

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

<http://semr.math.nsc.ru>

Том XX, стр. XXX–XXX (20XX)

УДК

519.63, 533.5, 533.2

DOI 10.33048/semi.2019.16.xxx

MSC 76P05,

65N08

РАСЧЕТ ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ В
ПРОСТРАНСТВЕННО-ОДНОРОДНОМ СЛУЧАЕ ПРИ
РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА ПРЯМЫМ
МЕТОДОМ

К.Н. ВОЛКОВ, В.Н. ЕМЕЛЬЯНОВ, А.В. ПУСТОВАЛОВ

ABSTRACT. The solution of the Boltzmann equation with a collision integral of general form using deterministic direct methods is considered. The use of the discrete velocity model to calculate the collision integral and various corrections to ensure the fulfillment of conservation laws at the macroscopic level is discussed. The software implementation of the approach is discussed for the case when the probability distribution function depends on time (homogeneous case) and the molecular velocity (isotropic case). This case is one of the stages in the implementation of the splitting scheme for solving the Boltzmann equation, allowing one to study the behavior of the distribution function depending on the initial conditions and the tendency of the system to reach an equilibrium state.

Keywords: Boltzmann equation, rarefied gas, collision integral, splitting scheme.

VOLKOV, K.N., EMELYANOV, V.N., PUSTOVALOV, A.V., CALCULATION OF COLLISION INTEGRAL IN SPATIAL UNIFORM CASE FOR SOLUTION OF BOLTZMANN EQUATION WITH DIRECT METHOD.

© 2024 Волков К.Н., Емельянов В.Н., Пустовалов А.В..

Поступила 8 января 2024 г., опубликована XX декабря 20XX г.

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к моделированию динамики разреженного газа объясняется как фундаментальной значимостью проблемы, так и практическими приложениями, связанными с необходимостью расчетов параметров перспективных летательных аппаратов. Одной из трудностей численного решения уравнения Больцмана является его высокая размерность (время, три координаты в физическом пространстве, три координаты в скоростном пространстве) и необходимость реализации методов решения, консервативных по интегралу столкновений [1].

К наиболее популярным численным методам решения уравнения Больцмана относятся методы прямого статистического моделирования Монте-Карло (Direct Simulation Monte-Carlo, DSMC) [2]. С помощью методов DSMC сложно решать нестационарные задачи, а моделирование дозвуковых течений требует существенных затрат вычислительных ресурсов из-за статистического шума [3, 4]. Статистические подходы с трудом обобщаются для неявных схем и схем с порядком точности выше, чем первый.

Недостатки методов DSMC стимулируют разработку эффективных методов прямого решения уравнения Больцмана [5, 6, 7, 8, 9]. Число операций, необходимых для расчета интеграла столкновений прямым методом, имеет оценку $O(N^7)$ [10], где N — число узлов сетки в скоростном пространстве в каждом координатном направлении (при этом подход имеет первый порядок точности). При использовании модели дискретных скоростей и модели твердых сфер число операций оценивается как $O(\bar{N}^3 N^3 \log N)$, где $\bar{N} \ll N$ [11]. Для расчета интеграла столкновений широкое применение находит метод дискретного преобразования Фурье [12, 13], вычислительные затраты которого оцениваются как $O(N^6 \log N)$ [14]. Применение спектрального метода для столкновительного ядра специального вида приводит к следующей оценке числа операций $O(N^6)$ [15]. Такая же оценка имеет место при использовании разрывного метода Галеркина [16]. Подход к расчету столкновительного оператора для максвелловских молекул, развитый в работе [17], приводит к оценке числа операций $O(N^4)$. Однако подход имеет порядок точности $O(N^{-1/2})$. Использование свойства цилиндрической симметрии, быстрого преобразования Фурье и преобразования Хенлеля позволяет уменьшить число операций до $O(N^2 \log N)$ [18]. Применение представления Карлемана и преобразований Радона позволяет повысить порядок точности до $O(N^{-2})$ при числе операций порядка $O(N^6 \log N)$ [19]. В подходе [20] число операций, необходимых для расчета интеграла столкновений для модели твердых сфер, составляет $O(N^6)$, а точность метода имеет порядок $O(N^{-2})$.

В данной работе рассматриваются особенности решения уравнения Больцмана с интегралом столкновений общего вида при помощи детерминистических прямых методов. Обсуждается использование модели дискретных скоростей (Discrete Velocity Model, DVM) для расчета интеграла столкновений и различных поправок, позволяющих обеспечить выполнение условия консервативности (выполнение законов сохранения на макроскопическом уровне). Обсуждаются особенности программной реализации разработанного подхода для случая, когда функция распределения зависит только от времени (однородный случай) и величины молекулярной скорости (изотропный случай). Приводятся фрагменты псевдо-кода, позволяющего реализовать изложенный подход.

2. УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

Учитывая только парные столкновения между молекулами и полагая эти столкновения упругими, уравнение Больцмана для функции плотности распределения вероятности $f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ в момент времени $t \in R^+$ в точке $\mathbf{x} \in R^3$ для молекул со скоростью $\boldsymbol{\xi} \in R_\xi^3$ записывается в виде [21]

$$(1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = Q(f, f),$$

Функция распределения определяется в области $\{t > 0, \mathbf{x} \in R^3, \boldsymbol{\xi} \in R_\xi^3\}$, где R^3 — физическое пространство, R_ξ^3 — пространство скоростей. Фазовое пространство имеет вид $R = R^3 \cup R_\xi^3$. При этом $f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) dt d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi}$ определяет вероятность того, что в интервале времени $(t, t + dt)$ молекула находится в окрестности $d\mathbf{x} \in R^3$ точки \mathbf{x} и имеет приращение $d\boldsymbol{\xi} \in R_\xi^3$ скорости $\boldsymbol{\xi}$.

Интеграл столкновений представляется в виде

$$(2) \quad Q(f, f) = \int_{R_\xi^3} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{n} < 0} B(\mathbf{g}, \mathbf{n}) [f(\boldsymbol{\xi}') f(\boldsymbol{\xi}'_*) - f(\boldsymbol{\xi}) f(\boldsymbol{\xi}_*)] d\mathbf{n} d\boldsymbol{\xi}_*,$$

где $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}_* \in R_\xi^3$ — скорости молекул до столкновения, $\boldsymbol{\xi}', \boldsymbol{\xi}'_* \in R_\xi^3$ — скорости молекул после столкновения, $\mathbf{g} = \boldsymbol{\xi}_* - \boldsymbol{\xi}$ — относительная скорость сталкивающихся молекул, $\mathbf{n} \in R^3$ — единичный вектор нормали, направленный вдоль линии, соединяющей центры сталкивающихся молекул, имеющих до столкновения скорости $\boldsymbol{\xi}$ и $\boldsymbol{\xi}_*$. Интегрирование проводится по переменной $\boldsymbol{\xi}_* \in R_\xi^3$.

Полагая молекулы максвелловскими, ядро столкновений (объемный поток молекул) представляется в виде [21]

$$(3) \quad B(|\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}|) = a^2 c_s \left(\frac{|\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}|}{c_s} \right)^\theta,$$

где a — радиус молекулы, c_s — средняя скорость молекул, $\theta \in N$. При этом $\theta = 1$ для модели твердых сфер и $\theta = 0$ для ядра столкновений, соответствующего постоянной частоте столкновений. После столкновения молекулы приобретают скорости

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}' &= \boldsymbol{\xi} + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}; \\ \boldsymbol{\xi}'_* &= \boldsymbol{\xi}_* - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}. \end{aligned}$$

В случае изотропной симметрии нечетные моменты (количество движения, тепловой поток) принимают нулевые значения, а поведение системы описывается четными моментами (давление, энергия) [21]. В континуальном пределе (малые числа Кнудсена) поведение системы описывается уравнениями Навье–Стокса для несжимаемой жидкости (малые числа Маха) и определяется только четными моментами. Для описания системы при малых отклонениях от состояния равновесия функция распределения раскладывается в ряд, а ее изменение зависит от четных моментов. В частности, такой подход используется в методе решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Method, LBM) [22] и квадратурном методе моментов (Quadrature Method of Moments, QMOM) [23].

Для решения уравнения Больцмана используется подход [24, 25]. Для повышения эффективности расчетов и выполнения условия консервативности

(сохранение числа частиц и энергии) интеграл столкновений записывается через кинетические энергии сталкивающихся молекул. Для описания стремления системы к состоянию равновесия используется модифицированный подход к расчету частот релаксации.

