

DOI: 10.51790/2712-9942-2022-3-4-07

**ОБ АДИАБАТИЧЕСКОМ СЖАТИИ ИДЕАЛЬНОГО БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНОГО ГАЗА В ТРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ****Д. А. Быковских<sup>1</sup>, В. А. Галкин<sup>2</sup>**<sup>1</sup> Сургутский государственный университет, г. Сургут, Российская ФедерацияORCID: <http://orcid.org/0000-0002-5796-3786>, [✉ dmitriy.bykovskih@gmail.com](mailto:dmitriy.bykovskih@gmail.com)<sup>2</sup> Сургутский филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Сургут, Российская ФедерацияORCID: <http://orcid.org/0000-0002-9721-4026>, [val-gal@yandex.ru](mailto:val-gal@yandex.ru)

*Аннотация:* статья посвящена поиску аналитического решения для задачи адиабатического сжатия бесстолкновительного газа в трехмерной области с подвижной и неподвижными границами. Представлен подробный вывод класса точных решений для этой задачи, суть которого заключается в определении плотности распределения молекул в пространстве координат и скоростей с течением времени. В отличие от одномерного случая, условия этой задачи такие, что пространство скоростей имеет кусочно-непрерывный вид, поэтому, чтобы вычислить макроскопические величины точного решения, необходимо интегрировать плотность распределения частиц по скоростям. Выполнено сравнение класса точных решений с результатами моделирования комплекса проблемно-ориентированных программ методом Монте-Карло. Статья содержит графики результатов сравнения аналитического и численного решения при различных скоростях подвижной стенки и различном количестве частиц, а также таблицы с максимальными оценками погрешностей макроскопических величин. Показано, что с увеличением числа частиц численное решение приближается к аналитическому. На  $PV$ -диаграмме продемонстрировано сравнение графиков адиабаты и аналитических решений при различных скоростях границы. Представлена оценка производительности разработанного комплекса программ. Полученный класс решений может быть использован для верификации комплексов программ.

*Ключевые слова:* адиабатическое сжатие газа, математическое моделирование, газодинамика, метод Монте-Карло.

*Благодарности:* публикация выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 47) по теме № FNEF-2022-0007 «Развитие методов математического моделирования распределенных систем и соответствующих методов вычисления», рег. № 1021060909180-7-1.2.1.

*Для цитирования:* Д. А. Быковских, В. А. Галкин Об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве. *Успехи кибернетики*. 2022;3(4):54–64. DOI: 10.51790/2712-9942-2022-3-4-07.

**ADIABATIC COMPRESSION OF IDEAL COLLISIONLESS GAS IN 3D SPACE****D. A. Bykovskikh<sup>1</sup>, V. A. Galkin<sup>2</sup>**<sup>1</sup> Surgut State University, Surgut, Russian FederationORCID: <http://orcid.org/0000-0002-5796-3786>, [✉ dmitriy.bykovskih@gmail.com](mailto:dmitriy.bykovskih@gmail.com)<sup>2</sup> Surgut Branch of Federal State Institute “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Surgut, Russian FederationORCID: <http://orcid.org/0000-0002-9721-4026>, [val-gal@yandex.ru](mailto:val-gal@yandex.ru)

*Abstract:* the purpose of this study is to find an analytical solution for the adiabatic compression of collisionless gas with movable and unmovable boundaries in 3D space. The paper presents a detailed inference of a class of exact solutions for determining the variation of molecular distribution density in the space/velocity space with time. In contrast to the 1D case, the velocity space is piecewise discontinuous. To calculate the macroscopic values of the exact solution, we should integrate the particle distribution density over the velocities. We also compared the class of exact solutions with the Monte Carlo simulation results. The paper contains curves that compare the analytical and numerical solutions for different moving wall

velocities and numbers of particles, and tables with max estimated errors for the macroscopic quantities. It is shown that as the number of particles increases, the numerical solution approaches the analytical one. The PV chart is used to compare the adiabatic and analytical solution curves at different boundary velocities. The software package performance is assessed. The class of solutions can be used to verify the software.

*Keywords:* adiabatic compression, simulation, gas dynamics, the Monte Carlo method.

*Acknowledgements:* this study is financially supported through a government order contracted to the Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences, project No. FNEF-2022-0007 Development of Distributed Systems and Computational Methods, Reg. No. 1021060909180-7-1.2.1.

*Cite this article:* D. A. Bykovskikh, V. A. Galkin Adiabatic Compression of Ideal Collisionless Gas in 3d Space. *Russian Journal of Cybernetics*. 2022;3(4):54–64. DOI: 10.51790/2712-9942-2022-3-4-07.

## Введение

В этой статье рассматривается задача об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в трехмерном пространстве с подвижной границей. Эта задача является продолжением работы [1], где представлены результаты исследования для одномерного случая.

## Постановка задачи

Пусть в начальный момент времени в кубе равномерно распределены частицы. Их плотность внутри интервала равна  $\rho_0 = \text{const}$ . Вектор скорости каждой частицы определяется случайным образом с равномерным распределением на единичной сфере. Куб ограничен плоскостями (гранями), одна из которых движется внутрь с постоянной скоростью  $\mathbf{u} = \{u_1, 0, 0\}$  вдоль оси  $x_1$ , уменьшая объем замкнутой области.

