

УДК 51-37

## ПРОБЛЕМНО-МОДЕЛИРУЮЩАЯ СРЕДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА НА ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ СЕТКАХ

Ю. Ю. Клосс<sup>1</sup>, Д. В. Мартынов<sup>2</sup>, Ф. Г. Черемисин<sup>3</sup>

Описывается структура и основные принципы работы новой проблемно-моделирующей среды, позволяющей численно решать кинетическое уравнение Больцмана без линеаризации и приближений интеграла столкновений. Расчет упругих столкновений осуществляется с помощью проекционного метода. Оператор уравнения переноса аппроксимируется с помощью неструктурированных сеток, что позволяет анализировать модели прикладных устройств со сложной геометрией. Для оценки точности метода разработан класс тестовых задач, решение которых может быть найдено теоретически. Для иллюстрации работы расчетной программы приводится анализ некоторых из них.

**Ключевые слова:** уравнение Больцмана, проекционный метод, проблемно-моделирующая среда, неструктурированные сетки.

**1. Введение.** Количественное описание движения газа на микроскопическом уровне стало возможным в 1872 г., когда Л. Больцман вывел интегро-дифференциальное уравнение кинетической теории неравновесных процессов. Нелинейность и сложная структура интеграла столкновений оказались основными препятствиями при попытке решения уравнения Больцмана: точные решения нашлись лишь для малого количества типов течений. Наиболее важным решением является абсолютное максвелловское распределение, характеризующее газ, находящийся в равновесии в отсутствие поля сил. Еще одно точное решение было найдено с помощью фурье-представления кинетического уравнения для “максвелловских молекул”, сила взаимодействия между которыми обратно пропорциональна пятой степени расстояния между молекулами.

В конце XIX века начали разрабатываться приближенные методы решения кинетического уравнения при некоторых дополнительных предположениях. Основными из них являются метод моментов, методы разложения по малому параметру, интегральный метод, принцип максимальной вероятности и метод дискретных скоростей. Метод Энского–Чепмена позволил обосновать применимость уравнений гидродинамики для плотных газов, когда число Кнудсена  $Kn \leq 10^{-2}$ , и получить коэффициенты вязкости и теплопроводности. Теоретические исследования привели к приближенному решению некоторых задач газовой динамики. Однако далеко не все задачи удавалось решить даже приближенно.

Во второй половине XX века решать уравнение Больцмана стало возможным численно с помощью вычислительных систем. Однако даже с помощью компьютеров рассчитывать пятимерный интеграл столкновений было сложно, и развитие получили приближенные методы его оценки, такие как BGK [1], ES-BGK [2] и S-модель Шахова [3]. Параллельно развивался метод прямого статистического моделирования [4] (Монте-Карло), рассматривающий определенное число молекул, во много раз меньшее их реального количества в системе, и отслеживающий движение каждой из них.

Приведенные модели позволяют описывать течения газа лишь для определенных классов задач. Метод прямого статистического моделирования хорошо описывает быстрые течения, но имеет большой шум при моделировании медленных. Модельные уравнения, напротив, могут быть использованы для расчета медленных течений, но не пригодны для моделирования быстрых.

В 1997 г. был опубликован проекционный метод вычисления интеграла столкновений [5, 6], сохраняющий массу, импульс и энергию в процессе молекулярных столкновений. В дальнейшем проекционный метод был обобщен на смеси газов и газы с внутренними степенями свободы молекул. Этот метод позволяет экономично рассчитывать сверх- и гиперзвуковые течения и особенно эффективен при расчете медленных и слабовозмущенных течений.

<sup>1</sup> Российский научный центр “Курчатовский институт” (РНЦ КИ), пл. Академика Курчатова, 1, 123182, Москва; начальник лаборатории, e-mail: kloss@mnpt.kiae.ru

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт (МФТИ), факультет общей и прикладной физики, Институтский переулок, 9, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный; студент, e-mail: mart1989@list.ru

<sup>3</sup> Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН (ВЦ РАН), ул. Вавилова, 40, 119333, Москва; вед. науч. сотр., e-mail: tcherem@ccas.ru

Тем не менее, главной проблемой применения кинетического уравнения Больцмана для решения широкого класса прикладных задач является необходимость наличия мощных вычислительных ресурсов как в плане оперативной памяти (десятки Гб), так и в плане процессорного времени. Для эффективной реализации математического метода, основанного на точном решении кинетического уравнения, необходимы современные суперкомпьютерные вычислительные системы. Появление и широкое распространение вычислительных систем с кластерной архитектурой, технологий и стандартов (MPI – Message Passing Interface) организации параллельных вычислений позволяет разрабатывать эффективные проблемно-моделирующие среды для численного решения кинетического уравнения Больцмана.