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ

Для простоты рассматривается случай, когда функция распределения не зависит от пространственных координат. Уравнение Больцмана (1) для функции распределения $f(t, \mathbf{x})$ принимает вид

$$(4) \quad \frac{\partial f}{\partial t} = Q(f, f).$$

Интеграл столкновений (2) представляется в виде

$$(5) \quad Q(f, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} S(q)B(q) [f(\boldsymbol{\xi}')f(\boldsymbol{\xi}'_*) - f(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}_*)] d\mathbf{n} d\xi_*,$$

где $q = \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}$, $B(q) = B(|q|)$. Произвольная функция $S(q)$ используется для упрощения области интегрирования и представляется в виде

$$S(q) = \begin{cases} 1, & \text{если } q < 0, \\ 0, & \text{если } q \geq 0. \end{cases}$$

Для дальнейших упрощений принимается допущение об изотропной симметрии ядра столкновений. В изотропном случае $\xi = \|\boldsymbol{\xi}\| \in R_{\xi}^+$ в момент времени $t \in R^+$. При этом $f(t, \xi)dt d\xi$ определяет вероятность того, что в интервале времени dt скорость молекулы находится в интервале $(\xi, \xi + d\xi)$. Единичные вектора вдоль направлений $\boldsymbol{\xi}$ и $\boldsymbol{\xi}_*$, определяются соотношениями

$$\mathbf{n}_o = \frac{\boldsymbol{\xi}}{\|\boldsymbol{\xi}\|}, \quad \mathbf{n}_* = \frac{\boldsymbol{\xi}_*}{\|\boldsymbol{\xi}_*\|}.$$

Заменяя элемент интегрирования $d\boldsymbol{\xi}_*$ на $\xi_*^2 d\mathbf{n}_* d\xi_*$, представим интеграл столкновений (5) в виде

$$(6) \quad Q(f, f) = \int_0^{+\infty} \int_0^{4\pi} \int_0^{4\pi} (f'f'_* - ff_*) S(q)B(q)\xi_*^2 d\mathbf{n} d\mathbf{n}_* d\xi_*.$$

Параметр q зависит от направлений, определяемых векторами \mathbf{n} и \mathbf{n}_* , и представляется в виде

$$q = \boldsymbol{\xi}_* \cdot \mathbf{n} - \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} = \xi_* \cos \alpha_y - \xi \cos \alpha_x,$$

где α_x — угол между векторами $\boldsymbol{\xi}$ и \mathbf{n} , α_y — угол между векторами $\boldsymbol{\xi}_*$ и \mathbf{n} . Используя замены переменных $x = \cos \alpha_x$ и $y = \cos \alpha_y$, получим, что $q = \xi_* y - \xi x$. В уравнении (6) используются полярные координаты, полагая, что $\boldsymbol{\xi}$ — полярная ось для $d\mathbf{n}$ и \mathbf{n} — полярная ось для $d\mathbf{n}_*$. Для элементов интегрирования получим, что $d\mathbf{n} = \sin \alpha_x d\alpha_x d\beta_x$ и $d\mathbf{n}_* = \sin \alpha_y d\alpha_y d\beta_y$, где β_x и β_y — полярные углы. Интеграл столкновений (6) представляется в виде

$$(7) \quad Q(f, f) = \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} (f'f'_* - ff_*) S(q)B(q)\xi_*^2 dx d\beta_x dy d\beta_y d\xi_*.$$

Возводя скорости частиц после столкновения в квадрат и полагая, что $q = \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}$, для кинетической энергии сталкивающихся молекул получим соотношения

$$\begin{aligned}(\xi')^2 &= \xi^2 + q^2 + 2q\xi x = \xi^2(1 - x^2) + \xi_*^2 y^2; \\(\xi'_*)^2 &= \xi_*^2 + q^2 - 2q\xi_* y = \xi_*^2(1 - y^2) + \xi^2 x^2.\end{aligned}$$

Учитывая, что $(f'f'_* - ff_*)$ не зависит от β_x и β_y , получим

$$(8) \quad Q(f, f) = N(f, f) - \nu(f)f.$$

Здесь

$$(9) \quad N(f, f) = 4\pi^2 \int_0^{+\infty} \xi_*^2 \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\xi')f(\xi'_*)S(q)B(q)dx dy d\xi_*;$$

$$(10) \quad \nu(f) = 4\pi^2 \int_0^{+\infty} f(\xi_*)\xi_*^2 \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} S(q)B(q)dx dy d\xi_*.$$

Переменные x и y представляют собой параметры столкновения. Параметры столкновения определяются в области $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$. Область интегрирования Ω разбивается на две подобласти $\Omega_{q \geq 0}$ и $\Omega_{q < 0}$, которые определяются для $q \geq 0$ и $q < 0$, и представляется в виде $\Omega = \Omega_{q \geq 0} \cup \Omega_{q < 0}$. Подобласти $\Omega_{q \geq 0}$ и $\Omega_{q < 0}$ разделяются линией $y = (\xi/\xi_*)x$, соответствующей условию $q = 0$. Для точки $P = (x_P, y_P) \in \Omega_{q < 0}$ существует точка P_* , симметричная исходной относительно начала координат и имеющая координаты $P_* = (-x_P, y_P) \in \Omega_{q \geq 0}$. Поскольку $B(q) = B(x, y)$, получим, что $B(P) = B(P_*)$ и выполняется соотношение

$$(11) \quad \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} S(q)B(q)dx dy = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} B(q)dx dy.$$

Скорости молекул после столкновения представляются в виде

$$\begin{aligned}\xi' &= \xi'(\xi, \xi_*, x, y) = [\xi^2(1 - x^2) + \xi_*^2 y^2]^{1/2}; \\ \xi'_* &= \xi'_*(\xi, \xi_*, x, y) = [\xi_*^2(1 - y^2) + \xi^2 x^2]^{1/2}.\end{aligned}$$

Учитывая, что $\xi'(P) = \xi'(P_*)$ и $\xi'_*(P) = \xi'_*(P_*)$, получим

$$(12) \quad \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\xi')f(\xi'_*)S(q)B(q)dx dy = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\xi')f(\xi'_*)B(q)dx dy.$$

Подставляя (12) в (9) и (11) в (10), получим

$$\begin{aligned}N(f, f) &= 2\pi^2 a^2 c_s^{1-\theta} \int_0^{+\infty} \xi_*^2 \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\xi')f(\xi'_*) |\xi_* y - \xi x|^\theta dx dy d\xi_*; \\ \nu(f) &= 2\pi^2 a^2 c_s^{1-\theta} \int_0^{+\infty} f(\xi_*)\xi_*^2 \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} |\xi_* y - \xi x|^\theta dx dy d\xi_*.\end{aligned}$$

4. ФОРМУЛИРОВКА В ПРОСТРАНСТВЕ ЭНЕРГИИ

В изотропном случае вместо скорости молекулы используется ее кинетическая энергия $E = \xi^2/2$. При этом $f(t, E)dt dE$ определяет вероятность того, что в интервале времени dt кинетическая энергия молекулы находится в интервале $(E, E + dE)$. Полагая кинетические энергии молекул до и после столкновения равными $E = \xi^2/2$, $E_* = \xi_*^2/2$, $E' = \xi'^2/2$ и $E'_* = \xi_*'^2/2$, получим

$$N(f, f) = F c_s^{-\theta} \int_0^{+\infty} E_*^{1/2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(E') f(E'_*) \left| y E_*^{1/2} - x E^{1/2} \right|^\theta dx dy dE_*;$$

$$\nu(f) = F c_s^{-\theta} \int_0^{+\infty} f(E_*) E_*^{1/2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \left| y E_*^{1/2} - x E^{1/2} \right|^\theta dx dy dE_*.$$

Здесь $F = 2^{(\theta+3)/2} \pi^2 a^2 c_s^2$ (параметр имеет размерность объемного расхода). Кинетические энергии молекул после столкновения находятся из соотношений

$$E' = E(1 - x^2) + E_* y^2;$$

$$E'_* = E x^2 + E_*(1 - y^2).$$

Макроскопическое свойство газа Φ определяется соотношением [21]

$$(13) \quad \Phi(t) = 4\pi\sqrt{2} \int_0^{+\infty} \phi(E) f E^{1/2} dE,$$

где $\phi(E)$ — функция кинетической энергии молекул. Изменение макроскопического свойства среды описывается уравнением

$$(14) \quad \frac{d\Phi}{dt} = \int_0^{+\infty} Q(f, f) \phi(\xi) d\xi = 4\pi\sqrt{2} \int_0^{+\infty} Q(f, f) \phi(E) E^{1/2} dE.$$

Уравнение (14) записывается в эквивалентном виде

$$(15) \quad \frac{d\Phi}{dt} = \langle \phi(E), f(E') f(E'_*) - f(E) f(E_*) \rangle,$$

где

$$\frac{\langle \phi, \varphi \rangle}{4\pi\sqrt{2} F c_s^{-\theta}} = \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \left| y E_*^{1/2} - x E^{1/2} \right|^\theta \phi \varphi (E E_*)^{1/2} dx dy dE_* dE.$$

На макроскопическом уровне свойства среды находятся при помощи осреднения. Меняя местами E и E_* , учитывая, что $x = \cos \alpha_x = \mathbf{n}_o \cdot \mathbf{n}$ и $y = \cos \alpha_y = \mathbf{n}_* \cdot \mathbf{n}$ и переставляя переменные x и y , уравнение (15) записывается в виде

$$(16) \quad \frac{d\Phi}{dt} = \langle \phi(E_*), f(E') f(E'_*) - f(E) f(E_*) \rangle.$$

Переставляя скорости молекул до и после столкновения, для параметров столкновения получим следующие соотношения

$$\begin{aligned} x' &= \frac{\boldsymbol{\xi}' \cdot \mathbf{n}}{\|\boldsymbol{\xi}'\|} = y \left[\frac{E_*}{E(1-x^2) + E_*y^2} \right]^{1/2}; \\ y' &= \frac{\boldsymbol{\xi}'_* \cdot \mathbf{n}}{\|\boldsymbol{\xi}'_*\|} = x \left[\frac{E}{Ex^2 + E_*(1-y^2)} \right]^{1/2}. \end{aligned}$$

Выполнение равенства $y'(E'_*)^{1/2} - x'(E')^{1/2} = xE^{1/2} - yE_*^{1/2}$ гарантирует, что интеграл столкновений остается неизменным.

