

А.Б. Хмелев¹, М.В. Калинин², В.В. Рябченков², П.В. Шувалов²

¹ *Московский физико-технический институт*

² *Национальный исследовательский центр Курчатовский институт*

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ТЕЧЕНИЯ ПУАЗЕЙЛЯ

Аннотация: Проведено компьютерное моделирование течения Пуазейля на основе численного решения уравнения Больцмана. Оператор переноса аппроксимировался методом конечных объемов с использованием тетраэдрических сеток и сеток в виде призм. Интеграл столкновений вычислялся проекционным методом. Проведено параметрическое исследование течения при различных разбиениях сетки по длине трубки.

Ключевые слова: проекционный метод, метод конечных объемов, уравнение Больцмана, течение Пуазейля.

A. Hmelev¹, M. Kalinin², V. Ryabchenkov², P. Shuvalov²

¹ *Moscow Institute of Physics and Technology*

² *NRC "Kurchatov Institute"*

DEVELOPMENT OF METHODS OF COMPUTER MODELING AND ANALYSIS OF POISEUILLE FLOW.

Abstract: A computer simulation of Poiseuille flow on the basis of numerical solutions of the Boltzmann equation was conducted. Transfer operator was approximated by finite volume method using a tetrahedral mesh and meshes in the form of prisms. The collision integral was calculated by the projection method. A parametric study of flow in different partitions of the grid along the length of the tube was conducted.

Key words: projection method, finite volume method, Boltzmann equation, Poiseuille flow.

Введение

Современное развитие технологий позволяет разрабатывать, конструировать и создавать различные микро- и наноустройства: MEMS [1], микронасосы [2], газовые анализаторы [3]. Одним из важных направлений исследования в этой области является изучение неравновесных течений газов в микроструктурах. В микроустройствах при нормальных условиях длина свободного пробега соизмерима с характерными размерами течения, что влечет за собой неприменимость традиционного подхода моделирования газовых течений – решение уравнений непрерывной

среды (уравнений Навье-Стокса). Необходимо кинетическое описание газа, основой которого является кинетическое уравнение Больцмана.

Кинетическое уравнение Больцмана позволяет изучать течение разреженного газа и определять его макропараметры (плотность, температуру, среднюю скорость) путем интегрирования функции распределения молекул по скоростям. Аналитически решить кинетическое уравнение ввиду его сложности возможно лишь для узкого ряда задач. В большинстве случаев приходится применять численные методы.

В данной работе на основе численного решения кинетического уравнения Больцмана изучается один из возможных вариантов течений Пуазейля. Исследование течения Пуазейля через микро полости и микро трубки имеет большой практический интерес, например, при конструировании вакуумного оборудования, фильтрующих мембран, газовых анализаторов и т. д.[4]. В работах [5] и [6] задача исследуется численно с помощью метода статистического моделирования и решения модельного уравнения, соответственно. Помимо этого, задача течения Пуазейля является классической задачей газовой динамики и может использоваться для верификации солверов.

Постановка краевой задачи

Геометрия моделируемого устройства представляет собой соединенные длинной цилиндрической трубкой большие резервуары. На Рис. 1 показана схема рассматриваемой задачи, состоящая из: цилиндрической трубки постоянного диаметра, А – резервуара с повышенным давлением, В – резервуара с пониженным давлением. Стрелка указывает направление течения газа, создающееся повышенным давлением в резервуаре А. Отношение давлений $\frac{P_A}{P_B} = 1.1$

