия для областей G и g . Выберем на $\text{Int } \gamma$ точку N , а на дополнительной (открытой) дуге $\partial G \setminus \gamma$ — точку M и введем конформное

отображение $w = \Phi(z)$ расширения G на верхнюю полуплоскость $\mathbb{H}$, удовлетворяющее нормировке

$$\Phi(N) = 0, \quad \Phi(M) = \infty. \quad (4.4)$$

Определим функции $\Omega_k(z)$, $k \in \mathbb{N}$, по формуле

$$\Omega_k(z) = \text{Im}[\Phi(z)]^k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.5)$$

В [47] доказано следующее утверждение.

Теорема 3. *Функции $\Omega_k(z)$ являются гармоническими в области g , удовлетворяют на γ однородному условию $\Omega_k(z) = 0$ и образуют полную и минимальную систему в $L_2(\Gamma)$.*

В соответствии с этой теоремой решение задачи (4.1)–(4.3) ищем в виде предела последовательности $\{\psi^N\}$ приближенных решений (здесь и далее N – верхний индекс)

$$\psi(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} \psi^N(z), \quad \psi^N(z) := \sum_{k=1}^N a_k^N \Omega_k(z), \quad (4.6)$$

где коэффициенты a_k^N определяются из условия минимальности отклонения приближенного решения ψ^N от граничной функции h в норме $L_2(\Gamma)$, т.е. $\|\psi^N - h; L_2(\Gamma)\| = \min$. Это условие приводит к следующей системе линейных уравнений:

$$\sum_{k=1}^N (\Omega_n, \Omega_k) a_k^N = (\Omega_n, h), \quad n = \overline{1, N}, \quad (4.7)$$

где через $(\cdot, \cdot)$ обозначено скалярное произведение в $L_2(\Gamma)$, т.е.

$$(\Omega_n, \Omega_k) = \int_{\Gamma} \Omega_n(z') \Omega_k(z') |dz'|, \quad (\Omega_n, h) = \int_{\Gamma} \Omega_n(z') h(z') |dz'|. \quad (4.8)$$

Обозначим верхний полукруг и его полуокружность соответственно через

$$\mathbb{U}^+ := \{|\zeta| < 1, \text{Im} > 0\}, \quad \mathbb{T}^+ := \{|\zeta| = 1, \text{Im} > 0\},$$

а через $z = \omega(\zeta)$ – конформное отображение полукруга $\mathbb{U}^+$ на g , переводящее полуокружность $\mathbb{T}^+$ в дугу Γ . Сходимость описанного метода обеспечивает установленная в [47] следующая

Теорема 4. *Справедливы утверждения*

$$1) \lim_{N \rightarrow \infty} \|\psi^N - h; L_2(\Gamma)\| = 0;$$

2) *последовательность приближенных решений $\{\psi^N(z)\}_N$ равномерно сходится при $N \rightarrow \infty$ к решению $\psi(z)$ задачи (4.1)–(4.3) на любом компакте $\mathcal{E} \subset (g \cup \text{Int } \gamma)$, и выполняется оценка*

$$\max_{z \in \mathcal{E}} |\psi(z) - \psi^N(z)| \leq \frac{1}{\pi \delta} \left\| \frac{1}{\omega}; L_1(\mathbb{T}^+) \right\|^{1/2} \|h - \psi^N; L_2(\Gamma)\|, \quad (4.9)$$

где δ – расстояние от $\omega^{-1}(\mathcal{E})$ до $\mathbb{T}^+$.

Если граничная функция $h(z')$ в граничном условии (4.3) непрерывна, тогда как точное $\psi(z)$, так и приближенное $\psi^N(z)$ решения задачи (4.1)–(4.3) являются гармоническими в g и непрерывными в $\bar{g}$, а значит, такой же является и их разность, и к ней применим принцип максимума. Отсюда получаем апостериорную оценку погрешности приближенного решения в норме $C(\bar{g})$:

$$\max_{z \in \bar{g}} |\psi(z) - \psi^N(z)| \leq \max_{z' \in \Gamma} |h(z') - \psi^N(z')|; \quad (4.10)$$

очевидно, что правая часть этого неравенства легко вычисляется после нахождения приближенного решения.

4.2. Построение гармонического отображения L -образных областей

Под областью L -образной формы мы понимаем шестиугольник $\mathcal{H}$, изображенный на фиг. 3а, со входящим углом $\mathcal{L}$ раствора $\pi\beta$, $\beta \in (1, 2)$, определяемым формулой (2.3) и имеющим вершину $z_1 = 0$. Контур угла $\mathcal{L}$ переобозначим через γ , а оставшуюся часть границы $\partial\mathcal{H}$ — через Γ .

Согласно сказанному в п. 1.1, построение функции $w = \mathcal{F}(z)$, осуществляющей отображение $\mathcal{F} : \mathcal{H} \xrightarrow{\text{harm}} \Pi$, сводится к решению задачи Дирихле

$$\Delta \mathcal{F}(z) = 0, \quad z \in \mathcal{H}; \quad \mathcal{F}(z) = B(z), \quad z \in \partial\mathcal{H}, \quad (4.11)$$

где для граничного гомеоморфизма $B(z)$, переписанного через текущие длины в виде $\mathfrak{B}(s)$, производная $d\mathfrak{B}/ds$ постоянна на каждой из сторон шестиугольника $\mathcal{H}$, причем

$$d\mathfrak{B}/ds = \begin{cases} \sigma_-, & z \in \mathcal{L}_-, \\ \sigma_+, & z \in \mathcal{L}_+. \end{cases}$$

Тогда, обозначая

$$u(z) + iv(z) = \mathcal{F}(z) - Q(z),$$

где Q определяется формулой (3.8), и учитывая (4.11) и (3.11), получаем для непрерывных в $\overline{\mathcal{H}}$ компонент $u(z)$, $v(z)$ отображения следующие краевые задачи:

$$\Delta u(z) = 0, \quad z \in \mathcal{H}, \quad u(z) = 0, \quad z \in \gamma, \quad u(z') = \operatorname{Re} B(z') - Q(z'), \quad z' \in \Gamma, \quad (4.12)$$

$$\Delta v(z) = 0, \quad z \in \mathcal{H}, \quad v(z) = 0, \quad z \in \gamma, \quad v(z') = \operatorname{Im} B(z'), \quad z' \in \Gamma. \quad (4.13)$$

Задачи (4.12), (4.13) решаем методом мультиполей, изложенным в п. 4.1, для которого принимаем $\Phi(z) = z^{1/\beta}$, так что

$$\Omega_k(z) = \operatorname{Im}(iz^{1/\beta})^k.$$

Далее применяем алгоритм метода мультиполей, изложенный в подпункте 4.1.2. Численная реализация осуществлена для трех вариантов L -образной области, $\mathcal{H}_{(1)}$, $\mathcal{H}_{(2)}$, $\mathcal{H}_{(3)}$. На фиг. 4а–4в даны соответствующие картины их гармонического отображения. При этом апостериорная оценка погрешности в норме $C(\overline{\mathcal{H}_{(j)}})$ составила менее 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций.

4.3. Построение гармонического отображения подковообразной области

Для того чтобы определить общий вид области S с полукруговой выемкой, частным случаем которой является изображенная на фиг. 10 подковообразная область $S_{(1)}$, введем вначале область

$$\mathcal{G} := \{z : \operatorname{Im} z > 0, |z| > 1\},$$

являющуюся расширением области S ; на фиг. 11 заштриховано дополнение к $\mathcal{G}$.

Выберем на границе $\partial\mathcal{G}$ точки $z_2 \in (1, \infty)$ и $z_3 \in (-\infty, -1)$ и соединим их (кусочно-гладкой) дугой l_2 , целиком, кроме концевых точек z_2 и z_3 , лежащей в области $\mathcal{G}$. Тогда в качестве области S примем внутренность контура $l_1 \cup l_2 \cup l_3 \cup l_4$, образованного отрезками $l_1 = [1, 2]$ и $l_3 = [-2, -1]$ границы $\partial\mathcal{G}$, лежащими на вещественной оси $\mathbb{R}$, а также дугой l_2 , введенной выше, и полуокружностью $l_4 = \{z : |z| = 1, y \geq 0\}$. Типичная область S из описанного класса областей с полукруговой выемкой изображена (затенена) на фиг. 11.

Генерируемое гармоническое отображение

$$F : S \xrightarrow{\text{harm}} \mathcal{Q}, \quad F(l_n) = L_n, \quad n = \overline{1, 4}, \quad (4.14)$$

области S на квадрат $\mathcal{Q}$ (см. фиг. 11) подчиним граничному гомеоморфизму $w = B(z)$, при котором “граничная производная” этого гомеоморфизма, переписанного через текущие длины дуг, постоянна на l_n , точнее

$$d\mathfrak{B}/ds = |l_n|^{-1}, \quad z \in l_n.$$

Тогда задача Дирихле (1.2), к решению которой согласно п. 1.1 сводится построение отображения F , приобретает следующий вид:

$$\Delta F(z) = 0, \quad z \in S, \quad (4.15)$$

$$B(z) = z_n - (i)^{n+1} |l_n|^{-1} [s(z) - \sigma_n], \quad z \in l_n, \quad n = \overline{1, 4}; \quad (4.16)$$

здесь $\sigma_n := \sum_{k=1}^{n-1} |l_k|$, а z_n суть вершины квадрата $\mathcal{Q}$, определяемые равенствами $z_1 = 0$, $z_2 = 1$, $z_3 = 1 + i$, $z_4 = i$ (см. фиг. 11б). Задача (4.15), (4.16), в свою очередь, приводится к двум задачам Дирихле отдельно для вещественной $u(z)$ и мнимой $v(z)$ частей отображения $u(z) + iv(z) = F$ с граничными условиями, вытекающими из формулы (4.16).

Построим с помощью метода мультиполей гармоническое отображение конкретной области из рассматриваемого класса, а именно, подковообразной области $S_{(1)}$ на квадрат $\mathcal{Q}$. Для этого зададим дугу l_2 как полуэллипс:

$$l_2 = \{z = x + iy : y = A\sqrt{4 - x^2}, x \in [-2, 2]\}.$$

Тогда граничный гомеоморфизм (4.16) переписывается для вещественной $u(z)$ и мнимой $v(z)$ частей отображения в виде

$$\begin{aligned} u(z) &= x - 1, \quad z \in l_1; & u(z) &= 1, \quad z \in l_2; \\ u(z) &= -x - 1, \quad z \in l_3; & u(z) &= 0, \quad z \in l_4; \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} v(z) &= 0, \quad z \in l_1; & v(z) &= \mathcal{V}(z), \quad z \in l_2; \\ v(z) &= 1, \quad z \in l_3; & v(z) &= \pi^{-1} \arccos x, \quad z \in l_4. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Здесь $\mathcal{V}(z)$ определяется по формуле

$$\mathcal{V}(z) = \begin{cases} \mathcal{E}(2^{-1}y/A, k), & z \in l_2 \cap \{\operatorname{Re} z \geq 0\}, \\ 1 - \mathcal{E}(2^{-1}y/A, k), & z \in l_2 \cap \{\operatorname{Re} z \leq 0\}, \end{cases} \quad (4.19)$$

где $\mathcal{E}(\xi, k)$ дается равенством $\mathcal{E}(\xi, k) := 2^{-1} E(\xi, k)/E(k)$, в котором $E(\xi, k)$ и $E(k)$ суть соответственно неполный и полный эллиптические интегралы второго рода (см. [51]), т.е.

$$E(\xi, k) := \int_0^\xi \sqrt{(1 - k^2 t^2)/(1 - t^2)} dt, \quad E(k) := E(1, k), \quad (4.20)$$

с модулем $k = \sqrt{1 - A^{-2}}$.

Переобозначим дугу $l_3 \cup l_4 \cup l_1$ через γ , дугу l_2 — через Γ , а область $S_{(1)}$ — через g , так что $\partial S_{(1)} = \gamma \cup \Gamma$. Область $\mathcal{G}$ является расширением области g через дугу Γ , и, таким образом, геометрические условия применимости метода мультиполей выполняются (см. подпункт 4.1.2).

Определим две функции, $u_0(z)$ и $v_0(z)$, используемые для того чтобы на дуге γ получить однородное условие Дирихле, что является необходимым для применения метода мультиполей:

$$u_0(z) = 1 + \operatorname{Re} \left(\frac{2}{\pi i} \ln \frac{z-1}{z+1} + \frac{z^2-1}{2z} - \frac{z^2+1}{\pi i z} \ln \frac{z^2-1}{2z} \right), \quad (4.21)$$

$$v_0(z) = \pi^{-1} \arg z. \quad (4.22)$$

Представляя компоненты $u(z)$ и $v(z)$ отображения в виде

$$u(z) = u_0(z) + U(z), \quad v(z) = v_0(z) + V(z), \quad (4.23)$$

получаем с учетом (4.17), (4.18) следующие постановки задач для функций U и V :

$$\Delta U = 0, \quad z \in \mathcal{G}; \quad U = 0, \quad z \in \gamma; \quad U = 1 - u_0, \quad z \in l_2; \quad (4.24)$$

$$\Delta V = 0, \quad z \in \mathcal{G}; \quad V = 0, \quad z \in \gamma; \quad V = \mathcal{V} - v_0, \quad z \in l_2. \quad (4.25)$$

Решения задач (4.24) и (4.25) будем строить с помощью модификации метода мультиполей, который, применительно к указанным задачам, использует систему аппроксимативных функций $\tilde{\Omega}_k(z)$, определяемых по формуле

$$\tilde{\Omega}_k(z) := \operatorname{Im}(z^k + z^{-k}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.26)$$

Система этих функций, являющихся модификацией мультиполей $\Omega_k(z)$, определяемых по формуле (4.5) через функцию Жуковского $\Phi(z) = (z + z^{-1})/2$, обладает теми же аппроксимативными свойствами, что и система $\{\Omega_k(z)\}_{k \in \mathbb{N}}$, так как каждая функция $\tilde{\Omega}_k(z)$ является линейной комбинацией функций $\Omega_l(z)$, $l = 1, k$, и, значит, система $\{\tilde{\Omega}_k(z)\}_{k \in \mathbb{N}}$ может служить основой для метода. С его помощью было получено отображение (4.14), картина которого представлена на фиг. 11. Апостериорная оценка допущенной погрешности составила 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций (4.26).

Все основные положения изложенного алгоритма построения отображения переносятся на произвольную область S с полукруговой выемкой при определении γ как дуги $(z_3 z_4 z_1 z_2)$, а Γ как дуги l_2 .

4.4. Построение гармонического отображения области с прямоугольным вырезом

4.4.1. Постановка задачи. Для определения области $\mathcal{N}$ с прямоугольным вырезом введем область G , изображенную на фиг. 14в, представляющую собой внешность полуполосы шириной 2ε :

$$G := \mathbb{C} \setminus \{z = x + y : x \in (-\infty, 0), y \in (-\varepsilon, \varepsilon)\}, \quad (4.27)$$

где $\mathbb{C}$ — комплексная плоскость. Бесконечно удаленную точку границы ∂G обозначим через z_0 , середину торца — через $z_3 := 0$, а вершины области — через $z_2 := i\varepsilon$ и $z_4 := -i\varepsilon$.

Выберем некоторые точки z_1 и z_5 соответственно на сторонах $(z_0 z_2)$ и $(z_4 z_0)$ области G . Дугу $(z_1 z_2 z_3 z_4 z_5)$ границы ∂G назовем γ (см. фиг. 14). Соединим z_5 и z_1 жордановой кусочно-гладкой дугой Γ , целиком (кроме концевых точек) лежащей в области G , и составим замкнутый жорданов контур $\gamma \cup \Gamma$. Его внутренность назовем областью $g = \mathcal{N}$ и примем ее в качестве общего вида области с выемкой, для построения гармонического отображения $w = \mathcal{F}(z)$ которой на прямоугольник

$$\Pi := \{w = u + iv : u \in (-A, A), v \in (0, B)\} \quad (4.28)$$

дан вычислительный метод.

Согласно разд. 1, построение гармонического отображения $w = \mathcal{F}(z)$ области $\mathcal{N}$ на Π сводится, как и выше, к решению задачи Дирихле

$$\Delta \mathcal{F}(z) = 0, \quad z \in \mathcal{N}; \quad \mathcal{F}(z) = B(z), \quad z \in \partial \mathcal{N}.$$

Здесь заданный граничный гомеоморфизм $B : \partial \mathcal{N} \xrightarrow{\text{hom}} \partial \Pi$ осуществляет соответствие

$$B(z_n) = w_n, \quad n = \overline{1, 5},$$

между точками границ области $\mathcal{N}$ и вершинами прямоугольника $\partial \Pi$ (см. фиг. 14). Таким образом, гомеоморфизм B переводит контур γ выемки в нижнюю сторону прямоугольника.

Кроме того, данный гомеоморфизм, переписанный через текущую длину дуг (тогда его переобозначаем как $\mathfrak{B}$), отвечает требованию, что его производная $d\mathfrak{B}/ds$ равна

$$\frac{d\mathfrak{B}(s)}{ds} = \begin{cases} V_1, & z \in (z_1 z_2), \\ V_2, & z \in (z_2 z_3 z_4), \\ V_3, & z \in (z_4 z_5). \end{cases} \quad (4.29)$$

Тогда размеры A , B прямоугольника Π и точка $w_3 := B(z_3)$ — прообраз начала координат $z_3 := 0$ — выражаются через параметры формулы (4.29) и координаты точек $x_k + iy_k = z_k = B^{-1}(w_k)$ границы $\partial\mathcal{N}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} A &= -\frac{V_1}{2}x_1 + V_2\varepsilon + \frac{V_3}{2}(x_4 - x_5), \\ B &= \int_{z_5}^{z_6} \frac{d\mathcal{B}(s)}{ds} ds, \quad w_3 = -\frac{V_1}{2}x_1 - \frac{V_3}{2}(x_4 - x_5). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Нетрудно убедиться, что гармоническая функция

$$\mathcal{P}(x, y) := \frac{V_1 + V_3}{2\varepsilon}xy + \frac{V_1 - V_3}{2}x - V_2y + w_3 \quad (4.31)$$

удовлетворяет условию

$$\mathcal{P}(x, y) := \mathcal{B}(z), \quad z \in \gamma, \quad (4.32)$$

где параметризованный по текущим длинам s и S гомеоморфизм $\mathcal{B}$ отвечает требованиям (4.29). Тогда, представляя искомое отображение $\mathcal{F} : \mathcal{N} \xrightarrow{\text{harm}} \Pi$ в виде суммы

$$\mathcal{F}(z) = \mathcal{P}(z) + U(z) + iV(z), \quad (4.33)$$

где $U(z)$ и $V(z)$ — вещественные, гармонические в $\mathcal{N}$ и непрерывные в $\overline{\mathcal{N}}$ функции, приходим к следующим двум задачам Дирихле для этих функций в области $\mathcal{N}$:

$$\Delta U(z) = 0, \quad z \in \mathcal{N}, \quad U(z) = 0, \quad z \in \gamma, \quad U(x', y') = \operatorname{Re} \mathcal{B}(z') - \mathcal{P}(x', y'), \quad z' \in \Gamma, \quad (4.34)$$

$$\Delta V(z) = 0, \quad z \in \mathcal{N}, \quad V(z) = 0, \quad z \in \gamma, \quad V(x', y') = \operatorname{Im} \mathcal{B}(z'), \quad z' \in \Gamma; \quad (4.35)$$

где z' — точки дуги Γ .