Соотношения определяют переход $(E, E_*, x, y) \rightarrow (E', E'_*, x', y')$ и позволяют найти якобиан преобразования координат. При этом

$$dx' dy' dE'_* dE' = \left(\frac{EE_*}{E'E'_*} \right)^{1/2} dx dy dE_* dE.$$

Уравнение (16) приобретает вид

$$(17) \quad \frac{d\Phi}{dt} = -\langle \phi(E'), f(E')f(E'_*) - f(E)f(E_*) \rangle.$$

Из уравнений (15), (16) и (17) следует, что

$$(18) \quad \frac{d\Phi}{dt} = \langle \phi(E) + \phi(E_*) - \phi(E') - \phi(E'_*), f(E')f(E'_*) - f(E)f(E_*) \rangle.$$

Уравнение (18) показывает, что если $\phi(E)$ остается неизменным при столкновениях молекул (инвариант столкновений), то макроскопическое свойство среды не зависит от времени (свойство консервативности).

Полагая $\phi(E) = \phi_p = E^p$ в соотношении (13), рассмотрим моменты, которые определяются соотношением

$$(19) \quad \Phi_p(t) = 4\pi\sqrt{2} \int_0^{+\infty} f E^{p+1/2} dE.$$

Поскольку $\phi_0 = 1$ и $\phi_1 = E$ являются инвариантами столкновений, свойство консервативности выполняется для моментов Φ_0 и Φ_1 , поэтому $d\Phi_0/dt = 0$ и $d\Phi_1/dt = 0$. Макроскопические свойства среды определяются при помощи числовой плотности молекул и удельной внутренней энергии

$$(20) \quad n = \Phi_0 = 4\pi\sqrt{2} \int_0^{+\infty} f E^{1/2} dE;$$

$$(21) \quad e = \frac{\Phi_1}{\Phi_0} = \frac{4\pi\sqrt{2}}{n} \int_0^{+\infty} f E^{3/2} dE = \frac{\int_0^{+\infty} E^{3/2} dE}{\int_0^{+\infty} E^{1/2} dE}.$$

Инварианты столкновений $\phi_0 = 1$ и $\phi_1 = E$ и соответствующие им макроскопические свойства n и e используются для нахождения функции распределения f_E такой, что $Q(f_E, f_E) = 0$ (условие локального равновесия). Полагая $f_E = \exp[-(c_0\phi_0 + c_1\phi_1)]$, где c_0 и c_1 — постоянные, для интеграла столкновений $Q(f, f) \propto f'f'_* - ff_*$ получим

$$Q(f_E, f_E) \propto \exp[-c_1(E' + E'_*)] - \exp[-c_1(E' + E'_*)] = 0.$$

Постоянные c_0 и c_1 находятся из условия выполнения соотношений (20) и (21). При выполнении условия локального равновесия функция распределения имеет вид

$$(22) \quad f_E = \frac{n}{(2\pi E_B)^{3/2}} \exp\left(-\frac{E}{E_B}\right),$$

где $E_B = 2e/3$. Давление определяется соотношением $P = 2ne/3 = nE_B$. Для идеального газа $P = nk_B T$, где k_B — постоянная Больцмана, T — температура, поэтому $2e/3 = E_B = k_B T$. Удельная теплоемкость при постоянном объеме определяется соотношением $C_v = e/T$, поэтому $C_v = 3k_B/2$ для одноатомного газа.

5. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МОМЕНТОВ

Для удобства уравнение (15) записывается в виде

$$(23) \quad \frac{d\Phi}{dt} = \langle \phi(E), f(E')f(E'_*) \rangle - \langle \phi(E), f(E)f(E_*) \rangle.$$

Произведение $\langle \phi, \varphi \rangle$ является инвариантом столкновений и допускает представление через скорости молекул после столкновения $\langle \phi, \varphi \rangle'$. Обратное преобразование координат $(E', E'_*, x', y') \rightarrow (E, E_*, x, y)$ записывается в виде

$$\begin{aligned} E &= E'(1 - x'^2) + E'_* y'^2; \\ E_* &= E' x'^2 + E'_*(1 - y'^2). \end{aligned}$$

Параметры столкновения находятся из соотношений

$$\begin{aligned} x &= y' \left[\frac{E'_*}{E'(1 - x'^2) + E'_* y'^2} \right]^{1/2}; \\ y &= x' \left[\frac{E'}{E' x'^2 + E'_*(1 - y'^2)} \right]^{1/2}. \end{aligned}$$

Приведенные соотношения используются для нахождения функции кинетической энергии $\phi(E) = \phi[E(E', E'_*, x', y')]$ в правой части уравнения (23), которое приобретает вид

$$(24) \quad \langle \phi(E), f(E')f(E'_*) \rangle = \langle \phi[E(E', E'_*, x', y')], f(E')f(E'_*) \rangle'.$$

Опуская штрих в соотношении (24), запишем уравнение (25) в виде

$$(25) \quad \frac{d\Phi}{dt} = \langle \phi[E(1 - x^2) + E_* y^2] - \phi(E), f(E)f(E_*) \rangle.$$

Уравнение (25) используется в методе моментов [23].

6. ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОЙ РЕАЛИЗАЦИИ

Рассмотрим дискретизацию приведенных соотношений и особенности численной реализации подхода к расчету интеграла столкновений.

6.1. Дискретизация основных соотношений. Обозначим максимальное значение кинетической энергии молекул E через E_M и разобьем интервал $[0, E_M]$ на M равных частей с шагом $\Delta E = E_M/M$. Для идентификации каждой расчетной ячейки используется индекс $1 \leq i \leq M$. Значение кинетической энергии в ячейке i находится как $E_i = (i-1/2)\Delta E$, а соответствующая функция распределения обозначается через $f_i = f(E_i)$. Для нахождения численного значения частоты релаксации в каждой расчетной ячейке $\tilde{\nu}_i$ для дискретной функции распределения f_i используется кусочно-постоянная аппроксимация [24]

$$(26) \quad \nu_i = \nu(f_i) \approx \bar{\nu}_i = \tilde{F}\Delta E \sum_{j=1}^M f_j E_j^{1/2} A_{ij}.$$

Здесь

$$A_{ij} = \Delta E^{-\theta/2} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} |yE_j^{1/2} - xE_i^{1/2}|^\theta dx dy;$$

$$\tilde{F} = F \left[\frac{(\Delta E)^{1/2}}{c_s} \right]^\theta = 2^{(\theta+3)/2} \pi^2 a^2 c_s \left[\frac{(\Delta E)^{1/2}}{c_s} \right]^\theta.$$

Выполняя интегрирование, коэффициенты в (26) находятся из соотношения

$$(27) \quad A_{ij}(\theta) = 2(\Delta E)^{-\theta/2} \frac{|E_i^{1/2} + E_j^{1/2}|^{2+\theta} - |E_i^{1/2} - E_j^{1/2}|^{2+\theta}}{E_i^{1/2} E_j^{1/2} (2 + 3\theta + \theta^2)}.$$

При $\theta = 0$ получим, что $A_{ij}(0) = 4$. При $\theta = 1$ имеем

$$A_{ij}(1) = \frac{1}{(\Delta E)^{1/2}} \begin{cases} 2E_j^{1/2} + \frac{2}{3}E_i E_j^{-1/2}, & \text{если } E_i \leq E_j, \\ 2E_i^{1/2} + \frac{2}{3}E_j E_i^{-1/2}, & \text{если } E_i > E_j. \end{cases}$$

В расчетах удобно использовать отношения $E_i/\Delta E = i-1/2$ и $E_j/\Delta E = j-1/2$.

Используя кусочно-постоянную аппроксимацию, найдем численное значение частоты релаксации в каждой расчетной ячейке \tilde{N}_i для дискретной функции распределения f_i из соотношения

$$(28) \quad N_i = N(f_i, f_i) \approx \tilde{N}_i = \tilde{F}\Delta E \sum_{j=1}^M E_j^{1/2} \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M f_k f_l B_{ij}^{kl}.$$

Здесь

$$B_{ij}^{kl} = \Delta E^{-\theta/2} \int_{\Omega_{ij}^{kl}} |yE_j^{1/2} - xE_i^{1/2}|^\theta dx dy.$$

Область Ω_{ij}^{kl} определяется как окрестность точки $(x, y) \in \Omega$, в которой кинетические энергии молекул после столкновения $\tilde{E}'(x, y)$ и $\tilde{E}_*(x, y)$ допускают

кусочно-постоянное представление в малой области около точки (E_k, E_l) . Кинетические энергии молекул после столкновения находятся из соотношений

$$\begin{aligned}\tilde{E}'(x, y) &= E_i(1 - x^2) + E_j y^2; \\ \tilde{E}'_*(x, y) &= E_j(1 - y^2) + E_i x^2.\end{aligned}$$

Нижний и верхний пределы изменения обозначаются через $E_{k-} = (k-1)\Delta E$ и $E_{k+} = k\Delta E$. Точка (x, y) принадлежит к области Ω_{ij}^{kl} , если точка $(\tilde{E}', \tilde{E}'_*)$ принадлежит к области $[E_{k-}, E_{k+}] \times [E_{l-}, E_{l+}]$, что сводится к выполнению условий

$$\begin{aligned}E_{k-} &\leq E_i(1 - x^2) + E_j y^2 \leq E_{k+}; \\ E_{l-} &\leq E_j(1 - y^2) + E_i x^2 \leq E_{l+}.\end{aligned}$$

Поскольку $\tilde{E}'_* = \tilde{E}'_*(\tilde{E}') = E_i + E_j - \tilde{E}'$, то только сегмент функции $\tilde{E}'_* = \tilde{E}'_*(\tilde{E}')$ лежит внутри указанной области.

