

На правах рукописи

Быковских Дмитрий Александрович

**Моделирование течения газа Кнудсена в трехмерной области  
методом Монте-Карло**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Сургут — 2020

Работа выполнена в Бюджетном учреждении высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа – Югры «Сургутский государственный университет»

**Научный руководитель:**

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

**Официальные оппоненты:**

д.ф.-м.н., профессор **Владимир Владимирович Аристов**, главный научный сотрудник Вычислительного центра им. А. А. Дородницына, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (г. Москва)

д.ф.-м.н., профессор **Кошечев Владимир Петрович**, профессор кафедры «Прикладная математика», Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» (г. Москва)

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (г. Москва)

Защита состоится «26» марта 2020 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д002.024.03, созданного на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им. М.В. Келдыша РАН <https://keldysh.ru/council/3/D00202403/defence2.htm>

Автореферат разослан «\_\_» февраля 2020 г.

Учёный секретарь диссертационного совета Д002.024.03, к.ф.-м.н.

М.А. Корнилина

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность.** С развитием высокопроизводительных вычислительных систем появился новый способ исследования фундаментальных и прикладных задач газовой динамики – численное моделирование. Прогресс в разработке численных методов позволил существенно расширить круг задач, доступных анализу. Благодаря методу Монте-Карло появился новый способ исследования явлений или процессов посредством моделирования траекторий частиц различной природы: нейтроны, фотоны, фононы и др.

Исследование поведения частиц, которые не взаимодействуют друг с другом, но взаимодействуют с подвижными границами, является актуальной задачей, которая может быть связана с управлением различными высокотехнологичными процессами. Полученные при моделировании результаты используются в различных областях науки и отраслях промышленности, например, в промышленных процессах, где требуется высокий вакуум, таких, как перегонка или движение объектов на больших высотах, где важно понимать механику движения разреженного газа в областях с низкой плотностью (свободно-молекулярный режим). Другим примером может служить задача управления течением тепловых нейтронов в различных средах (рассеивание тепла), которая актуальна в атомной энергетике, и может быть рассмотрена как процесс фильтрации газа в пористой среде. И наконец, к такой задаче можно отнести исследование особых зон с высокой плотностью бесстолкновительного газа, спецификой которого является наличие управляющего воздействия на структуру течения за счет пространственно-временного изменения границ областей.

Повышенный интерес к моделированию течений разреженного газа методом Монте-Карло связан с эффективным использованием современных высокопроизводительных вычислительных систем, поскольку разработанные алгоритмы и программы, использующие методы Монте-Карло, обладают высоким уровнем параллелизма. При этом необходимо верифицировать комплекс программ на задачах, имеющих точные решения, во избежание получения неправильных результатов численного решения задач газовой динамики.

Существуют точные решения уравнения Больцмана, которые обращают интеграл столкновения в нуль и описывают течение газа Кнудсена с наличием границ, для сравнительно простых случаев: течение газа с границами, не нарушающего максвелловского распределения; течение Куэтта; течение Пуазейля и др. В работе исследуется задача об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в замкнутой области с подвижной границей. Такая задача относится к исследованию явления параметрической неустойчивости, при котором нарастание энергии возмущения сопровождается непрерывным сжатием газа с течением времени в пространстве. Эта

параметрическая неустойчивость может рассматриваться как распространение бегущих волн в изменяющейся во времени области.

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

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

#### **Задачи работы:**

1. Разработать метод и алгоритмы расчета движения кнудсеновского газа в трехмерной изменяющейся во времени области.
2. Разработать тестовые задачи с подвижными границами для верификации комплекса проблемно-ориентированных программ.
3. Разработать, отладить и протестировать комплекс проблемно-ориентированных программ для численного решения задач кинетики идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве, позволяющий визуализировать динамику процессов.
4. Выполнить распараллеливание и оптимизацию программного кода для проведения расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах.
5. Провести вычислительные эксперименты по исследованию задачи фильтрации идеального бесстолкновительного газа в пористой среде.
6. Осуществить анализ полученных результатов расчета.

#### **Научная новизна:**

1. Впервые найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей.
2. Разработан бессеточный метод Монте-Карло, позволяющий моделировать течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами, основанный на методах прямого моделирования и динамики молекул.

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

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

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

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

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

**Положения, выносимые на защиту:**

1. Найден класс точных решений для модели адиабатического сжатия кнудсеновского газа в трехмерной области с подвижной границей.
2. Разработан бессеточный метод Монте-Карло, предназначенный для моделирования нестационарного течения газа Кнудсена в трехмерной области с подвижными границами. Выполнено сравнение численных решений, полученных с помощью разработанного метода, с найденными точными решениями.
3. Разработан и реализован комплекс программ, позволяющий моделировать течение идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве с применением технологий параллельных вычислений. Выполнена верификация разработанного комплекса программ на задачах газовой

динамики, имеющих аналитические решения. Эффективность комплекса программ подтверждена численными экспериментами.