С 2002 г. ведется разработка проблемно-моделирующей среды, решающей кинетическое уравнение Больцмана с помощью проекционного метода вычисления интеграла столкновений. Ее общая структура описана в работах [7, 8]. В работе [8] выделяются три основных решателя: решатель на прямоугольных сетках (RectSolv), решатель на графических процессорах (GPUSolv) и решатель на неструктурированных сетках (UnstructSolv). В настоящей статье подробно описывается последний решатель. Его отличительная черта – работа с неструктурированными сетками, что позволяет исследовать газ в системах с любой геометрией и решать прикладные задачи. В этом смысле решатель UnstructSolv является универсальным.

В статье приводится описание структуры решателя UnstructSolv и показано, как идет поток данных при моделировании задач газовой динамики с помощью решателя. В качестве проверок решателя рассматриваются задачи теплопроводности между двумя пластинами, концентрическими цилиндрами и сферами, течение газа через прямолинейную цилиндрическую трубку и движение газа между двумя вращающимися цилиндрами. Более трудоемкие проверки и исследовательские задачи, проанализированные с помощью решателя UnstructSolv, опубликованы в работах [9–13].

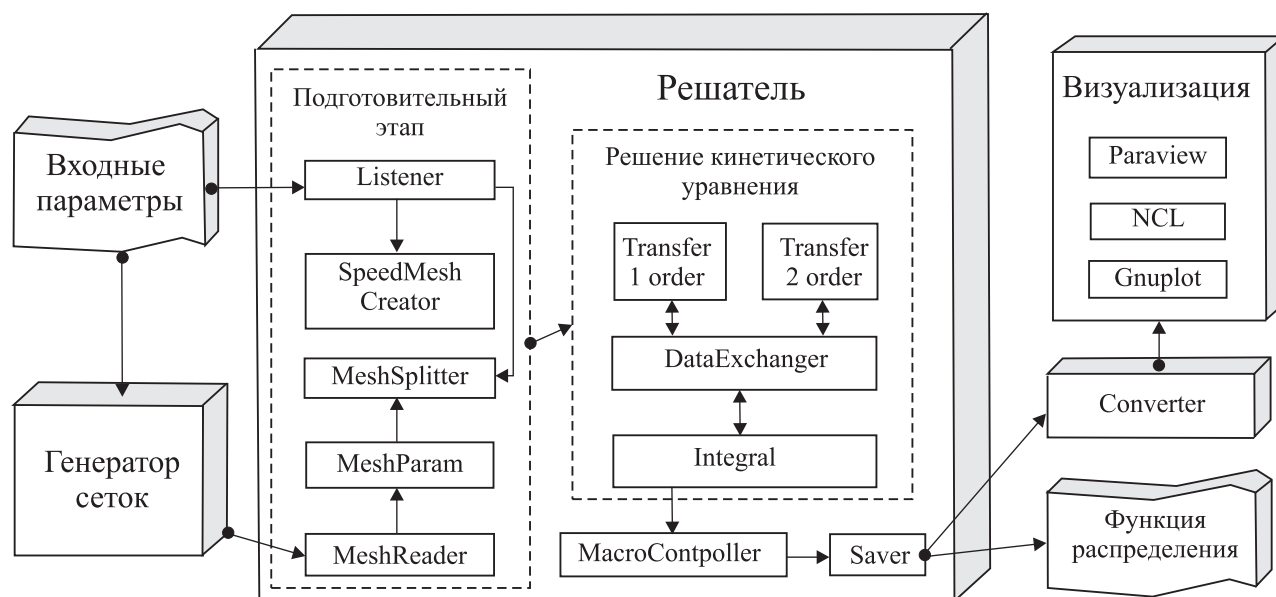


Рис. 1. Структура решателя на неструктурированных сетках

**2. Общая структура решателя UnstructSolv.** В этом разделе приводится аналитическая модель разрабатываемой проблемно-моделирующей среды, основная логика узлов системы и их взаимодействие. Поэтапно описываются самые общие представления о программном комплексе, а детали его работы и построения на уровне реализации опускаются.

Эволюция функции распределения по скоростям  $f(t, \mathbf{r}, \xi)$  моделируется с помощью уравнения Больцмана. В случае одноатомного газа уравнение имеет вид  $\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = I$ , где  $I$  – пятимерный интеграл столкновений.

На рис. 1 представлена структура решателя на неструктурированных сетках UnstructSolv. Поток данных идет в направлении “входные параметры задачи и расчетная сетка – решатель – визуализация результатов”. Рассмотрим каждое звено более подробно.