Для определения области Ω_{ij}^{kl} разрешается система соотношений

$$\begin{aligned}\Omega_+ &= \{(x, y) \in \Omega : E_i(1 - x^2) + E_j y^2 \leq E_{k+}\}; \\ \Omega_{-\infty} &= \{(x, y) \in \Omega : E_i(1 - x^2) + E_j y^2 \geq E_{k-}\}; \\ \Omega_{ij}^{kl} &= \Omega_+ \cap \Omega_{-\infty}.\end{aligned}$$

Области Ω_+ и $\Omega_{-\infty}$ ограничены двумя гиперболами, а область Ω_{ij}^{kl} представляет собой их пересечение. Такой подход к определению области Ω_{ij}^{kl} является неэффективным, поскольку требует определения двух областей Ω_+ и $\Omega_{-\infty}$. Для удобства область Ω_{ij}^{kl} находится при помощи разрешения соотношений

$$\begin{aligned}\Omega_+ &= \{(x, y) \in \Omega : E_i(1 - x^2) + E_j y^2 \leq E_{k+}\}; \\ \Omega_- &= \{(x, y) \in \Omega : E_i(1 - x^2) + E_j y^2 \leq E_{k-}\}; \\ \Omega_{ij}^{kl} &= \Omega_+ - \Omega_-.\end{aligned}$$

Интегралы по соответствующим областям находятся из соотношения

$$(29) \quad B_{ij}^{kl} = C(E_{k+}) - C(E_{k-}).$$

Здесь

$$C(E_{k\pm}) = \Delta E^{-\theta/2} \int_{\Omega_{\pm}(E_{k\pm})} |yE_j^{1/2} - xE_i^{1/2}|^{\theta} dx dy.$$

Форма областей Ω_{\pm} на плоскости (x, y) зависит от относительной величины кинетической энергии E_i , E_j , E_{k-} и E_{k+} . В общем случае рассматривается шесть случаев

$$C(E_{k\pm}) = \begin{cases} C_1(E_i, E_j, E_{k\pm}), & \text{если } E_{k\pm} \leq E_i \leq E_j; \\ C_2(E_i, E_j, E_{k\pm}), & \text{если } E_i \leq E_{k\pm} \leq E_j; \\ C_3(E_i, E_j, E_{k\pm}), & \text{если } E_i \leq E_j \leq E_{k\pm}; \\ C_1(E_j, E_i, E_{k\pm}), & \text{если } E_{k\pm} \leq E_j \leq E_i; \\ C_2(E_j, E_i, E_{k\pm}), & \text{если } E_j \leq E_{k\pm} \leq E_i; \\ C_3(E_j, E_i, E_{k\pm}), & \text{если } E_j \leq E_i \leq E_{k\pm}. \end{cases}$$

Применение соответствующей перестановки аргументов позволяет рассмотреть только три случая.

6.2. Случай 1 ($E_{k\pm} \leq E_i \leq E_j$). Область Ω_{\pm} имеет вид

$$\frac{x^2}{a_{\pm}^2} - \frac{y^2}{b_{\pm}^2} \geq 1,$$

где $a_{\pm} = (1 - E_{k\pm}/E_i)^{1/2}$, $b_{\pm} = [(E_i - E_{k\pm})/E_j]^{1/2}$. Область Ω_{\pm} представляет собой две полосы между двумя гиперболами. Для уменьшения объема вычислительной работы учитывается свойство симметрии на плоскости (x, y) . Рассматривая одну полосу, для которой $q(E_i, E_j) \leq 0$, функция $C_1(E_i, E_j, E_{k\pm})$ определяется соотношением

$$C(E_i, E_j, E_{k\pm}) = 2\Delta E^{-\theta/2} \int_{a_{\pm} - c_{\pm}(x)}^{+1 + c_{\pm}(x)} \int \left| yE_j^{1/2} - xE_i^{1/2} \right|^{\theta} dy dx,$$

где

$$c_{\pm}(x) = \left(\frac{E_i x^2 - E_i + E_{k\pm}}{E_j} \right)^{1/2}.$$

При $\theta \in N$ соотношения для $C_1 = C_1(\theta)$ получаются в конечном виде:

– при $\theta = 0$

$$\begin{aligned} C_1(0) &= 2 \int_{a_{\pm} - c_{\pm}(x)}^{+1 + c_{\pm}(x)} \int \left(xE_i^{1/2} - yE_j^{1/2} \right) dy dx = \\ (30) \quad &= 2 \frac{E_{k\pm}^{1/2}}{E_j^{1/2}} + \frac{E_i - E_{k\pm}}{E_i^{1/2} E_j^{1/2}} \ln \left(\frac{E_i^{1/2} - E_{k\pm}^{1/2}}{E_i^{1/2} + E_{k\pm}^{1/2}} \right); \end{aligned}$$

– при $\theta = 1$

$$\begin{aligned} C_1(1) &= \frac{2}{\Delta E^{1/2}} \int_{a_{\pm} - c_{\pm}(x)}^{+1 + c_{\pm}(x)} \int \left(xE_i^{1/2} - yE_j^{1/2} \right) dy dx = \\ (31) \quad &= \frac{4}{3\Delta E^{1/2}} \frac{E_{k\pm}^{3/2}}{E_i^{1/2} E_j^{1/2}}. \end{aligned}$$

При $E_{k-} = 0$ получим, что $C_1(0) = C_1(1) = 0$. При произвольном θ используются методы численного интегрирования.

6.3. Случай 2 ($E_i \leq E_{k\pm} \leq E_j$). Область Ω_{\pm} имеет вид

$$\frac{y^2}{b_{\pm}^2} - \frac{x^2}{a_{\pm}^2} \leq 1,$$

где $a_{\pm} = (E_{k\pm}/E_i - 1)^{1/2}$, $b_{\pm} = [(E_{k\pm} - E_i)/E_j]^{1/2}$. Область Ω_{\pm} представляет собой две полосы между двумя гиперболами. Для уменьшения объема вычислительной работы учитывается свойство симметрии на плоскости (x, y) . Рассматривается одна полоса, для которой $q(E_i, E_j) \leq 0$. Интеграл по области Ω_{\pm}

зависит от координат точек (x_I, y_I) , соответствующих пересечению гипербол и прямых $y_I = \pm 1$. При этом $x_I = \pm e_{\pm}$, где

$$e_{\pm} = \left(1 + \frac{E_j - E_{k\pm}}{E_i}\right)^{1/2}.$$

При $E_j \geq E_{k\pm}$, что соответствует случаю $e_{\pm} \geq 1$, точка пересечения (x_I, y_I) лежит за пределами области Ω_{\pm} . Функция $C_2(E_i, E_j, E_{k\pm})$ определяется соотношением

$$C_2(E_i, E_j, E_{k\pm}) = 2\Delta E^{-\theta/2} \int_{-1 - c_{\pm}(x)}^{+1} \int_{d(x)} \left|xE_i^{1/2} - yE_j^{1/2}\right|^{\theta} dy dx,$$

где $d(x) = x(E_i/E_j)^{1/2}$.

При $\theta \in N$ соотношения для $C_2 = C_2(\theta)$ получаются в конечном виде:

– при $\theta = 0$

$$(32) \quad C_2(0) = 2 \frac{E_{k\pm}^{1/2}}{E_j^{1/2}} + \frac{E_{k\pm} - E_i}{E_i^{1/2} E_j^{1/2}} \ln \left(\frac{E_{k\pm}^{1/2} + E_i^{1/2}}{E_{k\pm}^{1/2} - E_i^{1/2}} \right);$$

– при $\theta = 1$

$$(33) \quad C_2(1) = 2 \frac{3E_{k\pm} - E_i}{3\Delta E^{1/2} E_j^{1/2}}.$$

При $E_{k-} = 0$ получим, что $C_1(0) = C_1(1) = 0$. При произвольном θ используются методы численного интегрирования.

6.4. Случай 3 ($E_i \leq E_j \leq E_{k\pm}$). Область Ω_{\pm} имеет вид

$$\frac{y^2}{b_{\pm}^2} - \frac{x^2}{a_{\pm}^2} \leq 1,$$

где $a_{\pm} = (E_{k\pm}/E_i - 1)^{1/2}$, $b_{\pm} = [(E_{k\pm} - E_i)/E_j]^{1/2}$. Область Ω_{\pm} представляет собой комбинацию двух гипербол и границ области Ω . Для уменьшения объема вычислительной работы учитывается свойство симметрии на плоскости (x, y) . Рассматривается одна подобласть, для которой $q(E_i, E_j) \leq 0$. Поскольку $E_j \leq E_{k\pm}$, $e_{\pm} \leq 1$, то точка пересечения (x_I, y_I) между гиперболами и прямыми $y_I = \pm 1$ лежит внутри области Ω_{\pm} . Тогда

$$\begin{aligned} C_3(E_i, E_j, E_{k\pm}) = & 2\Delta E^{-\theta/2} \int_{-1}^{-e_{\pm}} \int_{-1}^{d(x)} \left(xE_i^{1/2} - yE_j^{1/2}\right)^{\theta} dy dx + \\ & + \Delta E^{-\theta/2} \int_{-e_{pm}}^{+e_{\pm}} \int_{-c_{\pm}(x)}^{d(x)} \left(xE_i^{1/2} - yE_j^{1/2}\right)^{\theta} dy dx + \\ & + 2\Delta E^{-\theta/2} \int_{+e_{\pm}}^{+1} \int_{-1}^{d(x)} \left(xE_i^{1/2} - yE_j^{1/2}\right)^{\theta} dy dx, \end{aligned}$$

где $d(x) = x(E_i/E_j)^{1/2}$.