## Построение аналитического решения

Пусть при  $t = 0$  в замкнутой области (в прямоугольном параллелепипеде) размером  $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3]$  равномерно распределены частицы. Тогда плотность распределения частиц по пространственным координатам  $f_x(0, \mathbf{x})$  в такой области [2, 3] определяется как

$$f_x(0, \mathbf{x}) = \rho_0 f_1(x_1) f_2(x_2) f_3(x_3) = \rho_0 \prod_{i=1}^3 \frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i). \quad (1)$$

Пусть координаты случайного вектора скорости  $\mathbf{v}$ , равномерно распределенного на поверхности единичной сферы, задаются системой уравнений [4–6]:

$$\begin{cases} v_1 = \sin \theta \cos \varphi \\ v_2 = \sin \theta \sin \varphi \\ v_3 = \cos \theta \end{cases}, \quad (2)$$

где  $\theta = \arccos(2\xi - 1)$ ;  $\varphi = 2\pi\eta$ ;  $\xi$  и  $\eta$  — случайные величины, равномерно распределенные в интервале  $[0, 1)$ .

Известно, что площадь единичной сферы равна  $4\pi$ , тогда плотность распределения частиц на поверхности этой сферы в сферической системе координат имеет вид:

$$f_4(0, \theta, \varphi) = \frac{\cos(\theta)}{2} I_{(0, \pi)}(\theta) \cdot \frac{1}{2\pi} I_{(0, 2\pi)}(\varphi), \quad (3)$$

где  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi]$ .

Поскольку площадь единичной сферы  $S$  может быть выражена в явном виде через любую из переменных, площадь сферы можно вычислить по формуле (4). Отсюда видно, что, в отличие от пространства координат, компоненты которого не зависят друг от друга, пространство скоростей имеет зависимые компоненты. Из этого следует, что плотность распределения частиц по скоростям можно представить в виде произведения частной и условной плотностей распределения [7]:

$$\begin{aligned}
\int_S \hat{f}_v(0, \mathbf{v}) dS &= 2 \int_{D(v_i, v_j)} \frac{1}{4\pi} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial v_k}{\partial v_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial v_k}{\partial v_j}\right)^2} dv_i dv_j = 2 \int_{-1}^1 \int_{-\sqrt{1-v_i^2}}^{\sqrt{1-v_i^2}} \frac{1}{4\pi} \frac{dv_i dv_j}{\sqrt{1-v_i^2-v_j^2}} = \\
&= \int_{v_{i,1}}^{v_{i,2}} \hat{f}_{4+i}(v_i) dv_i \int_{v_{j,1}=\phi_1(v_i)}^{v_{j,2}=\phi_2(v_i)} \hat{f}_{7+j}(v_j|v_i) dv_j = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} dv_i \cdot 2 \int_{-\sqrt{1-v_i^2}}^{\sqrt{1-v_i^2}} \frac{1}{2\pi} \frac{dv_j}{\sqrt{1-v_i^2-v_j^2}} = 1, \quad (4)
\end{aligned}$$

где  $v_i^2 + v_j^2 + v_k^2 = 1^2$  – уравнение единичной сферы  $S$  с центром в начале координат;  $D(v_i, v_j)$  – проекция полусферы на плоскость  $Ov_i v_j$ .

В результате произведение пространства координат на пространство скоростей даст плотность распределения частиц в фазовом пространстве в начальный момент времени:

$$\hat{f}(0, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \hat{f}_x(0, \mathbf{x}) \hat{f}_v(0, \mathbf{v}). \quad (5)$$

Пусть на границах области расположены плоскости, одна из которых подвижна, а остальные – нет. Пусть левая граница движется внутрь, уменьшая первоначальную область, со скоростью  $\mathbf{u} = (u_1, 0, 0)$ , где  $u_1 \in (0, 1]$ . Объем куба  $V$ , изменяющегося с течением времени  $t$ , рассчитывается по следующей формуле:

$$V(t) = l_1(t) \prod_{i=2}^3 (b_i - a_i), \quad (6)$$

где  $l_1(t) = b_1 - (a_1 + u_1 t)$ .

Поскольку выполняется условие параллельности нормалей противоположных стенок осей, тогда при взаимодействии частицы со стенкой происходит изменение только в одной компоненте скорости, совпадающей с ненулевой компонентой нормали. В случае когда стенка неподвижна, в соответствующей компоненте скорости меняется знак на противоположный. Если рассмотреть проекции скоростей частиц  $v_2$  и  $v_3$ , то можно заметить, что эти величины по модулю постоянны у частиц, находящихся внутри замкнутой области. Из условия начального распределения частиц в фазовом пространстве, закона сохранения объема в фазовом пространстве (теорема Лиувилля) и зеркального отражения выдвигается предположение о том, что следующие частные плотности распределения с течением времени  $t \geq 0$  меняться не будут, т.е.