**2.1. Ввод параметров.** Входные параметры задаются пользователем в специальном файле формата xml. Основными из них являются геометрия системы, граничные условия, потенциал взаимодействия молекул, функция распределения в начальный момент времени, число ядер, на которых будет решаться

задача, число Куранта или шаг по времени, требуемая точность и шаг в скоростном пространстве.

Большинство параметров, необходимых для моделирования расчетной задачи, заданы в программе по умолчанию. Например, в качестве потенциала взаимодействия молекул берется потенциал упругих сфер. Если же пользователю необходимо использовать потенциал Леннарда–Джонса, то это следует указать во входных параметрах, а также в соответствующих полях ввести параметры потенциала взаимодействия.

После создания файла с входными параметрами этот файл считывается классом `Listener` для последующей передачи другим классам проблемно-моделирующей среды.

**2.2. Генерация сеток.** Для численного решения кинетического уравнения Больцмана необходимо перейти от непрерывной функции распределения к дискретной. Для разбиения координатного пространства используются пакеты, создающие сетку в моделируемой области. Для расчетов используются неравномерные тетраэдрические стеки. Создаваемая сетка должна отвечать следующим требованиям:

- сгущаться в тех областях, где движение газа представляет наибольший интерес, и быть менее подробной там, где функция распределения меняется незначительно;
- сгущаться у искривленных поверхностей системы;
- иметь высокое качество, т.е. каждая ячейка сетки должна быть как можно ближе к правильной тетраэдрической форме.

Первое свойство позволяет проводить точные расчеты, не создавая сетку с большим числом узлов. Подробная сетка создается только в тех областях, где функция распределения имеет сильные градиенты. Например, если рассматривать задачу вытекания газа из большого резервуара через цилиндрическую трубку, то сетку в трубке следует брать более подробную, чем в резервуаре. В цилиндрической трубке приложен градиент давления, за счет которого газ приходит в движение. Необходима подробная дискретизация для точного отслеживания зависимостей скорости течения газа и распределения макропараметров. В резервуаре, размеры которого во много раз превышают диаметр трубки, можно построить менее подробную сетку для уменьшения общего количества узлов в расчетной области, что приведет к сокращению времени работы программы. На рис. 2 приведена сетка, отвечающая приведенному примеру.

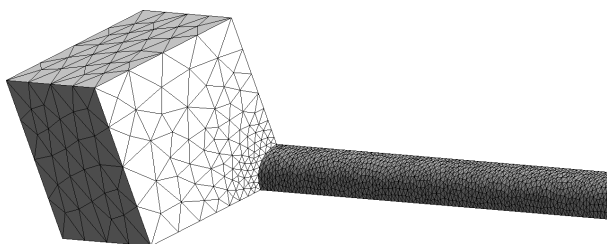


Рис. 2. Увеличение размеров сетки в резервуаре

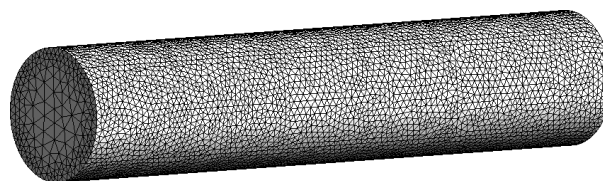


Рис. 3. Сгущение сетки в приграничной области

Второе свойство необходимо для того, чтобы расчетная сетка лучше повторяла геометрию системы. Некоторые устройства имеют извилистую геометрию, для их аккуратного моделирования необходимо, чтобы сетка точно повторяла границы расчетной области (рис. 3).

Третье свойство возникает в связи с использованием явных численных схем при решении уравнения переноса на тетраэдрических сетках. Оказывается, что чем выше качество тетраэдров (приближенность тетраэдров к правильным), тем бóльшим можно взять шаг по времени. Это необходимо при расчете медленных течений, в которых для достижения стационарного режима требуется выполнить много шагов, на каждом из которых решается уравнение Больцмана.

В качестве генератора сеток может быть использован открытый пакет `GMSH` [14]. Сетки, создаваемые пакетом, удовлетворяют критериям, сформулированным выше. Реализованы алгоритмы генерации треугольников (`MeshAdapt`, `Delaunay` и `Frontal`) и тетраэдров (`Delaunay` и `Frontal`). Для создания неравномерных сеток используются поля, а для улучшения качества тетраэдров разработаны специальные оптимизаторы.

Для генерации сеток могут быть использованы и другие пакеты, например `Netgen` [15] или `TetGen` [16]. После того как сетка в расчетной области сгенерирована, она сохраняется в бинарный файл, откуда считывается классом `MeshReader`. Разные генераторы могут использовать разные форматы файлов для сохранения сетки, поэтому в `MeshReader` реализованы функции считывания основных из них. Например, пакет `GMSH` сохраняет сетку в формате `msh`, в то время как `TetGen` использует формат `smesh`. Операторы класса `MeshReader` `read_msh()` и `read_smesh()` позволяют считать сетку из бинарных файлов с именем `fileName` форматов `msh` и `smesh`.