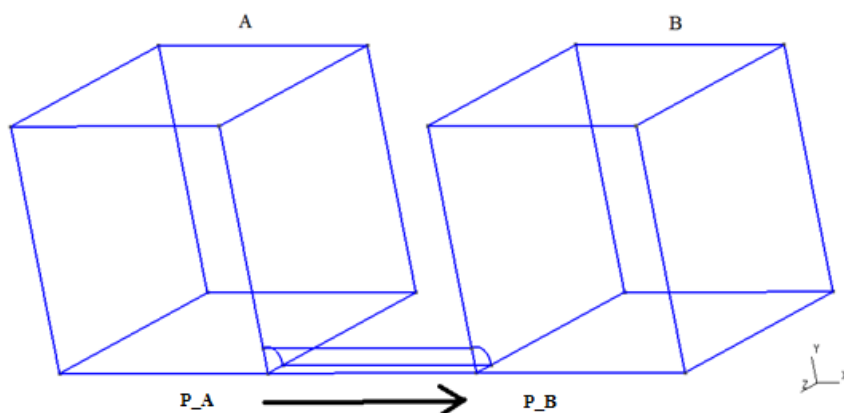


Рис. 1. Течение Пуазейля по цилиндрической трубке постоянного диаметра.

Геометрия рассматриваемой задачи симметрична относительно 2-х плоскостей, поэтому для уменьшения объема вычислений целесообразно моделировать движение газа в одной из таких областей. Поступая таким образом, мы решим задачу для всей системы.

Обозначим r – радиус трубки. Расчёты проводились для 3-х длин трубки L :

- 1) $L = 10 * r$
- 2) $L = 50 * r$
- 3) $L = 100 * r$

Число Кнудсена было равным $Kn = L/\lambda = 2$

В начальный момент функция распределения по скоростям газа внутри системы имеет максвелловский вид при температуре T_0 и числовой плотности молекул n_A в трубке и n_B в резервуаре повышенного давления, $n_A = 1.1n_B$

$$f(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = n_0 \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi k T_0}\right)^3} \exp\left(-\frac{m(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2k T_0}\right)$$

где ξ_x, ξ_y, ξ_z - проекции скорости молекулы на координатные оси, m - масса молекулы газа, k - постоянная Больцмана.

Температуры стенок резервуаров А и В равны T_0 . Отражение молекул от стенок резервуаров и трубки является диффузным с максвелловским распределением по скоростям. Температура отраженных молекул равна температуре стенки. От плоскостей симметрии молекулы отражаются зеркально.

Построение пространственной сетки

Время, затрачиваемое на численное решение уравнения Больцмана, линейно зависит от числа ячеек в координатном пространстве, поэтому сетка должна отвечать следующим требованиям:

1) сгущаться в тех областях, в которых движение газа представляет наибольший интерес, и быть менее подробной там, где важно только распределение макропараметров.

2) сгущаться у искривленных поверхностей расчетной области для того, чтобы лучше повторять геометрию системы.

Этим требованиям удовлетворяет сетка, представленная на Рис. 2.

Геометрия системы и сетки были получены с помощью программы GMSH [7] - это генератор конечно-элементных сеток со встроенным CAD-редактором и модулем постобработки данных. GMSH — это быстрый, легковесный и дружелюбный генератор сеток с параметрическим представлением данных (как через графический интерфейс (OpenGL API), так и через собственный скриптовый язык) и расширенными возможностями визуализации.

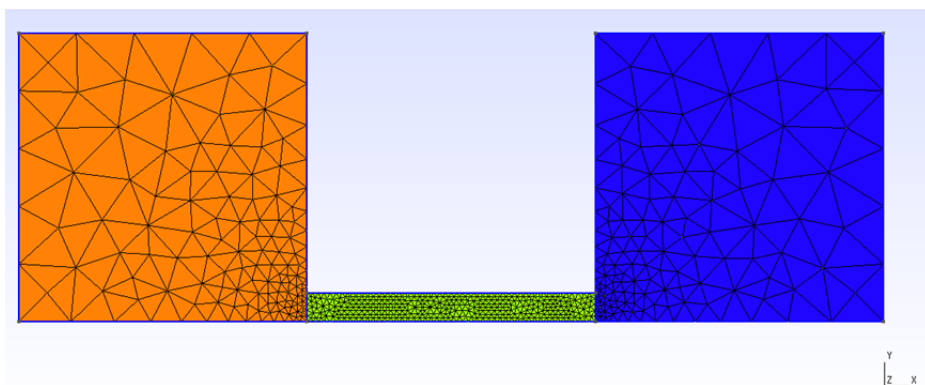


Рис. 2. Неравномерная тетраэдрическая сетка.