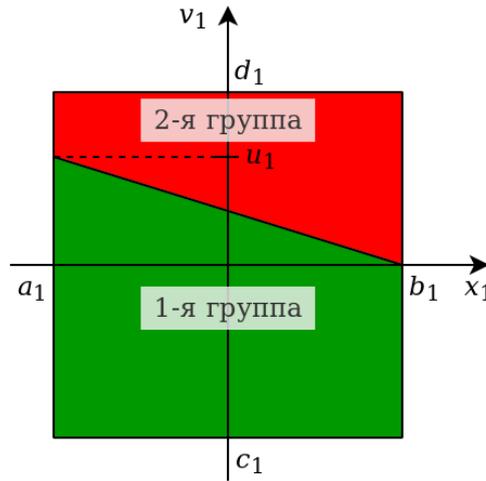
$$\hat{f}_6(t, v_2) = \hat{f}_6(v_2) = \frac{1}{2} I_{(-1, 1)}(v_2), \quad (7)$$

$$\hat{f}_2(t, x_2) = \hat{f}_2(x_2) = \frac{1}{b_2 - a_2} I_{(a_2, b_2)}(x_2), \quad (8)$$

$$\hat{f}_7(t, v_3) = \hat{f}_7(v_3) = \frac{1}{2} I_{(-1, 1)}(v_3), \quad (9)$$

$$\hat{f}_3(t, x_3) = \hat{f}_3(x_3) = \frac{1}{b_3 - a_3} I_{(a_3, b_3)}(x_3). \quad (10)$$

Пусть аналогично одномерной модели адиабатического сжатия газа [1] частицы в начальный момент времени делятся условно на две группы в зависимости от дальнейшего первого взаимодействия с подвижной или неподвижной стенками, у которых нормали параллельны оси  $x_1$ . На рис. 1 представлено такое разделение на две группы, которое зависит от начального местоположения координаты  $x_1$ , компоненты скорости  $v_1$  и компоненты скорости подвижной стенки  $u_1$ . Зеленым цветом выделена область, в которой частная плотность распределения  $\hat{f}_{11}(0, x_1, v_1)$  частиц, относящихся к 1-ой группе, а красным – ко 2-ой. Следует отметить тот факт, что при  $t = 0$  частная плотность  $\hat{f}_{11}(0, x_1, v_1)$



**Рис. 1.** Схема условного разделения частиц в кубе на две большие группы в зависимости от координаты  $x_1$ , компоненты скорости  $v_1$  частиц и компоненты скорости стенки  $u_1$  в начальный момент времени

равна  $1/(2 \cdot l_1(0))$ , значение скорости  $v_1$  для частиц 1-ой группы изменяется от 0 до 1, а для 2-ой группы — от  $-1$  до  $u_0$ .

Исходя из вышесказанного, получается, что плотность распределения  $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$  можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) f_{12}(t, x_1, \mathbf{v}) = \\ &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_2} f_{12}(t, x_1, \mathbf{v}) dv_2 dv_3 \cdot f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1) f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2) = \\ &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) f_{11}(t, x_1, v_1) f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1) f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2). \end{aligned} \quad (11)$$

В свою очередь плотность распределения частиц  $f_{11}(t, x_1, v_1)$  в произвольный момент времени  $t$  представляется в виде суммы плотностей распределения:

$$f_{11}(t, x_1, v_1) = \sum_{s=1}^n f_{11}^{\{s\}}(t, x_1, v_1), \quad (12)$$

где  $s$  — номер группы частиц,  $n$  — число групп.

И, наконец, величина  $f_{11}^{\{s\}}(t, x_1, v_1)$  имеет вид:

$$f_{11}^{\{s\}}(t, x_1, v_1) = Q^{\{s\}}(t, x_1) I_{(c_1^{\{s\}}, d_1^{\{s\}})}(v_1), \quad (13)$$

где величины  $Q^{\{s\}}(t, x_1)$ ,  $c_1^{\{s\}}$  и  $d_1^{\{s\}}$  рассчитываются аналогично формулам, представленным в [1].

Тогда из выше представленных утверждений можно вычислить макроскопические величины следующим способом. Например, расписав плотность распределения  $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$  как в формуле (11), можно вычислить плотность газа  $\rho(t, \mathbf{x})$ :

$$\begin{aligned} \rho(t, \mathbf{x}) &= \int_{R_3} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \int_{R_3} [\rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) f_{11}(t, x_1, v_1) f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1) f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2)] d\mathbf{v} = \\ &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_1} f_{11}(t, x_1, v_1) dv_1 \cdot \int_{R_1} f_{13}(t, v_2 | x_1, v_1) dv_2 \int_{R_1} f_{14}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2) dv_3. \end{aligned} \quad (14)$$

Из формулы (14) два последних интеграла связаны с расчетом условных плотностей распределения и равняются 1. В результате получается, что

$$\begin{aligned} \rho(t, \mathbf{x}) &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_1} f_{11}(t, x_1, v_1) dv_1 = \\ &= \rho_0 \prod_{i=2}^3 \frac{1}{b_i - a_i} I_{(a_i, b_i)}(x_i) \int_{R_1} \sum_{s=1}^n [Q^{\{s\}}(t, x_1) I_{(c_1^{\{s\}}, d_1^{\{s\}})}(v_1)] dv_1. \end{aligned} \quad (15)$$

Рассуждая аналогичным образом, можно вычислить компоненту гидродинамической скорости  $\bar{v}_1$ :

$$\bar{v}_1(t, \mathbf{x}) = \int_{R_3} v_1 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_1} v_1 f_{11}(t, x_1, v_1) dv_1 / \rho(t, \mathbf{x}). \quad (16)$$