4.4.2. Вычисление мультиполей через конформное отображение. Аппроксимативная система функций определяется с помощью равенства

$$\Omega_k(z) = \operatorname{Im}[\Phi(z)]^k, \quad k \in \mathbb{N}, \quad (4.36)$$

через конформное отображение

$$\Phi : G \xrightarrow{\text{conf}} \mathbb{H}, \quad \Phi(0) = 0, \quad \Phi(\infty) = \infty. \quad (4.37)$$

Обратное отображение

$$\Phi^{-1} : \mathbb{H} \xrightarrow{\text{conf}} G \quad (4.38)$$

может быть записано через интеграл Кристоффеля–Шварца (см. [51]) или в элементарном виде

$$z = \Phi^{-1}(w) = e^{-i\pi} \frac{4\varepsilon}{\pi} \int_1^w \sqrt{t^2 - 1} dt - i\varepsilon = \quad (4.39)$$

$$= e^{-i\pi} \frac{2\varepsilon}{\pi} [w\sqrt{w^2 - 1} - \ln(w + \sqrt{w^2 - 1})] - i\varepsilon. \quad (4.40)$$

С помощью представления (4.39) мы выводим для искомого прямого отображения $w = \Phi(z)$ степенные разложения вблизи вершин $z_2 := i\varepsilon$ и $z_4 := -i\varepsilon$, представляющие это отображение соответственно в секторах

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_2 &:= \left\{ z : |z - z_2| \leq 2\varepsilon, \arg(z - z_2) \in \left[-\frac{\pi}{2}, \pi \right] \right\}, \\ \mathbb{S}_4 &:= \left\{ z : |z - z_4| \leq 2\varepsilon, \arg(z - z_4) \in \left[-\pi, \frac{\pi}{2} \right] \right\}; \end{aligned} \quad (4.41)$$

где эти разложения сходятся. При этом достаточно получить одно из этих разложений, например, вблизи точки $z_4 := -i\varepsilon$. Тогда второе разложение получается из него применением преобразования симметрии. В остальной части области G отображение $w = \Phi(z)$ строится с помощью метода Ньютона (см. [52]) с использованием формул (4.39), (4.40).

Найдем разложение отображения $w = \Phi(z)$ вблизи вершины z_4 . Разлагая подынтегральное выражение (4.39) в биномиальный ряд по степеням $(t-1)$ и интегрируя, получим для обратного отображения $z = \Phi^{-1}(w)$ следующее представление вблизи образа $w_4 = 1$ вершины $z_4 = -i\varepsilon$:

$$z = \Phi^{-1}(w) = e^{-i\pi\mu} \left[(w-1) + \sum_{m=2}^{\infty} A_m (w-1)^m \right]^{3/2} - i\varepsilon, \quad (4.42)$$

где $\mu := \frac{8\sqrt{2}\varepsilon}{3\pi}$, а коэффициенты A_m выражаются через величины

$$a_k := \left(\frac{1}{2} \right) \frac{2^{-k} 3}{3 + 2k}$$

по формуле

$$A_{m+1} = \sum_{\pi(m)} \frac{\Gamma\left(\frac{5}{3}\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{3} - k\right) k_1! k_2! \dots k_m!} \prod_{j=1}^m (a_j)^{k_j}; \quad (4.43)$$

здесь $\binom{a}{b}$ — биномиальные коэффициенты, $k = k_1 + \dots + k_m$, а сумма в (4.43) берется по всем решениям $(k_1, \dots, k_m)$ уравнения $k_1 + 2k_2 + \dots + mk_m = m$ в неотрицательных целых числах, иначе говоря, по всем разбиениям $\pi(m)$ числа m .

Обращая представление (4.42) с помощью формул Бюрмана–Лагранжа (см. [51]) и Фаа ди Бруно (см. [53]), получаем представление для отображения $w = \Phi(z)$ вблизи вершины $z_4 = -i\varepsilon$:

$$w = \Phi(z) = 1 + \left(\frac{e^{i\pi} z + i\varepsilon}{\mu} \right)^{2/3} + \sum_{p=2}^{\infty} C_p \left(\frac{e^{i\pi} z + i\varepsilon}{\mu} \right)^{2p/3}. \quad (4.44)$$

Множеством сходимости разложения в (4.44) является сектор $\mathbb{S}_4$, а коэффициенты C_p даются формулой

$$C_p = \frac{1}{p} \sum_{\pi(p-1)} \frac{(-1)^k \binom{p+k-1}{k}}{k_1! k_2! \dots k_{p-1}!} \prod_{j=1}^{p-1} (A_{j+1})^{k_j}, \quad (4.45)$$

где $k = k_1 + \dots + k_{p-1}$, а сумма берется по всем решениям $(k_1, \dots, k_{p-1})$ в неотрицательных целых числах уравнения $k_1 + 2k_2 + \dots + (p-1)k_{p-1} = p-1$, иначе говоря, по всем разбиениям числа $(p-1)$.

Вычислив с помощью изложенного алгоритма отображение $\Phi(z)$, находим требуемые мультиполи $\Omega_k(z)$ по формуле (4.36), после чего получаем с помощью изложенного в п. 4.1 метода мультиполей отображение $\mathcal{F} : \mathcal{N} \xrightarrow{\text{harm}} \Pi$ для любой области $\mathcal{N}$ из описанного класса, в том числе и для областей $\mathcal{N}_{(1)}$ и $\mathcal{N}_{(2)}$, изображенных на фиг. 13, 15.

4.4.3. Численные результаты. Результаты численной реализации полученного решения задачи о построении гармонического отображения представлены для двух вариантов области с прямоугольным вырезом — областей $\mathcal{N}_{(1)}$ и $\mathcal{N}_{(2)}$ — в виде картин соответствующих отображений $\tilde{\gamma}_{(1)}(z)$ и $\tilde{\gamma}_{(2)}(z)$, приведенных на фиг. 13, 15. Апостериорная оценка погрешности этих отображений в норме $C(\bar{\mathcal{N}})$ составила 10^{-7} при использовании 120 аппроксимативных функций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Radó T. Aufgabe 41 // Jahresbericht der Deutschen Mathematiker Vereinigung. 1926. V. 35. P. 49.
2. Kneser H. Lösung der Aufgabe 41 // Jahresbericht der Deutschen Mathematiker Vereinigung. 1926. V. 35. P. 123–124.

3. *Choquet G.* Sur un type de transformation analytiques généralisant la représentation conforme et définie au moyen de fonctions harmoniques // *Bull. Sci. Math.* 1945. V. 69. № 2. P. 156–165.
4. *Duren P.* Harmonic mappings in the plane, “Cambridge Tracts in Mathematics”. V. 156. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004.
5. *Кудрявцев Л.Д.* О свойствах гармонических отображений плоских областей // *Матем. сб.* 1955. Т. 36 (4.12). № 2. С. 201–208.
6. *Hamilton R.* Harmonic maps of manifolds with boundary. In: “Lecture Notes in Computer Science”. VI. 471. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1975.
7. *Clunie J., Sheil-Small T.* Harmonic univalent functions // *Ann. Acad. Sci. Fenn. Ser. A. I. Math.* 1984. V. 9. P. 3–25.
8. *Jost J.* Lectures on harmonic maps. “Lecture Notes in Mathematics”. V. 1161, Berlin, New York: Springer-Verlag, 1985.
9. *Winslow A.M.* Numerical solution of the quasilinear Poisson equations in a nonuniform triangle mesh // *J. Comp. Phys.* 1966. V. 1. № 2. P. 149–172.
10. *Годунов С.К., Прокопов Г.П.* Об использовании подвижных сеток в газодинамических расчетах // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1972. Т. 12. № 2. P. 429–440.
11. *Thompson J.F., Thames C.W., Mastin C.W.* Automatic numerical generation of body fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies // *J. Comput. Phys.* 1974. V. 15. P. 299–319.
12. *Яненко Н.Н., Данаев Н.Т., Лисейкин В.Д.* О вариационном методе построения сеток // *Численные методы в механике сплошной среды.* Новосибирск. 1977. Т. 8. № 4. С. 157–163.
13. *Brackbill J.U., Saltzman J.S.* Adaptive zoning for singular problems in two dimensions // *J. Comput. Phys.* 1982. V. 46. № 3. P. 342–368.
14. *Castillo J.E., Steinberg S., Roache P.J.* Mathematical aspects of variational grid generation II // *J. Comp. and Appl. Math.* 1987. V. 20. P. 127–135.
15. *Иваненко С.А.* Построение невырожденных сеток // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1988. Т. 28. № 10. С. 1498–1506.
16. *Иваненко С.А., Чарахчян А.А.* Криволинейные сетки из выпуклых четырехугольников // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1988. Т. 28. № 4. С. 503–514.
17. *Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Прокопов Г.П., Крайко А.М.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
18. *Лисейкин В.Д., Шокин Ю.И., Васева И.А., Лиханова Ю.В.* Технология построения разностных сеток. Новосибирск: Наука, 2009.
19. *Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W.* Numerical grid generation. Foundations and Applications N.-Y.: North-Holland, 1985.
20. *Sengupta S., Hauser J., Eiseman P.R., Thompson J.F.* (Eds.) Numerical Grid Generation in Computational Fluid Mechanics’88. N.-Y.: Pineridge Press Ltd, 1988.
21. *Castillo J.E. (Ed.)* Mathematical Aspects of Numerical Grid Generation. Philadelphia: SIAM, 1991.
22. *Knupp P., Steinberg S.* Fundamentals of Grid Generation. Florida: CRC Press. Boca Raton, 1992.
23. *Иваненко С.А.* Адаптивно-гармонические сетки. М.: Изд-во ВЦ РАН, 1997.
24. *Ivanenko S.A.* Harmonic Mappings. In: Thompson J.E., Soni B.K., Weatherill N.P. (Eds.) Handbook of Grid Generation. Boca Raton, London, N.Y., Washington, D.C.: RCR Press LLC, 1999.
25. *Marcum D.L.* Unstructured Grid Generation Using Automatic Point Insertion and Local Reconnection. In: Thompson J.E., Soni B.K., Weatherill N.P. (Eds.) Handbook of Grid Generation. Boca Raton, London, N.Y., Washington, D.C.: RCR Press LLC, 1999.
26. *Liseikin V.D.* Grid generation methods. N.-Y.: Springer-Verlag, 2017.
27. *Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W.* Boundary-fitted coordinate systems for numerical solutions of partial differential equations // *J. Comput. Phys.* 1982. V. 47. № 2. P. 1–109.
28. *Лисейкин В.Д.* Технология конструирования трехмерных сеток для задач аэрогидродинамики (обзор) // *Вопр. атомной науки и техн. Матем. моделирование физ. процессов.* 1991. Вып. 3. С. 31–45.
29. *Софронов И.Д., Рассказова В.В., Нестеренко Л.В.* Нерегулярные сетки в методах расчета нестационарных задач газовой динамики // *Вопр. матем. моделирования, вычисл. матем. и информатики.* М.: Арзамас-16, Мин. РФ Атомной энергии, 1994. С. 131–183.
30. *Лисейкин В.Д.* Обзор методов построения структурированных адаптивных сеток // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1996. Т. 36. № 1. С. 3–41.
31. *Иваненко С.А., Прокопов Г.П.* Методы построения адаптивно-гармонических сеток // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1997. Т. 37. № 6. С. 643–662.
32. *Прокопов Г.П.* Методология вариационного подхода к построению квазиортогональных сеток // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделир. физ. процессов.* 1998. № 1. С. 37–46.

33. *Иваненко С.А.* Управление формой ячеек в процессе построения сетки // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2000. Т. 40. № 11. С. 1662–1684.
34. *Безродных С.И., Власов В.И.* Об одной проблеме конструктивной теории гармонических отображений // Современная математика. Фундаментальные направления. 2012. Т. 46. С. 5–30.
35. *Roache P.J., Steinberg S., Moeny W.M.* Interactive electric field calculations for lasers // AIAA Paper No. 84-1655, Proc. AIAA 17-th Fluid Dynamics, Plasma Dynamics, and Lasers Conference, Snomass. Colorado, June, 1984.
36. *Roache P.J., Steinberg S.* A new approach to grid generation using a variational formulation // AIAA Paper No. 85-1527-CP, Proc. AIAA 7-th Computational Fluid Dynamics Conference, Cincinnati OH, July, 1985. P. 360–370.
37. *Castillo J.E., Steinberg S., Roache P.J.* On the folding of numerically generated grids: use of a reference grid // Comm. Appl. Numer. Method. 1988. V. 4. P. 471–481.
38. *Knipp P., Luczak R.* Truncation error in grid generation: a case study // Numer. Meth. Part. Differ. Equats. 1995. V. 11. P. 561–571.
39. *Азаренок Б.Н.* О построении структурированных сеток в двумерных невыпуклых областях с помощью отображений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49. № 5. С. 826–839.
40. *Азаренок Б.Н., Чарахчян А.А.* О построении структурированных сеток в двумерных невыпуклых областях с помощью отображений // Матем. моделирование. 2014. Т. 26. № 12. С. 48–64.
41. *Стренг Г., Фикс Дж.* Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977.
42. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
43. *Марчук Г.И., Алошков В.И.* Введение в проекционно-разностные методы. М.: Наука, 1981.
44. *Безродных С.И., Власов В.И.* О поведении гармонического отображения в углах // Матем. заметки. 2017. Т. 101. № 3. С. 474–480.
45. *Bezrodnykh S.I., Vlasov V.I.* Singular behavior of harmonic maps near corners // Complex Variables and Elliptic Equations. 2019. V. 64. № 5. P. 838–851.
46. *Власов В.И.* Об одном методе решения некоторых смешанных задач для уравнения Лапласа // Докл. АН СССР. 1977. Т. 237. № 5. С. 1012–1015.
47. *Власов В.И.* Краевые задачи в областях с криволинейной границей. Дисс. ... докт. физ.-мат. наук. М.: ВЦ АН СССР, 1990.
48. *Vlasov V.I.* Multipole method for solving some boundary value problems in complex-shaped domains // Zeitschr. Angew. Math. Mech. 1996. V. 76. Suppl. 1. P. 279–282.
49. *Безродных С.И., Власов В.И.* Об одной вычислительной проблеме двумерных гармонических отображений // Научные ведомости БелГУ. 2009. № 13 (4.2). Вып. 17/2. С. 30–44.
50. *Bezrodnykh S.I., Vlasov V.I.* The method of harmonic mapping of regions with a notch // Math. Notes. 2022. V. 112. № 6. P. 831–844.
51. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1987.
52. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Н.С.* Численные методы. М.: Наука, 1987.
53. *Архипов Г.И., Садовничий В.А., Чубариков В.А.* Лекции по математическому анализу. М.: Изд. Московского университета, 2004.

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ
МЕТОДЫ

УДК 517.95

PROJECTION GRID SCHEMES ON IRREGULAR GRID
FOR PARABOLIC EQUATION¹⁾

© 2023 г. О. Г. Olkhovskaya^{1,*}

¹*Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 125047 Russia*

**e-mail: olkhovsk@gmail.com*

Поступила в редакцию 04.06.2023 г.
Переработанный вариант 07.07.2023 г.
Принята к публикации 22.08.2023 г.

Проекционно-сеточные схемы на нерегулярных сетках для параболического уравнения. Построено семейство проекционно-сеточных схем для аппроксимации параболических уравнений с переменным коэффициентом диффузии в тензорной форме. Разработанные схемы обладают свойством консервативности и сохраняют свойство самосопряженности, присущее исходному дифференциальному оператору. Предложенные схемы предназначены для выполнения расчетов на трехмерных нерегулярных разностных сетках, в том числе тетраэдральных, смешанных (сетках произвольных многогранников) и локально-адаптивных (типа восьмеричное дерево).

Ключевые слова: нестационарное уравнение диффузии проекционно-сеточная схема, нерегулярная сетка, локально-адаптивная сетка, консервативность, самосопряженность.

DOI: 10.31857/S0044466923120232, **EDN:** ZJWGDK

¹⁾Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 517.954

КОНФОРМНОЕ ОТОБРАЖЕНИЕ $\mathbb{Z}$ -ОБРАЗНОЙ ОБЛАСТИ

© 2023 г. С. Л. Скороходов^{1,*}¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 44, ФИЦ ИУ РАН, Россия

*e-mail: sskorokhodov@gmail.com

Поступила в редакцию 13.04.2023 г.

Переработанный вариант 18.06.2023 г.

Принята к публикации 10.07.2023 г.