Переход к безразмерным переменным и функциям

Для перехода от размерных переменных к безразмерным используются четыре нормирующие постоянные: температура T_0 , плотность n_0 , масса m , диаметр σ . Обезразмеривание переменных производится введением нормировочных констант:

Скорость:

$$v_0 = \sqrt{\frac{kT_0}{m}},$$

Импульс:

$$p_0 = \sqrt{kT_0 m},$$

Длина:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n_0 \sigma_{\text{eff}}^2},$$

Время:

$$\tau_0 = \frac{\lambda}{v_0}.$$

Соответственно переменные в безразмерном виде определяются выражениями:

$$p^* = \frac{p}{p_0}, \quad t^* = \frac{t}{\tau_0}, \quad b^* = \frac{b}{\sigma_{\text{eff}}}, \quad x^* = \frac{x}{\lambda}, \quad f^* = \frac{f}{n_0 v_0^{-3}}$$

Далее везде будем опускать знак $*$ у переменных и будем работать с безразмерными переменными.

Здесь в качестве исходной системы единиц можно брать, например, СГСЭ или СИ. При этом надо помнить, что при переходе от безразмерных единиц необходимо брать ту же систему измерения.

Уравнение Больцмана принимает вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} I \quad (1)$$

Кроме того, будем считать равной 1 константу Больцмана, а массу близкой единице.

Конечно-разностная схема.

Для численного решения уравнения (1) необходимо перейти от непрерывной функции распределения к дискретной. Для этого введем скоростную сетку, построение которой осуществляется следующим образом. Вначале определяется куб в пространстве скоростей и в нем строится равномерная сетка узлов. Выбор равномерной сетки узлов обусловлен методом вычисления интеграла столкновений. Ребро куба равно $4.8\sqrt{T_l}$. Затем в куб вписывается сфера, и исключаются все внешние узлы. Число узлов сетки сокращается примерно вдвое. Далее уравнение (1) решается в каждом из N_0 равноотстоящих скоростных узлов ξ_γ в каждой ячейке пространственной тетраэдрической сетки.

В скоростном пространстве функция распределения и интеграл столкновений могут быть представлены на базисе δ -функций в виде

$$f(\xi, \mathbf{x}, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} f_\gamma(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_\gamma), \quad I(\xi, \mathbf{x}, t) = \sum_{\gamma=1}^{N_0} I_\gamma(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_\gamma)$$

Для определения дискретных значений $I_\gamma(\mathbf{x}, t)$ интеграла столкновений используется проекционный метод [11-13], сохраняющий массу, импульс и энергию, а также дающий точное значение интеграла, равное нулю, для максвелловской функции распределения. Последнее свойство метода выполняется для сколь угодно грубых кубатурных сеток, применяемых для вычисления интеграла столкновений.

После вычисления дискретных значений интеграла столкновений задача сводится к решению конечно-разностным методом системы уравнений

$$\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \xi_\gamma \cdot \frac{\partial f_\gamma}{\partial \mathbf{x}} = I_\gamma(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

Система (2) из N_0 уравнений решается симметричным методом расщепления с шагом по времени $\tau = t^{j+1} - t^j$

$$\frac{f_\gamma^{1,j} - f_\gamma^j}{\tau/2} = \frac{1}{V} (\Phi_{1,\gamma}^1 + \Phi_{2,\gamma}^1 + \Phi_{3,\gamma}^1 + \Phi_{4,\gamma}^1) \quad (3)$$

$$\frac{f_\gamma^{2,j} - f_\gamma^{1,j}}{\tau} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_\gamma \quad (4)$$

$$\frac{f_\gamma^{j+1} - f_\gamma^{2,j}}{\tau/2} = \frac{1}{V} (\Phi_{1,\gamma}^2 + \Phi_{2,\gamma}^2 + \Phi_{3,\gamma}^2 + \Phi_{4,\gamma}^2) \quad (5)$$

$f_\gamma^{1,j}$ и $f_\gamma^{2,j}$ - промежуточные значения функции распределения.