Для того чтобы вычислить  $\bar{v}_2(t, \mathbf{x})$ , следует расписать следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{v}_2(t, \mathbf{x}) &= \int_{R_3} v_2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \\ &= \int_{R_3} [v_2 \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) f_6(t, v_2) f_{15}(t, x_1, v_1 | v_2) f_{16}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2)] d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \\ &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_1} v_2 f_6(t, v_2) dv_2 \int_{R_1} f_{15}(t, x_1, v_1 | v_2) dv_1 \cdot \int_{R_1} f_{16}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2) dv_3 / \rho(t, \mathbf{x}). \end{aligned} \quad (17)$$

Домножив и разделив на интеграл  $\int_{R_1} f_6(t, v_2) dv_2$ , равный 1, можно получить следующую формулу:

$$\begin{aligned} \bar{v}_2(t, \mathbf{x}) &= \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_1} v_2 f_6(t, v_2) dv_2 \int_{R_1} f_{15}(t, x_1, v_1 | v_2) dv_1 \cdot \\ &\cdot \int_{R_1} f_{16}(t, v_3 | x_1, v_1, v_2) dv_3 \int_{R_1} f_6(t, v_2) dv_2 / \left[ \int_{R_1} f_6(t, v_2) dv_2 \cdot \rho(t, \mathbf{x}) \right] = \\ &= \int_{R_1} v_2 f_6(t, v_2) dv_2 \cdot \rho(t, \mathbf{x}) / \rho(t, \mathbf{x}). \end{aligned} \quad (18)$$

Следует учитывать, что отношение  $\rho(t, \mathbf{x}) / \rho(t, \mathbf{x})$  равняется 1, если плотность распределения частиц больше нуля ( $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) > 0$ ) при условии, что в момент времени  $t$  в окрестности точки  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  существуют частицы, и 0 – в противном случае. Тогда, заменив  $\rho(t, \mathbf{x}) / \rho(t, \mathbf{x})$  на  $\text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x}))$ , получим окончательный вид:

$$\bar{v}_2(t, \mathbf{x}) = \int_{R_3} v_2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} v_2 f_6(t, v_2) dv_2. \quad (19)$$

Компонента гидродинамической скорости  $\bar{v}_3(t, \mathbf{x})$  вычисляется точно так же, как и компонента гидродинамической скорости  $\bar{v}_2(t, \mathbf{x})$ , т.е.

$$\bar{v}_3(t, \mathbf{x}) = \int_{R_3} v_3 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} / \rho(t, \mathbf{x}) = \text{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} v_3 f_7(t, v_3) dv_3. \quad (20)$$

Используя вышеописанные рассуждения, можно аналогичным образом вычислить внутреннюю энергию единицы массы газа  $e(t, \mathbf{x})$ :

$$\begin{aligned}
 e(t, \mathbf{x}) &= \frac{1}{2\rho(t, \mathbf{x})} \sum_{i=1}^3 \int_{R_3} (v_i - \bar{v}_i(t, \mathbf{x}))^2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} = \\
 &= \frac{1}{2} \left[ \rho_0 f_2(x_2) f_3(x_3) \int_{R_1} (v_1 - \bar{v}_1(t, \mathbf{x}))^2 f_{11}(t, x_1, v_1) dv_1 / \rho(t, \mathbf{x}) + \right. \\
 &\quad + \operatorname{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} (v_2 - \bar{v}_2(t, \mathbf{x}))^2 f_6(t, v_2) dv_2 + \\
 &\quad \left. + \operatorname{sgn}(\rho(t, \mathbf{x})) \int_{R_1} (v_3 - \bar{v}_3(t, \mathbf{x}))^2 f_7(t, v_3) dv_3 \right] \quad (21)
 \end{aligned}$$

Зная внутреннюю энергию единицы массы газа  $e(t, \mathbf{x})$ , можно по уже по известным формулам рассчитать температуру  $T(t, \mathbf{x})$  (см. формулу (22)) и давление  $p(t, \mathbf{x})$  (см. формулу (23)).

$$T(t, \mathbf{x}) = \frac{2}{3R} e(t, \mathbf{x}), \quad (22)$$

$$p(t, \mathbf{x}) = \frac{2}{3} \rho(t, \mathbf{x}) e(t, \mathbf{x}). \quad (23)$$

### Моделирование и анализ результатов

Были проведены серии вычислительных экспериментов при  $\rho_0 = 1$ ,  $[a_i, b_i] = [-0.5, 0.5]$  ( $i = \overline{1, 3}$ ), различном числе частиц  $N$  и скоростях границы  $\mathbf{u} = (u_1, 0, 0)$ .

На рис. 2 представлена частная плотность распределения  $f_{11}(t, x_1, v_1)$  (см. формулу (12)), значение которой изменяется с течением времени  $t$ . Из графиков видно, что с уменьшением скорости движения стенки  $u_1$  число групп растет быстрее при одинаковой степени сжатия газа. Для наглядности области, относящиеся к различным группам, выделены разными цветами. Также следует отметить, что относительно оси  $v_1$  нечетные группы расположены справа, а четные группы — слева.

Для качественного сравнения частной плотности распределения  $f_5(t, v_1)$  вдоль компоненты  $v_1$ , рассчитанной аналитическим способом, с результатами численного решения была дополнительная построена гистограмма распределения. На рис. 3 представлены графики изменения частной плотности распределения  $f_5(t, v_1)$  и гистограммы при  $N = 10^4$  в различные моменты времени  $t$ . Гистограмма распределения получена из статистического ряда с шагом 0.2. Число разрядов (делений), которое зависит от шага, рационально выбирать так, чтобы в результате их совокупность была в районе 10–20 [8]. Левая вероятностная шкала относится к графикам изменения условной плотности распределения, а правая частотная шкала — к гистограмме плотности распределения. Из графиков видно, что при выравнивании масштабов шкал гистограмма распределения вдоль оси  $v_1$  сохраняет существенные особенности, сравнимые с частной плотностью распределения  $f_5(t, v_1)$ , вычисленной аналитически.