**2.3. Подготовительный этап.** После того как программа считала входные параметры и сетку в

координатном пространстве, начинается подготовительный этап перед численным решением уравнения Больцмана. На этом этапе выделяется память и присваиваются начальные значения переменным величинам, таким как макропараметры газа и функции распределения. Схема этапа представлена на рис. 4. На схеме показаны основные классы и связи между ними.

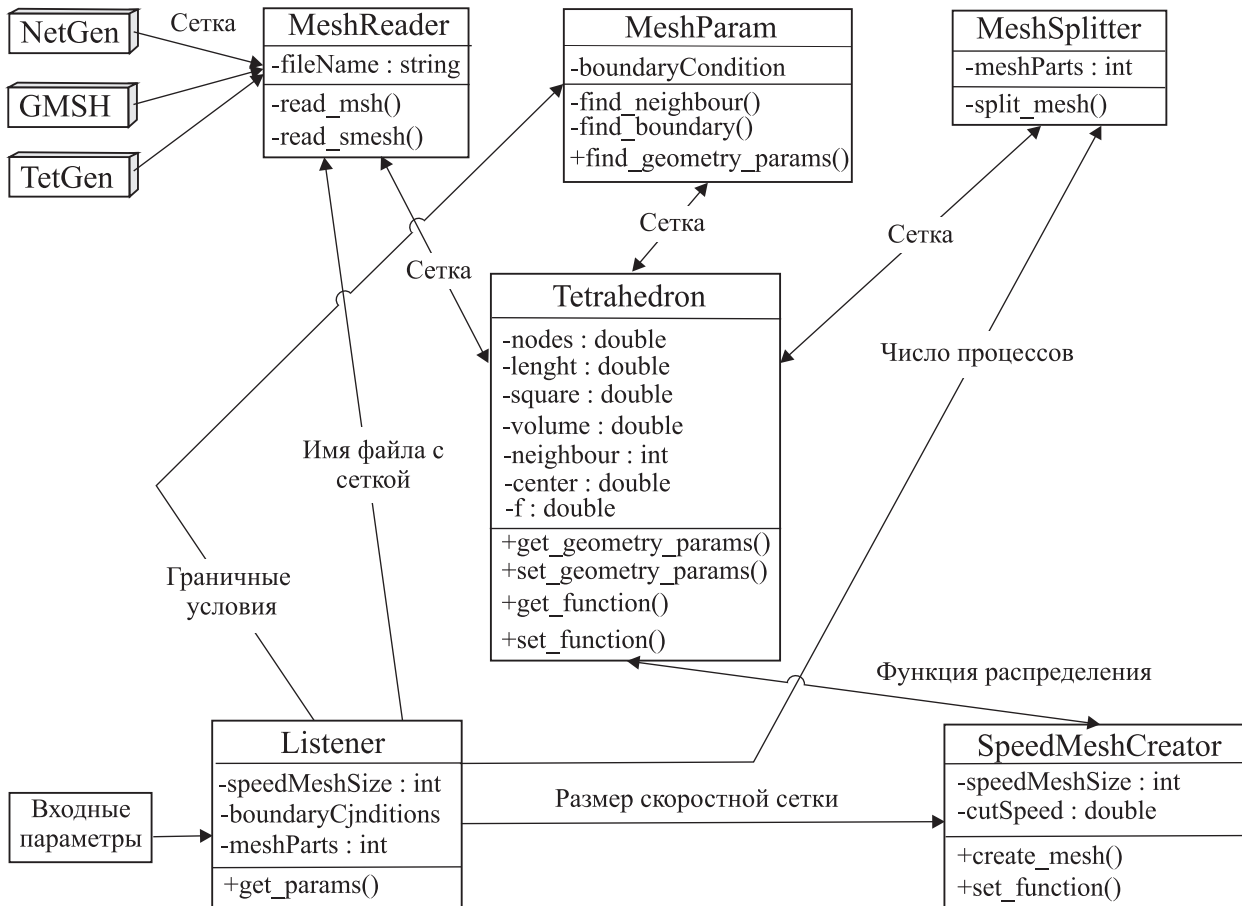


Рис. 4. Схема подготовительного этапа

Класс **Tetrahedron** содержит всю геометрическую информацию о сетке, необходимую для численного решения уравнения Больцмана. В его атрибуты входят координаты вершин **nodes**, длины ребер **length**, площади граней **square**, объемы **volume**, соседи **neighbour** и центры **center** всех тетраэдров в расчетной сетке. В каждом тетраэдре задана функция распределения по скоростям **f**. С помощью операций **get\_geometry\_params()**, **set\_geometry\_params()**, **get\_function()** и **set\_function()** можно получать или записывать геометрические параметры и функцию распределения по скоростям. Знак + или - перед атрибутом или операцией означает, что это поле является открытым (public) или закрытым (private).