Φ_k^1, Φ_k^2 - потоки функции распределения через k -ю грань тетраэдра в уравнениях (3) и (5) соответственно. V - объем тетраэдра.

Уравнение переноса аппроксимируем явной консервативной схемой первого порядка точности. На каждом временном шаге оно решается два раза для смягчения условия Куранта.

Определим Φ_k для всех тетраэдров. Через $\mathbf{n}_k$ обозначим нормаль к k -й грани, направленной внутрь тетраэдра. Возможно 3 случая:

1) Рассматриваемый тетраэдр под номером i граничит с другим тетраэдром под номером m . Тогда справедлива формула

2)

$$\Phi_k = \begin{cases} S_k f(t, i, \xi)(\xi, \mathbf{n}_k), (\xi, \mathbf{n}_k) < 0 \\ S_k f(t, m, \xi)(\xi, \mathbf{n}_k), (\xi, \mathbf{n}_k) > 0 \end{cases} \quad (6)$$

где S_k - площадь k -й грани тетраэдра,

Верхняя формула отвечает вытеканию газа из тетраэдра, в то время как нижняя формула означает приток газа в i -й тетраэдр из соседнего k -го тетраэдра.

3) Грань тетраэдра граничит со стенкой, тогда имеет место диффузное отражение:

4)

$$\Phi_k = \begin{cases} S_k f(t, i, \xi)(\xi, \mathbf{n}_k), (\xi, \mathbf{n}_k) < 0 \\ - \sum_{(\xi, \mathbf{n}_i) < 0} (\xi, \mathbf{n}_k) f(t, i, \xi) \\ \sum_{(\xi, \mathbf{n}_i) > 0} (\xi, \mathbf{n}_k) \exp(-\frac{\xi^2}{2T_{cm}}) \exp(-\frac{\xi^2}{2T}) (\xi, \mathbf{n}_k) > 0 \end{cases} \quad (7)$$

где T_{cm} - безразмерная температура стенки.

5) Грань тетраэдра лежит на плоскости симметрии, тогда имеет место зеркальное отражение:

6)

$$\Phi_k = \begin{cases} S_k f(t, i, \xi)(\xi, \mathbf{n}_k), (\xi, \mathbf{n}_k) < 0 \\ S_k f(t, i, \xi - 2\mathbf{n}_k)(\xi, \mathbf{n}_k), (\xi, \mathbf{n}_k) > 0 \end{cases} \quad (8)$$

Уравнение (4) решается как интегральное с контролем положительной определенности получаемого решения, изложенным в [11-13].

Результаты расчетов.

Ниже приведены значения потока частиц через трубку $Q(n, t)$ в зависимости от количества ячеек сетки в трубке n и от времени t

Вначале рассмотрим моделирование сетки в трубке с помощью призм. В таблицах 1 – 3 представлены результаты для 3-х длин трубок

Таблица 1

Поток частиц через трубку длиной $L = 10 * r$. Призматическая сетка.

t	$Q(2700)$	$Q(1350)$	$Q(540)$
0,5	5,75	5,7	6,2
1,0	4,15	4,15	4,5
1,5	3,3	3,45	3,8
2,0	3,2	3,1	3,5
2,5	3,0	2,9	3,35
3,0	2,85	2,85	3,25

Таблица 2.