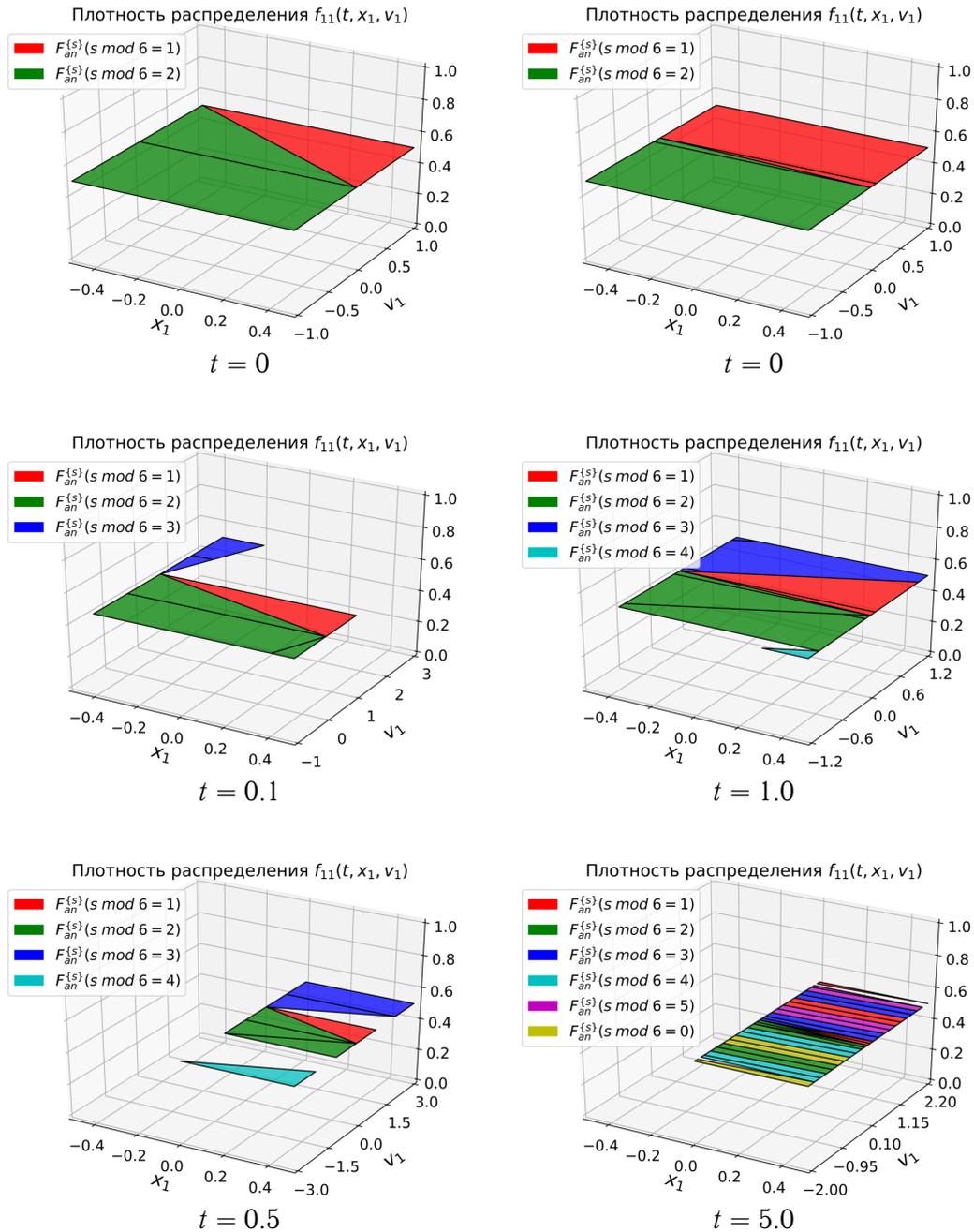
На рис. 4 представлены графики изменений статистических оценок макроскопических величин при  $u_1 = \{1.0, 0.1\}$ . Из графиков видно, что с увеличением числа частиц  $N$  в эксперименте численное решение приближается к аналитическому.

В табл. 1, 2 представлены оценки максимальных абсолютных и относительных погрешностей на отрезке  $t \in [0, 0.5]$  при  $u_1 = 1.0$  и на отрезке  $t \in [0, 5]$  при  $u_1 = 0.1$ , рассчитанные по формулам:

$$\Delta_F = \max_t |F_{num} - F_{an}| \quad \delta_F = \frac{\Delta_F}{|F_{an}|} \cdot 100\%, \quad (24)$$

где  $F_{num}$  — численное значение;  $F_{an}$  — аналитическое значение;  $t \in [0, t^*]$  — временной отрезок.