Для задачи конформного отображения полуплоскости на $\mathbb{Z}$ -образную область с произвольной геометрией разработан метод эффективного нахождения параметров интеграла Кристоффеля–Шварца, т.е. прообразов вершин и предынтегрального множителя. Особое внимание уделено случаю кроудинга прообразов, когда традиционные методы интегрирования сталкиваются со значительными трудностями. Для этого вводится понятие кластера, определяются его центр и все подынтегральные биномы с прообразами из этого кластера разлагаются в быстросходящийся ряд по однородной схеме. Возникающие интегралы далее сводятся к одинарному или двойному ряду по гипергеометрическим функциям Гаусса $F(a, b; c; q)$. Использование формул аналитического продолжения для $F(a, b; c; q)$ в окрестность точки $q = 1$ и численно устойчивых рекуррентных соотношений позволило обеспечить быструю сходимость полученных разложений. Построенные разложения оказываются также весьма эффективными при выборе начальных приближений прообразов в итерационном методе Ньютона. Использование старших членов этих разложений позволяет выразить приближения для прообразов в явном виде через элементарные функции, а последующие итерации обеспечивают быструю сходимость алгоритма. После нахождения параметров в интеграле искомое отображение строится в виде комбинации степенных разложений в прообразах, регулярных разложений в прообразе центра симметрии, в виде ряда Лорана в полукольце и в виде специальных рядов в окрестности прообразов торцевых отрезков. Численные результаты показали высокую эффективность разработанного метода, особенно в случае сильного кроудинга прообразов. Библ. 30. Фиг. 7.

Ключевые слова: конформное отображение, интеграл Кристоффеля–Шварца, кроудинг прообразов, гипергеометрические функции Гаусса, формулы аналитического продолжения, асимптотики параметров, $\mathbb{Z}$ -образная область.

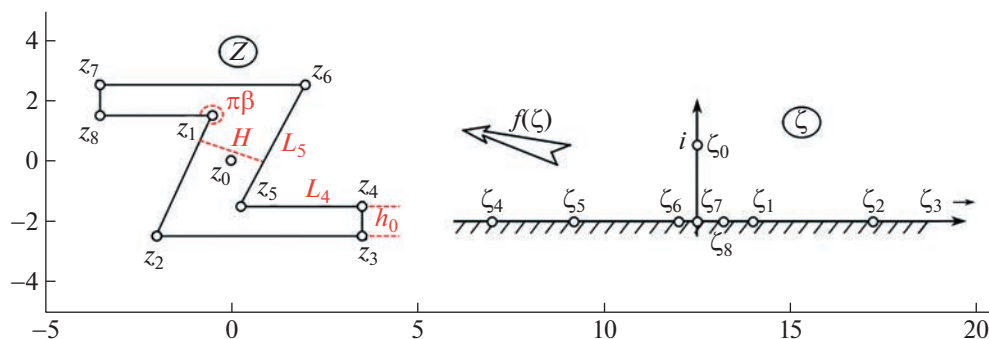
DOI: 10.31857/S0044466923120256, EDN: BWPFIE

1. ВВЕДЕНИЕ

Задачу конформного отображения $f(\zeta)$ полуплоскости или круга на многоугольник решает интеграл Кристоффеля–Шварца (далее ИКШ), однако основная трудность при этом состоит в нахождении параметров этого интеграла, т.е. прообразов вершин ζ_k и предынтегрального множителя (см. [1–9]). Зависимость этих величин от длин сторон L_k и углов многоугольника является сильно нелинейной, причем некоторые из прообразов могут меняться экспоненциально быстро или медленно, а некоторые — степенным образом.

Особые трудности при этом возникают в ситуации кроудинга, когда ряд прообразов ζ_k сбивается в тесную группу, и расстояние между соседними прообразами в группе становится чрезвычайно малым (см. [4, 7, 10–13]), а таких групп может быть несколько.

Основные уравнения для нахождения прообразов в ИКШ возникают при интегрировании по отрезкам $[\zeta_k, \zeta_{k+1}]$ производной искомого отображения $f'(\zeta)$ и сравнении этих интегралов I_k с заданными длинами L_k сторон многоугольника. Для вычисления I_k часто используют либо квадратуры Гаусса (см. [4, 14, 5, 9]), либо квадратуры Гаусса–Якоби (см. [15–17]), либо другие специальные методы (см. [18, 19]). Однако все указанные подходы в ситуации сильного кроудинга не позволяют с нужной точностью определить параметры ИКШ, и эта проблема остается далекой от надежного решения.



Фиг. 1. Отображение полуплоскости на $\mathbb{Z}$ -образную область.

Существенный прогресс в преодолении отмеченных трудностей достигнут в недавних работах [20–23]. В этих исследованиях решена проблема аналитического продолжения функции Лауричеллы произвольного числа переменных; формулы продолжения применены к решению проблемы параметров интеграла Кристоффеля–Шварца. Благодаря такому подходу ситуация кроудинга в этих работах является эффективно разрешимой.

Отметим также работу [24], в которой отображение $\mathbb{L}$ -образной области построено в явном аналитическом виде. Возникающий здесь кроудинг вблизи двух точек $\zeta = \pm 1$ эффективно разрешается с помощью техники гипергеометрической функции Гаусса $F(a, b; c; z)$ и искомое отображение представлено в виде быстроходящихся рядов.

Необходимо также отметить, что попытка отображения области $\mathbb{Z}$ частного вида была предпринята в [25], где входящий угол был равен лишь $3\pi/2$, горизонтальные стороны полагались бесконечными, а толщины вертикальной и горизонтальных полочек были равными. Однако отображение области и решение на его основе задачи кручения стержня такого $\mathbb{Z}$ -образного сечения содержат принципиальные ошибки в приведенной эпюре напряжений.

В настоящей работе рассмотрена задача построения конформного отображения симметричной $\mathbb{Z}$ -образной области с произвольными геометрическими характеристиками (см. фиг. 1a). Здесь возникает ситуация кроудинга четырех прообразов вблизи точки $\zeta = 0$ и четырех прообразов вблизи $\zeta = \infty$. Для преодоления указанных трудностей при вычислении необходимых интегралов I_k вводится понятие кластера, т.е. объединение прообразов ζ_k , входящих в одну компактную группу. Каждый из соответствующих биномов $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$ с прообразами из этого кластера разлагается в специальный ряд, и такие ряды перемножаются. В результате интеграл I_k представлен в виде разложения по функциям Гаусса $F(a, b; c; q)$, для которых использование формул аналитического продолжения в окрестность точки $q = 1$ и рекуррентных соотношений по параметрам a , b и c позволяет вычислить I_k с высокой точностью.

Выбор начального приближения прообразов $\zeta_k^{(0)}$ для итерационного метода Ньютона является важной и трудной задачей, поскольку сходимость итераций сильно зависит от значений $\zeta_k^{(0)}$. В работе [13] такие приближения строятся на основе развитой в [26] теории конформного отображения сингулярно деформируемых областей и получения адекватных асимптотик прообразов. В настоящей работе приближения прообразов $\zeta_k^{(0)}$ также определяются на основе использования результатов из [26], в частности, учет лишь старших членов разложений в представлении для интегралов I_k позволяет выразить аппроксимации $\zeta_k^{(0)}$ в явном виде через элементарные функции, а последующие несколько итераций обеспечивают относительную точность вычисления параметров ИКШ до $\delta = 10^{-20}$.

После нахождения параметров ИКШ искомое отображение $f(\zeta)$ полуплоскости на исходную область $\mathbb{Z}$ строится в виде степенных разложений в прообразах ζ_k , регулярного разложения в прообразе центра симметрии, в виде ряда Лорана в определенном полукольце и в виде специальных рядов в окрестности некоторых отрезков $[\zeta_k, \zeta_{k+1}]$. Полученные разложения покрывают всю полуплоскость и решают задачу эффективного построения отображения $f(\zeta)$.

Численные результаты разработанного метода представлены в виде рассчитанных параметров ИКШ и в виде образа квадратной сетки в прямоугольнике Π при отображении на область $\mathbb{Z}$ с тремя различными геометрическими параметрами.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть необходимо построить конформное отображение $f(\zeta)$ верхней полуплоскости $\mathbb{H}_+ := \{\operatorname{Im} \zeta > 0\}$ на симметричную $\mathbb{Z}$ -образную область $\mathcal{Z}$ (см. фиг. 1). Геометрия области определяется толщиной h_0 горизонтальных полочек, толщиной H центральной части, раствором $\pi\beta$, $\beta \in (1, 2)$, входящих углов в вершинах z_1 и z_5 , длиной горизонтальных сторон $L_4 = |z_5 - z_4| = |z_1 - z_8|$ и длиной центральных сторон $L_5 = |z_6 - z_5| = |z_2 - z_1|$.

Вершинам z_k при отображении $f(\zeta)$ будут соответствовать прообразы ζ_k , $k = 1, \dots, 8$, а показатели углов, т.е. деленные на π величины углов в вершинах z_k , обозначим через β_k . Это позволяет записать

$$\beta_3 = \beta_4 = \beta_7 = \beta_8 = \frac{1}{2}, \quad \beta_1 = \beta_5 = \beta, \quad \beta_2 = \beta_6 = 2 - \beta, \quad \beta \in (1, 2). \quad (1)$$

Пусть отображение $f(\zeta)$ имеет такую нормировку, что точка $\zeta_0 = i$ переходит в центр симметрии z_0 области $\mathcal{Z}$ (см. фиг. 1), а точка $\zeta_7 = 0$ переходит в z_7 . Тогда прообразы ζ_k будут обладать свойством симметрии

$$\zeta_3 = \infty, \quad \zeta_k \zeta_{k+4} = \zeta_0^2 = -1, \quad k = 1, 2, 4. \quad (2)$$

Чтобы убедиться в этом, используем отображение $\chi(\zeta) = \frac{i - \zeta}{i + \zeta}$ полуплоскости $\mathbb{H}$ на единичный круг $\mathbb{U} := \{|\chi| < 1\}$ с нормировкой $\chi(i) = 0$. Тогда суперпозиция $f \circ \zeta(\chi)$ отображает круг $\mathbb{U}$ на область $\mathcal{Z}$ с нормировкой $f \circ \zeta(0) = z_0$ и, значит, обладает свойством центральной симметрии, т.е. для любой граничной точки χ_* выполнено

$$f \circ \zeta(-\chi_*) = -f \circ \zeta(\chi_*).$$

Обратная к введенной функции $\chi(\zeta)$, т.е. $\zeta(\chi) = i \frac{1 - \chi}{1 + \chi}$, обладает очевидным свойством, что любым двум граничным симметричным точкам χ_* и $-\chi_*$ при отображении $\zeta(\chi)$ соответствуют две точки $\zeta(\chi_*) = i \frac{1 - \chi_*}{1 + \chi_*}$ и $\zeta(-\chi_*) = i \frac{1 + \chi_*}{1 - \chi_*}$, для которых очевидно выполнено правило $\zeta(\chi_*)\zeta(-\chi_*) = -1$. Это и доказывает свойство (2).

Для удобства выкладок введем обозначение $\alpha_k = \beta_k - 1$ и приведем эти значения:

$$\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_7 = \alpha_8 = -\frac{1}{2}, \quad \alpha_1 = \alpha_5 = \beta - 1, \quad \alpha_2 = \alpha_6 = 1 - \beta. \quad (3)$$

Запишем теперь ИКШ с выбором нижнего предела ζ_0 в интеграле:

$$z(\zeta) = z_0 + \mathcal{H} \int_{\zeta_0}^{\zeta} \prod_{k \neq 3} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} dt, \quad \mathcal{H} > 0; \quad (4)$$

свойство $\mathcal{H} > 0$ легко следует из рассмотрения (4) при $\zeta > \zeta_2$. Далее, неравенство $k \neq 3$ в произведении биномов в ИКШ будем опускать.

В других необходимых случаях нижний предел в интеграле будем полагать равным прообразу ζ_n , тогда значение z_0 в (4) необходимо заменить на z_n .

Условиями для искоемых параметров ζ_k и множителя $\mathcal{H}$ служат характеристики $\mathbb{Z}$ -образной области, в частности, уравнения для сторон L_4 и L_5 :

$$\mathcal{H} \int_{\zeta_4}^{\zeta_5} \prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k} dt = z_5 - z_4 = -L_4, \quad (5)$$

$$\mathcal{H} \int_{\zeta_5}^{\zeta_6} \prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k} dt = z_6 - z_5 = L_5 e^{-i\pi\beta}. \quad (6)$$

Далее, из рассмотрения области $\mathcal{L}$ и проведения двух перпендикуляров из точки z_5 на стороны $[z_2, z_3]$ и $[z_1, z_2]$ можно несложно вывести связь параметров h_0 , H и β с вектором $z_5 - z_2$:

$$z_5 - z_2 = -\frac{H + h_0 \cos(\pi\beta)}{\sin(\pi\beta)} + ih_0. \quad (7)$$

Это дает еще два условия на интеграл по любой дуге в полуплоскости $\mathbb{H}_+$ от точки ζ_2 до ζ_5 , т.е. для вещественной и мнимой частей:

$$\mathcal{H} \int_{\zeta_2}^{\zeta_5} \prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k} dt = -\frac{H + h_0 \cos(\pi\beta)}{\sin(\pi\beta)} + ih_0. \quad (8)$$

Таким образом, в поставленной задаче искомыми являются шесть прообразов ζ_k , $k = \{1, 2, 4, 5, 6, 8\}$, и множитель $\mathcal{H} > 0$. Определяющими уравнениями являются четыре уравнения (5), (6), (8) на интегралы и три уравнения (2) парных связей ζ_k и ζ_{k+4} . Выражая прообразы ζ_5 , ζ_6 и ζ_8 по формулам $\zeta_{k+4} = -1/\zeta_k$, получаем искомыми три прообраза ζ_1 , ζ_2 , ζ_4 и $\mathcal{H}$. Интегралы (5), (6), (8) имеют гипергеометрический тип и берутся различными методами, чему посвящены три следующих раздела.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА $J_{(4,5)}$ ПО ОТРЕЗКУ $[\zeta_4, \zeta_5]$

3.1. Введение кластера прообразов $\zeta_6, \zeta_7, \zeta_8, \zeta_1, \zeta_2$

Пять прообразов $\zeta_6, \zeta_7, \zeta_8, \zeta_1, \zeta_2$ объединим в один кластер $\mathbb{C}l^{(62)}$ и введем его центр $\zeta_c^{(62)}$ как полусумму граничных значений ζ_6 и ζ_2 :

$$\zeta_c^{(62)} = (\zeta_6 + \zeta_2)/2. \quad (9)$$

При интегрировании по отрезку $[\zeta_4, \zeta_5]$ введем замену переменной t в виде

$$t = \zeta_4 + \Delta_4 u, \quad \Delta_4 = \zeta_5 - \zeta_4, \quad u \in [0, 1]. \quad (10)$$

Для каждого из биномов $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$, $k = \{6, 7, 8, 1, 2\}$, используем замену (10) и проведем цепочку преобразований:

$$\begin{aligned} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} &= (\zeta_4 - \zeta_c^{(62)} + \Delta_4 u)^{\alpha_k} \left(1 - \frac{\zeta_c^{(62)} - \zeta_k}{\zeta_c^{(62)} - \zeta_4 - \Delta_4 u} \right)^{\alpha_k} = (\zeta_4 - \zeta_c^{(62)})^{\alpha_k} (1 - q^{(62)} u)^{\alpha_k} \times \\ &\times \left(1 - \frac{p_k}{1 - q^{(62)} u} \right)^{\alpha_k}, \quad q^{(62)} = \frac{\Delta_4}{\zeta_c^{(62)} - \zeta_4}, \quad p_k = \frac{\zeta_c^{(62)} - \zeta_k}{\zeta_c^{(62)} - \zeta_4}. \end{aligned} \quad (11)$$

Далее нам потребуется формула разложения бинома в степенной ряд

$$(1 - ax)^\mu = \sum_{m=0}^{\infty} c_m x^m, \quad c_m = \frac{a^m (-\mu)_m}{m!}, \quad (-\mu)_m = \frac{\Gamma(m - \mu)}{\Gamma(-\mu)}, \quad |ax| < 1, \quad (12)$$

где $(-\mu)_m$ — символ Похгаммера, а $\Gamma(y)$ — гамма-функция Эйлера.

Последний множитель в (11) теперь разложим в ряд вида (12) по степеням $(1 - q^{(62)}u)^{-n}$:

$$\left(1 - \frac{p_k}{1 - q^{(62)}u}\right)^{\alpha_k} = \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(k)} (1 - q^{(62)}u)^{-n}, \quad b_n^{(k)} = \frac{p_k^n (-\alpha_k)_n}{n!}. \quad (13)$$

Скорость сходимости этого ряда будет весьма высокой, поскольку величина $p_k/(1 - q^{(62)}u)$ при $u \in [0, 1]$ имеет максимум:

$$\max_{u \in [0, 1]} \left| \frac{p_k}{1 - q^{(62)}u} \right| = \left| \frac{p_k}{1 - q^{(62)}} \right| = \frac{|\zeta_c^{(62)} - \zeta_k|}{\zeta_c^{(62)} - \zeta_5} < 1, \quad k = \{6, 7, 8, 1, 2\}. \quad (14)$$

Таким образом, каждый из биномов $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$ для $k = \{6, 7, 8, 1, 2\}$ запишем в окончательном виде

$$(t - \zeta_k)^{\alpha_k} = (\zeta_4 - \zeta_c^{(62)})^{\alpha_k} (1 - q^{(62)}u)^{\alpha_k} \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(k)} (1 - q^{(62)}u)^{-n}. \quad (15)$$

Здесь важно отметить, что текущий прообраз ζ_k участвует лишь в определении коэффициента p_k , а значит, лишь в задании $b_n^{(k)}$.