При $\theta \in N$ соотношения для $C_3 = C_3(\theta)$ получаются в конечном виде:

— при $\theta = 0$

$$(34) \quad C_3(0) = 4 - 2 \left(\frac{E_i + E_j - E_{k\pm}}{E_i} \right)^{1/2} - 2 \frac{E_i - E_{k\pm}}{E_i^{1/2} E_j^{1/2}} \ln \left\{ \frac{E_j^{1/2} + (E_i + E_j - E_{k\pm})^{1/2}}{[E_j - (E_i + E_j - E_{k\pm})]^{1/2}} \right\};$$

— при $\theta = 1$

$$(35) \quad C_3(1) = \frac{2}{\Delta E^{1/2}} \left[E_j^{1/2} + \frac{E_i}{3E_j^{1/2}} - \frac{2}{3E_i^{1/2} E_j^{1/2}} (E_i + E_j - E_{k\pm})^{3/2} \right].$$

При $E_{k+} = E_i + E_j$ получим, что $C_3(0) = A_{ij}(0)$ и $C_3(1) = A_{ij}(1)$. При произвольном θ используются методы численного интегрирования.

7. МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ СКОРОСТЕЙ

Область Ω_{ij}^{kl} определяется как окрестность точек $(x, y) \in \Omega$, в которых для кинетических энергий молекул до столкновения (E_i, E_j) кинетические энергии молекул после столкновения $\tilde{E}'_i(x, y)$ и $\tilde{E}'_j(x, y)$ находятся в окрестности узла (E_k, E_l) . Допускается, в том числе, пустая область Ω_{ij}^{kl} . При $E_i + E_j < E_M$ кинетические энергии после столкновения попадают внутрь сетки для кинетической энергии. При $E_i + E_j > E_M$ некоторые кинетические энергии являются возможными с физической точки зрения, но они оказываются вне рассматриваемой сетки и исключаются из рассмотрения. Геометрические соображения приводят к заключению, что

— при $E_i + E_j \leq E_M$

$$\bigcup_{k=1}^M \bigcup_{l=1}^M \Omega_{ij}^{kl} = \Omega;$$

— при $E_i + E_j > E_M$

$$\bigcup_{k=1}^M \bigcup_{l=1}^M \Omega_{ij}^{kl} < \Omega.$$

При этом выполняются также следующие свойства:

— при $E_i + E_j \leq E_M$

$$\sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M B_{ij}^{kl} = A_{ij};$$

— при $E_i + E_j > E_M$

$$\sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M B_{ij}^{kl} < A_{ij}.$$

При $E_i + E_j \leq E_M$ знак равенства является следствием условий сохранения числа частиц и энергии на дискретной решетке (свойство консервативности). При $E_i + E_j > E_M$ кинетические энергии до столкновения, которые не попадают внутрь сетки, исключаются из рассмотрения, что приводит к исключению из рассмотрения соответствующих кинетических энергий после столкновения. Для повышения точности расчетов рассматривается интервал $[0, E_M/2]$.

Введем матрицу

$$(36) \quad \hat{A}_{ij} = \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M B_{ij}^{kl}.$$

Соотношение (26) принимает вид

$$(37) \quad \nu_i \approx \tilde{\nu}_i = F \Delta E \sum_{j=1}^M f_i E_j^{1/2} \hat{A}_{ij}.$$

Полагая $\tilde{Q}_i = \tilde{N}_i - \tilde{\nu}_i f_i$ и учитывая соотношения (28) и (37), получим

$$(38) \quad Q_i = Q(f_i, f_i) \approx \tilde{Q}_i = \tilde{F} \Delta E \sum_{j=1}^M E_j^{1/2} \left(\sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M f_k f_l B_{ij}^{kl} - f_i f_j \hat{A}_{ij} \right).$$

Рассмотрим консервативные свойства дискретного оператора \tilde{Q}_i . Учитывая, что dE'_* , dE' , dE_* , dE допускают приближение ΔE , получим

$$dx' dy' = \left[\frac{E_i E_j}{\tilde{E}'(x, y) \tilde{E}'_*(x, y)} \right]^{1/2} dx dy \approx \left(\frac{E_i E_j}{E_k E_l} \right)^{1/2} dx dy.$$

Из приведенных соотношений следует, что для макроскопических моментов свойство консервативности не выполняется (даже в случае выполнения свойства консервативности на микроскопическом уровне). Для введения поправки к методу дискретных скоростей умножим и разделим соотношение (38) на $E_i^{1/2}$, что приводит к уравнению

$$(39) \quad \frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{F \Delta E^2}{E_i^{1/2}} \sum_{j,k,l=1}^M \Gamma_{ij}^{kl} (f_k f_l - f_i f_j).$$

Матрица переходных частот имеет вид

$$(40) \quad \Gamma_{ij}^{kl} = \frac{(E_i E_j)^{1/2}}{\Delta E} B_{ij}^{kl}.$$

При этом имеет место свойство

$$\Gamma_{ij}^{kl} = \Gamma_{ji}^{kl} \approx \Gamma_{kl}^{ij}.$$

Требуется, что матрица переходных частот удовлетворяла свойству симметричности [26]. В общем имеется $4! = 24$ возможных перестановок индексов i, j, k и l , но только восемь перестановок гарантируют консервативность кинетической энергии. При совпадении двух индексов ($i = j$ или $k = l$) только четыре перестановки индексов гарантируют консервативность кинетической энергии. Множество переходных частот $\{\Gamma_{ij}^{kl}\}$ определяется перестановками индексов (i, j, k, l) , которые удовлетворяют свойству консервативности. Поправка к методу дискретных скоростей определяется следующим образом

$$\forall (i, j, k, l) : \Gamma_{ij}^{kl} \in \{\Gamma_{ij}^{kl}\}, \quad \tilde{\Gamma}_{ij}^{kl} = \overline{\{\Gamma_{ij}^{kl}\}}.$$

Черта означает среднее арифметическое рассматриваемого множества. В этом случае выполняется свойство

$$(41) \quad \tilde{\Gamma}_{ij}^{kl} = \tilde{\Gamma}_{ji}^{kl} = \tilde{\Gamma}_{kl}^{ij}.$$

При этом

$$(42) \quad \tilde{B}_{ij}^{kl} = \frac{\Delta E}{(E_i E_j)^{1/2}} \tilde{\Gamma}_{ij}^{kl},$$

$$(43) \quad \tilde{A}_{ij}^{kl} = \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M \tilde{B}_{ij}^{kl}.$$

Такие определения приводят к тому, что число частиц и кинетическая энергия сохраняются на макроскопическом уровне. Для расчета величин $\tilde{\nu}_i$ и \tilde{Q}_i используются \tilde{B}_{ij}^{kl} и \tilde{A}_{ij}^{kl} вместо B_{ij}^{kl} и \hat{A}_{ij}^{kl} . При использовании DVM поправки $\tilde{A}_{ij}^{kl} \neq A_{ij}$ при $E_i + E_j \leq E_M$ (хотя $\hat{A}_{ij}^{kl} = A_{ij}$). Схожие идеи используются в методе решеточных уравнений Больцмана, в котором консервативность гидродинамических величин обеспечивается на решетках малой размерности [22].

8. РАСЧЕТ МОМЕНТОВ

Для расчета моментов, определяемых соотношением (19), применяется кусочно-постоянная аппроксимация. Такой подход является совместимым с расчетом интеграла столкновений $Q(f, f) = N(f, f) - \nu f$. Свойство, описываемое соотношением (41), имеет место только в случае кусочно-постоянной аппроксимации. Используя кусочно-постоянную аппроксимацию, запишем уравнение (19) в виде

$$(44) \quad \Phi_p \approx \tilde{\Phi}_p = 4\pi\sqrt{2}\Delta E \sum_{i=1}^M f_i E_i^{p+1/2}.$$

Реализация такого подхода не вызывает затруднений, за исключением определения условия локального равновесия. На дискретном уровне условие локального равновесия определяется как $(f_E)_i = f_E(E_i)$. При этом имеет место совпадение дискретных значений функции распределения с узловыми значениями непрерывной функции f_E , определяемой соотношением (22). Применение подхода дает $\tilde{\Phi}_0[(f_E)_i] \neq n$ и $\tilde{\Phi}_1[(f_E)_i] \neq ne$, где n и e определяются соотношениями (20) и (21), что оказывает влияние на численную погрешность.

Для дискретной функции распределения f_i полагается, что $\tilde{n} = \tilde{\Phi}_0(f_i)$ и $\tilde{n}\tilde{e} = \tilde{\Phi}_1(f_i)$. Равновесная функция распределения определяется соотношением

$$(45) \quad (\tilde{f}_E)_i = \exp[-(\tilde{c}_0 + \tilde{c}_1 E_i)].$$

Постоянные \tilde{c}_0 и \tilde{c}_1 находятся из условий

$$\tilde{\Phi}_0[(\tilde{f}_E)_i] = \tilde{n}, \quad \tilde{\Phi}_1[(\tilde{f}_E)_i] = \tilde{n}\tilde{e}.$$

Рекурсивный подход к определению условия локального равновесия приводит к тому, что число частиц и энергия остаются постоянными. При известной функции распределения (например, из начальных условий) используются соотношения $\tilde{n} = \Phi_0(f)$ и $\tilde{n}\tilde{e} = \Phi_1(f)$.