Максимальные относительные погрешности температуры  $\delta_T$  и давления  $\delta_p$  совпадают, поскольку погрешность плотности зависит только от вычислительной погрешности. С уменьшением скорости

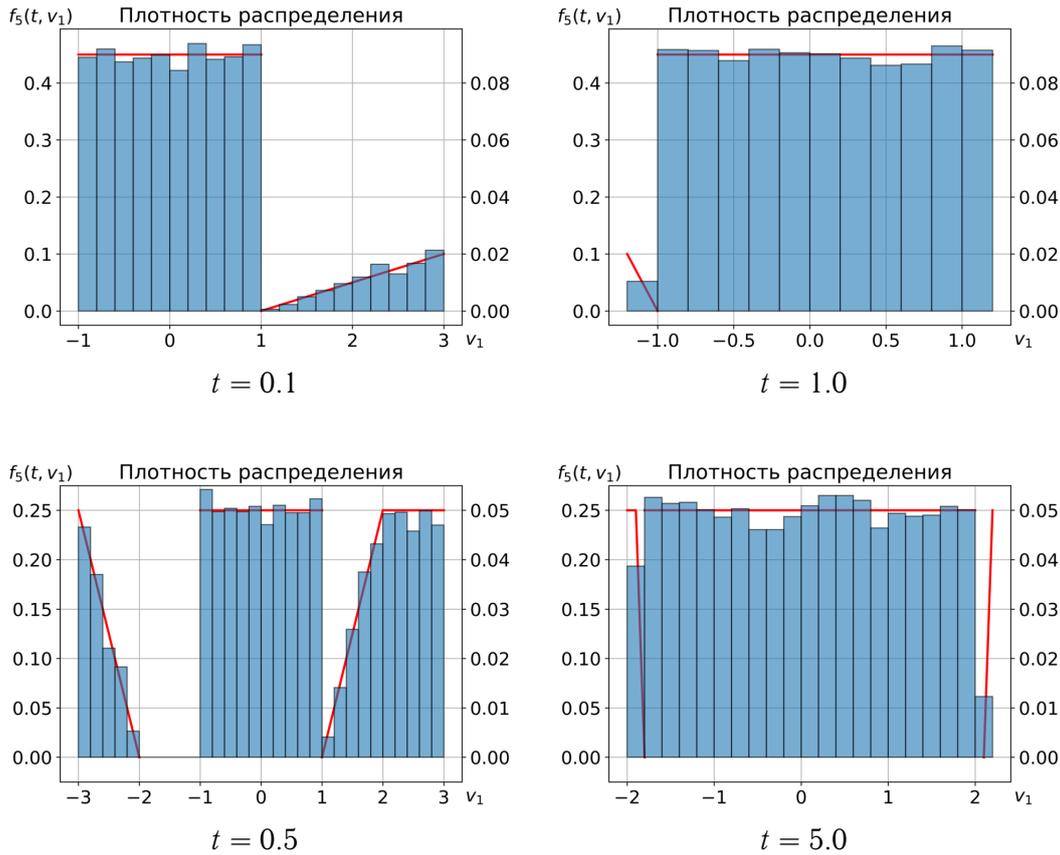


**Рис. 2.** Графики изменения частной плотности распределения  $f_{11}(t, x_1, v_1)$  в различные моменты времени  $t$ : слева —  $u_1 = 1.0$ ; справа —  $u_1 = 0.1$

Таблица 1

Оценка максимальной абсолютной погрешности при различном числе частиц  $N$  и скоростях границы  $u_1$

$u_0$	$N$	$\Delta_{v_1}$	$\Delta_T$	$\Delta_p$
1.0	$10^4$	$2.55 \cdot 10^{-2}$	$1.26 \cdot 10^{-3}$	$1.70 \cdot 10^{-2}$
	$10^6$	$2.69 \cdot 10^{-3}$	$2.96 \cdot 10^{-4}$	$4.55 \cdot 10^{-3}$
	$10^8$	$2.05 \cdot 10^{-4}$	$1.15 \cdot 10^{-5}$	$1.82 \cdot 10^{-4}$
0.1	$10^4$	$1.85 \cdot 10^{-2}$	$4.05 \cdot 10^{-4}$	$6.70 \cdot 10^{-3}$
	$10^6$	$2.07 \cdot 10^{-3}$	$2.26 \cdot 10^{-5}$	$3.65 \cdot 10^{-4}$
	$10^8$	$2.79 \cdot 10^{-4}$	$3.86 \cdot 10^{-6}$	$6.29 \cdot 10^{-5}$



**Рис. 3.** Графики изменения частной плотности распределения  $f_5(t, v_1)$  и гистограммы вдоль компоненты скорости  $v_1$  в различные моменты времени  $t$ : слева —  $u_1 = 1.0$ ; справа —  $u_1 = 0.1$

Таблица 2

Оценка максимальной относительной погрешности при различном числе частиц  $N$  и скоростях границы  $u_1$