Поток частиц через трубку длиной $L = 50 * r$. Призматическая сетка.

t	$Q(13500)$	$Q(6750)$	$Q(2700)$
0,5	5,60	6,00	6,45
1,0	4,00	4,25	4,65
1,5	3,25	3,45	3,75
2,0	3,00	3,00	3,50
2,5	2,65	2,60	3,15
3,0	2,40	2,35	2,75
3,5	2,25	2,25	2,60
4,0	2,15	2,15	2,25
4,5	2,10	2,00	2,20
5,0	1,75	1,75	2,00

Таблица 3.

Поток частиц через трубку длиной $L = 100 * r$. Призматическая сетка.

t	$Q(27000)$	$Q(13500)$	$Q(6750)$
0,5	5,75	6,00	6,30
1,0	4,10	4,20	4,60
1,5	3,40	3,45	3,75
2,0	3,00	3,05	3,35
2,5	2,75	2,80	2,95
3,0	2,50	2,50	2,65
3,5	2,30	2,30	2,50
4,0	2,15	2,15	2,30
4,5	2,00	2,00	2,15
5,0	1,85	1,80	2,00
6,0	1,75	1,75	1,90
7,0	1,75	1,75	1,85

На Рис.3. представлена концентрация молекул в системе в момент выхода трубки на оптимальную пропускную способность.

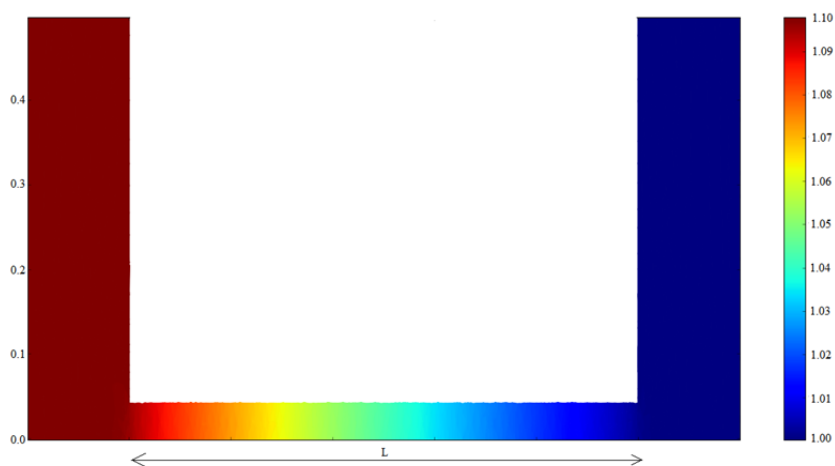


Рис.3. Установление оптимальной пропускной способности в трубке.
Концентрация. Призматическая сетка.

Дальше рассмотрим моделирование сетки в трубке с помощью тетраэдров. В таблицах 4. – 6 представлены результаты для 3-х длин трубок

Таблица 4.

Поток частиц через трубку длиной $L = 10 * r$. Тетраэдрическая сетка.

t	$Q(4835)$	$Q(831)$	$Q(178)$
1,0	4,00	3,90	3,80
2,0	3,00	3,00	2,90
3,0	2,70	2,65	2,55
4,0	2,60	2,55	2,50
5,0	2,60	2,55	2,45
6,0	2,60	2,60	2,45

Таблица 5.

Поток частиц через трубку длиной $L = 50 * r$. Тетраэдрическая сетка.

t	$Q(21872)$	$Q(3866)$	$Q(827)$
0,5	6,25	6,00	5,80
1,0	4,10	4,00	3,90
1,5	3,60	3,50	3,45
2,0	3,15	3,00	2,90
2,5	2,75	2,70	2,65
3,0	2,50	2,40	2,35
3,5	2,25	2,20	2,10
4,0	2,15	2,05	1,90
4,5	2,00	1,95	1,85
5,0	1,85	1,85	1,75

7,5	1,60	1,55	1,50
10,0	1,35	1,35	1,30
15,0	1,15	1,15	1,10
17,5	1,15	1,15	1,10

Таблица 6.