После того как класс **MeshReader** считывает из бинарного файла информацию о геометрии сетки, некоторые атрибуты класса **Tetrahedron** оказываются заполненными, такие как координаты точек сетки и координаты точек, являющихся вершинами тетраэдра. Однако некоторые форматы сеточных файлов не содержат информации о соседях тетраэдров. В таких случаях с помощью метода **find\_neighbour()** их определяет класс **MeshParam**. Кроме того, этот класс проводит вычисления объемов, площадей граней и длин ребер узлов сетки, подключая к исполнению метод **find\_geometry\_params()**. Тетраэдры, граничащие со стенкой или плоскостью симметрии, определяются классом **MeshParam** с помощью метода **find\_boundary()** и с использованием информации **boundaryConditions** о граничных условиях.

Класс **MeshSplitter** разбивает сетку методом **split\_mesh()** между ядрами, количество которых **meshParts** он получает от класса **Listener**. Разбиение сетки осуществляется для того, чтобы проблемно-модулирующая среда могла работать на кластерных системах. При разработке алгоритма распараллеливания в основе лежали следующие предположения:

- 1) на одном вычислительном ядре работает один процесс,
- 2) все вычислительные ядра идентичны,

- 3) все вычислительные ядра связаны одинаковой сетью,
- 4) для одной итерации решения уравнения Больцмана необходимо одинаковое время для всех узлов пространственной сетки.

Тогда если  $p$  процессов будут проводить вычисления, то для эффективного распараллеливания необходимо, чтобы каждый процесс выполнял примерно одинаковый объем работы, т.е. проводил расчеты в  $[N/p]$  или  $[N/p] + 1$  тетраэдрах, где  $N$  — число тетраэдров в координатной сетке. После разбиения каждый из  $P$  процессов устанавливает, какие узлы пространственной сетки, ему не принадлежащие, необходимы ему для решения уравнения переноса и какие узлы, ему принадлежащие, необходимы другим процессам для решения уравнения переноса. В процессе решения уравнения переноса процессы обмениваются друг с другом недостающей информацией. Для сокращения времени передачи сообщений между процессами необходимо минимизировать количество тетраэдров, функция распределения которых передается или принимается от других процессов.

Для разбиения сетки на равные части с минимальной поверхностью взаимодействия процессов используется многоуровневый алгоритм Кернигана–Лина. На рис. 5 представлено разбиение цилиндрической трубки на три части, полученное с помощью этого алгоритма.



Рис. 5. Разбиение сетки в изогнутой трубке на три части

Задачи разбиения расчетной области возникают во многих сферах современного компьютерного моделирования, в котором задачи решаются на кластерной архитектуре. Проблема оптимального разбиения расчетных областей на узлы кластерной вычислительной системы является крайне актуальной задачей, и для ее решения имеются определенные подходы. Для этих целей были разработаны специальные программные средства, такие как Chaco [17] и Metis [18], в которых встроены несколько алгоритмов разбиения расчетной области: рекурсивный (recursive),  $k$ -мерный ( $k$ -way), спектральный (spectral), Кернигана–Лина (Kernighan–Lin), линейный (linear) и др. Разбиения сетки, полученные с помощью этих открытых пакетов, могут быть использованы решателем. Например, в пакет GMSH встроены алгоритмы, реализованные в пакетах Metis и Chaco, и полученные разбиения сохраняются в бинарный файл с сеткой `msh`. Данные в файле `msh` содержат информацию о том, какой тетраэдр принадлежит какому процессу.

Для дискретизации функции распределения в скоростном пространстве создается прямоугольная сетка с помощью класса `SpeedMeshCreator`. Построение скоростной сетки 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  $4.8 \sqrt{T_{\max}}$ , где  $T_{\max}$  — максимальная температура, достигаемая в течении и выраженная в безразмерных переменных. Затем в куб вписывается сфера и исключаются все внешние узлы. Число узлов сетки сокращается примерно вдвое. Скоростная сетка строится во всех узлах координатной сетки. Далее выделяется память под функцию распределения, заданную во всех узлах скоростной и пространственной сетки.

**2.4. Решение уравнения Больцмана.** После подготовительного этапа начинается моделирование эволюции дискретной функции распределения по скоростям  $f(n, i, \gamma)$  с помощью уравнения Больцмана, где  $n$  — номер шага по времени,  $i$  — номер тетраэдра и  $\gamma$  — номер узла в скоростной сетке.