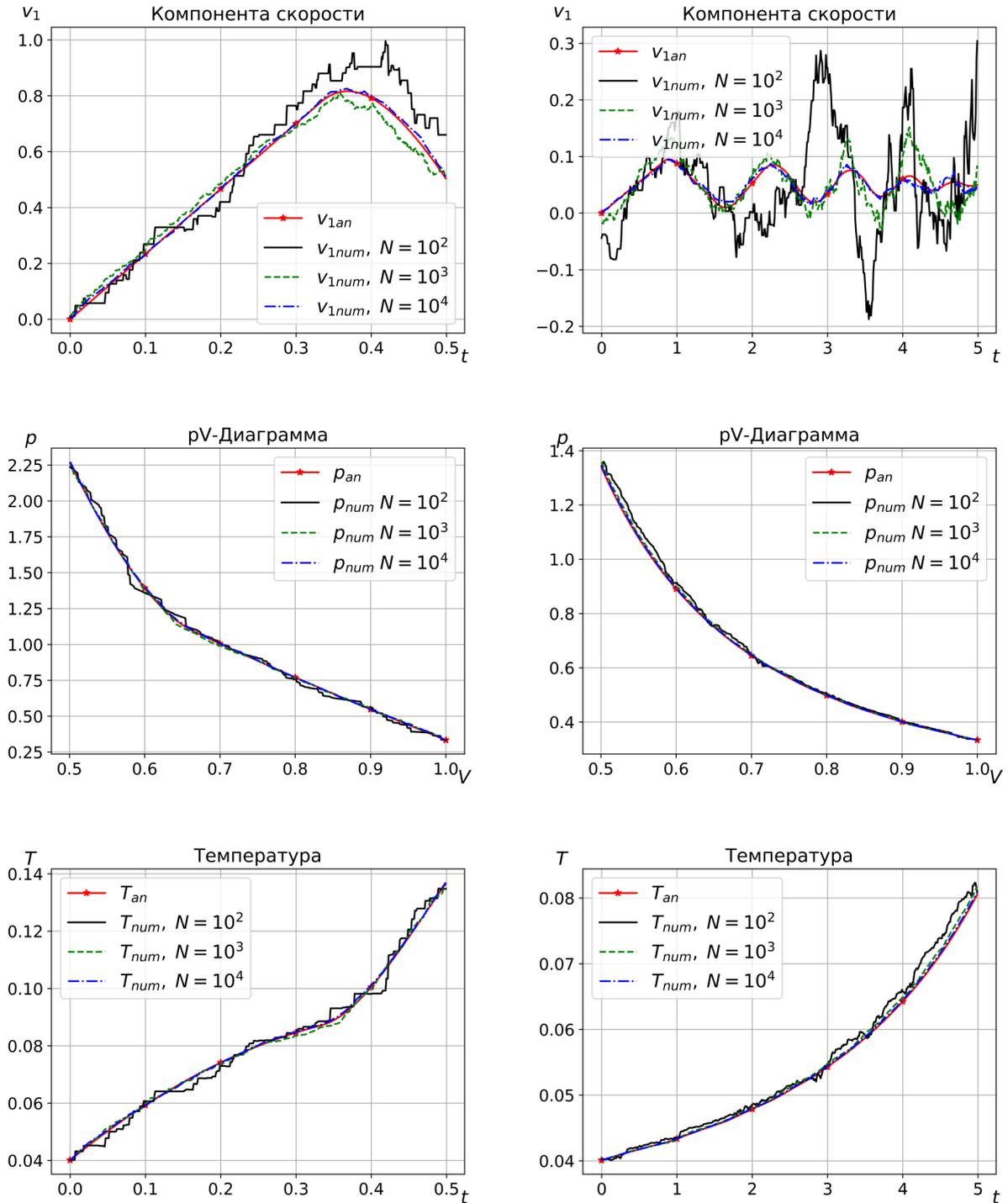
$u_0$	$N$	$\delta_{v_1}$	$\delta_T$	$\delta_p$
1.0	$10^4$	$7.66 \cdot 10^1$	2.13	2.13
	$10^6$	$3.09 \cdot 10^1$	$2.54 \cdot 10^{-1}$	$2.54 \cdot 10^{-1}$
	$10^8$	1.34	$9.46 \cdot 10^{-3}$	$9.46 \cdot 10^{-3}$
0.1	$10^4$	$1.18 \cdot 10^2$	$5.07 \cdot 10^{-1}$	$5.07 \cdot 10^{-1}$
	$10^6$	$2.67 \cdot 10^1$	$2.93 \cdot 10^{-2}$	$2.93 \cdot 10^{-2}$
	$10^8$	$7.90 \cdot 10^{-1}$	$4.92 \cdot 10^{-3}$	$4.92 \cdot 10^{-3}$

стенки  $u_1$  уменьшаются максимальные абсолютные и относительные погрешности температуры и давления. Порядок погрешности статистических оценок макроскопических величин убывает согласно выражению:

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta_F)^2\rangle}}{\langle F \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{L}}, \quad (25)$$

где  $(\Delta_F)^2 = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2$  — средняя квадратичная флуктуация;  $F$  — статистическая оценка макроскопической величины;  $L$  — число частиц в выделенной подобласти (элементе объема  $dx$ ), в которой вычисляются статистические оценки макроскопических величин.

Оценка производительности программ, связанных с расчетом основного блока с учетом сохранения данных, выполнена на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2 (240 GFlops DP для 10 ядер) при следующих параметрах: шаг по времени  $\Delta t = 0.001$ , число итераций 5000, число частиц  $N = 2^{17}$ . Результаты работы различных версий программ представлены в табл. 3. В не векторизованной версии про-



**Рис. 4.** Графики изменения аналитического решения  $F_{an}$  и статистических оценок макроскопических параметров  $F_{num}$  при различном числе частиц в эксперименте  $N$  в зависимости от времени  $t$ : слева —  $u_1 = 1.0$ ; справа —  $u_1 = 0.1$

граммы выполнены декомпозиция и выравнивание данных. Автовекторизованная версия программы, в отличие от неавтовекторизованной, скомпилирована с использованием дополнительных ключей, позволяющих выполнить автовекторизацию и дополнительную оптимизацию программного кода с помощью компилятора. В векторизованной версии программы дополнительно расставлены директивы препроцессора, выполнены перестановки некоторых операций внутри циклов и применены другие оптимизации. Наилучший результат показала векторизованная версия (39 % от пиковой производительности).