Необходимое для интегрирования произведение пяти биномов $\prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k}$ теперь запишем в виде

$$\prod_{k=\{6,7,8,1,2\}} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} = (\zeta_4 - \zeta_c^{(62)})^{-\beta} (1 - q^{(62)}u)^{-\beta} \sum_{m=0}^{\infty} B_m^{(62)} (1 - q^{(62)}u)^{-m}, \quad (16)$$

поскольку из (3) имеем $\alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_1 + \alpha_2 = -\beta$. Коэффициенты $B_m^{(62)}$ здесь получаются последовательным произведением Коши рядов по степеням $(1 - q^{(62)}u)^{-n}$:

$$\prod_{k=\{6,7,8,1,2\}} \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(k)} (1 - q^{(62)}u)^{-n} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} B_m^{(62)} (1 - q^{(62)}u)^{-m}, \quad (17)$$

и вычисляются рекуррентно по схеме

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} \mu_n x^{-n} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \nu_n x^{-n} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \eta_m x^{-m}, \quad \eta_m = \sum_{k=0}^m \mu_k \nu_{m-k}. \quad (18)$$

3.2. Сведение интеграла $J_{(4,5)}$ к ряду по функциям $F(a, b; c; q^{(62)})$

Необходимые биномы $(t - \zeta_4)^{\alpha_4}$, $(t - \zeta_5)^{\alpha_5}$ и дифференциал dt представим с учетом замены (10) в виде

$$(t - \zeta_4)^{\alpha_4} = \Delta_4^{\alpha_4} u^{\alpha_4}, \quad (t - \zeta_5)^{\alpha_5} = e^{i\pi\alpha_5} \Delta_4^{\alpha_5} (1 - u)^{\alpha_5}, \quad dt = \Delta_4 du. \quad (19)$$

Тогда, используя произведение биномов (16) и представление (19), в интеграле (5) для $J_{(4,5)}$ получаем

$$J_{(4,5)} = -\mathcal{H} \Delta_4^{\beta-1/2} (\zeta_c^{(62)} - \zeta_4)^{-\beta} \sum_{m=0}^{\infty} B_m^{(62)} \int_0^1 \frac{u^{-1/2} (1 - u)^{\beta-1}}{(1 - q^{(62)}u)^{m+\beta}} du. \quad (20)$$

Воспользуемся теперь интегральным представлением Эйлера [27] для гипергеометрической функции Гаусса $F(a, b; c; z)$:

$$F(a, b; c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^1 \frac{t^{b-1} (1-t)^{c-b-1}}{(1-tz)^a} dt, \quad c > b > 0, \quad (21)$$

и перепишем (20) в виде

$$J_{(4,5)} = -\mathcal{H} \Delta_4^{\beta-1/2} (\zeta_c^{(62)} - \zeta_4)^{-\beta} \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\beta)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \beta)} \sum_{m=0}^{\infty} B_m^{(62)} F\left(m + \beta, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q^{(62)}\right). \quad (22)$$

Величина $q^{(62)}$, участвующая в качестве аргумента функций $F(.,.,.; q^{(62)})$ в этом разложении, определена в (11) и, как легко оценить, очень близка к единице (в реальных расчетах значение $(1 - q^{(62)}) \sim 10^{-3} - 10^{-7}$). Поэтому для эффективного вычисления значений $F(.,.,.; q^{(62)})$ в сумме (22) воспользуемся формулой аналитического продолжения из [27] в окрестность точки $q = 1$:

$$\begin{aligned} F\left(m + \beta, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q\right) &= (1 - q)^{-m} \frac{\Gamma(m)\Gamma(\frac{1}{2} + \beta)}{\Gamma(m + \beta)\Gamma(\frac{1}{2})} \sum_{n=0}^{m-1} \frac{\left(\frac{1}{2} - m\right)_n (\beta)_n}{n!(1 - m)_n} (1 - q)^n + \\ &+ (-1)^m \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \beta)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\frac{1}{2} - m)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{2} + m\right)_n \left(\frac{1}{2}\right)_n}{n!(n + m)!} [k_n'' - \ln(1 - q)] (1 - q)^n, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$k_n'' = \psi(1 + m + n) + \psi(1 + n) - \psi(m + \beta + n) - \psi\left(\frac{1}{2} + n\right), \quad \psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)},$$

а при $m = 0$ первая сумма в (23) исчезает.

Функции $F\left(m + \beta, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q^{(62)}\right)$ вычислим при $m = 0$ и $m = 1$ по формуле (23), а для последующих $m \geq 2$ воспользуемся рекуррентным соотношением из [27]

$$\begin{aligned} F\left(m + \beta, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q\right) &= \frac{\frac{3}{2} - m}{(m + \beta - 1)(1 - q)} F\left(m + \beta - 2, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q\right) + \\ &+ \frac{2m + \beta - \frac{5}{2} - q\left(m + \beta - \frac{3}{2}\right)}{(m + \beta - 1)(1 - q)} F\left(m + \beta - 1, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q\right). \end{aligned} \quad (24)$$

Численная устойчивость рекурсии (24) проводится с помощью асимптотического анализа при $m \rightarrow +\infty$ двух линейно независимых решений этого трехчленного рекуррентного уравнения (см. [28]) и показывает устойчивость этой рекурсии в сторону увеличения номера m . Высокоточные расчеты с использованием соотношения (24) полностью подтвердили этот вывод.

Таким образом, алгоритм вычисления интеграла $J_{(4,5)}$ построен.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА $J_{(2,5)}$ ПО ДУГЕ $[\zeta_2, \zeta_5]$

4.1. Введение кластера $\mathbb{C}l^{(61)}$ прообразов $\zeta_6, \zeta_7, \zeta_8, \zeta_1$ и представление бинома $(t - \zeta_4)^{\alpha_4}$

Введем верхнюю полуокружность C_+ с диаметром $[\zeta_2, \zeta_5]$; ее центр $\zeta_c^{(25)}$ и радиус R есть

$$\zeta_c^{(25)} = (\zeta_2 + \zeta_5)/2, \quad R = (\zeta_5 - \zeta_2)/2. \quad (25)$$

Интегрирование будем проводить по полуокружности C_+ от точки ζ_2 к точке ζ_5 , тогда переменная t и дифференциал dt в ИКШ (4) имеют вид

$$t = \zeta_c^{(25)} + Re^{i\varphi}, \quad dt = Rie^{i\varphi} d\varphi, \quad \varphi \in [0, \pi]. \quad (26)$$

Каждый из биномов $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$, $k = \{6, 7, 8, 1\}$, участвующих в ИКШ по дуге C_+ , запишем в виде

$$(t - \zeta_k)^{\alpha_k} = R^{\alpha_k} e^{i\varphi\alpha_k} \left(1 - \frac{\zeta_k - \zeta_c^{(25)}}{R} e^{-i\varphi} \right)^{\alpha_k} \quad (27)$$

и последнюю скобку представим в виде сходящегося ряда

$$\left(1 - \frac{\zeta_k - \zeta_c^{(25)}}{R} e^{-i\varphi} \right)^{\alpha_k} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(k)} e^{-in\varphi}, \quad a_n^{(k)} = \left(\frac{\zeta_k - \zeta_c^{(25)}}{R} \right)^n \frac{(-\alpha_k)_n}{n!}, \quad (28)$$

поскольку $|\zeta_k - \zeta_c^{(25)}|/R < 1$, $k = \{6, 7, 8, 1\}$.

Произведение четырех биномов $\prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k}$, $k = \{6, 7, 8, 1\}$, теперь запишем в виде

$$\prod_{k=\{6,7,8,1\}} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} = R^{-1} e^{-i\varphi} \sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(61)} e^{-im\varphi}, \quad (29)$$

где учтено $\alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_1 = -1$, а величины $A_m^{(61)}$ – коэффициенты в произведении Коши

$$\prod_{k=\{6,7,8,1\}} \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(k)} e^{-in\varphi} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(61)} e^{-im\varphi}, \quad (30)$$

вычисляемые рекуррентно аналогично схеме (18).

Теперь бином $(t - \zeta_4)^{\alpha_4}$ на дуге C_+ представим в виде ряда

$$(t - \zeta_4)^{\alpha_4} = (\zeta_c^{(25)} - \zeta_4)^{\alpha_4} \left(1 - \frac{R}{\zeta_4 - \zeta_c^{(25)}} e^{i\varphi} \right)^{\alpha_4} = (\zeta_c^{(25)} - \zeta_4)^{\alpha_4} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(4)} e^{in\varphi}, \quad (31)$$

где коэффициенты $a_n^{(4)} = \left(\frac{R}{\zeta_4 - \zeta_c^{(25)}} \right)^n \frac{(-\alpha_4)_n}{n!}$.

4.2. Представление биномов $(t - \zeta_2)^{\alpha_2}$ и $(t - \zeta_5)^{\alpha_5}$ и интеграла $J_{(2,5)}$

4.2.1. На дуге C_+ бином $(t - \zeta_2)^{\alpha_2}$ с учетом параметризации (26) и (25) запишем в виде $(t - \zeta_2)^{\alpha_2} = R^{\alpha_2} (e^{i\varphi} - 1)^{\alpha_2}$ и, переходя к углу $\varphi/2$, преобразуем его к виду

$$(t - \zeta_2)^{\alpha_2} = (2R)^{\alpha_2} e^{i\pi\alpha_2/2} \sin^{\alpha_2}(\varphi/2) e^{i\alpha_2\varphi/2}. \quad (32)$$

Аналогично для бинома $(t - \zeta_5)^{\alpha_5}$ имеем

$$(t - \zeta_5)^{\alpha_5} = (2R)^{\alpha_5} \cos^{\alpha_5}(\varphi/2) e^{i\alpha_5\varphi/2}. \quad (33)$$

Подставляя теперь представления (29), (32), (33) и дифференциал $dt = Rie^{i\varphi}d\varphi$ в интеграл $J_{(2,5)}$, запишем его в форме

$$J_{(2,5)} = -\mathcal{H}(\zeta_c^{(25)} - \zeta_4)^{-1/2} e^{-i\frac{\pi\beta}{2}} \int_0^\pi \text{tg}^{1-\beta}(\varphi/2) \left(\sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(61)} e^{-im\varphi} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(4)} e^{in\varphi} \right) d\varphi, \quad (34)$$

где учтены соотношения $\alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_1 = -1$, $\alpha_2 + \alpha_5 = 0$.

Перемножая ряды в (34) и учитывая четность и нечетность функций $\cos m\varphi$ и $\sin m\varphi$, записываем

$$\left(\sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(61)} e^{-im\varphi} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(4)} e^{in\varphi} \right) = \sum_{p=0}^{\infty} C_p \cos p\varphi + i \sum_{p=0}^{\infty} S_p \sin p\varphi, \quad (35)$$

где обозначено

$$C_p = \sum_{n=0}^{\infty} (A_n^{(61)} a_{n+p}^{(4)} + a_n^{(4)} A_{n+p}^{(61)}), \quad S_p = \sum_{n=0}^{\infty} (A_n^{(61)} a_{n+p}^{(4)} - a_n^{(4)} A_{n+p}^{(61)}). \quad (36)$$

Проводя в (34) замену переменной $\varphi = 2\theta$ и учитывая представление (35), получаем

$$J_{(2,5)} = -2\mathcal{H}(\zeta_c^{(25)} - \zeta_4)^{-1/2} e^{-i\frac{\pi\beta}{2}} \sum_{p=0}^{\infty} (C_p I_p^{(\cos)} + i S_p I_p^{(\sin)}), \quad (37)$$

где введены интегралы

$$I_p^{(\cos)} = \int_0^{\pi/2} (\operatorname{tg} \theta)^{1-\beta} \cos(2p\theta) d\theta, \quad I_p^{(\sin)} = \int_0^{\pi/2} (\operatorname{tg} \theta)^{1-\beta} \sin(2p\theta) d\theta, \quad p = 0, 1, \dots \quad (38)$$

4.2.2. Вычисление осциллирующих интегралов $I_p^{(\cos)}$, $I_p^{(\sin)}$. Для нахождения интегралов в (38) построим представления

$$\cos(2p\theta) = \sum_{k=0}^p c_k^{(p)} \cos^{2k}\theta, \quad \sin(2p\theta) = \sin \theta \sum_{k=0}^{p-1} s_k^{(p)} \cos^{2k+1}\theta. \quad (39)$$

Коэффициенты $c_k^{(p)}$ при $p = 0$ и $p = 1$ очевидно равны $c_0^{(0)} = 1$, $c_0^{(1)} = -1$, $c_1^{(1)} = 2$, а для последующих значений $p > 1$ используем равенство

$$\cos(2p\theta) = 2 \cos 2\theta \cos[2(p-1)\theta] - \cos[2(p-2)\theta], \quad (40)$$

что приводит к рекуррентным соотношениям для $c_k^{(p)}$, $p \geq 2$:

$$c_k^{(p)} = 4c_{k-1}^{(p-1)} - 2c_k^{(p-1)} - c_k^{(p-2)}, \quad k = 0, \dots, p, \quad (41)$$

причем $c_p^{(p-1)} = c_{p-1}^{(p-2)} = c_p^{(p-2)} = 0$. Таким образом, коэффициенты $c_k^{(p)}$ в (39) найдены.

Разложение для $\sin(2p\theta)$, $p \geq 1$, построим с помощью дифференцирования равенства для $\cos(2p\theta)$ в (39), что дает

$$s_k^{(p)} = \frac{k+1}{p} c_{k+1}^{(p)}, \quad k = 0, \dots, p-1. \quad (42)$$

Получив представления (39), теперь запишем интегралы $I_p^{(\cos)}$ и $I_p^{(\sin)}$ в (38):

$$I_p^{(\cos)} = \sum_{k=0}^p c_k^{(p)} \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{1-\beta} (\cos \theta)^{\beta-1+2k} d\theta, \quad I_p^{(\sin)} = \sum_{k=0}^{p-1} s_k^{(p)} \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{2-\beta} (\cos \theta)^{\beta+2k} d\theta. \quad (43)$$

Значения этих интегралов выражаются явно с помощью формулы из [27]:

$$\int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{2x-1} (\cos \theta)^{2y-1} d\theta = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{2\Gamma(x+y)}, \quad x > 0, \quad y > 0, \quad (44)$$

что приводит окончательно к представлениям для $I_p^{(\cos)}$ и $I_p^{(\sin)}$:

$$I_p^{(\cos)} = \sum_{k=0}^p c_k^{(p)} \frac{\Gamma\left(1-\frac{\beta}{2}\right)\Gamma\left(k+\frac{\beta}{2}\right)}{2k!}, \quad I_p^{(\sin)} = \sum_{k=0}^{p-1} s_k^{(p)} \frac{\Gamma\left(\frac{3-\beta}{2}\right)\Gamma\left(k+\frac{\beta+1}{2}\right)}{2(k+1)!}. \quad (45)$$

Теперь интеграл $J_{(2,5)}$ в (37) можно записать в удобной форме, выделив в нем вещественную и мнимую части:

$$\operatorname{Re}(J_{(2,5)}) = -2\mathcal{H}(\zeta_c^{(25)} - \zeta_4)^{-1/2} \left(\cos \frac{\pi\beta}{2} \sum_{p=0}^{\infty} C_p I_p^{(\cos)} + \sin \frac{\pi\beta}{2} \sum_{p=0}^{\infty} S_p I_p^{(\sin)} \right), \quad (46)$$

$$\operatorname{Im}(J_{(2,5)}) = -2\mathcal{H}(\zeta_c^{(25)} - \zeta_4)^{-1/2} \left(\cos \frac{\pi\beta}{2} \sum_{p=0}^{\infty} S_p I_p^{(\sin)} - \sin \frac{\pi\beta}{2} \sum_{p=0}^{\infty} C_p I_p^{(\cos)} \right). \quad (47)$$

Таким образом, алгоритм вычисления интеграла $J_{(2,5)}$ построен.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА $J_{(5,6)}$ ПО ОТРЕЗКУ $[\zeta_5, \zeta_6]$

5.1. Введение кластера $\mathbb{C}l^{(71)}$ прообразов $\zeta_7, \zeta_8, \zeta_1$

Три прообраза $\zeta_7, \zeta_8, \zeta_1$ объединим в один кластер $\mathbb{C}l^{(71)}$ с центром $\zeta_c^{(71)}$:

$$\zeta_c^{(71)} = (\zeta_7 + \zeta_1)/2, \quad (48)$$

и на отрезке $[\zeta_5, \zeta_6]$ введем замену переменной t :

$$t = \zeta_5 + \Delta_5 u, \quad \Delta_5 = \zeta_6 - \zeta_5, \quad u \in [0, 1]. \quad (49)$$

Для каждого из биномов $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$, $k = \{7, 8, 1\}$, участвующих в ИКШ (4) по отрезку $[\zeta_5, \zeta_6]$, проведем цепочку преобразований, аналогичную (11):

$$(t - \zeta_k)^{\alpha_k} = (\zeta_5 - \zeta_c^{(71)} + \Delta_5 u)^{\alpha_k} \left(1 - \frac{\zeta_c^{(71)} - \zeta_k}{\zeta_c^{(71)} - \zeta_5 - \Delta_5 u} \right)^{\alpha_k} = (\zeta_5 - \zeta_c^{(71)})^{\alpha_k} (1 - q^{(71)} u)^{\alpha_k} \left(1 - \frac{p_k}{1 - q^{(71)} u} \right)^{\alpha_k}, \quad (50)$$

$$q^{(71)} = \frac{\Delta_5}{\zeta_c^{(71)} - \zeta_5}, \quad p_k = \frac{\zeta_c^{(71)} - \zeta_k}{\zeta_c^{(71)} - \zeta_5},$$

а последний множитель в (50) разложим в аналогичный (13) ряд по степеням $(1 - q^{(71)} u)^{-n}$:

$$\left(1 - \frac{p_k}{1 - q^{(71)} u} \right)^{\alpha_k} = \sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(k)} (1 - q^{(71)} u)^{-n}, \quad b_n^{(k)} = \frac{p_k^n (-\alpha_k)_n}{n!}. \quad (51)$$

Скорость сходимости этого ряда будет весьма высокой, поскольку величина $p_k/(1 - q^{(71)} u)$ при $u \in [0, 1]$ имеет максимум:

$$\max_{u \in [0, 1]} \left| \frac{p_k}{1 - q^{(71)} u} \right| = \left| \frac{p_k}{1 - q^{(71)}} \right| = \left| \frac{\zeta_c^{(71)} - \zeta_k}{\zeta_c^{(71)} - \zeta_6} \right| < 1, \quad k = \{7, 8, 1\}. \quad (52)$$

Необходимое произведение биномов $\prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k}$ теперь запишем в виде

$$\prod_{k=\{7, 8, 1\}} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} = (\zeta_5 - \zeta_c^{(71)})^{\beta-2} (1 - q^{(71)} u)^{\beta-2} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{(71)} (1 - q^{(71)} u)^{-n}, \quad (53)$$

где учтено $\alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_1 = \beta - 2$, а значения $B_n^{(71)}$ — коэффициенты в произведении Коши рядов (51) по степеням $(1 - q^{(71)} u)^{-n}$:

$$\prod_{k=\{7, 8, 1\}} \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n^{(k)} (1 - q^{(71)} u)^{-n} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{(71)} (1 - q^{(71)} u)^{-n} \quad (54)$$

и вычисляемые рекуррентно по схеме (18).