9. УРАВНЕНИЕ ВГК

Для описания условий, близких к равновесным, используется приближенное представление интеграла столкновений \tilde{Q}_i . Для расчета частоты релаксации,

определяемой соотношением (37), используется равновесная функция распределения. Вместо коэффициентов \widehat{A}_{ij} в соотношении (37) используются A_{ij} , а частота релаксации находится из соотношения $\tilde{\nu}_i = (\nu_E)_i$, где

$$(46) \quad (\nu_E)_i = \tilde{F} \Delta E \sum_{j=1}^M A_{ij} E_j^{1/2} (\tilde{f}_E)_j.$$

Вместо соотношения (38) используется следующая аппроксимация

$$(47) \quad \tilde{Q}_i \approx (\tilde{Q}_B)_i = (\nu_E)_i \left[(\tilde{f}_E)_i - f_i \right].$$

Частота $(\nu_E)_i$ зависит от кинетической энергии молекул E_i . В случае постоянного ядра ($\theta = 0$), когда $A_{ij}(0) = 4$, получим

$$\nu_E(0) = 4 \tilde{F} \Delta E \sum_{j=1}^M E_j^{1/2} (\tilde{f}_E)_j = \frac{\tilde{F} \tilde{n}}{\pi \sqrt{2}} = \frac{F \tilde{n}}{\pi \sqrt{2}}.$$

В этом случае частота релаксации $\nu_E(0)$ зависит только от концентрации молекул. Для модели твердых сфер ($\theta = 1$) используется функция ошибок. В предельном случае для высоких кинетических энергий при $E_i > E_j$ имеем

$$\lim_{E_i \rightarrow E_M} (\nu_E)_i(1) = \frac{2E_i^{1/2}}{c_s} F \Delta E \sum_{j=1}^M E_j^{1/2} (\tilde{f}_E)_j = \frac{F \tilde{n}}{\pi \sqrt{2}} \frac{E_i^{1/2}}{2c_s}.$$

Приближение ВГК (Bhatnagar–Gross–Krook), соответствующее постоянной частоте релаксации, имеет вид [1]

$$(\tilde{Q}_{\text{ВГК}})_i = \nu_{\text{ВГК}} \left[(\tilde{f}_E)_i - f_i \right].$$

Для простоты полагается $\nu_{\text{ВГК}} = (\nu_E)_1$, где $(\nu_E)_1$ соответствует $(\nu_E)_i$ при $E_1 = \Delta/2$. В общем случае необходимо учитывать, что $\nu_{\text{ВГК}} = \lim_{E \rightarrow 0} \nu_E(E)$.

10. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Рассмотрим особенности программной реализации подхода к расчету интеграла столкновений, а также структуры данных и возможные пути сокращения требований к вычислительным ресурсам.

10.1. Основные шаги. Решение уравнения Больцмана реализуется в виде следующей последовательности шагов.

1. Задание входных данных и расчет необходимых параметров.
2. Задание сетки и интервала интегрирования по времени. Расчет шага сетки и шага интегрирования по времени.
3. Инициализация функции распределения в узлах сетки при помощи соотношения (48).
4. Формирование структуры $B(i, j)$, которая содержит как элементы матрицы B_{ij} , так и ряд параметров, необходимых для упрощения доступа к данным. Матрица B_{ij} используется для расчета члена интеграла столкновений, ответственного за приобретение молекулами энергии (gain term). Производится вызов функции `B_Hard_Sphere_Model`, параметром которой является число узлов сетки M . Эта функция считывает данные из внешнего файла при его наличии либо вызывает вспомогательную функцию `B_Hard_Sphere_Model_Creator`, которая производит необходимые вычисления. Результаты записываются во

внешний файл для последующего доступа к данным. Расчеты проводятся по различным формулам при использовании модели DVM и модели, учитывающей поправку на консервативность числа частиц и энергии (структура файлов и их имена различаются в этих случаях).

4.1. Расчет элементов матрицы B_{ij} производится при помощи вызова функции `V_Hard_Sphere_Model_Creator`, параметром которой является число узлов сетки M . Эта же функция присваивает значения элементам структуры $V(i, j)$. Расчет элементов B_{ij}^{kl} используется соотношение (29).

4.2. Производится вызов функции `C_Hard_Sphere_Model`, параметрами которой являются энергии E_i, E_j, E_{k+} для расчета $C(E_{k+})$ и E_i, E_j, E_{k-} для расчета $C(E_{k-})$. В зависимости от соотношения между энергиями молекул производится выбор одного расчетного случая из трех возможных. Для расчетов используются соотношения (31) для C_1 , соотношение (33) для C_2 и соотношение (35) для C_3 .

4.3. Применение поправки DVM к элементам структуры $V(i, j)$. Элементы матрицы \tilde{B}_{ij}^{kl} находятся при помощи соотношения (42) с использованием соотношения (40) для расчета Γ_{ij}^{kl} .

5. Формирование матрицы A , используя соотношение (27). Матрица A применяется для расчета равновесных частот релаксации $(\nu_E)_i$, используя соотношение (46). Формирование матрицы A производится при помощи вызова функции `A_Hard_Sphere_Model`, параметром которой является число узлов сетки M . Матрица A используется для расчета члена интеграла столкновений, ответственного для потерю энергии.

5.1. Расчет элементов матрицы \hat{A}_{ij} с использованием соотношения (36), когда поправка DVM не учитывается, или элементов матрицы \tilde{A}_{ij} с использованием соотношения (43), когда поправка DVM учитывается. В обоих случаях используется сформированная ранее матрица B_{ij} . Энергии молекул после столкновения, которые находятся вне рассматриваемого интервала, исключаются из рассмотрения.

6. Рекурсивная проверка выполнения условия равновесия.

6.1. Вызов функции `Equilibrium` для сравнения функции распределения в узлах сетки с равновесным распределением.

6.2. Расчет моментов функции распределения при помощи вызова функции `Phi` с использованием соотношения (44). Нахождение числа частиц и энергии при помощи вызова функции `Thermodynamics`.

6.3. Расчет равновесных частот релаксации $(\nu_E)_i$ при помощи соотношения (46). Для расчетов вызывается функция `Nu_Equilibrium`, в качестве параметров которой используются значения функции распределения, энергии и матрицы A в узлах сетки.

7. Основной цикл.

8. Построение распределений искомых функций и моментов.

10.2. Схема программы. Программа состоит из двух основных частей, связанных с расчетом структуры данных $V(i, j)$, в которой хранятся безразмерные частоты, и основным циклом, в котором производится расчет интеграла столкновений и интегрирование по времени (для простоты используется явная схема Эйлера).

```

// основная программа
// theta=0 (постоянное ядро столкновений)
B_Constant_Kernel_Model(M)
  B_Constant_Kernel_Model_Creator(M)
    C_Constant_Kernel_Model(nEi,nEj,Ek±/ΔE)=C±
    // перестановки
    EnergyPerms(v), где v = [i,j,k,l]T
    // загрузка данных, если файл существует
    Read_B(B,i,j,k,l)=Bijkl
    // сохранение
    Write_B(B,i,j,k,l,Bijkl)
// theta=1 (модель твердых сфер)
B_Hard_Sphere_Model(M)
  B_Hard_Sphere_Model_Creator(M)
    C_Hard_Sphere_Model(nEi,nEj,Ek±/ΔE)=C±
    // перестановки
    EnergyPerms(v), где v = [i,j,k,l]T
    // загрузка данных, если файл существует
    Read_B(B,i,j,k,l)=Bijkl
    // сохранение
    Write_B(B,i,j,k,l,Bijkl)
//  $\hat{A}_{ij}$ 
A_Hard_Sphere_Model(M)
// состояние равновесия
Equilibrium(fi,Ei,ΔE)=fE
// макроскопические свойства
Thermodynamics(fi,ΔE)=[ $\tilde{n},\tilde{e},k_B\tilde{T}$ ]
// приближение BGK
Nu_Equilibrium(F,ΔE,Ei,(fE)i,A)=(νE)i
// моменты
Phi(fi,ΔE,p)=Φp

```

10.3. Структуры данных. Расчет и формирование матрицы безразмерных частот \tilde{B}_{ij}^{kl} является наиболее затратным шагом с вычислительной точки зрения. В матрице \tilde{B}_{ij}^{kl} хранятся все данные, соответствующие переходу $(E_k, E_l) \rightarrow (E_i, E_j)$. В матрице \tilde{A}_{ij} хранятся данные, соответствующие переходу $(E_i, E_j) \rightarrow (E_k, E_l)$.