4. Получены результаты численного исследования задачи фильтрации кнудсеновского газа в пористой среде. Построена зависимость коэффициента фильтрации от размеров ячеек пористой среды. Установлена линейная зависимость между скоростью течения и скоростью фильтрации для идеального бесстолкновительного газа.

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

**Апробация результатов.** Основные результаты работы были представлены на: Всероссийских научно-практических конференциях «Север России: стратегии и перспективы развития» (Сургут, 2015, 2016); Международных конференциях «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященных дню рождения великого русского математика академика П.Л. Чебышева (Сургут, 2016, 2019); Всероссийской конференции молодых ученых «Наука и инновации XXI века» (Сургут, 2016); Всероссийских конференциях «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики», посвященных памяти К.И. Бабенко (Абрау-Дюрсо, Новороссийск, 2016, 2018); Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2018); Международной научной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (Академгородок, Новосибирск, 2019).

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 17 научных работах [1–17], из них: 4 статьи изданы в журналах, рекомендованных ВАК для публикации научных результатов [1–4]; 2 публикации в сборниках научных статей [5; 6]; 9 публикаций представлены в сборниках трудов и тезисах докладов конференций [7–15]; 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [16; 17].

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

**Личный вклад** автора заключается в разработке алгоритмов и их реализации в виде комплекса проблемно-ориентированных программ, включая отладку и тестирование, и проведении вычислительных экспериментов. Автор самостоятельно отыскал класс точных решений задачи об адиабатическом сжатии газа Кнудсена в трехмерной области с подвижной границей. В

совместных исследованиях автор принимал участие во всех этапах работы: в постановках задач, в выборе и формулировке математической модели, в создании численного метода и анализе полученных результатов. В совместных работах научному руководителю д.ф.-м.н. В.А. Галкину принадлежит первоначальная постановка задач, определение направлений исследований и интерпретация полученных результатов, выбор тестовых задач для верификации комплекса программ.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и двух приложений. Объём диссертации составляет 100 страниц, включая 26 рисунков и 16 таблиц. Список литературы содержит 126 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** сформулированы цели и задачи; изложена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы; описаны методы исследований; обосновано соответствие диссертации паспорту научной специальности 05.13.18; отражен личный вклад автора.

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

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

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0,$$

где  $f$  – функция распределения;  $v$  – скорость молекул;  $x$  – координаты местоположения молекул;  $t$  – время.

**В пункте 2.1.1** определена одночастичная функция распределения, показана ее связь с макроскопическими величинами. **В пункте 2.1.2** рассматриваются граничные условия. Граница состоит из конечного объединения  $C^1$ -гладких поверхностей  $\partial G_j(x,t)$ , где  $j = \overline{1, M}$ . В работе рассмотрено зеркальное упругое отражение частиц газа от абсолютно гладкой поверхности (рис. 1). Масса

границы условно много больше массы частицы. В этом случае модель взаимодействия газа с движущейся поверхностью имеет следующий вид:

$$f(x, v, t) = f(x, v - 2n(v - u, n), t),$$

где  $n$  – единичный вектор нормали к поверхности в точке  $x \in \partial G(x, t)$  в момент времени  $t$ ;  $u$  – скорость подвижной границы.

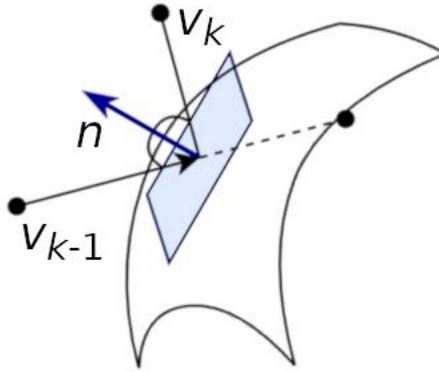


Рис. 1. Схема взаимодействия частицы с границей по закону зеркального отражения:  $v_{k-1}$  – скорость частицы до столкновения;  $v_k$  – скорость частицы после  $k$ -го столкновения с границей;  $n$  – единичная нормаль к поверхности границы в точке столкновения частицы с границей

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

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

$$v_k^{(i+1)} = \begin{cases} v^{(i)}, & k = 0 \\ v_{k-1}^{(i+1)} - 2n_{j(k)}(v_{k-1}^{(i+1)} - u_{j(k)}, n_{j(k)}), & k = \overline{1, K} \end{cases},$$

где  $v_k$  – скорость частицы после  $k$ -го взаимодействия с границей;  $\sum_{k=0}^K (t_{k+1} - t_k) = \sum_{k=0}^K \Delta t_k = \Delta t$  – временной шаг;  $K$  – число столкновений частицы с границами;  $u_{j(k)}$  – скорость  $j$ -й границы в момент времени  $t_k$  на  $(i + 1)$ -ом шаге;  $n_{j(k)}$  – нормаль к поверхности  $j$ -й границы в точке столкновения в момент времени  $t_k$  на  $(i + 1)$ -м шаге.