5.2. Сведение интеграла $J_{(5,6)}$ к ряду по функциям $F(a, b; c; q^{(71)})$

5.2.1. Представление биномов $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$, $k = \{4, 2, 5, 6\}$. Биномы $(t - \zeta_k)^{\alpha_k}$, $k = \{4, 2\}$, участвующие в ИКШ (4) по отрезку $[\zeta_5, \zeta_6]$, запишем в виде

$$(t - \zeta_k)^{\alpha_k} = (\zeta_5 - \zeta_k)^{\alpha_k} \left(1 - \frac{\Delta_5}{\zeta_k - \zeta_5} u \right)^{\alpha_k}, \quad k = \{4, 2\}, \quad (55)$$

и второй множитель в (55) разложим в ряд по степеням u^n :

$$\left(1 - \frac{\Delta_5}{\zeta_k - \zeta_5} u\right)^{\alpha_k} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(k)} u^n, \quad a_n^{(k)} = \left(\frac{\Delta_5}{\zeta_k - \zeta_5}\right)^n \frac{(-\alpha_k)_n}{n!}, \quad k = \{4, 2\}. \quad (56)$$

Произведение двух биномов $(t - \zeta_4)^{\alpha_4}(t - \zeta_2)^{\alpha_2}$ теперь запишем в виде

$$\prod_{k=\{4,2\}} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} = (\zeta_5 - \zeta_4)^{\alpha_4} (\zeta_5 - \zeta_2)^{\alpha_2} \sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(42)} u^m, \quad A_m^{(42)} = \sum_{k=0}^m a_k^{(4)} a_{m-k}^{(2)}. \quad (57)$$

Биномы $(t - \zeta_5)^{\alpha_5}$, $(t - \zeta_6)^{\alpha_6}$ и дифференциал dt , в силу замены (49), примут вид

$$(t - \zeta_5)^{\alpha_5} = \Delta_5^{\alpha_5} u^{\alpha_5}, \quad (t - \zeta_6)^{\alpha_6} = e^{i\pi\alpha_6} \Delta_5^{\alpha_6} (1 - u)^{\alpha_6}, \quad dt = \Delta_5 du. \quad (58)$$

5.2.2. Представление интеграла $J_{(5,6)}$ в виде двойного ряда по функциям $F(a, b; c; q^{(71)})$. Используя полученные представления (53), (57), (58), запишем интеграл $J_{(5,6)}$ в форме

$$J_{(5,6)} = e^{-i\pi\beta_{\text{сж}}} P^{(56)} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{(71)} \sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(42)} \int_0^1 \frac{u^{\beta-1+m} (1-u)^{1-\beta}}{(1-q^{(71)}u)^{2-\beta+n}} du, \quad (59)$$

где обозначено

$$P^{(56)} = (\zeta_5 - \zeta_4)^{-1/2} (\zeta_2 - \zeta_5)^{1-\beta} (\zeta_c^{(71)} - \zeta_5)^{\beta-2} \Delta_5.$$

Используя теперь интегральное представление (21) для функции $F(a, b; c; q^{(71)})$, преобразуем (59) к виду

$$J_{(5,6)} = e^{-i\pi\beta_{\text{сж}}} P^{(56)} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{(71)} \sum_{m=0}^{\infty} A_m^{(42)} \frac{\Gamma(\beta+m)\Gamma(2-\beta)}{(m+1)!} F(n+2-\beta, \beta+m; 2+m; q^{(71)}). \quad (60)$$

Величина $q^{(71)}$, участвующая в качестве аргумента функций $F(\dots; q^{(71)})$ в этом разложении, определена в (50) и, как легко оценить, очень близка к единице (в реальных расчетах значение $(1 - q^{(71)}) \sim 10^{-3} - 10^{-7}$). Поэтому, как и для интеграла $J_{(4,5)}$, вычисление значений $F(\dots; q^{(71)})$ в сумме (60) будем проводить по аналогичной (23) формуле аналитического продолжения из [27]:

$$\begin{aligned} F(n+2-\beta, \beta+m; 2+m; q) &= (1-q)^{-n} \frac{\Gamma(n)\Gamma(2+m)}{\Gamma(n+2-\beta)\Gamma(m+\beta)} \sum_{p=0}^{n-1} \frac{(\beta+m-n)_p (2-\beta)_p}{p! (1-n)_p} (1-q)^p + \\ &+ (-1)^n \frac{\Gamma(2+m)}{\Gamma(2-\beta)\Gamma(\beta+m-n)} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(n+2-\beta)_p (\beta+m)_p}{p! (n+p)!} [k_p - \ln(1-q)] (1-q)^p, \end{aligned} \quad (61)$$

где

$$k_p = \psi(1+n+p) + \psi(1+p) - \psi(n+2-\beta+p) - \psi(\beta+m+p),$$

а при $n=0$ первая сумма в (61) исчезает.

Помимо этого соотношения для вычисления $F(\dots; q^{(71)})$ будем еще использовать рекурсии, аналогичные (24), по следующей схеме.

Для значений $n=0$ и $n=1$ воспользуемся формулой (61) и вычислим два массива $Y_m^{(0)} = F(2-\beta, \beta+m; 2+m; q^{(71)})$ и $Y_m^{(1)} = F(3-\beta, \beta+m; 2+m; q^{(71)})$, $m=0, 1, \dots, M$. Теперь для каждого фиксированного значения m применим рекурсию

$$\begin{aligned} F(n+2-\beta, \beta+m; 2+m; q) &= \frac{1+m+\beta-n}{(n+1-\beta)(1-q)} F(n-\beta, \beta+m; 2+m; q) + \\ &+ \frac{2n-2\beta-m-q(n+1-2\beta-m)}{(n+1-\beta)(1-q)} F(n+1-\beta, \beta+m; 2+m; q) \end{aligned} \quad (62)$$

при увеличении номера $n = 2, 3, \dots, N$ и найдем все необходимые значения $F(n + 2 - \beta, \beta + m; 2 + m; q^{(71)})$; здесь M и N – верхние границы соответствующих разложений по m и n .

Анализ всех возможных рекуррентных соотношений для функций $F(a, b; c; q)$ показал, что при значении аргумента q , близком к единице, именно такой способ вычисления функций $F(n + 2 - \beta, \beta + m; 2 + m; q^{(71)})$ обеспечивает надежную численную устойчивость и эффективность алгоритма.

Таким образом, представление всех необходимых интегралов в виде быстросходящихся разложений построено.

Теперь для реализации эффективного итерационного процесса вычисления прообразов необходимо задание их подходящих начальных значений.

При произвольных геометрических параметрах $\mathbb{Z}$ -образной области такие приближения построить весьма сложно, поэтому будем рассматривать случай больших длин L_4 и L_5 в сравнении с толщинами h_0 и H . Этот случай соответствует стремлению прообразов ζ_6, ζ_8 и ζ_1 к прообразу $\zeta_7 = 0$ и одновременно стремлению ζ_2, ζ_4 и ζ_5 к прообразу $\zeta_3 = \infty$ так, что выполнено

$$\zeta_6 \rightarrow 0, \quad \zeta_8 \rightarrow 0, \quad \zeta_1 \rightarrow 0; \quad \zeta_4 \rightarrow \infty, \quad \zeta_2 \rightarrow \infty, \quad \zeta_5 \rightarrow \infty, \quad \frac{\zeta_2}{\zeta_4} \rightarrow 0, \quad \frac{\zeta_5}{\zeta_4} \rightarrow 0. \quad (63)$$

Выводу таких аппроксимаций прообразов ζ_k посвящен следующий раздел.

6. ВЫБОР НАЧАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В ИТЕРАЦИОННОМ МЕТОДЕ

6.1. Аппроксимация интеграла $J_{(4,5)}$

В представлении (22) для интеграла $J_{(4,5)}$ в рассматриваемом случае больших длин L_4 и L_5 учтем условия (63) и оставим члены до первой степени малости $(-\zeta_4)^{-1}$. Используем определение $q^{(62)}$ из (11), что позволяет аппроксимировать (22) следующим образом:

$$J_{(4,5)} \approx -\mathcal{K}(-\zeta_4)^{-1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(\beta)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \beta\right)} F\left(\frac{1}{2}, \beta; \frac{1}{2} + \beta; q^{(62)}\right), \quad q^{(62)} \approx \frac{\zeta_5 - \zeta_4}{\zeta_2/2 - \zeta_4} = 1 - \frac{\zeta_2/2 - \zeta_5}{\zeta_2/2 - \zeta_4}. \quad (64)$$

Поскольку аргумент $q^{(62)}$ здесь очень близок к единице, то для функции $F(., .; .; q)$ используем формулу (23) продолжения в окрестность аргумента $q = 1$. Учтем при этом член первого порядка малости $(1 - q)$, а также равенство $\psi(1) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) = 2 \ln 2$ (см. [27]); это дает возможность преобразовать (64) к виду

$$J_{(4,5)} \approx -\mathcal{K}(-\zeta_4)^{-1/2} \left(k_0'' - \ln \frac{\zeta_2 - 2\zeta_5}{\zeta_2 - 2\zeta_4} \right), \quad k_0'' = \psi(1) + 2 \ln 2 - \psi(\beta). \quad (65)$$

6.2. Аппроксимация интегралов, родственных $J_{(2,5)}$

В этом пункте вместо оценки интеграла $J_{(2,5)}$ более удобно аппроксимировать родственные ему два других. Из фиг. 1а следует, что $\text{Im}[J_{(2,5)}] = \text{Im}[J_{(3,4)}] = h_0$, а также

$$\text{Im}[e^{-i\pi(2-\beta)} J_{(2,5)}] = \text{Im}[e^{-i\pi(2-\beta)} \hat{J}_0] = -H, \quad (66)$$

где $J_{(3,4)}$ – интеграл ИКШ (4) по отрезку $[\zeta_3, \zeta_4]$, а $\hat{J}_0$ – ИКШ (4) по дуге $\zeta = e^{i\varphi}$, $\varphi \in [0, \pi]$, проходящей через прообраз $\zeta_0 = i$ центра симметрии z_0 :

$$\hat{J}_0 = \mathcal{K} \int_1^{-1} \prod_k (t - \zeta_k)^{\alpha_k} dt. \quad (67)$$

Значение $J_{(3,4)}$ определим с помощью замены $t = \zeta_4/u$, $u \in [0, 1]$, и учета соотношений (63), что дает аппроксимацию

$$\operatorname{Im}[J_{(2,5)}] = \operatorname{Im}[J_{(3,4)}] \approx \mathcal{H}\pi(-\zeta_4)^{-1/2}. \quad (68)$$

Интеграл $\hat{J}_0$ вычислим аналогично с помощью замены $t = e^{i\varphi}$, $\varphi \in [0, \pi]$, и учета (63):

$$\hat{J}_0 \approx \mathcal{H}\pi(-\zeta_4)^{-1/2} i e^{i\pi(1-\beta)} \left(\frac{-\zeta_5}{\zeta_2} \right)^{\beta-1}. \quad (69)$$

Из (69) следует необходимая в равенстве (66) связь

$$\operatorname{Im}[e^{-i\pi(2-\beta)} J_{(2,5)}] = \operatorname{Im}[e^{-i\pi(2-\beta)} \hat{J}_0] \approx -\mathcal{H}\pi(-\zeta_4)^{-1/2} \left(\frac{-\zeta_5}{\zeta_2} \right)^{\beta-1}. \quad (70)$$

6.3. Аппроксимация интеграла $J_{(5,6)}$

В представлении (60) для интеграла $J_{(5,6)}$ в рассматриваемом случае больших длин L_4 и L_5 учтем соотношения (63) и оставим члены до первой степени малости ζ_4^{-1} . Тогда, используя в двойной сумме (60) лишь главное слагаемое при $n = m = 0$, получим аппроксимацию

$$J_{(5,6)} \approx e^{-i\pi\beta} \mathcal{H}(-\zeta_4)^{-1/2} \left(\frac{-\zeta_5}{\zeta_2 - \zeta_5} \right)^{\beta-1} \Gamma(\beta) \Gamma(2-\beta) F(2-\beta, \beta; 2; q^{(71)}). \quad (71)$$

Поскольку значение аргумента $q^{(71)}$ здесь очень близко к единице:

$$q^{(71)} = \frac{\zeta_5 - \zeta_6}{\zeta_5 - \zeta_1/2} = 1 - \frac{\zeta_6 - \zeta_1/2}{\zeta_5 - \zeta_1/2},$$

то для функции $F(., ., .; q^{(71)})$ используем формулу аналитического продолжения (61) в окрестность аргумента $q = 1$. Учтем при этом члены до первого порядка малости $(1 - q^{(71)})$, что дает возможность преобразовать (71) к виду

$$J_{(5,6)} \approx e^{-i\pi\beta} \mathcal{H}(-\zeta_4)^{-1/2} \left(\frac{-\zeta_5}{\zeta_2 - \zeta_5} \right)^{\beta-1} \left(k_0 - \ln \frac{2\zeta_6 - \zeta_1}{2\zeta_5 - \zeta_1} \right), \quad k_0 = 2\psi(1) - \psi(2-\beta) - \psi(\beta). \quad (72)$$

6.4. Аппроксимация прообразов ζ_1 , ζ_4 и ζ_5

Учтем исходные условия (5), (6), (8) на геометрические параметры отображаемой $\mathbb{Z}$ -образной области, что приводит к соотношениям

$$J_{(4,5)} = -L_4, \quad J_{(2,5)} = -\frac{H + h_0 \cos(\pi\beta)}{\sin(\pi\beta)} + ih_0, \quad J_{(5,6)} = e^{-i\pi\beta} L_5. \quad (73)$$

Используем теперь полученные аппроксимации (65), (68), (70), (72) интегралов $J_{(4,5)}$, $J_{(2,5)}$, $J_{(5,6)}$. Это приводит к системе четырех уравнений для начальных значений прообразов и множителя $\mathcal{K}$ в итерационном процессе их высокоточного вычисления:

$$\mathcal{H}(-\zeta_4)^{-1/2} \left(\psi(1) + 2 \ln 2 - \psi(\beta) - \ln \frac{\zeta_2 - 2\zeta_5}{\zeta_2 - 2\zeta_4} \right) \approx L_4, \quad (74)$$

$$\mathcal{H}\pi(-\zeta_4)^{-1/2} \left(\frac{-\zeta_5}{\zeta_2} \right)^{\beta-1} \approx H, \quad (75)$$

$$\mathcal{H}\pi(-\zeta_4)^{-1/2} \approx h_0, \quad (76)$$

$$\mathcal{H}(-\zeta_4)^{-1/2} \left(\frac{-\zeta_5}{\zeta_2 - \zeta_5} \right)^{\beta-1} \left(2\psi(1) - \psi(2-\beta) - \psi(\beta) - \ln \frac{2\zeta_6 - \zeta_1}{2\zeta_5 - \zeta_1} \right) \approx L_5. \quad (77)$$

Деля соотношение (75) на (76) и выражая из него прообраз ζ_5 через ζ_2 , находим

$$\zeta_5 = \mu \zeta_2, \quad \mu \approx -\left(\frac{H}{h_0}\right)^{1/(\beta-1)}. \quad (78)$$

Далее разделим соотношение (74) на (76) и используем полученное приближение (78), что даст зависимость ζ_4 от прообраза ζ_2 :

$$\zeta_4 \approx \zeta_2 \left[\frac{1}{2} - \frac{1-2\mu}{8} \exp\left(\psi(\beta) - \psi(1) + \frac{\pi L_4}{h_0}\right) \right]. \quad (79)$$

Наконец разделим соотношение (77) на (76) и учтем связь (78), что позволит записать

$$\ln \frac{2\zeta_5/\zeta_1 - 1}{2\zeta_6/\zeta_1 - 1} \approx \pi \frac{L_5}{h_0} (1 - \mu^{-1})^{\beta-1} + \psi(2 - \beta) + \psi(\beta) - 2\psi(1). \quad (80)$$

Используем теперь равенство (2) для прообразов, т.е. $\zeta_1 \zeta_5 = \zeta_2 \zeta_6 = -1$, из которого следуют, с учетом (78), соотношения $\zeta_6/\zeta_1 = \zeta_5/\zeta_2 = \mu$, $\zeta_5 = -1/\zeta_1$. Подстановка этих равенств в (80) дает окончательное представление для прообраза ζ_1 :

$$\zeta_1 \approx \left\{ \frac{1-2\mu}{2} \exp\left[\frac{\pi L_5}{h_0} (1 - \mu^{-1})^{\beta-1} + \psi(2 - \beta) + \psi(\beta) - 2\psi(1)\right] - \frac{1}{2} \right\}^{-1/2}. \quad (81)$$

Тогда последовательность вычисления аппроксимаций прообразов будет следующей. Вычислим ζ_1 по (81), далее найдем $\zeta_5 = -1/\zeta_1$, затем, в силу (78), получим $\zeta_2 = \zeta_5/\mu$, после этого из (79) определим ζ_4 и, в силу связи $\zeta_8 = -1/\zeta_4$, наконец, найдем ζ_8 .

Таким образом, начальные приближения для всех прообразов построены; для последующего итерационного метода обозначим их через $\zeta_k^{(0)}$.

7. ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПРООБРАЗОВ

Запишем систему трех уравнений относительно трех неизвестных прообразов ζ_1 , ζ_2 и ζ_4 . Для этого уравнение для $J_{(4,5)}$ из (73) разделим на уравнение для $\text{Im}[J_{(2,5)}]$ из (73) и результат запишем в виде функции для $\Phi_1(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_4)$:

$$\Phi_1(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_4) = \frac{J_{(4,5)}}{\text{Im}[J_{(2,5)}]} + \frac{L_4}{h_0} = 0. \quad (82)$$

Далее уравнение для $\text{Re}[J_{(2,5)}]$ из (73) разделим на $\text{Im}[J_{(2,5)}]$ и получим

$$\Phi_2(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_4) = \frac{\text{Re}[J_{(2,5)}]}{\text{Im}[J_{(2,5)}]} + \frac{\cos(\pi\beta) + H/h_0}{\sin(\pi\beta)} = 0. \quad (83)$$

И, наконец, уравнение для $J_{(5,6)}$ из (73) разделим на $\text{Im}[J_{(2,5)}]$ и запишем

$$\Phi_3(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_4) = \frac{|J_{(5,6)}|}{\text{Im}[J_{(2,5)}]} - \frac{L_5}{h_0} = 0. \quad (84)$$

В этой системе, как сказано ранее, прообразы ζ_5 , ζ_6 и ζ_8 связаны с ζ_1 , ζ_2 и ζ_4 формулами (2).

Решение системы (82)–(84) проводилось итерационным методом Ньютона

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{A}^{-1} \Phi(\mathbf{x}^{(n)}), \quad (85)$$

где $\mathbf{x} = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_4)^T$ – вектор искомых прообразов, Φ – вектор-функция значений (82)–(84), а $\mathbf{A}$ – матрица частных производных $\partial \Phi_m / \partial \zeta_k$. Необходимые девять частных производных

$$\frac{\partial \Phi_m}{\partial \zeta_k}, \quad m = \{1, 2, 3\}, \quad k = \{1, 2, 4\},$$

находились по формулам конечных разностей

$$\frac{\partial \Phi_m}{\partial \zeta_k} \approx \frac{\Phi_m(\cdot, \zeta_k + \delta_k, \cdot) - \Phi_m(\cdot, \zeta_k - \delta_k, \cdot)}{2\delta_k}, \quad \delta_k = 10^{-5} \zeta_k,$$

а начальные приближения $\zeta_1^{(0)}$, $\zeta_2^{(0)}$ и $\zeta_4^{(0)}$ брались из (81) и последующей схемы нахождения остальных $\zeta_k^{(0)}$. Итерации (85) проводились до достижения относительной погрешности $\delta_\zeta = |(\zeta_k^{(n+1)} - \zeta_k^{(n)})/\zeta_k^{(n)}| \approx 10^{-20}$. В большинстве проведенных обширных расчетов для этого требовалось 7–8 итераций и лишь в некоторых редких случаях было необходимо 9–11 итераций.

Сходимость процесса (85) оказалась очень чувствительна к выбору начального приближения. Так, отклонение от полученных начальных значений (81), (78), (79) очень часто приводило к расходимости итераций, что объясняется сильной нелинейной зависимостью значений интегралов $J_{(4,5)}$, $J_{(2,5)}$, $J_{(5,6)}$ от прообразов ζ_k .

В некоторых редких случаях, когда внутренняя толщина H сильно отличалась от толщины h_0 горизонтальных полочек $\mathbb{Z}$ -образного профиля (см. фиг. 1), выбор начальных значений по формулам (81), (78), (79) также не приводил к сходимости итераций (85). В этом случае процесс модифицировался в соответствии с методом продолжения по параметру (см. [29]). Геометрические характеристики β , L_4 , L_5 , h_0 области $\mathbb{Z}$ полагались равными нужным значениям, а толщина H выбиралась равной h_0 , и итерационный процесс (85) проводился до достижения невысокой точности $\delta_\zeta \approx 10^{-4}$ прообразов ζ_k . Далее, величина H монотонно изменялась с небольшим шагом ΔH , $H_{m+1} = H_m + \Delta H$, а начальные значения прообразов $\zeta_k^{(0)}$ при этом выбирались из решения задачи для H_m . Высокая точность $\delta_\zeta \approx 10^{-20}$ вычисления прообразов ζ_k при этом требовалась лишь на последнем этапе достижения H_m необходимой величины H .

После нахождения прообразов ζ_k множитель $\mathcal{H}$ в ИКШ (4) может быть найден из любого уравнения (73); в частности, из (73) для $J_{(4,5)}$ и (22) получаем

$$\mathcal{H} = L_4 \Delta_4^{1/2-\beta} (\zeta_c^{(62)} - \zeta_4)^\beta \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \beta\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(\beta)} \left[\sum_{m=0}^{\infty} B_m^{(62)} F\left(m + \beta, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \beta; q^{(62)}\right) \right]^{-1}. \quad (86)$$

Таким образом, проблема нахождения прообразов ζ_k и множителя $\mathcal{H}$ в ИКШ (4) решена.

8. ПОСТРОЕНИЕ ОТОБРАЖЕНИЯ $f(\zeta)$

8.1. Представление $f(\zeta)$ вблизи прообразов ζ_k

Отображение $f(\zeta)$ вблизи конечных прообразов и прообраза $\zeta_3 = \infty$ имеют различную структуру, поэтому рассмотрим их отдельно.

8.1.1. Представление $f(\zeta)$ вблизи конечных прообразов. Получим разложение функции $f(\zeta)$ вблизи точек ζ_k , $k \neq 3$. В интеграле (4) все биномы $(t - \zeta_n)^{\alpha_n}$, кроме $n = k$, представим в виде

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = (\zeta_k - \zeta_n)^{\alpha_n} \left(1 - \frac{t - \zeta_k}{\zeta_n - \zeta_k}\right)^{\alpha_n} = (\zeta_k - \zeta_n)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m^{(n)} (t - \zeta_k)^m, \quad \gamma_m^{(n)} = \frac{(-\alpha_n)_m}{(\zeta_n - \zeta_k)^m m!}. \quad (87)$$

Перемножая все такие разложения по указанному в (18) правилу Коши и обозначая получаемые коэффициенты через G_m , для производной $f'(t)$ искомой функции в окрестности прообраза ζ_k записываем

$$f'(t) = \mathcal{H} \prod_{n \neq k} (\zeta_k - \zeta_n)^{\alpha_n} (t - \zeta_k)^{\alpha_k} \sum_{m=0}^{\infty} G_m (t - \zeta_k)^m. \quad (88)$$

Интегрируя это разложение от ζ_k до ζ , получаем представление $f(\zeta)$ вблизи ζ_k :

$$f(\zeta) = z_k + \mathcal{H} \prod_{n \neq k} (\zeta_k - \zeta_n)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{G_m}{m + \alpha_k + 1} (\zeta - \zeta_k)^{m + \alpha_k + 1}. \quad (89)$$

Этот ряд сходится в верхнем полукруге $\{\zeta : |\zeta - \zeta_k| < R_k, \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}$, где $R_k = \min_{n \neq k} |\zeta_n - \zeta_k|$ — расстояние от ζ_k до ближайшего соседнего прообраза ζ_n .

8.1.2. Представление $f(\zeta)$ вблизи бесконечноудаленного прообраза ζ_3 . Вблизи точки $\zeta_3 = \infty$ подынтегральные биномы разложим в ряды

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = t^{\alpha_n} \left(1 - \frac{\zeta_n}{t}\right)^{\alpha_n} = t^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m^{(n)} t^{-m}, \quad \gamma_m^{(n)} = \frac{(-\alpha_n)_m \zeta_n^m}{m!}. \quad (90)$$

Перемножая все такие разложения по правилу Коши, обозначая получаемые коэффициенты через G_m и учитывая равенство $\sum_{n \neq 3} \alpha_n = -3/2$, для производной $f'(t)$ записываем представление в окрестности ζ_3

$$f'(t) = \mathcal{H} t^{-3/2} \sum_{m=0}^{\infty} G_m t^{-m}. \quad (91)$$

Интегрируя это разложение от ζ_3 до ζ , получаем разложение $f(\zeta)$ вблизи ζ_3 :

$$f(\zeta) = z_3 - \mathcal{H} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{G_m}{m + 1/2} \zeta^{-m-1/2}. \quad (92)$$

Этот ряд сходится во внешности полукруга радиуса R_3 , т.е. $\{\zeta : |\zeta| > R_3, \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}$, где $R_3 = \max\{|\zeta_2|, |\zeta_4|\}$.

8.1.3. Представление $f(\zeta)$ вблизи прообраза центра симметрии ζ_0 . Вблизи точки $\zeta_0 = i$ все подынтегральные биномы разложим в ряды

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = (\zeta_0 - \zeta_n)^{\alpha_n} \left(1 - \frac{t - \zeta_0}{\zeta_n - \zeta_0}\right)^{\alpha_n} = (\zeta_0 - \zeta_n)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m^{(n)} (t - \zeta_0)^m, \quad \gamma_m^{(n)} = \frac{(-\alpha_n)_m}{(\zeta_n - \zeta_0)^m m!}. \quad (93)$$

Перемножая все такие разложения и обозначая получаемые коэффициенты через G_m , для производной $f'(t)$ в окрестности точки ζ_0 имеем

$$f'(t) = \mathcal{H} \prod_n (\zeta_0 - \zeta_n)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} G_m (t - \zeta_0)^m. \quad (94)$$

Интегрируя это разложение от ζ_0 до ζ , получаем представление $f(\zeta)$ вблизи точки ζ_0 :

$$f(\zeta) = z_0 + \mathcal{H} \prod_n (\zeta_0 - \zeta_n)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{G_m}{m + 1} (\zeta - \zeta_0)^{m+1}. \quad (95)$$

Этот ряд сходится в круге $\{\zeta : |\zeta - \zeta_0| < 1\}$, поскольку на его границе лежит ближайшая к $\zeta_0 = i$ особая точка $\zeta_7 = 0$.

8.2. Представление $f(\zeta)$ в полукольце $\mathcal{R}_+$

Биномы $(t - \zeta_n)^{\alpha_n}$ для $n = \{6, 7, 8, 1\}$ разложим в ряды

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = t^{\alpha_n} \left(1 - \frac{\zeta_n}{t}\right)^{\alpha_n} = t^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} u_m^{(n)} t^{-m}, \quad u_m^{(n)} = \frac{(-\alpha_n)_m \zeta_n^m}{m!}, \quad (96)$$

сходящиеся вне полукруга радиуса r_* , т.е. при $\{\zeta : |\zeta| > r_*, \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}$, где $r_* = \max\{\zeta_1, |\zeta_6|\}$. Перемножая эти разложения по правилу Кошу и обозначая коэффициенты U_m , получаем

$$\prod_{n=6,7,8,1} (t - \zeta_n)^{\alpha_n} = t^{-1} \sum_{m=0}^{\infty} U_m t^{-m}, \quad (97)$$

где, с учетом (3), имеем $\alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_1 = -1$.

Теперь биномы $(t - \zeta_n)^{\alpha_n}$ для $n = \{2, 4, 5\}$ разложим в ряды

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = (-\zeta_n)^{\alpha_n} \left(1 - \frac{t}{\zeta_n}\right)^{\alpha_n} = (-\zeta_n)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} V_m^{(n)} t^m, \quad V_m^{(n)} = \frac{(-\alpha_n)_m}{\zeta_n^m m!}, \quad (98)$$

сходящиеся в полукруге радиуса R_* , т.е. при $\{\zeta : |\zeta| < R_*, \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}$, где $R_* = \min\{\zeta_2, |\zeta_5|\}$. Перемножая эти разложения по правилу Коши и обозначая коэффициенты V_m , записываем

$$\prod_{n=2,4,5} (t - \zeta_n)^{\alpha_n} = (-\zeta_2)^{\alpha_2} (-\zeta_4)^{\alpha_4} (-\zeta_5)^{\alpha_5} \sum_{m=0}^{\infty} V_m t^m. \quad (99)$$

Теперь для получения представления $f'(t)$ перемножим разложения (97) и (99) и найдем

$$f'(t) = \mathcal{H}(-\zeta_2)^{\alpha_2} (-\zeta_4)^{\alpha_4} (-\zeta_5)^{\alpha_5} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} S_m t^{m-1}, \quad (100)$$

где обозначено

$$S_m = \sum_{p=0}^{\infty} U_p V_{p+m}, \quad S_{-m} = \sum_{p=0}^{\infty} V_p U_{p+m}, \quad m = 0, 1, \dots \quad (101)$$

Интегрируя это разложение от ζ_0 до ζ , получаем представление $f(\zeta)$ в полукольце $\mathcal{R}_+$:

$$f(\zeta) = z_0 + \mathcal{H}(-\zeta_2)^{\alpha_2} (-\zeta_4)^{\alpha_4} (-\zeta_5)^{\alpha_5} \left\{ S_0 \ln \left(\frac{\zeta}{\zeta_0} \right) + \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{S_m}{m} (\zeta^m - \zeta_0^m) - \frac{S_{-m}}{m} (\zeta^{-m} - \zeta_0^{-m}) \right] \right\}. \quad (102)$$

Этот ряд Лорана сходится в полукольце $\mathcal{R}_+$, т.е. при $\{\zeta : r_* < |\zeta| < R_*, \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}$.

8.3. Представление $f(\zeta)$ вблизи отрезков $[\zeta_7, \zeta_8]$ и $[\zeta_3, \zeta_4]$

8.3.1. Отображение $f(\zeta)$ вблизи отрезка $[\zeta_7, \zeta_8]$. Введем следующую линейную замену переменных в ИКШ (4):

$$t = \frac{\zeta_8}{2}(u+1), \quad u = \frac{2}{\zeta_8}t - 1, \quad (103)$$

откуда, с учетом равенств $\alpha_7 = \alpha_8 = -1/2$, следует представление

$$(t - \zeta_7)^{\alpha_7} (t - \zeta_8)^{\alpha_8} = \frac{2}{\zeta_8} (u^2 - 1)^{-1/2}, \quad dt = \frac{\zeta_8}{2} du. \quad (104)$$

Остальные биномы $(t - \zeta_n)^{\alpha_n}$ с помощью замены (103) представим в виде

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = \left(\frac{\zeta_8 - 2\zeta_n}{2} \right)^{\alpha_n} (1 - p_n u)^{\alpha_n}, \quad p_n = \frac{\zeta_8}{2\zeta_n - \zeta_8}, \quad n = \{1, 2, 4, 5, 6\}, \quad (105)$$

и далее их разложим в ряды

$$(t - \zeta_n)^{\alpha_n} = \left(\frac{\zeta_8 - 2\zeta_n}{2} \right)^{\alpha_n} \sum_{m=0}^{\infty} e_m^{(n)} u^m, \quad e_m^{(n)} = \frac{(-\alpha_n)_m p_n^m}{m!}. \quad (106)$$

Перемножая эти разложения по правилу Коши и обозначая коэффициенты ряда через E_m , имеем

$$\prod_{n=1,2,4,5,6} (t - \zeta_n)^{\alpha_n} = A \sum_{m=0}^{\infty} E_m u^m, \quad A = \prod_{n=1,2,4,5,6} \left(\frac{\zeta_8 - 2\zeta_n}{2} \right)^{\alpha_n}. \quad (107)$$

Подставляя представления (104) и (107) в ИКШ (4), записываем для суперпозиции

$$f' \circ t(u) = \mathcal{H}A(u^2 - 1)^{-1/2} \sum_{m=0}^{\infty} E_m u^m. \quad (108)$$

Интегрируя это разложение от $u = -1$ до u , и вводя специальные интегралы $I_m(u)$, получаем

$$f \circ t(u) = \mathcal{H}A \sum_{m=0}^{\infty} E_m I_m(u), \quad I_m(u) = \int_{-1}^u (u^2 - 1)^{-1/2} u^m du. \quad (109)$$

Интегралы $I_m(u)$ будем брать с помощью замены $u = \cosh v$, $v = \operatorname{arcch} u$, тогда

$$I_m(u) = \int_{\pi i}^{\operatorname{arcch} u} \cosh^m v dv, \quad m = 0, 1, \dots. \quad (110)$$

Значения $I_m(u)$ при $m = 0$ и $m = 1$ получаем явно:

$$I_0(u) = \operatorname{arcch} u - \pi i, \quad I_1(u) = \sqrt{u^2 - 1}, \quad (111)$$

а для всех последующих m находим $I_m(u)$ рекуррентно интегрированием по частям:

$$I_m(u) = \frac{\sqrt{u^2 - 1}}{m} u^{m-1} + \frac{m-1}{m} I_{m-2}(u), \quad m = 2, 3, \dots. \quad (112)$$

Таким образом, учитывая (109) и (103), разложение $f(\zeta)$ вблизи отрезка $[\zeta_7, \zeta_8]$ запишем в виде

$$f(\zeta) = \mathcal{H}A \sum_{m=0}^{\infty} E_m I_m(u), \quad u = \frac{2}{\zeta_8} \zeta - 1, \quad (113)$$

которое сходится в полукруге $\mathbb{U}_+$ с центром в точке $\zeta_* = \zeta_8/2$ и радиусом R_* :

$$\{\zeta : |\zeta - \zeta_*| < R_*, \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}, \quad R_* = \min[\zeta_1 - \zeta_*, \zeta_* - \zeta_6]. \quad (114)$$

8.3.2. Отображение $f(\zeta)$ вблизи отрезка $[\zeta_3, \zeta_4]$. В ИКШ (4) используем рациональную замену переменной $t = -1/w$ и учтем симметричность $\mathbb{Z}$ -образной области, включающую условия (3), (2):

$$\alpha_{n+4} = \alpha_n, \quad \zeta_{n+4} = -1/\zeta_n, \quad n = 1, \dots, 4.$$

Это приводит к преобразованию подынтегрального выражения в (4) в себя же, а отрезка $[\zeta_3, \zeta_4]$ — в отрезок $[\zeta_7, \zeta_8]$. Тогда представление $f(\zeta)$ вблизи $[\zeta_3, \zeta_4]$ будет иметь вид (113) с подстановкой $u = -2/(\zeta_8 \zeta) - 1$, следующей из замены $t = -1/w$. Сходиться такое разложение будет во внешности полукруга

$$\left\{ \zeta : \left| \frac{1}{\zeta} + \zeta_* \right| < R_*, \operatorname{Im} \zeta \geq 0 \right\}, \quad R_* = \min[\zeta_1 - \zeta_*, \zeta_* - \zeta_6], \quad \zeta_* = \zeta_8/2. \quad (115)$$

Построенные в этом разделе разложения искомой функции $f(\zeta)$ полностью покрывают всю полуплоскость $\mathbb{H}_+ = \{\zeta : \operatorname{Im} \zeta \geq 0\}$, причем скорость сходимости в соответствующих подобластях $\mathbb{H}_+$ является экспоненциальной.