Опуская переменные  $n$  и  $i$ , запишем кинетическое уравнение Больцмана в дискретном виде для каждого узла скоростной сетки  $\xi_\gamma$ :

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

Эффективным методом решения этого уравнения является метод расщепления по физическим процессам [19]. На малом по сравнению со средним временем свободного пробега молекул шаге по времени  $\tau = t^{n+1} - t^n$  осуществляется расщепление на две стадии: расчет переноса молекул без соударений и расчет упругих столкновений. Обозначив функцию распределения в  $i$ -й ячейке координатного пространства после первого этапа через  $f_{i\gamma}^*$ , после второго этапа через  $f_{i\gamma}^{n+1}$ , а решение на предыдущем временном слое через  $f_{i\gamma}^n$ , получим следующую последовательность уравнений:

$$\frac{f_{i\gamma}^* - f_{i\gamma}^n}{\tau} = \sum_{k=1}^K (\xi_\gamma, \mathbf{n}_{ik}) f_{ik\gamma}^n S_{ik}, \quad \frac{f_{i\gamma}^{n+1} - f_{i\gamma}^*}{\tau} = I_{i\gamma}.$$

Для численного решения уравнения переноса необходимо для каждой ячейки координатного пространства определить  $f_{ik\gamma}^n$  — функцию распределения на границе двух тетраэдров либо на границе тет-

раэдра со стенкой. В зависимости от метода вычисления  $f_{ik\gamma}^n$  численная схема может менять порядок точности.

Отличительной особенностью описываемого решателя является способ расчета упругих столкновений. Согласно используемому методу дискретных ординат, интеграл столкновений при его численном вычислении заменяется квадратурной формулой, обладающей свойствами консервативности по всем интегралам движения [5, 6]. Ввиду многомерности интеграла для повышения порядка сходимости, точки непосредственного вычисления подынтегральных функций определяются с использованием сеток Коробова [20]. Преимуществом этой схемы является то, что она вместе с процессом случайной перестановки интегрирующих узлов сетки Коробова дает второй порядок малости ошибки численного интегрирования по временному шагу.