Граница определяется поверхностью 2-го порядка в трехмерном пространстве:

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

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

При подстановке уравнения траектории движения частицы в уравнение поверхности и переходе в систему координат, где граница становится неподвижной, получается квадратное уравнение относительно  $t$ .

**В пункте 2.2.2** вводятся статистические оценки макроскопических величин, значения которых вычисляются с помощью локальных параметров частиц, принадлежащих элементарной области (рис. 2), по следующим формулам:

$$\hat{\rho}(x, t) = \frac{1}{NV} \sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N m_j,$$

$$\hat{v}(x, t) \cong \begin{cases} 1/(\hat{\rho}NV) \sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N v_j m_j, & \hat{\rho} > 0 \\ 0, & \hat{\rho} = 0 \end{cases},$$

$$\hat{e}(x, t) = \frac{1}{2(N-1)} \sum_{k=1}^3 \left[ \sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N (v_j^k)^2 - \frac{1}{N} \left( \sum_{j: x_j \in D(x, h)}^N v_j^k \right)^2 \right],$$

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

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

где  $V$  – объем элементарной области;  $D(x, h)$  – элементарная область;  $m_j$  – масса  $j$ -й частицы;  $v_j$  – скорость  $j$ -й частицы;  $R$  – газовая постоянная.

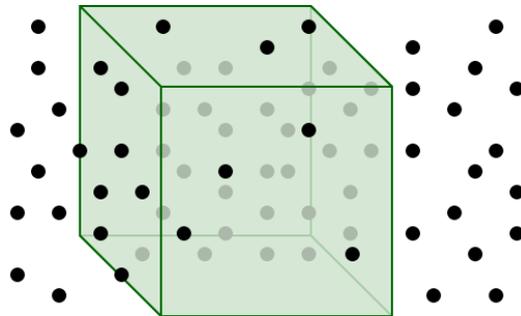


Рис. 2. Схема расположения частиц и элементарной области

В конце главы (**пункт 2.2.3**) рассмотрены способы оценки погрешностей полученных результатов.

**Третья глава** посвящена разработанному проблемно-ориентированному комплексу программ. **В параграфе 3.1** приведена схема работы комплекса программ (рис. 3), включая подробное описание каждого этапа. Такая реализация

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

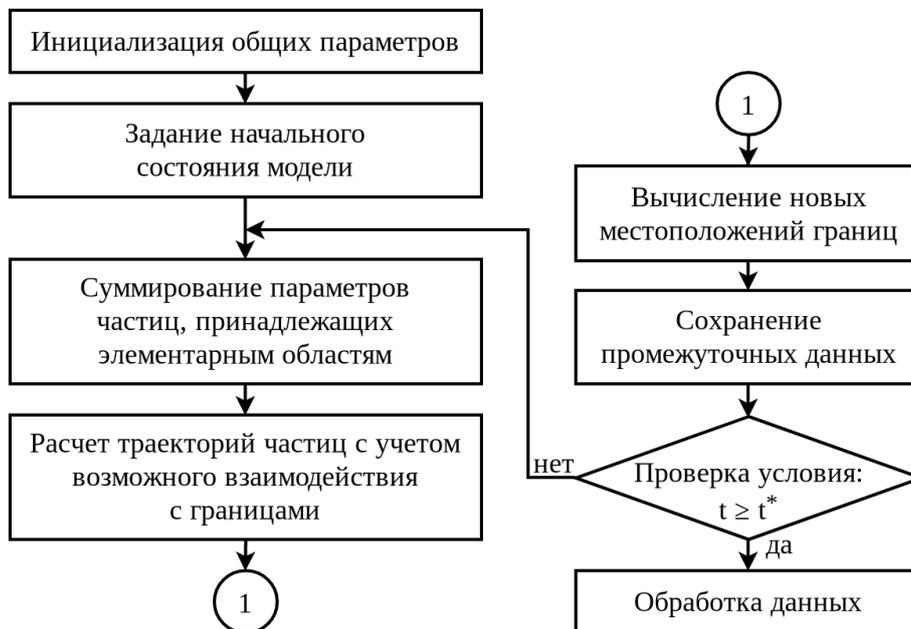


Рис. 3. Общая схема работы комплекса программ



Рис. 4. Схема расчета траектории движения частиц с учетом их возможного взаимодействия с подвижными границами

Описаны методы оптимизации программного кода, позволяющие эффективно задействовать вычислительные ресурсы центрального процессора, такие как декомпозиция данных; векторизация вычислений, связанная прежде всего с расчетом траекторий движения частиц с учетом возможного взаимодействия с подвижными границами (рис. 4); быстрое извлечение обратного корня, используемое при нормализации векторов, и другие.