9. ОТОБРАЖЕНИЕ ОБЛАСТИ $\mathbb{Z}$ НА ПРЯМОУГОЛЬНИК Π

9.1. Отображение $w = g(\zeta)$ полуплоскости $\mathbb{H}_+$ на прямоугольник Π

Имея отображение $z = f(\zeta)$ полуплоскости $\mathbb{H}_+$ на область $\mathbb{Z}$, построим теперь отображение $U(z)$ области $\mathbb{Z}$ на прямоугольник Π единичной высоты и расположенный симметрично на плос-

кости w так, что вершины z_3, z_4, z_7, z_8 с прямыми углами перейдут в вершины w_3, w_4, w_7, w_8 прямоугольника соответственно. Его длина L_0 будет найдена в процессе построения, тогда вершины Π будут иметь координаты $w_3 = L_0/2, w_4 = L_0/2 + i, w_7 = -L_0/2 + i, w_8 = -L_0/2$. Такое отображение можно представить с помощью эллиптического синуса $\operatorname{sn}(w, k)$ и обратного к нему $\operatorname{sn}^{-1}(\zeta, k)$ (см. [30]). Однако далее для единообразия выкладок будем использовать аппарат функций Гаусса $F(a, b; c; z)$.

Построим отображение $w = g(\zeta)$ полуплоскости $\mathbb{H}_+$ с уже найденным расположением прообразов ζ_k на прямоугольник Π с соответствием $w_3 = g(\zeta_3), w_4 = g(\zeta_4), w_7 = g(\zeta_7), w_8 = g(\zeta_8)$. Функция $w = g(\zeta)$ представима интегралом

$$g(\zeta) = w_k + \mathcal{M} \int_{\zeta_k}^{\zeta} [(t - \zeta_4)t(t - \zeta_8)]^{-1/2} dt, \quad k = \{3, 4, 7, 8\}, \quad \mathcal{M} > 0. \quad (116)$$

Множитель $\mathcal{M}$ и длину L_0 прямоугольника Π найдем из условий

$$\mathcal{M} \int_{\zeta_7}^{\zeta_8} [(t - \zeta_4)t(t - \zeta_8)]^{-1/2} dt = -i, \quad (117)$$

$$\mathcal{M} \int_{\zeta_4}^{\zeta_7} [(t - \zeta_4)t(t - \zeta_8)]^{-1/2} dt = -L_0. \quad (118)$$

В уравнении (117) введем замену $t = \zeta_8 u$ и с помощью метода из п. 3.1 с использованием представления функции $F(a, b; c; z)$ в (21) и с учетом связи $\zeta_4 = -1/\zeta_8$ преобразуем его к виду

$$\pi \mathcal{M} \sqrt{\zeta_8} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; -\zeta_8^2\right) = 1. \quad (119)$$

В уравнении (118) введем замену $t = \zeta_4(1 - u)$ и аналогично предыдущему преобразуем его к виду

$$\pi \mathcal{M} \sqrt{\frac{\zeta_8}{1 + \zeta_8^2}} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; (1 + \zeta_8^2)^{-1}\right) = L_0. \quad (120)$$

Из уравнения (119) следует значение множителя $\mathcal{M}$, а из отношения (120) и (119) — длина L_0 прямоугольника Π :

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\pi \sqrt{\zeta_8} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; -\zeta_8^2\right)}, \quad L_0 = \frac{F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; (1 + \zeta_8^2)^{-1}\right)}{\sqrt{1 + \zeta_8^2} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; -\zeta_8^2\right)}. \quad (121)$$

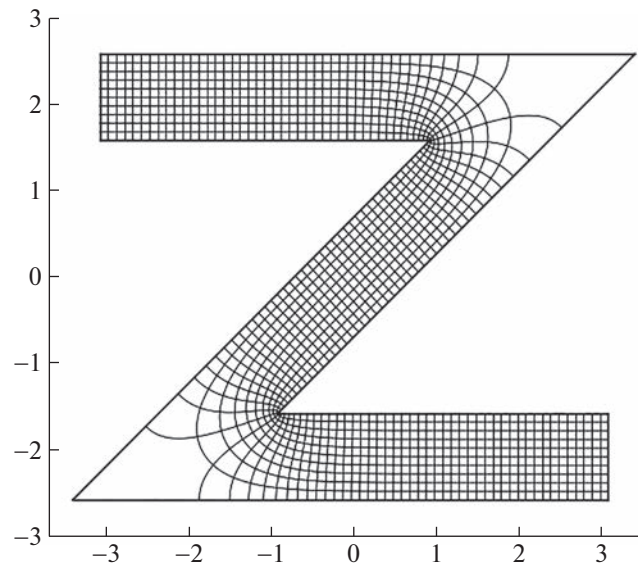
В выражении для длины L_0 функцию $F(a, b; c; z)$ в числителе представим по формуле аналитического продолжения (23), что приведет к соотношению

$$L_0 = \frac{1}{\pi \sqrt{1 + \zeta_8^2}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n k_n \left(\frac{\zeta_8^2}{1 + \zeta_8^2} \right)^n - \ln \left(\frac{\zeta_8^2}{1 + \zeta_8^2} \right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(\frac{\zeta_8^2}{1 + \zeta_8^2} \right)^n \right] \left[F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; -\zeta_8^2\right) \right]^{-1}, \quad (122)$$

где $a_n = \left[\left(\frac{1}{2} \right)_n / n! \right]^2$, $k_0 = 4 \ln 2$, $k_n = k_{n-1} - \frac{2}{n(2n-1)}$.

В случае вытянутых полочек области $\mathbb{Z}$, когда прообраз $\zeta_8 \rightarrow 0$, асимптотика для длины L_0 прямоугольника принимает простой вид

$$L_0 = \frac{2}{\pi} \ln \left(\frac{4}{\zeta_8} \right) (1 + O(\zeta_8^2)), \quad \zeta_8 \rightarrow 0. \quad (123)$$



Фиг. 2. Отображение на $\mathbb{Z}$ -образную область с углом $\pi\beta$, $\beta = 1.7563918$.

9.2. Представление отображения $w = g(\zeta)$ вблизи отрезков $[\zeta_3, \zeta_4]$ и $[\zeta_7, \zeta_8]$

Вблизи отрезка $[\zeta_7, \zeta_8]$ для интеграла (116) используем разложения, аналогичные полученным в подпункте 8.3.1. Это позволяет записать $w = g(\zeta)$ в виде ряда

$$g(\zeta) = \mathcal{M} \left(\frac{2}{\zeta_8 - 2\zeta_4} \right)^{1/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{2} \right)_m}{m!} \left(\frac{\zeta_8}{2\zeta_4 - \zeta_8} \right)^m I_m(u), \quad u = \frac{2}{\zeta_8} \zeta - 1, \quad (124)$$

где $\mathcal{M}$ определено в (121), а функции $I_m(u)$ – в (111) и (112). Это разложение сходится в полукруге $\mathbb{U}_+$ с центром в точке $\zeta_* = \zeta_8/2$ и радиусом $R_* = \zeta_8/2 - \zeta_4$.

Вблизи отрезка $[\zeta_3, \zeta_4]$ используем разложения, аналогичные полученным в подпункте 8.3.2, что дает для $w = g(\zeta)$ представление (124), но с подстановкой $u = -2/(\zeta_8\zeta) - 1$. Этот ряд сходится во внешности полукруга

$$\left\{ \zeta : \left| \frac{1}{\zeta} + \frac{\zeta_8}{2} \right| < R_*, \operatorname{Im} \zeta \geq 0 \right\}, \quad R_* = \frac{\zeta_8}{2} - \zeta_4. \quad (125)$$

Полученные здесь два разложения целиком покрывают полуплоскость $\mathbb{H}_+$, что завершает построение функции $w = g(\zeta)$.

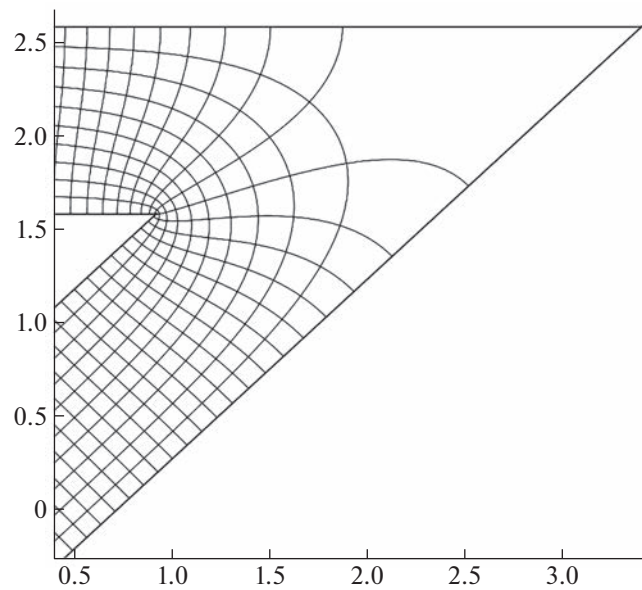
Необходимое для дальнейшего отображение прямоугольника Π на область $\mathbb{Z}$ и обратное к нему даются суперпозициями $f \circ g^{-1}(w)$ и $g \circ f^{-1}(z)$, где $g^{-1}(w)$ и $f^{-1}(z)$ – обратные к функциям $g(\zeta)$ и $f(\zeta)$.

10. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

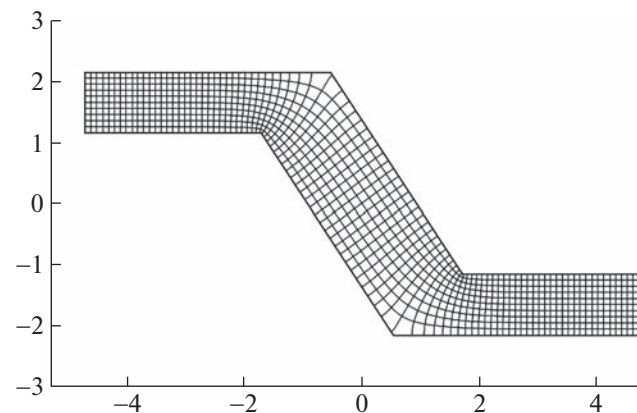
Приведем результаты вычисления параметров ИКШ для различных геометрических характеристик области $\mathbb{Z}$. Напомним здесь, что нормировка отображения $f(\zeta)$ включает условия $\zeta_7 = 0$, $\zeta_3 = \infty$ и $f(i) = z_0 = 0$, из которых вытекают еще три соотношения $\zeta_1\zeta_5 = \zeta_2\zeta_6 = \zeta_4\zeta_8 = -1$.

Размеры области $\mathbb{Z}$ выбирались такими, чтобы длина L_0 прямоугольника Π , на который отображалась $\mathbb{Z}$ -образная область, была с большой точностью кратна числу $\Delta = 0.1$ – шагу квадратной декартовой сетки в прямоугольнике Π .

Ниже приведены результаты расчетов параметров ИКШ, причем даны только три прообраза $\zeta_6, \zeta_8, \zeta_1$, образующие кластер вокруг прообраза $\zeta_7 = 0$. Остальные прообразы находятся из условия $\zeta_k = -1/\zeta_{k+4}$.



Фиг. 3. Отображение на $\mathbb{Z}$ -образную область при $\beta = 1.7563918$ вблизи z_1 .



Фиг. 4. Отображение на $\mathbb{Z}$ -образную область с углом $\pi\beta$, $\beta = 1.31$.

На фиг. 2 дана картина образа такой сетки, а размеры области $\mathbb{Z}$ были выбраны следующими: $h_0 = 1$, $H = 1$, $\beta = 1.7563918$, $L_4 = 4$, $L_5 = 6$. Вычисление прообразов ζ_k и множителя $\mathcal{H}$ дало следующее:

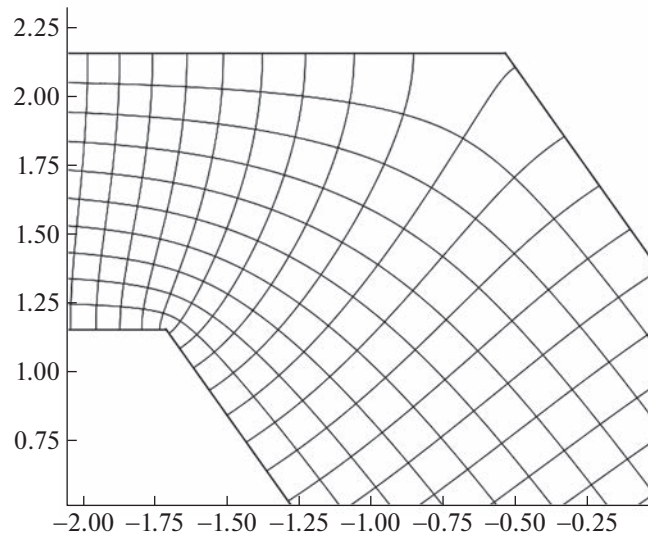
$$\begin{aligned}\zeta_6 &= -1.2456995997 \times 10^{-3}, & \zeta_8 &= 5.4153955997 \times 10^{-9}, \\ \zeta_1 &= 1.2456991666 \times 10^{-3}, & \mathcal{H} &= 4325.5014456.\end{aligned}$$

Полученная длина L_0 прямоугольника Π при этом составила $L_0 = 12.9999758184$.

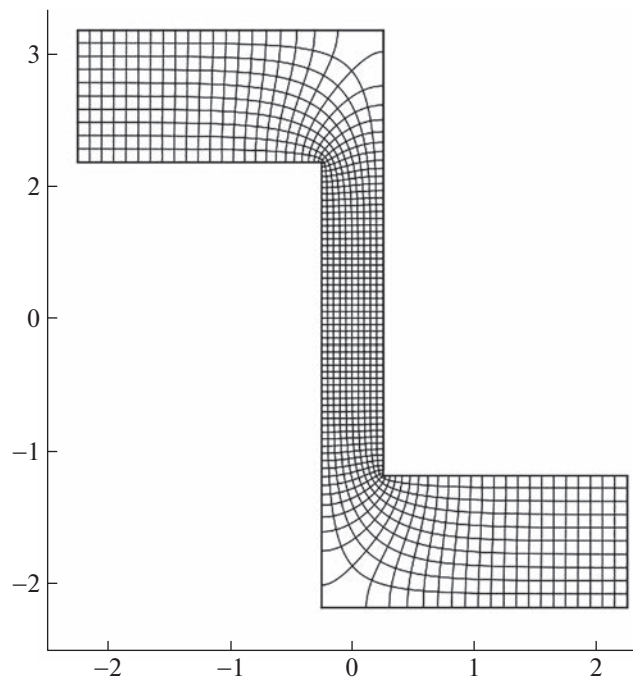
На фиг. 3 представлена эта же сетка с увеличением вблизи вершины z_1 входящего угла.

На фиг. 4 дана картина образа сетки прямоугольника Π , а параметры области $\mathbb{Z}$ были следующие: $h_0 = 1$, $H = 1.5355832266$, $\beta = 1.31$, $L_4 = 3$, $L_5 = 4$. Вычисленные параметры ИКШ таковы:

$$\begin{aligned}\zeta_6 &= -3.0747586008 \times 10^{-2}, & \zeta_8 &= 1.5469999867 \times 10^{-6}, \\ \zeta_1 &= 7.7052145553 \times 10^{-3}, & \mathcal{H} &= 255.93039745.\end{aligned}$$



Фиг. 5. Отображение на $\mathbb{Z}$ -образную область при $\beta = 1.31$ вблизи z_1 .



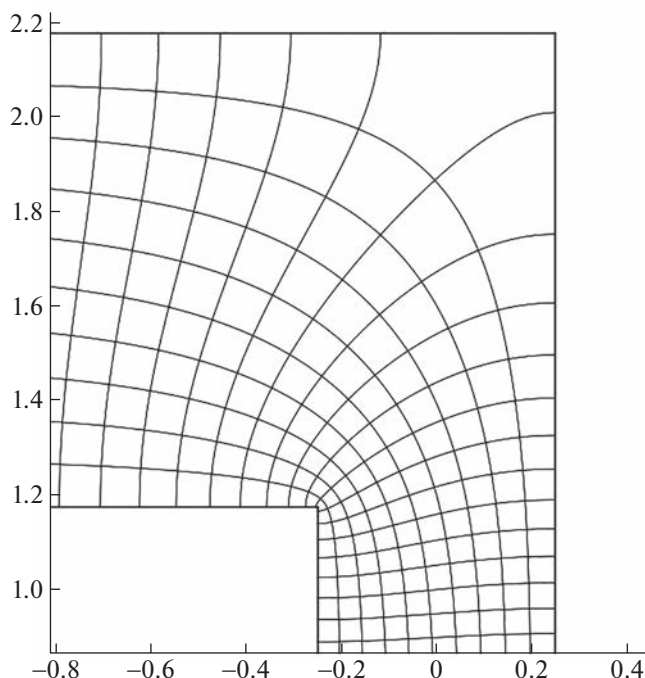
Фиг. 6. Отображение на $\mathbb{Z}$ -образную область с углом $\pi\beta$, $\beta = 1.5$.

Полученная длина L_0 прямоугольника Π составила $L_0 = 9.4000011995$.

На фиг. 5 представлена эта же сетка с увеличением вблизи вершины z_1 .

На фиг. 6 дан образ сетки прямоугольника, а размеры области $\mathbb{Z}$ были взяты следующими: $h_0 = 1$, $H = 0.5$, $\beta = 1.5$, $L_4 = 2$, $L_5 = 3.3564632240$. Найденные параметры ИКШ были следующими:

$$\begin{aligned}\zeta_6 &= -7.6003357522 \times 10^{-5}, & \zeta_8 &= 6.0280691010 \times 10^{-7}, \\ \zeta_1 &= 3.0551837893 \times 10^{-4}, & \mathcal{H} &= 410.99195216.\end{aligned}$$



Фиг. 7. Отображение на $\mathbb{Z}$ -образную область при $\beta = 1.5$ вблизи z_1 .

Полученная длина L_0 прямоугольника Π составила $L_0 = 10$.