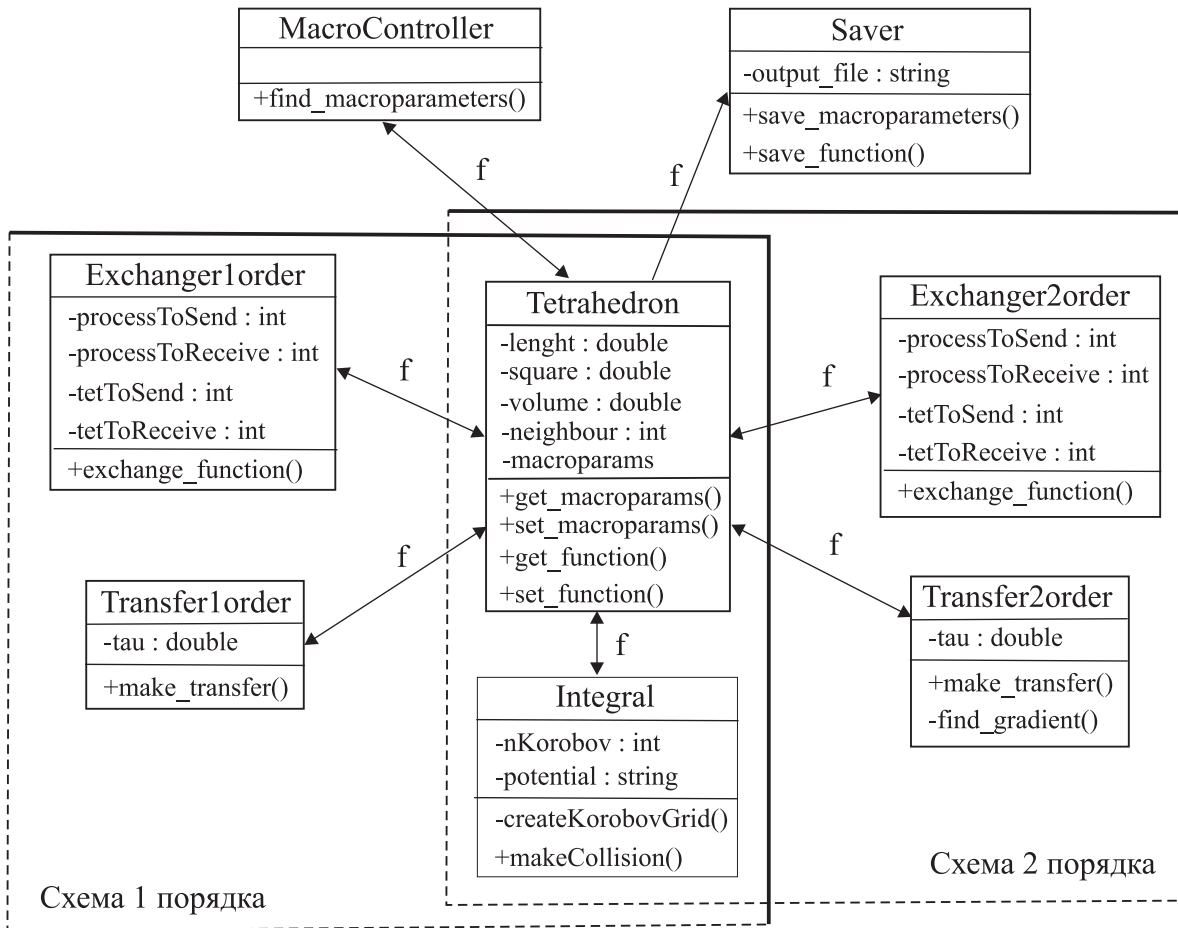


Рис. 6. Схема решения уравнения Больцмана

Схема работы той части программы, в которой моделируется эволюция функции распределения с помощью уравнения Больцмана, приведена на рис. 6.

Классы **Transfer1order** и **Transfer2order** решают уравнение переноса с помощью явных потоковых схем первого и второго порядков точности соответственно с помощью операции `make_transfer()` с шагом по времени `tau`. Схемы первого порядка используются для решение задач, в которых основной целью является вычисление макропараметров газа в системе. Схемы второго порядка применяются в задачах, где необходимо с большей точностью вычислить потоки функции распределения. Класс **Transfer2order** содержит закрытый метод `find_gradient()`, который используется для нахождения градиента функции распределения в каждой точке скоростной сетки. Далее градиент используется для определения функции распределения на границе тетраэдра  $f_{ik\gamma}^n$ .

Класс **Integral** выполняет вычисление интеграла столкновений проекционным методом. Открытый метод `makeCollision()` производит расчет бинарного столкновения с указанным пользователем потенциалом взаимодействия `potential` на каждом из `nKorobov`-узлов сетки Коробова, предварительно создав ее с помощью операции `createKorobovGrid()`. Общий расчет интеграла столкновений происходит согласно схеме “непрерывного счета”, в которой изменение функции распределения происходит непрерывно в

процессе суммирования [5].

Каждый процесс работает на своей части расчетной области, поэтому после решения уравнения переноса и вычисления интеграла столкновений процессы обмениваются между собой функцией распределения в граничных ячейках. Классы `Exchanger1order` и `Exchanger2order` осуществляют такой обмен информацией в виде сообщений с помощью технологии распараллеливания MPI. Атрибутами класса являются номера процессов `processToSend` и `processToReceive`, которым необходимо послать и от которых получить сообщения с функцией распределения в тетраэдрах с номерами `tetToSend` и `tetToReceive` соответственно. Для каждого порядка схемы необходим свой класс обмена сообщениями, поскольку для схемы первого порядка необходимо пересылать функцию распределения только соседних тетраэдров, а для схемы второго порядка еще и соседей к соседям. Это нужно для вычисления градиента функции распределения в узле. Эффективное распараллеливание позволило, с одной стороны, значительно сократить время расчетов (с недель до часов), с другой — обеспечить саму возможность прецизионного расчета на мелких координатных и скоростных сетках, которые требуют больших объемов памяти.

В процессе решения уравнения Больцмана через определенное количество шагов вычисляются макропараметры газа, такие как плотность, температура, давление, скорость, поток массы, поток тепла и поток энергии, с помощью метода `find_macroparameters()` класса `MacroController`. С помощью операции `get_function()` класса `Tetrahedron` класс `MacroController` получает функцию распределения, вычисляет макропараметры и сохраняет их с помощью метода `set_macroparams()`.

**2.5. Сохранение результатов.** Класс `Saver` с помощью открытых методов `save_macroparameters()` и `save_function()` сохраняет макропараметры газа и функцию распределения по скоростям в бинарные файлы. Функция распределения используется для того, чтобы можно было продолжить расчет после неожиданной остановки работы программы, вызванной, например, сбоем в электропитании, или же если нужно продолжить расчет до достижения большей точности. Макропараметры газа используются для анализа поведения газа в системе.