Матрица безразмерных частот \tilde{B}_{ij}^{kl} является четырехмерной разреженной матрицей, которая хранится в особом формате, используя структуру $V(i, j)$. Введем множество Λ_{ij} , сформированное всеми парами натуральных индексов (k, l) , для которых $E_k + E_l = E_i + E_j$ при $0 < E_k < E_M$ и $0 < E_l < E_M$. Число элементов множества Λ_{ij} обозначим через M_{ij} . Каждая пара индексов из множества Λ_{ij} идентифицируется числом λ таким, что $[k(\lambda), l(\lambda)] \in \Lambda_{ij}$, $1 \leq \lambda \leq M_{ij}$. Такой подход позволяет уменьшить число операций в соотношении

(38), которое принимает вид

$$\tilde{Q}_i = \tilde{F}\Delta E \sum_{j=1}^M E_j^{1/2} \left(\tilde{\Psi}_{ij} - f_i f_j \tilde{A}_{ij} \right),$$

где

$$\tilde{\Psi}_{ij} = \sum_{\lambda=1}^{M_{ij}} f_{k(\lambda)} f_{l(\lambda)} \tilde{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}.$$

Под $\tilde{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ понимается \tilde{B}_{ij}^{kl} при $k = k(\lambda)$ и $l = l(\lambda)$. Доступ к матрице \tilde{B}_{ij}^{kl} осуществляется при помощи указания натурального числа λ .

Структура данных $V(i, j)$ имеет следующих формат

```
// структура V(i, j)
V(i, j).howmany=Mij
V(i, j).k(λ)=k(λ)
V(i, j).l(λ)=l(λ)
V(i, j).nEkm(λ)=Ek(λ)-/ΔE = k(λ) - 1
V(i, j).nEkp(λ)=Ek(λ)+/ΔE = k(λ)
V(i, j).value(λ)= $\tilde{B}_{ij}^{k(\lambda)l(\lambda)}$ 
```

При этом имеется возможность формирования структуры данных $V(i, j)$ на подготовительном этапе и ее сохранения в отдельном файле для его использования в последующих расчетах. Подготовительные расчеты проводятся для различных значений M .

10.4. Основной цикл. Основной цикл связан с расчетом $\tilde{Q}_i = \tilde{N}_i - \tilde{\nu}_i f_i$ на данном шаге по времени. Расчеты осуществляются при помощи соотношений

$$\tilde{N}_i = \tilde{F}\Delta E^{3/2} \sum_{j=1}^M (j - 1/2)^{1/2} \tilde{\Psi}_{ij};$$

$$\tilde{\nu}_i = \tilde{F}\Delta E^{3/2} \sum_{j=1}^M (j - 1/2)^{1/2} f_j \tilde{A}_{ij}.$$

Основной цикл программы имеет следующий вид.

```
// интегрирование по времени
for t=... (time)
  for i=1:M
    N(i)=0;
    nu(i)=0;
    for j=1:M
      // положительный вклад
      Psi(i, j)=0;
      for m=1:V(i, j).howmany
        k=V(i, j).k(m);
        l=V(i, j).l(m);
        Bijkm=V(i, j).value(m);
        Psi(i, j)=Psi(i, j)+f(k)*f(l)*Bijkm;
      end
    end
  end
end
```

```

N(i)=N(i)+F*DeltaE*(3/2)*(j-1/2)^(1/2)*Psi(i,j);
// отрицательный вклад
nu(i)=nu(i)+F*DeltaE*(3/2)*(j-1/2)^(1/2)*f(j)*A(i,j);
end
Q(i)=N(i)-nu(i)*f(i);
end
// явная схема Эйлера
f=f+Deltat*Q;
end

```

11. ТЕСТОВЫЙ ПРИМЕР

Рассмотрим разреженный газ, состоящий из молекул, взаимодействия между которыми описываются при помощи ядра столкновений (3) с параметрами $a = 1$, $c_s = 50$, $\theta = 1$ (модель твердых сфер). Приведенные значения параметров выбираются для удобства проведения оценок. Вместо пространства R^+ рассматриваются только молекулы, кинетические энергии которых находятся в интервале $[0, E_M]$. Для улучшения точности расчет выбирается интервал $[0, E_M/2]$. Начальные условия задаются в виде $f(t = 0, E) = f_I(E)$, где

$$(48) \quad f_I(f_0, G_0, G_{00}) = f_0 \exp \left[-\frac{(E^{1/2} - G_0^{1/2})^2}{G_{00}} \right].$$

Параметрам присваиваются следующие значения: $E_M = 5000$, $f_0 = 5 \cdot 10^{-4}$, $G_0 = 600$, $G_{00} = 35$.

Интервал времени, на котором проводятся расчеты, определяется временем релаксации. Характеристический масштаб времени, связанный с релаксацией системы, оценивается как $\tau \sim (nF)^{-1} \sim (na^2c_s)^{-1} \sim a^{-2}$. Выбор интервала времени зависит от того, насколько начальное состояние системы далеко от равновесия. В расчетах полагается, что $T_F = 10^{-3}$.

Интервал $[0, E_M]$ разбивается на $M = 100$ участков с шагом $\Delta E = E_M/M$. Временной интервал T_F разбивается на $T = 100$ частей с шагом $\Delta t = T_F/T$. Для интегрирования уравнения Больцмана используется явная схема Эйлера, что накладывает ограничения на шаг по времени

$$\Delta T < k_\gamma \Delta E^\gamma,$$

где k_γ — постоянная. Показатель степени γ определяет условие устойчивости ($\gamma = 1$ для адвекции и $\gamma = 2$ для диффузии).

Для контроля за процессом релаксации производится расчет нескольких моментов $\tilde{\Phi}_p$, описываемых соотношением (44), где $p = 2, \dots, 9$.

Изменение функции распределения во времени показывает рис. 1. Функция распределения в начальный момент времени $f(t = 0, E) = f_I(E)$ описывается соотношением (48), а в конечный момент времени, соответствующий условию локального равновесия, функция распределения f_E задается соотношением (45). Имеет место достаточно быстрое изменение функции распределения на начальной стадии релаксации (кинетический режим), которое в существенной степени замедляется по мере приближения системы к состоянию равновесия (континуальный режим).

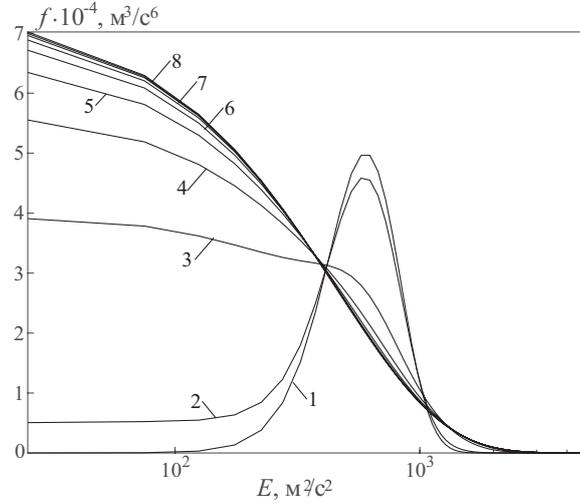


Рис. 1. Изменение функции распределения во времени. Линия 1 соответствует начальному распределению, а линия 8 — распределению в состоянии локального равновесия. Линии 2–7 соответствуют моментам времени 10 (2), 30 (3), 40 (5), 50 (6), 60 (7)

Несмотря на то, что результаты, представленные в виде динамики изменения функции распределения, достаточно хорошо описывают поведение системы, их недостаточно для оценки точности подхода. Оценка точности требует расчета моментов различного порядка и исследования их изменения во времени. Скорость релаксации момента порядка p определяется соотношением

$$\tilde{R}_p = \frac{\tilde{\Phi}_p - \tilde{\Phi}_p^E}{\tilde{\Phi}_p^E},$$

где $\tilde{\Phi}_p^E = \tilde{\Phi}_p(\tilde{f}_E)$. Изменение макроскопических моментов порядка $p = 2, \dots, 9$ во времени показывает рис. 2. Изменение скорости релаксации моментов различного порядка, нормированной на скорость релаксации в начальный момент времени $\tilde{R}_p/\tilde{R}_p(0)$, показывает рис. 3. С течением времени моменты различного порядка стремятся к нулю, что является одной из характеристик точности.

Для дополнительной проверки точности используется частота релаксации момента порядка p , которая определяется соотношением

$$\tilde{\nu}_p = \frac{\tilde{\Phi}_p^Q}{\tilde{\Phi}_p^E - \tilde{\Phi}_p},$$

где $\tilde{\Phi}_p^Q = \tilde{\Phi}_p(\tilde{Q})$. Результаты нормируются на частоту релаксации $\nu_{\text{ВГК}}$, соответствующую уравнению ВГК, которая полагается равной $\nu_{\text{ВГК}} = (\nu_E)_1$, где $(\nu_E)_1$ соответствует частоте $(\nu_E)_i$ при $E_1 = \Delta E/2$, рассчитываемой по соотношению (46). Изменение относительной частоты релаксации моментов различного порядка показывается рис. 4. Приведенные результаты показывают, что $\tilde{\nu}_p < \nu_{\text{ВГК}}$ на достаточно протяженном интервале времени. При $t \rightarrow \infty$

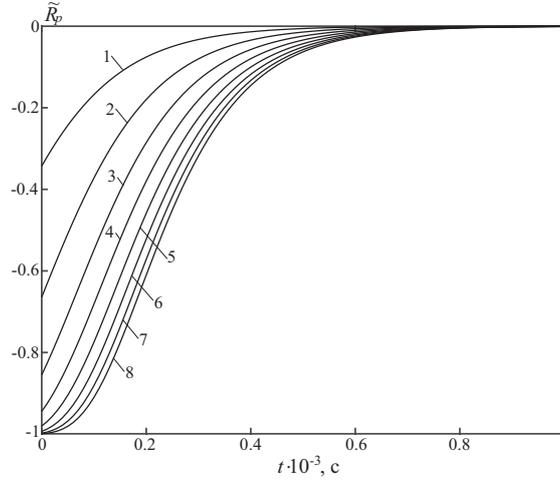


Рис. 2. Изменение скорости релаксации моментов различного порядка во времени при $p = 2$ (1), 3 (2), 4 (3), 5 (4), 6 (5), 7 (6), 8 (7), 9 (8)