В параграфе 3.2 рассматривается тестовая задача о моделировании движения встречных пучков газа, для которой существует аналитическое решение. В пункте 3.2.1 представлено описание математической модели, аналитическое решение и постановка вычислительной задачи. В пункте 3.2.2 представлены результаты тестирования комплекса программ. Выполнена оценка погрешностей статистических оценок макроскопических величин при различном числе частиц  $N$  в вычислительном эксперименте и количестве испытаний  $n$ . На рис. 5 и 6 представлено сравнение результатов численного моделирования с аналитическим решением. Их анализ показывает, что с увеличением числа частиц приближенное решение  $F_{num}$  стремится к аналитическому  $F_{an}$ . Это справедливо как при увеличении числа частиц в эксперименте  $N$ , так и при увеличении числа испытаний  $n$  с последующим усреднением величин  $\bar{F}$ .

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

Табл. 1. Оценка максимальной абсолютной погрешности  $\Delta_F$  статистических оценок макроскопических величин при различном числе частиц  $N$  и испытаний  $n$

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

Табл. 2. Оценка максимальной величины  $\sigma_F$  при различном числе частиц  $N$  и испытаний  $n$

$N$	$n$	$\sigma_v$	$\sigma_p$	$\sigma_T$	$\sigma_p$
$10^5$	$10^2$	$1.15 \cdot 10^{-3}$	$1.45 \cdot 10^{-4}$	$7.94 \cdot 10^{-7}$	$4.83 \cdot 10^{-5}$
$10^5$	$10^4$	$1.01 \cdot 10^{-4}$	$1.28 \cdot 10^{-5}$	$5.71 \cdot 10^{-8}$	$4.27 \cdot 10^{-6}$
$10^7$	$10^2$	$1.02 \cdot 10^{-4}$	$1.49 \cdot 10^{-5}$	$5.53 \cdot 10^{-9}$	$4.98 \cdot 10^{-6}$

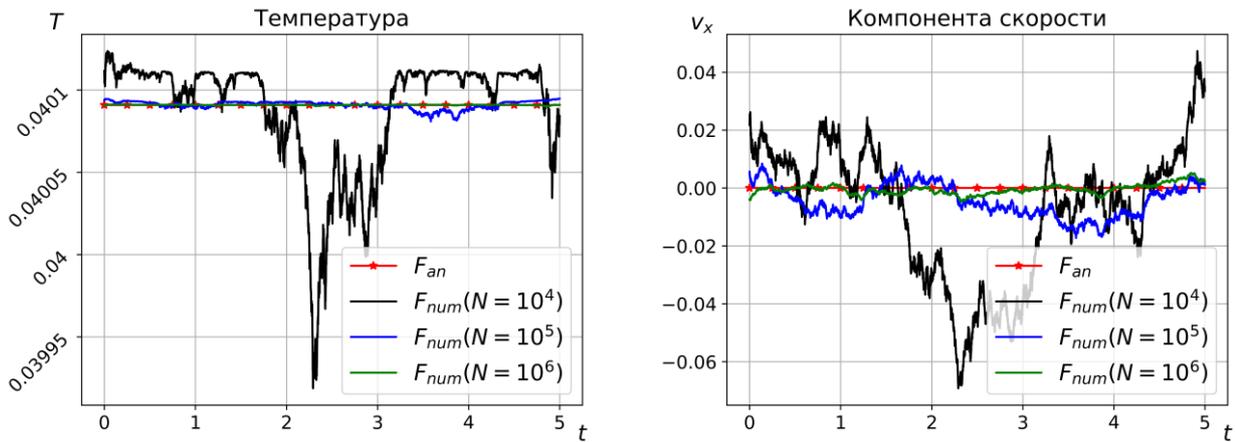


Рис. 5. Графики изменения аналитического решения  $F_{an}$  и статистических оценок макроскопических параметров  $F_{num}$  при различном числе частиц в эксперименте  $N$  в зависимости от времени  $t$