На фиг. 7 показана эта же сетка с увеличением вблизи вершины z_1 .

Все представленные результаты дополнительно проверялись нахождением интеграла ИКШ по отрезкам $[\zeta_7, \zeta_8]$, $[\zeta_2, \zeta_3]$ и по дуге $\zeta = re^{i\varphi}$, $\varphi \in [0, \pi]$, соответствующей переходу со стороны (z_1, z_2) на сторону (z_5, z_6) . Эти интегралы находились аналогично описанным выше алгоритмам с введением соответствующих кластеров и построением быстросходящихся разложений. Сравнение полученных интегралов с длинами сторон $[z_7, z_8]$, $[z_2, z_3]$ и с толщиной H центральной части области $\mathbb{Z}$ показало требуемую относительную точность $\delta = 10^{-20}$.

Характерное время нахождения параметров ИКШ и построения показанных сеток на PC Intel Core i3 составило порядка 20 секунд.

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанный метод нахождения параметров ИКШ включает объединение определенных прообразов вершин ζ_k в кластер, выбор центра этого кластера, построение наиболее удобных быстросходящихся разложений соответствующих биномов в кластере и произведение таких разложений. Полученное представление позволяет свести интегрирование по отрезку $[\zeta_k, \zeta_{k+1}]$ к ряду по гипергеометрическим функциям Гаусса $F(a, b; c; q)$, для которых используются формулы аналитического продолжения в окрестность точки $q = 1$ и численно устойчивые трехчленные рекуррентные соотношения по параметрам a , b и c .

Построенные разложения оказываются также весьма эффективными при выборе начальных приближений прообразов $\zeta_k^{(0)}$ в итерационном методе Ньютона. Использование главных членов разложений позволяет выразить $\zeta_k^{(0)}$ в явном виде через элементарные функции, а последующие 6–11 итераций обеспечивают относительную точность параметров ИКШ до $\delta = 10^{-20}$.

Ситуация кроудинга прообразов, создающая для большинства численных методов значительные трудности, в разработанном подходе является наоборот благоприятствующей, поскольку

аналитическое продолжение функций $F(a, b; c; q)$ в окрестность точки $q = 1$ имеет разложение по степеням $(1 - q)^n$, что обеспечивает быструю сходимость представлений.

После нахождения параметров ИКШ искомое отображение $f(\zeta)$ полуплоскости $\mathbb{H}$ на исходную область $\mathbb{Z}$ строится в виде степенных разложений в прообразах ζ_k , регулярных разложений в точке $\zeta_0 = i$ (прообразе центра симметрии $\mathbb{Z}$), в виде ряда Лорана в полукольце $|\zeta| \in (\varepsilon_*, R_*)$ и в виде специальных рядов в окрестности некоторых отрезков $[\zeta_k, \zeta_{k+1}]$. Полученные разложения покрывают всю полуплоскость $\mathbb{H}$ и решают задачу эффективного построения отображения $f(\zeta)$.

Разработанный метод применен к построению отображения полуплоскости на область $\mathbb{Z}$, когда возникает кроудинг четырех прообразов вблизи точки $\zeta = 0$ и кроудинг четырех прообразов вблизи $\zeta = \infty$. Разработанный подход также эффективно работает в случае многоугольников с числом вершин, большим восьми, и с образованием более сложного кроудинга.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. Л.: Физматгиз, 1962.
2. Коппенфельс В., Штальман Ф. Практика конформных отображений. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
3. Gaier D. Konstruktive Methoden der konformen Abbildung. Springer Tracts in Natural Philosophy. V. 3. Berlin: Springer-Verlag, 1964.
4. Trefethen L.N. Numerical computation of the Schwarz–Christoffel transformation // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1980. V. 1. P. 82–102.
5. Trefethen L.N., Ed. Numerical Conformal Mapping, Amsterdam: North-Holland, 1986.
6. Driscoll T.A. A MATLAB toolbox for Schwarz–Christoffel mapping // ACM Trans. Math. Soft. 1996. V. 22. P. 168–186.
7. Henrici P. Applied and computational complex analysis. V. 3: N.-Y.—London, Sidney, Toronto: Jonh Willey & Sons, 1991.
8. Driscoll T.A., Trefethen L.N. Schwarz–Christoffel mapping, Vol. 8 of Cambridge Monographs on Applied and Comput. Math. Cambridge: Cambridge Univer. Press, 2002.
9. Trefethen L.N., Driscoll T.A. Schwarz–Christoffel transformation. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
10. Zemach C. A conformal map formula for difficult cases // J. Comput. Appl. Math. 1986. V. 14. P. 207–215.
11. Kriekes B.C., Rubin R.L. On the crowding of parameters associated with Schwarz–Christoffel transformation // Appl. Math. Comput. 1988. V. 28. № 4. P. 297–308.
12. Wegmann R. An estimate for crowding in conformal mapping to elongated regions // Complex Variables. 1992. V. 18. P. 193–199.
13. Безродных С.И., Власов В.И. Задача Римана–Гильберта в сложной области для модели магнитного пересоединения в плазме // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2002. Т. 42. № 3. С. 277–312.
14. Gautschi W. A Survey of Gauss–Christoffel quadrature formulae. Christoffel E.B. The Influence of His Work on Mathematics and the Physical Sciences, Ed. P.L. Butzer, F. Feher, Birkhauser Basel, Basel, 1981, 72–147.
15. Боголюбовский А.И., Скороходов С.Л. Разработка обобщенных квадратур Гаусса–Якоби с помощью методов компьютерной алгебры // Программирование. 2005. Т. 31. № 2. С. 72–80.
16. Hale N., Townsend A. Fast and accurate computation of Gauss–Legendre and Gauss–Jacobi quadrature nodes and weights // SIAM J. Sci. Comput. 2013. V. 35. № 2. P. A652–A674.
17. Gil A., Segura J., Temme N.M. Fast and reliable high-accuracy computation of Gauss–Jacobi quadrature // Numer. Algor. 2021. V. 87. P. 1391–1419.
<https://doi.org/10.1007/s11075-020-01012-6>
18. Wegmann R. Methods for numerical conformal mapping. — In: Handbook of Complex Analysis: Geometric Function Theory, V. 2. Ed. by R. Kühnau. Amsterdam: Elsevier, 2005, p. 351–477.
19. Paramichael N., Stylianopoulos N.S. Numerical conformal mapping: domain decomposition and the mapping of quadrilaterals. New Jersey—London—Singapore: World Scientific, 2010.
20. Безродных С.И. Функция Лауричеллы и конформное отображение многоугольников // Матем. заметки. 2022. Т. 112. Вып. 4. С. 500–520.
21. Безродных С.И. Гипергеометрическая функция Лауричеллы $F_D^{(N)}$ и некоторые приложения // Успехи матем. наук. 2018. Т. 73. Вып. 6 (444). С. 3–94.
22. Безродных С.И. Формулы для вычисления функции Лауричеллы в ситуации кроудинга переменных // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62. № 12. С. 2054–2076.

23. *Безродных С.И.* Формулы для вычисления интегралов типа Эйлера и их приложение к задаче построения конформного отображения многоугольников // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2023. Т. 63. № 11. С. 1763–1798.
24. *Власов В.И., Скороходов С.Л.* Конформное отображение L -образной области в аналитическом виде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62. № 12. С. 1943–1980.
25. *Бабакова О.И.* О кручении стержня с Z -образным сечением // Докл. АН УССР. 1954. № 5. С. 319–323 (на укр.).
26. *Власов В.И.* Краевые задачи в областях с криволинейной границей. М.: ВЦ АН СССР, 1987.
27. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра. М.: Наука, 1973.
28. *Gautschi W.* Computational aspects of three-term recurrence relations // SIAM Rev. 1967. V. 9. № 1. P. 24–82.
29. *Ортега Дж., Рейнболдт В.* Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975.
30. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1973.

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ
МЕТОДЫ

УДК 519.65

**STUDY OF THE GARDNER EQUATION WITH HOMOGENEOUS
BOUNDARY CONDITIONS VIA FOURTH ORDER MODIFIED
CUBIC B-SPLINE COLLOCATION METHOD¹⁾**

© 2023 г. S. Dahiya^{1,*}, A. Singh^{2,**}, S. P. Singh^{2,***}

¹*Department of Mathematics, Netaji Subhas University of Technology, Delhi-110078, India*

²*Department of Mathematics, Dayalbagh Educational Institute, Agra-282005, India*

**e-mail: sumita.dahiya@nsut.ac.in*

***e-mail: aditi.dei2014@gmail.com*

****e-mail: shail.dei@gmail.com*

Поступила в редакцию 09.01.2023 г.

Переработанный вариант 13.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Исследование уравнения Гарднера с однородными граничными условиями с помощью метода коллокаций с кубическими В-сплайнами для модифицированного уравнения четвертого порядка. Исследуется уравнение Гарднера, которое преобразуется в связанную систему нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, и для нахождения его численного решения применяется модифицированный метод коллокации кубических В-сплайнов. Дискретизация по времени и линеаризация уравнения Гарднера были выполнены с использованием метода Кранка–Николсона и соответствующей квазилинеаризации. Получена система линейных алгебраических уравнений, анализ которой по методу Неймана показал условную устойчивость. Численные исследования этого уравнения проведены в различных постановках, таких как распространение начального положительного импульса и волны с изломом, распространение и взаимодействие двух солитонов, образование волны из одного солитона, эволюция стоячих солитонов. Полученные результаты сравнены с имеющимися в литературе и наиболее достоверными. Вычисляются также интегралы в этой задаче, чтобы показать справедливость законов сохранения. Численные результаты демонстрируют высокую точность и обоснованность настоящего метода.

Ключевые слова: уравнение Гарднера, метод коллокации кубических В-сплайнов, метод Кранка–Николсона.

DOI: 10.31857/S0044466923120104, **EDN:** UQGPKW

¹⁾Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

ОПТИМАЛЬНОЕ
УПРАВЛЕНИЕ

УДК 619.852

**DENSITY FUNCTION-BASED TRUST REGION ALGORITHM
FOR APPROXIMATING PARETO FRONT OF BLACK-BOX
MULTIOBJECTIVE OPTIMIZATION PROBLEMS¹⁾**

© 2023 г. К. Н. Ju¹, Y. B. O¹, K. Rim^{1,*}

¹*Department of Mathematics, Kim Il Sung University, CITY, Democratic People's Republic of Korea*

**e-mail: math9@ryongnamsan.edu.kp*

Поступила в редакцию 28.04.2023 г.

Переработанный вариант 28.04.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Основанный на функции плотности алгоритм определения доверительной области для аппроксимации границы Парето задач многоцелевой оптимизации типа “черный ящик”. Рассматривается задача многоцелевой оптимизации типа “черный ящик”, целевые функции которой требуют больших вычислительных затрат. Предложен основанный на функции плотности алгоритм оценки доверительной области для аппроксимации границы Парето этой задачи. На последовательных итерациях определяется граница доверительной области, а затем в ней выбирается несколько точек выборки, в которых оцениваются значения целевой функции. Для получения в такой области решения без доминирования заданные целевые функции преобразуются в одну скалярную функцию. Затем строятся модели с квадратичным характером целевых функций. В текущей доверительной области находятся решения всех задач оптимизации с одной целевой функцией. Затем удаляются доминирующие точки из множества полученных решений. Для оценки распределения решений без доминирования вводится функция плотности, используя которую получены наиболее “изолированные” точки. Доказана сходимость предложенного алгоритма при некоторых допущениях. Численные результаты показывают, что, даже в случае задач оптимизации с тремя целями, точки, генерируемые предложенным алгоритмом, равномерно распределяются по границе Парето.

Ключевые слова: многообъектная оптимизация, метод доверительной области, функция типа “черный ящик”, наиболее изолированная точка.

DOI: 10.31857/S0044466923120189, **EDN:** AQCHNV

¹⁾ Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

ОБЫКНОВЕННЫЕ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

УДК 519.642

**A UNIFORMLY CONVERGENT NUMERICAL METHOD
FOR SINGULARLY PERTURBED SEMILINEAR INTEGRO-
DIFFERENTIAL EQUATIONS WITH TWO INTEGRAL
BOUNDARY CONDITIONS¹⁾**

© 2023 г. **B. Gunes^{1,*}, M. Cakir^{1,**}**

¹*Dept. of Math., Van Yuzuncu Yil University, Van, Turkey*

**e-mail: baranselgunes23@gmail.com*

***e-mail: cakirmusa@hotmail.com*

Поступила в редакцию 09.10.2022 г.

Переработанный вариант 17.06.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Равномерно сходящийся численный метод для решения сингулярно возмущенных полулинейных интегродифференциальных уравнений с двумя интегральными граничными условиями. Целью данной статьи является представление новой дискретной схемы для сингулярно возмущенной полулинейной системы. Интегродифференциальное уравнение Вольтерра—Фредгольма включает два интегральных граничных условия. Приведены некоторые основные аналитические свойства решения, а затем с помощью составных формул численного интегрирования построена неявная разностная схема на равномерной сетке. Дана оценка погрешности приближенного решения и приведены границы устойчивости в дискретной равномерной норме. Представлен численный пример, иллюстрирующий ϵ -равномерную сходимость предложенной разностной схемы.

Ключевые слова: дискретная схема, оценка погрешности, интегральные граничные условия, интегродифференциальное уравнение, сингулярное уравнение.

DOI: 10.31857/S004446692312013X, **EDN:** XENING

¹⁾Полный текст статьи публикуется в английской версии журнала.

ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

УДК 519.62

A NOVEL FITTED APPROACH FOR THE SOLUTION OF A CLASS OF SINGULARLY PERTURBED DIFFERENTIAL- DIFFERENCE EQUATIONS INVOLVING SMALL DELAY IN UNDIFFERENTIATED TERM¹⁾

© 2023 г. Javed Alam^{1,*}, Hari Shankar Prasad^{1,**}, Rakesh Ranjan^{1,***}

¹Department of Mathematics, National Institute of Jamsshedpur, Jharkhand-831014, India

*e-mail: mjalam1729@gmail.com

**e-mail: hspasad.math@nitjsr.ac.in

***e-mail: 90.ranjan@gmail.com

Поступила в редакцию 09.10.2021 г.

Переработанный вариант 15.08.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Новый адаптивный метод решения для класса сингулярно возмущенных дифференциально-разностных уравнений с малой сдвижкой в недифференциальном члене. Рассмотрен метод решения класса сингулярно возмущенных дифференциально-разностных уравнений с малой сдвижкой. С помощью разложения в ряд Тейлора задача сводится к эквивалентной версии исходной задачи, для которой затем предложена новая трехчленная конечно-разностная рекуррентная схема ее решения. Неоднородность решения преодолевается введением подходящего параметра настройки в полученной схеме. Итоговая система алгебраических уравнений решается с помощью дискретно-инвариантного алгоритма. Исследованы устойчивость и сходимость метода и дано приложение этого подхода к решению нескольких тестовых задач. Приведенные примеры показывают, что метод способен хорошо аппроксимировать решение со скоростью сходимости второго порядка.

Ключевые слова: дифференциально-разностные уравнения, сингулярно возмущенная задача, пограничный слой, устойчивость и сходимость, конечно-разностная схема.

DOI: 10.31857/S0044466923120037, EDN: ZNVVWU

¹⁾Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

УРАВНЕНИЯ
В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

УДК 517.95

STABILITY AND ERROR ESTIMATES OF HIGH ORDER
BDF-LDG-DISCRETIZATIONS FOR THE ALLEN–CAHN EQUATION¹⁾

© 2023 г. Fengna Yan^{1,*}, Ziqiang Cheng^{1,**}

¹ 230009 Hefei, 485 Danxia st., HFUT, P.R. China

*e-mail: fnyan@hfut.edu.cn,

**e-mail: czq10491@hfut.edu.cn

Поступила в редакцию 21.07.2023 г.

Переработанный вариант 21.07.2023 г.

Принята к публикации 22.08.2023 г.

Устойчивость и оценки погрешности метода Галеркина высокого порядка для уравнения Аллена–Кана. Исследовано применение метода Галеркина высокого порядка с локальными разрывами в сочетании с формулами дифференцирования против потока третьего и четвертого порядков для уравнения Аллена–Кана. Численная дискретизация обеспечивает преимущества линейности и высокой точности как по пространству, так и по времени. Проанализированы оценки устойчивости и погрешности дискретизации по времени третьего порядка и четвертого порядка в приложении к численному решению уравнения Аллена–Кана. Теоретический анализ показывает устойчивость и оптимальные результаты погрешности этих численных дискретизаций в том смысле, что шаг по времени должен быть положительным и при этом он не зависит от шага сетки. Ряд численных примеров показал справедливость проведенного анализа. Сравнение с численной дискретизацией первого порядка показывает, что предложенная дискретизация высокого порядка имеет высокую эффективность при решении жестких задач.

Ключевые слова: метод Галеркина высокого порядка с локальными разрывами, дифференцирование против потока, уравнение Аллена–Кана, устойчивость.

DOI: 10.31857/S004446692312030X, **EDN:** BUQRTY

¹⁾ Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

УРАВНЕНИЯ
В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

УДК 517.93

**MULTIPOLE REPRESENTATION OF THE GRAVITATIONAL FIELD
FOR ASTEROID (16) PSYCHE¹⁾**

© 2023 г. V. I. Nikonov^{1,2,*}

¹ 119333 Russia, Moscow, Vavilova st., 44/2, Federal Research Center “Computer Science and Control”
of the Russian Academy of Sciences

² 119991 Russia, Moscow, Leninskie Gory st., 1, Moscow Center of Fundamental and Applied Mathematics,
Lomonosov Moscow State University

*e-mail: nikon_v@list.ru

Поступила в редакцию 08.07.2023 г.
Переработанный вариант 26.07.2023 г.
Принята к публикации 22.08.2023 г.

Мультипольное представление гравитационного поля астероида (16) Психея. На примере астероида (16) Психея демонстрируется подход к вычислению мультипольных приближений потенциала притяжения малых небесных тел с нерегулярным распределением масс.

Ключевые слова: приближение поля притяжения, астероиды, максвеллово представление сферической функции, мультиполь.

DOI: 10.31857/S0044466923120219, **EDN:** JKPIQQ

¹⁾ Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.