Поток частиц через трубку длиной $L = 100 * r$. Тетраэдрическая сетка.

t	$Q(43416)$	$Q(7332)$	$Q(1626)$
0,8	4,30	4,10	4,00
3,5	2,25	2,10	2,00
5,0	1,95	1,80	1,65
7,5	1,60	1,40	1,35
10,0	1,40	1,25	1,15
12,5	1,25	1,15	1,05
15,0	1,10	1,00	0,95
17,5	0,95	0,90	0,85
20,0	0,90	0,85	0,80
22,5	0,85	0,80	0,75
25,0	0,85	0,80	0,75
27,5	0,85	0,80	0,75

На рис.4. представлена концентрация молекул и производная от концентрации в системе к моменту выхода трубки на оптимальную пропускную способность.

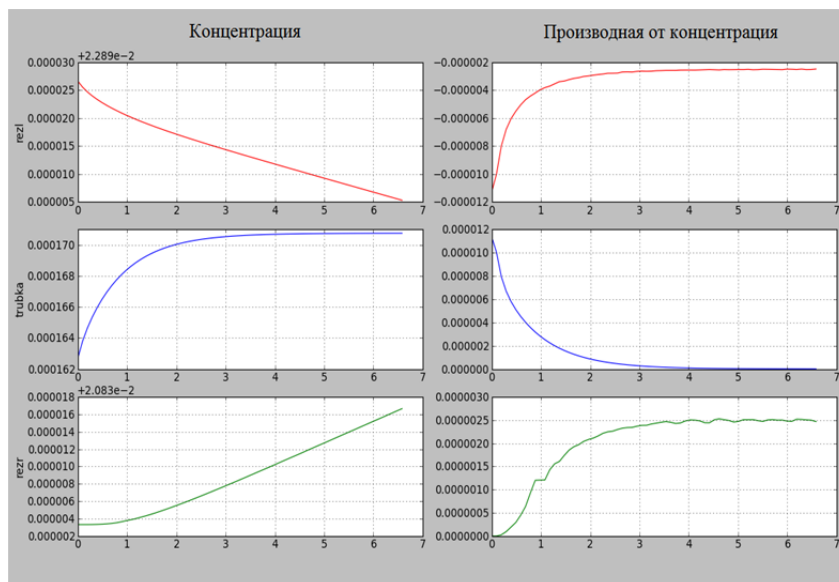


Рис.4. Изменение концентрации и её производной со временем.
Тетраэдрическая сетка.

На рис.5. представлено отклонение значений потока частиц через трубку. При построении данного графика за основу брались значения потока через трубку при самой точной сетке. Относительно этих данных поставлены средние квадраты отклонений для результатов которые приведены в табл. 4.-6.