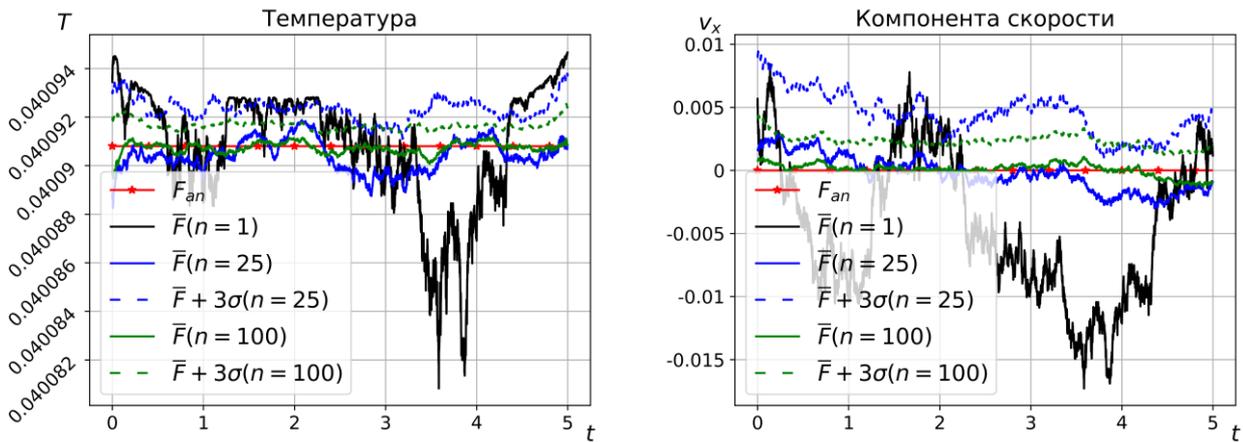


Рис. 6. Графики изменения аналитического решения  $F_{an}$ , статистических оценок макроскопических параметров  $\bar{F}$  и верхней границы доверительного интервала  $\bar{F} + 3\sigma$  (правило трех сигм) при  $N = 10^5$ , различном числе испытаний  $n$  в зависимости от времени  $t$

Для тестовой задачи достигнута производительность, равная 49% от пиковой на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 (240 GFlops DP для 10 ядер).

**Четвертая глава** посвящена адиабатическому сжатию газа Кнудсена в одномерной и трехмерной замкнутых областях. В параграфе 4.1 исследуется модель адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа в одномерном пространстве. В пункте 4.1.1 представлена постановка вычислительной задачи. При  $t = 0$  на интервале  $(a_0, b_0)$  равномерно распределены частицы с плотностью  $\rho_0 = 1$ . Скорость каждой частицы  $|v_0| = 1$ , а направление определяется случайным образом с равномерным распределением. Правая граница неподвижна  $b = b_0$ , а левая граница движется со

скоростью  $u \in (0, v_0]$ . Местоположение левой границы определяется как  $a(t) = a_0 + ut$ .

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

При  $t=0$  первая группа частиц имеет скорость  $v_1 = v_0$  и функцию распределения  $f_1$ , а вторая – скорость  $v_2 = -v_0$  и функцию распределения  $f_2$ :

$$f_1(x, 0) = f_2(x, 0) = \frac{0.5}{b - a(0)} I_{(a(0), b)}(x),$$

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

Скорость и функция распределения для  $i$ -й группы частиц имеют вид:

$$v_i = \begin{cases} -v_{i-1}, & i - \text{четный} \\ -v_{i-1} + 2u, & i - \text{нечетный} \end{cases},$$

$$f_i(x, t) = -\frac{0.5}{b - a(t)} Q_i(x, t),$$

где  $Q_i(x, t) = \left[ I_{(t_i, \tilde{t}_{i-1})}(t) \cdot I_{(a(t), b)}(x) + \right. \\ \left. + I_{(t_{i-1}, t_i)}(t) \cdot \left[ I_{(a(t), a(t_{i-1}) + v_i(t - t_{i-1}))}(x) \cdot (i \bmod 2) + I_{(b + v_i(t - t_{i-1}), b)}(x) \cdot ((i + 1) \bmod 2) \right] + \right. \\ \left. + I_{(\tilde{t}_{i-1}, \tilde{t}_i)}(t) \cdot \left[ I_{(a(\tilde{t}_{i-1}) + v_i(t - \tilde{t}_{i-1}), b)}(x) \cdot (i \bmod 2) + I_{(a(t), b + v_i(t - \tilde{t}_{i-1}))}(x) \cdot ((i + 1) \bmod 2) \right] \right];$

$t_i$  и  $\tilde{t}_i$  – моменты времени возникновения первой и исчезновения последней частиц в  $i$ -й группе соответственно.

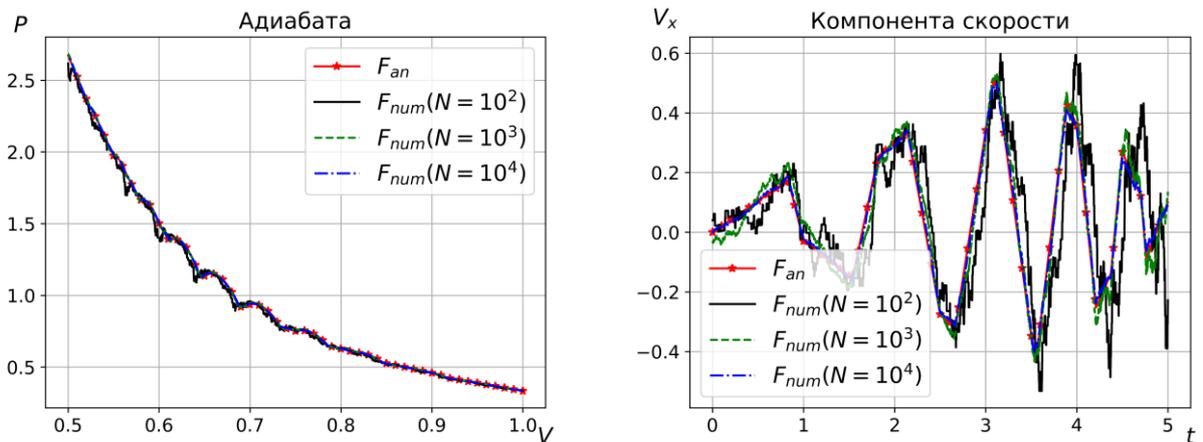


Рис. 7. Графики изменения аналитического решения  $F_{an}$  и статистических оценок макроскопических параметров  $F_{num}$  при различном числе частиц в эксперименте  $N$  в зависимости от времени  $t$  при  $u = 0.1$

