

Программный модуль для вычисления интеграла столкновений Больцмана для смеси газов

Додулад О.И.^{1,2}, Жотиков В.Г.¹, Квасов И.Е.¹, Клосс Ю.Ю.^{1,2}, Черемисин Ф.Г.^{1,3},

1 – Московский физико-технический институт

2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

3 – Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»

В работе [1] представлено описание программно-моделирующей системы, предназначенной для решения кинетического уравнения Больцмана для различных приложений в двумерной геометрии для оперативной оценки физических характеристик системы, в трехмерной геометрии с неструктурированными тетраэдрическими сетками для моделирования сложных систем произвольной геометрии. Система позволяет эффективно использовать кластерные вычислительные системы на основе технологии MPI и графические процессоры на основе технологии CUDA. Программно-моделирующая система базируется на консервативном методе дискретных ординат точного решения кинетического уравнения Больцмана [2]. В таком подходе общим для различных решателей переноса вещества является программный модуль, связанный с вычислением интеграла столкновений. В данной работе приводятся основные методы и алгоритмы вычисления интеграла столкновений, особенности их программной реализации и технологии тестирования корректности моделирующей системы.

Расщепление численной схемы решения уравнения Больцмана позволяет отделить часть ответственную за интеграл столкновений в отдельный модуль. Схема модуля интеграла столкновений и его взаимосвязей показана рис. 1.

Ключевой деятельностью модуля является построение интегрирующей сетки. Основой является цикл по набору параметров сталкивающихся молекул. Данный набор получается из 8-ми мерной сетки Коробова [3]. Для нахождения импульсов после столкновения необходимо знать о потенциале взаимодействия сталкивающихся молекул. За разрешение данной зависимости отвечает модуль решения систем дифференциальных уравнений. Выбор аппроксимационных импульсов на сетке осуществляется перебором, так чтобы сумма расстояний до истинных импульсов после столкновения умноженных на соответствующий коэффициент вкладов была минимальной. Получив расчетную сетку, производится вычисление функции распределения на следующем шаге согласно схеме ``непрерывного счета''. Для ускорения вычисления степенной аппроксимации функции распределения используются инструкции SSE и SSE2 (Streaming SIMD Extensions).

Тестирование модуля проводилось на задачах медленных течений: обеспечение верных коэффициентов теплопроводности и вязкости моделируемых газов в приближении сплошной среды, — и сверхзвуковых: получение структуры плоской ударной волны.

Рассмотренный модуль расчета интеграла столкновений успешно применяется для

моделирования широкого класса задач динамики разреженных газов [4, 5, 6].

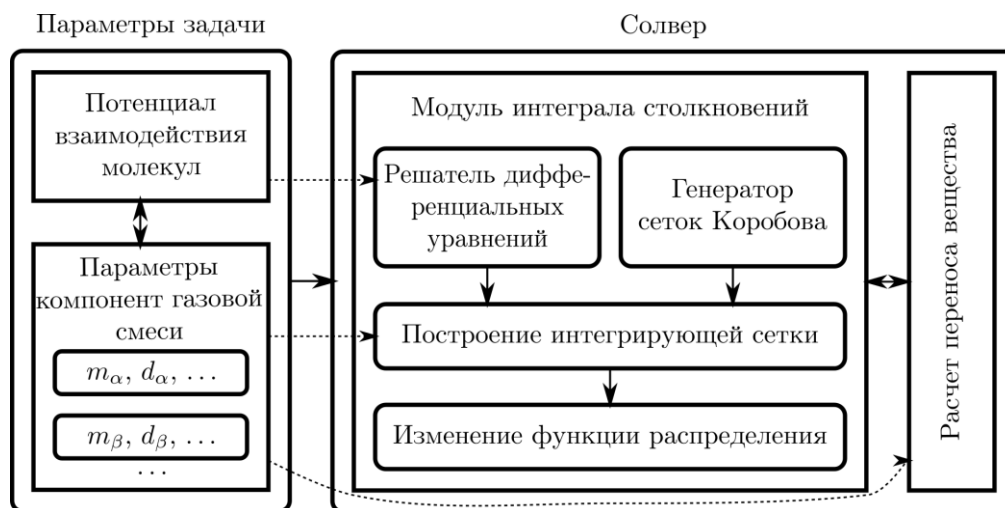


Рис. 1. Модуль интеграла столкновений и его взаимосвязи.

Литература:

1. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Rogozin О.А., Рябченков В.В., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В. Проблемно-моделирующая среда для расчета и анализа газокинетических процессов // Нано- и микросистемная техника. 2011. №2, С. 12–17.
2. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. Т. 357, № 1. С. 53–56 .
3. Коробов Н. М. Теоретикочисловые методы в приближенном анализе. М.: Физматгиз, 1963.
4. Аникин Ю.А., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г. Компьютерное моделирование и анализ эксперимента Кнудсена 1910 года // Нано- и микросистемная техника. 2010. №8, С. 6–14.
5. Клосс Ю.Ю., Rogozin О.А., Черемисин Ф.Г. Компьютерное моделирование многоступенчатого микронасоса Кнудсена в плоской геометрии // Нано- и микросистемная техника. 2010. № 6. С. 24–32.
6. Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г. Падение ударной волны на плоскую преграду, содержащую микрощели // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 10. <http://www.chemphys.edu.ru/media/files/2009-12-21-001.pdf>