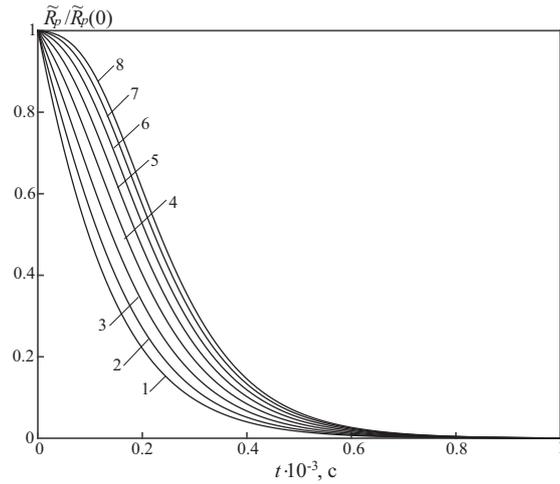


Рис. 3. Изменение относительной скорости релаксации моментов различного порядка во времени при $p = 2$ (1), 3 (2), 4 (3), 5 (4), 6 (5), 7 (6), 8 (7), 9 (8)

относительные частоты релаксации моментов различного порядка стремятся к предельному значению $\tilde{\nu}_p / \nu_{\text{ВГК}} = 0.665$.

Рассмотрим приближение ВГК, которое описывается соотношением (47). Полагая $\tilde{Q}_i \approx (\tilde{Q}_B)_i$ и опуская для простоты индекс i , получим

$$\tilde{\nu}_p = \frac{\tilde{\Phi}_p [\nu_E (\tilde{f}_E - f)]}{\tilde{\Phi}_p (\tilde{f}_E - f)}.$$

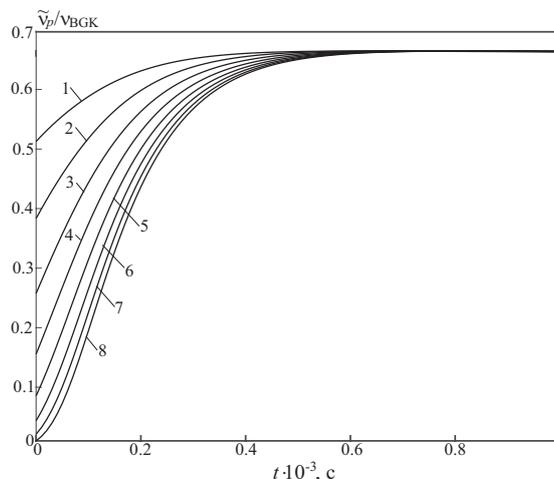


Рис. 4. Изменение относительной частоты релаксации моментов различного порядка во времени при $p = 2$ (1), 3 (2), 4 (3), 5 (4), 6 (5), 7 (6), 8 (7), 9 (8)

Весовой множитель $\tilde{f}_E - f$ является положительным или отрицательным в зависимости от начальных условий. В частности, для начальных условий, описываемых соотношением (48), $(\tilde{f}_E - f)_i < 0$ для высоких кинетических энергий. В модели твердых сфер частота релаксации $(\nu_E)_i$ изменяется монотонным образом $(\nu_E)_i \sim E_i^{1/2}$. При увеличении p (для моментов высокого порядка) такой вклад возрастает, что объясняет медленное приближение к состоянию равновесия моментов высокого порядка.

12. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработка программных комплексов является одним из основных направлений в развитии технологии численного моделирования течений разреженного газа, которые описываются уравнением Больцмана. Такие комплексы позволяют сократить время и уменьшить затраты на проведение исследований по созданию образцов аэрокосмической техники, а также повысить качество и надежность этих работ.

Разработан подход к вычислению интеграла столкновений в уравнении Больцмана в изотропном и однородном случае. Для дискретизации по времени используется явная схема Эйлера (пространственно-однородный этап). Метод обеспечивает выполнение условия консервативности на макроскопическом уровне.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект «Математическое моделирование на супер-ЭВМ экса-и зеттафлопсной производительности»).

REFERENCES

- [1] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook, *Model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems*, Physical Review, **94**:3 (1954), 511–525.

- [2] G.A. Bird, *Setting the post-reaction internal energies in direct simulation Monte Carlo chemistry simulations*, Physics of Fluids, **24** (2012), 127104.
- [3] A.K. Chinnappan, G. Malaikannan, R. Kumar, *Insights into flow and heat transfer aspects of hypersonic rarefied flow over a blunt body with aerospike using direct simulation Monte-Carlo approach*, Aerospace Science and Technology, **66** (2017), 119–128.
- [4] A. Shoja-Sani, E. Roohi, S. Stefanov, *Homogeneous relaxation and shock wave problems: assessment of the simplified and generalized Bernoulli trial collision schemes*, Physics of Fluids, **33** (2021), 032004.
- [5] V.I. Kolobov, R.R. Arslanbekov, V.V. Aristov, A.A. Frolova, S.K. Zabelok, *Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement*, Journal of Computational Physics, **223**:2 (2007), 589–608.
- [6] R.R. Arslanbekov, V.I. Kolobov, A.A. Frolova, *Analysis of compressible viscous flow solvers with adaptive Cartesian mesh*, AIAA Paper, 2011-3381 (2011).
- [7] Yu.A. Anikin, O.I. Dodulad, Yu.Yu. Kloss, D.V. Martynov, P.V. Shuvalov, F.G. Tcheremissine, *Numerical modeling of Knudsen's thermal creep experiment*, Journal of Physics: Conference Series, **362** (2012), 012037.
- [8] V.V. Aristov, A.A. Frolova, S.A. Zabelok, R.R. Arslanbekov, V.I. Kolobov, *Simulations of pressure-driven flows through channels and pipes with unified flow solver*, Vacuum, **86**:11 (2012), 1717–1724.
- [9] K.N. Volkov, V.N. Emelyanov, A.V. Pustovalov, *Discretization of Boltzmann equation using finite-volume method and explicit-implicit schemes*, Siberian Electronic Mathematical Reports, **20**:2 (2023), 942–960.
- [10] A.V. Bobylev, A. Palczewski, J. Schneider, *On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models*, Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, **320** (1995), 639–644.
- [11] C. Mouhot, L. Pareschi, T. Rey, *Convolutional decomposition and fast summation methods for discrete-velocity approximations of the Boltzmann equation*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, **47**:5 (2013), 1515–1531.
- [12] J. Hu, K. Qi, *A fast Fourier spectral method for the homogeneous Boltzmann equation with non-cutoff collision kernels*, Journal of Computational Physics, **423** (2020), 109806.
- [13] L. Wu, C. White, T.J. Scanlon, J.M. Reese, Y. Zhang, *Deterministic numerical solutions of the Boltzmann equation using the fast spectral method*, Journal of Computational Physics, **250** (2013), 27–52.
- [14] A.M.P. Boelens, D. Venturi, D.M. Tartakovsky, *Tensor methods for the Boltzmann-BGK equation*, Journal of Computational Physics, **421** (2020), 109744.
- [15] L. Pareschi, B. Perthame, *A Fourier spectral method for homogeneous Boltzmann equation*, Transport Theory and Statistical Physics, **25** (1996), 369–382.
- [16] A. Alekseenko, J. Limbacher, *Evaluating high order discontinuous Galerkin discretization of the Boltzmann collision integral in $O(N^2)$ operations using the discrete Fourier transform*, Kinetic and Related Models, **12** (2019), 703.
- [17] A.V. Bobylev, S. Rjasanow, *Difference scheme for the Boltzmann equation based on fast Fourier transformation*, European Journal of Mechanics. B/Fluids, **16** (1997), 293–306.
- [18] C. Watchararuangwita, Y.N. Grigoriev, S.V. Meleshko, *A deterministic spectral method for solving the Boltzmann equation for one-dimensional flows*, Science Asia, **35** (2009), 70–79.
- [19] A.V. Bobylev, S. Rjasanow, *Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres*, European Journal of Mechanics. B/Fluids, **18** (1999), 869–887.
- [20] I. Ibragimov, S. Rjasanow, *Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid*, Computing, **69** (2002), 163–186.
- [21] C. Cercignani, *The Boltzmann equation and its applications*. New York: Springer-Verlag, 1988, 455 p.
- [22] S. Succi, *Lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Oxford: Oxford University Press, 2001, 287 p.
- [23] D.L. Marchisio, R.O. Fox, *Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments*, Journal of Aerosol Science, **36**:43 (2005), 43–73.
- [24] V.V. Aristov, *Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001, 304 p.
- [25] P. Asinari, *Nonlinear Boltzmann equation for the homogeneous isotropic case: minimal deterministic Matlab program*, Computer Physics Communications, **181**:101 (2010), 1776–1788.

- [26] A.V. Bobylev, M.C. Vinerean, *Construction of discrete kinetic models with given invariants*, Journal of Statistical Physics, **132**:1 (2008), 153–170.

KONSTANTIN VOLKOV, VLADISLAV EMELIANOV, ALEXANDER PUSTOVALOV
BALTIC STATE TECHNICAL UNIVERSITY,
1-YA KRASNOARMEYSKAYA UL., 1,
190005, ST PETERSBURG, RUSSIA
E-mail address: `dsci@mail.ru`