**В пункте 4.1.3** представлены результаты моделирования с использованием разработанного комплекса программ. Проведены серии вычислительных экспериментов при различном числе частиц  $N$  и скоростях границы  $u$ . Выполнено качественное и количественное сравнение точного решения с численными результатами (рис. 7). Из графиков видно, что с увеличением числа частиц в эксперименте приближенное решение стремится к точному.

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

**В пункте 4.2.2** описано построение класса точных решений. Функция распределения имеет вид:

$$f(x, v, t) = f_x(x, t) \cdot f_v(v, t) = \frac{1}{V(t)} Q_j(x_1, t) \prod_{i=2}^3 I_{(a_i, b_i)}(x_i) \cdot f_v(v_1 | v_2, v_3, t) \int_{R_1} f_v(v, t) dv_1,$$

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

$V(t) = l_1(t) \prod_{i=2}^3 (b_i - a_i)$  – объем замкнутой области;  $l_1(t) = b_1 - (a_1 + u_1 t)$ ;  $j$  – номер группы.

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

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= f_x(x, t) \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i, \\ \bar{v}_i(x, t) &= \int_{R_1} v_i f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i / f_x(x, t) \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i, \\ e(x, t) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[ \int_{R_1} (v_i - \bar{v}_i(x, t))^2 f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i / \int_{R_1} f_v(v_i | v_j, v_k, t) dv_i \right]. \end{aligned}$$

**В пункте 4.2.3** представлены результаты вычислительных экспериментов при различном числе частиц  $N$  и скоростях границы  $u$ . Выполнено качественное и количественное сравнение точного решения с численными результатами. Рис. 8 иллюстрирует графики изменений компоненты скорости вдоль оси  $x$  с течением времени и адиабаты в зависимости от объема при  $u = 0.1$ .

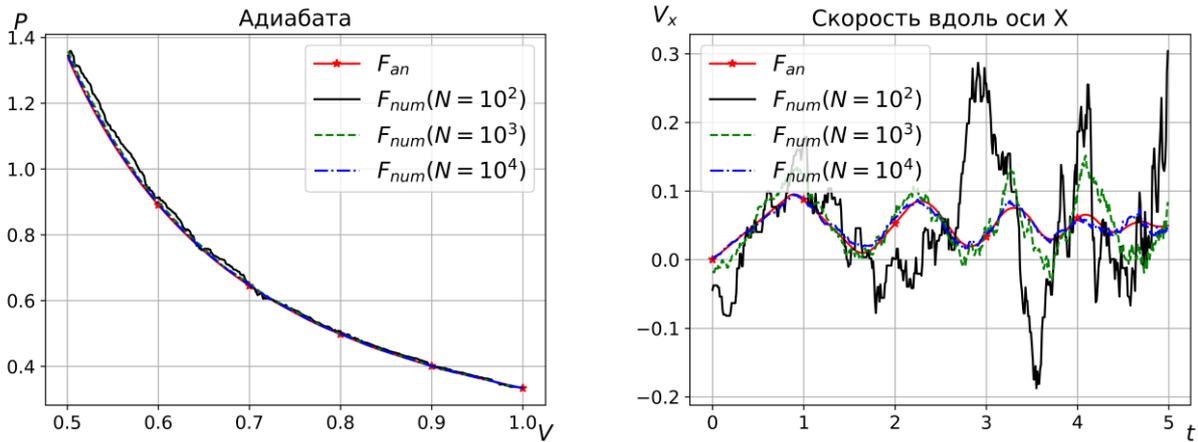


Рис. 8. Графики изменения аналитического решения  $F_{an}$  и статистических оценок макроскопических параметров  $F_{num}$  при различном числе частиц в эксперименте  $N$  в зависимости от времени  $t$  при  $u = 0.1$

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

Табл. 3. Оценка максимальных абсолютной и относительной погрешностей при  $u = 0.1$  и различном числе частиц  $N$