На рис. 5 дополнительно рассмотрен случай изменения аналитического решения  $\rho_{an}$  в зависи-

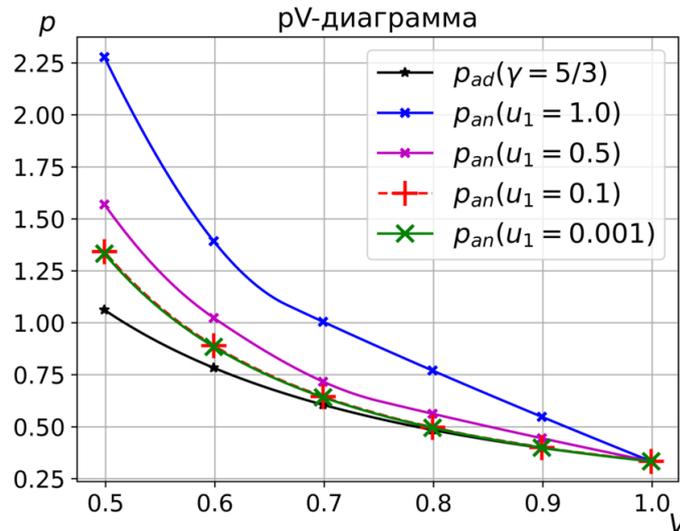


Рис. 5. Графики изменения адиабаты  $p_{ad}$  и аналитического решения  $p_{an}$  при различных скоростях движения стенки  $u_1$  на  $pV$  плоскости

Таблица 3

Оценка производительности различных версий программы на процессоре Intel Xeon E5-2690 V2

Версия программы	$t$ , с	$R_{task}$ , GFlops	$R_{task}/R_{peak}$ , %
Невекторизованная	198.51	0.8	3.3
Автовекторизованная	19.691	6.99	29.11
Векторизованная	15.48	9.42	39.25

мости от скорости движения стенки  $u_1$  и выполнено сравнение с графиком адиабаты  $p_{ad}$  идеального одноатомного газа с показателем адиабаты  $\gamma$ , равным  $5/3$ . В процессе адиабатического сжатия газа наполовину от первоначального объема наблюдается качественное изменение давления  $p_{ad}$  при уменьшении скорости стенки с 1.0 до 0.1, а при дальнейшем уменьшении скорости стенки на два порядка (до 0.001) качественное различие незначительно. Тем не менее сохраняется существенное различие аналитического решения  $p_{an}$  с графиком адиабаты  $p_{ad}$  вне зависимости от скорости стенки.

### Заключение

Рассмотрена задача об адиабатическом сжатии газа Кнудсена в трехмерном пространстве с подвижной границей, для которой был найден класс точных решений. Идея нахождения класса точных решений, как и в одномерном случае [1], заключалась в определении плотности распределения молекул в пространстве координат и скоростей с течением времени. С помощью условной плотности распределения и предположений, основанных на начальном распределении частиц в фазовом пространстве, законах сохранения и зеркального отражения, удалось свести решение трехмерной задачи к одномерной. Принципиальное отличие при вычислении макроскопических величин между одномерной и трехмерной задачами заключалось в том, что в первом случае требовалось суммировать плотность распределения по скоростям, поскольку пространство скоростей дискретное, а в последнем случае — интегрировать плотность распределения по кусочно-непрерывному пространству скоростей. Дополнительно были проведены серии вычислительных экспериментов с использованием разработанного комплекса программ при различных параметрах моделей. Результаты верификации разработанного комплекса программ демонстрируют качественное и количественное соответствие статистических оценок макроскопических величин полученным аналитическим решениям. В задачах расчета траекторий движения частиц в замкнутой области с подвижными границами с применением декомпозиции и векторизации данных была достигнута производительность, равная 39 % от пиковой.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Быковских Д. А., Галкин В. А. Об адиабатическом сжатии идеального бесстолкновительного газа в одномерном пространстве. *Успехи кибернетики*. 2020;1(4):6–12.
2. Соболев И. М. *Численные методы Монте-Карло*. М.: Наука; 1973. 312 с.
3. Banks J. *Handbook of Simulation: Principles, Methodology, Advances, Applications, and Practice*. New York: Wiley; 1998. 849 p.
4. Sibuya M. A. Method for Generating Uniformly Distributed Points on N-Dimensional Spheres. *Ann Inst Stat Math*. 1962;14:1:81–85.
5. Marsaglia G. Choosing a Point from the Surface of a Sphere. *Ann Math Stat*. 1972;43:2:645–646.
6. Копытов Н. П. *Равномерное распределение точек на поверхностях и его применение в исследованиях структурно-неоднородных сред* : дис. ... канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург, 2015. 121 с.
7. Крамер Г. *Математические методы статистики*. М.: Мир; 1975. 648 с.
8. Вентцель Е. С. *Теория вероятностей*. М.: Высш. шк.; 1999. 576 с.