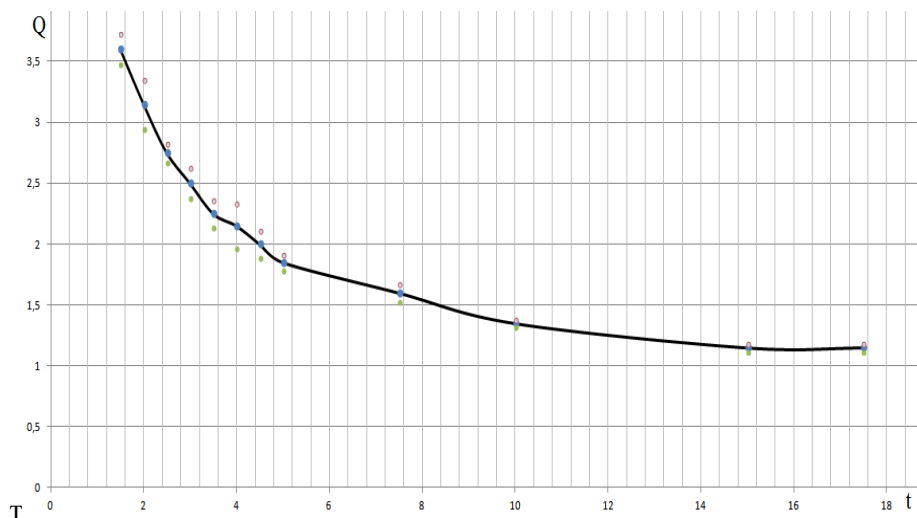


Рис.5. Поток газа через трубку в зависимости от времени.

Выводы.

Как видно из таблиц, как для призматических сеток, так и для тетраэдрических – уменьшение точности сетки в 2 раза даёт потерю точности вычисления в 2-3%. При этом мощности для счёта задействовались в 1,5 раза меньше. При уменьшении точности сетки количество ядер на задачу уменьшалось в 1,5 раза.

Уменьшение точности в 4 раза ведёт к погрешности в 5-10%. А соответствующий выигрыш в ресурсах составляет 3 раза. Сравнивая между собой сетки из призм и тетраэдрические, можно сказать, что точность результатов получается одинаковая.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nathanson H.C., Liberman I., Freidhoff C. Novel functionality using micro-gaseous devices // Proceedings of IEEE Int. Conf. on MEMS. — 1995. — P. 72–76.
2. Blomberg M., Rusanen O., Keranen K., Lehto A. A silicon microsystem-miniaturised infrared spectrometer // Proceedings of IEEE Int. Conf. on Solid-State Sensors and Actuators. — 1997. — V. 2. — P. 1257–1258.
3. Terry S.C., Jerman J.H., Angell J.B. A gas chromatographic air analyzer

- fabricated on a silicon wafer // IEEE Trans. on Electron Devices. — 1979. — V. 26, I. 12. — P. 1880–1886.
4. Knudsen M. Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularströmung // Ann. der Phys. — 1910. — Bd. 31, Nr. 9. — S. 205–229.
 5. S. Varoutis, D. Valougeorgis, F. Sharipov. Rarefied Gas Flow through Tubes of Finite Length. In the Proceedings of the 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. 2008. AIP Conf. Proc. 1084, pp. 1111–1116.
 6. Titerev. Efficient Deterministic Modelling of Three-Dimensional Rarefied Gas Flows. Communications in Computational Physics, 2012.
 7. www.geuz.org/gmsh/
 8. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. Т. 357. № 1. С. 53–56. 1997
 9. Черемисин Ф.Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // ЖВМ и МФ. Т. 46 № 2, С.329–343. 2006
 10. Tcheremissine F.G. Solution of the Boltzmann Kinetic Equation for Low Speed Flows //Transport Theory and Statistical Physics. Vol. 37, N.5, pp. 564 - 575, 2008
 11. www.gnuplot.info

УДК 533 6.011

М.М. Кузнецов^{1,2}, С.В. Матвеев², Л.В. Смотрова²

¹ *Московский физико-технический институт
(государственный университет)*

² *Московский государственный областной университет*

ПОСТУПАТЕЛЬНО НЕРАВНОВЕСНЫЙ ПИРОЛИЗ В СИЛЬНО ДИСПЕРГИРОВАННЫХ СМЕСЯХ ГАЗОВ

Аннотация. Исследована химическая релаксация релеевского газа в ударной волне. Аналитически вычислены функция распределения пар молекул и константа поступательно неравновесной скорости пиролиза типичных углеродосодержащих летучих веществ.

Ключевые слова: Ключевые слова: кинетика, уравнения, неравновесный, химический, реакция, ударная волна, распределение, молекулярный.

M. Kuznetsov, S. Matveev, L. Smotrova

¹ *Moscow Institute of Physics and Technology (State University)*

² *Moscow State Regional University*