$N$	$\Delta_v$	$\Delta_T$	$\Delta_p$	$\delta_v$	$\delta_T$	$\delta_p$
$10^4$	$1.85 \cdot 10^{-2}$	$4.05 \cdot 10^{-4}$	$6.70 \cdot 10^{-3}$	$1.18 \cdot 10^2$	$5.07 \cdot 10^{-1}$	$5.07 \cdot 10^{-1}$
$10^6$	$2.07 \cdot 10^{-3}$	$2.26 \cdot 10^{-5}$	$3.65 \cdot 10^{-4}$	$2.67 \cdot 10^1$	$2.93 \cdot 10^{-2}$	$2.93 \cdot 10^{-2}$
$10^8$	$2.79 \cdot 10^{-4}$	$3.86 \cdot 10^{-6}$	$6.29 \cdot 10^{-5}$	$7.90 \cdot 10^{-1}$	$4.92 \cdot 10^{-3}$	$4.92 \cdot 10^{-3}$

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

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

**В параграфе 5.1** описывается математическая модель фильтрации газа, состоящего из закона Дарси, соотношения Клапейрона-Менделеева и уравнения неразрывности:

$$\begin{cases} u = -\frac{k}{\mu} \nabla p \\ p = \rho RT \\ \frac{\partial p}{\partial x} + \nabla(pu) = 0 \end{cases},$$

где  $k$  – проницаемость среды;  $\mu$  – динамическая вязкость среды.

В одномерном случае при условии, что течение стационарно, получена расчетная формула фильтрации идеального газа в пористой среде:

$$u_{j,i} = -\frac{k}{\mu} \frac{p_j^2 - p_i^2}{2p_j L},$$

где  $j$  и  $i$  – номера элементарных областей;  $L$  – длина фильтрующей части пористой среды (расстояние между элементарными областями).

В параграфе 5.2 представлена постановка вычислительной задачи, описаны 3 конфигурации пористой среды. Параграф 5.3 посвящен численным экспериментам по исследованию зависимости скорости течения и скорости фильтрации газа Кнудсена для трех конфигураций пористой среды. На рис. 9 представлена визуализация течения газа для 3-й конфигурации пористой среды. Желтым цветом выделены частицы газа, красным – пористая среда, зеленым – границы элементарных областей. Течение газа направлено слева направо.

$t = 0006.0$

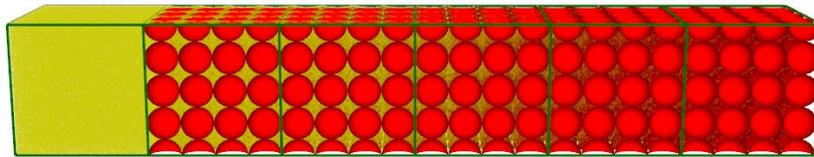


Рис. 9. Течение газа для 3-й конфигураций пористой среды при  $t = 6.0$ ,  $N = 10^8$

В рамках вычислительного эксперимента решалась обратная задача о нахождении коэффициента  $k/\mu$ , связывающего скорость течения и скорость фильтрации газа, в зависимости от конфигурации пористой среды после выхода течения на квазистационарный режим. На рис. 10 представлены графики зависимости скорости течения  $v_j$  и скорости фильтрации  $u_{j,i}$  от времени при различных номерах  $j$  и  $i$  элементарных областей.

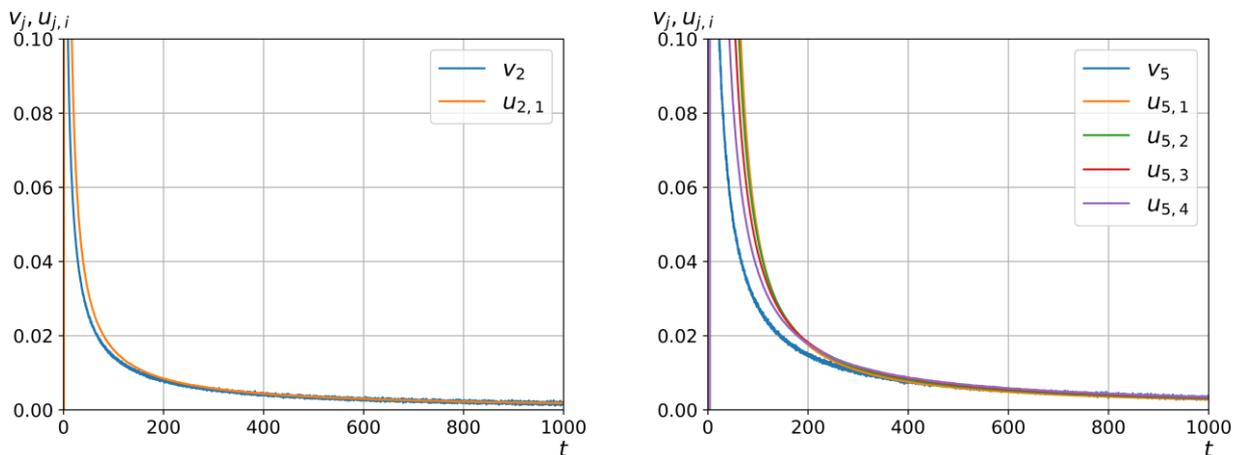


Рис. 10. Графики зависимости скорости течения  $v_j$  и скорости фильтрации  $u_{j,i}$  от времени  $t$  при  $N = 10^8$  для 3-й конфигурации

Выполнено качественное и количественное сравнение полученных результатов, включая оценку погрешностей статистических оценок макроскопических величин. Установлена линейная зависимость коэффициента фильтрации от размеров ячеек пористой среды, в узлах которой расположены сферы. Для идеального газа, у которого отсутствует внутреннее трение, коэффициент фильтрации зависит от структуры пористой среды. Выполнен расчет оценки производительности созданного комплекса программ при различном шаге по времени для трех конфигураций пористой среды.

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

### Список публикаций автора

1. Быковских Д.А., Галкин В.А. Моделирование и визуализация течения идеального газа в пористой среде методом Монте-Карло // Научная визуализация. 2019. Т. 11. № 3. С. 27 – 42. (перевод Bykovskih D.A., Galkin V.A. An ideal gas flow modeling and visualization in porous medium by Monte Carlo method // Scientific Visualization. 2019. V. 11. N. 3. P. 27 – 42.) **Scopus**.
2. Быковских Д.А., Галкин В.А. О вычислительном тесте для модели адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2019. № 1 (33). С. 15 – 23. **Перечень ВАК**.
3. Быковских Д.А., Галкин В.А. О вычислительном тесте для одной модели бесстолкновительного идеального газа // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2017. № 3 (27). С. 119 – 127. **Перечень ВАК**.
4. Галкин В.А., Гавриленко Т.В., Быковских Д.А. Управление динамикой невзаимодействующих частиц в плоской области // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2015. № 3 (19). С. 148 – 159. **Перечень ВАК**.
5. Галкин В.А., Быковских Д.А., Гавриленко Т.В., Стулов П.А. Фильтрационная модель движения идеального газа в пористой среде // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2016. № 4 (24). С. 50 – 57.
6. Галкин В.А., Быковских Д.А., Гавриленко Т.В., Дубовик А.О. Моделирование движения частиц газа в пористой среде при периодическом воздействии на границу среды // Вестник кибернетики. Электр. Журн. 2016. № 4(24). С. 58 – 65.
7. Быковских Д.А., Галкин В.А., Гавриленко Т.В. Моделирование движения невзаимодействующих частиц в пространстве // Северный регион: наука, образование, культура. Сургут: СурГУ, 2015. Т. 2. № 2 (32). С. 48 – 55.
8. Галкин В.А., Гавриленко Т.В., Быковских Д.А. О моделировании динамики невзаимодействующих частиц с переменной во времени геометрией // Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе: тез. докл. Междунар. конф. Сургут: ИЦ СурГУ, 2016. С. 131 – 132.

9. Быковских Д.А., Галкин В.А., Гавриленко Т.В. О моделировании идеального газа с переменной во времени геометрией // Север России: стратегии и перспективы развития: материалы II Всерос. науч.-практ. конф. Сургут: СурГУ, 2016. Т. 2. С. 19 – 24.
10. Галкин В.А., Гавриленко Т.В., Быковских Д.А. Об управлении поведением идеального газа с переменной во времени геометрией // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики: тез. докл. XXI Всерос. конф. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. С. 74 – 75.
11. Быковских Д.А. Модель фильтрации идеального газа в пористой среде // Наука и инновации XXI века: материалы III Всерос. конф. молодых ученых. Сургут: СурГУ, 2016. Т. 1. С. 22 – 26.
12. Быковских Д.А., Галкин В.А. Фильтрационная модель движения идеального газа в пористой среде // Супервычисления и математическое моделирование: тез. докл. XVII Международной конференции. Саров: ИПК ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2018. С. 36 – 37.
13. Быковских Д.А., Галкин В.А. Фильтрационная модель движения газа в пористой среде // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики: тез. докл. XXI Всерос. конф. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018. С. 24 – 25.
14. Быковских Д.А., Галкин В.А. Моделирование течения идеального бесстолкновительного газа в пористой среде методом Монте-Карло // Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе: труды Междунар. конф. Самара: ООО «Порто-принт», 2019. С. 185 – 188.
15. Быковских Д.А., Галкин В.А. О вычислительном тесте для модели адиабатического сжатия идеального бесстолкновительного газа // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики: тез. докл. междунар. конф. Новосибирск: ИПЦ НГУ. 2019. С. 43.
16. Быковских Д.А., Галкин В.А., Гавриленко Т.В. и др. MidgeS: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016617287; правообладатель БУ ВО ХМАО-Югры «Сургутский государственный университет». – Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 29.06.2016 г.
17. Быковских Д.А., Галкин В.А., Гавриленко Т.В. и др. MidgeS D3: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016617145; правообладатель БУ ВО ХМАО-Югры «Сургутский государственный университет». – Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 28.06.2016 г.