Чаще всего макропараметры анализируются с помощью визуализации. Используются такие пакеты, как `paraview` [21], `ncl` [22] и `gnuplot` [23]. Пакет `paraview` позволяет строить трехмерные распределения макропараметров и потоков, поддерживает неструктурированные сетки. Пакет `ncl` используется для создания изолиний потоков в сечениях устройств. Пакет `gnuplot` позволяет строить двумерные графики зависимости величин, аппроксимировать кривые аналитическими зависимостями. Каждый из этих пакетов поддерживает свой определенный формат данных. Например, в пакете `paraview` одним из поддерживаемых форматов является `vtk`, который, однако, не поддерживается `ncl` и `gnuplot`. В этой связи не имеет смысла сохранять макропараметры в формате, поддерживаемом тем или иным пакетом визуализации. Данные сохраняются в формате `f1`, специально разработанном для описываемого решателя. Далее эти файлы с макропараметрами могут быть переделаны в другие с помощью разработанной программы `Converter`. Выходной формат зависит от программы, в которой данные будут визуализироваться. Схема работы программы `Converter` представлена на рис. 7.

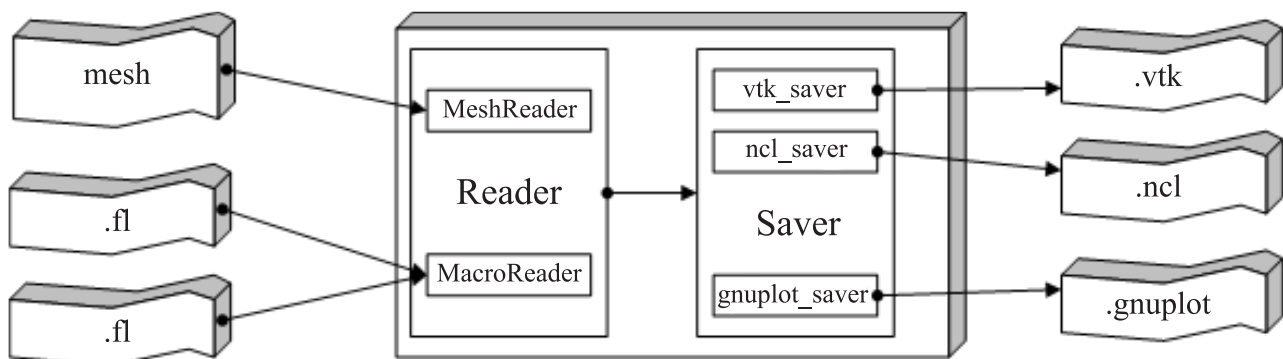


Рис. 7. Схема работы программы Converter

**3. Примеры расчетов.** Для некоторых задач газовой динамики найдены точные решения. В отдельных случаях найти теоретические зависимости намного проще, чем проводить численное моделирование. Однако целью этого раздела является не обсуждение новых явлений или особенностей течения газа, а рассмотрение результатов проверки работы решателя и оценка точности полученных результатов.

Результаты будут представлены в безразмерных переменных и безразмерной функции распределения:

$$\xi^* = \frac{\xi}{v_0}, \quad t^* = \frac{t}{\tau_0}, \quad \mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{\lambda}, \quad T^* = \frac{T}{T_0}, \quad n^* = \frac{n}{n_0}, \quad f^* = \frac{f}{n_0 v_0^{-3}},$$

$$v_0 = \sqrt{\frac{kT_0}{m}}, \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n_0 \sigma_{\text{эф}}^2}, \quad \tau_0 = \frac{\lambda}{v_0}.$$

Здесь  $\xi$  — скорость молекулы,  $v_0$  — нормировочная скорость,  $t$  — время,  $\tau_0$  — нормировочное время,  $k$  — постоянная Больцмана,  $m$  — масса молекул газа,  $\mathbf{x}$  — координата молекулы,  $\lambda$  — длина свободного пробега молекулы газа,  $\sigma_{\text{эф}}$  — эффективный диаметр молекул,  $T$  — температура газа,  $T_0$  — нормировочная температура газа,  $n$  — числовая плотность газа,  $n_0$  — нормировочная числовая плотность газа и  $f$  — функция распределения по скоростям.

**3.1. Проверка схемы первого порядка точности.** Схема первого порядка точности проверяется на примере задачи теплопроводности. Сравниваются распределения температуры и теплового потока, полученные численно, с теоретическими значениями. В этом разделе статьи рассматривается свободномолекулярный режим между двумя бесконечными параллельными пластинами и стационарное распределение температуры и теплового потока плотного газа ( $Kn \ll 1$ ) в различных геометриях: плоскопараллельные пластины, концентрические цилиндры и сферы. Коэффициент теплопроводности для газов, состоящих из упругих шариков, в первом порядке вычисляется по формуле [24–26]

$$\chi = \frac{75}{64 \sqrt{\pi}} \frac{1}{d^2} \sqrt{\frac{kT}{m}},$$

где  $d$  — диаметр молекулы,  $m$  — масса молекулы и  $k$  — постоянная Больцмана.

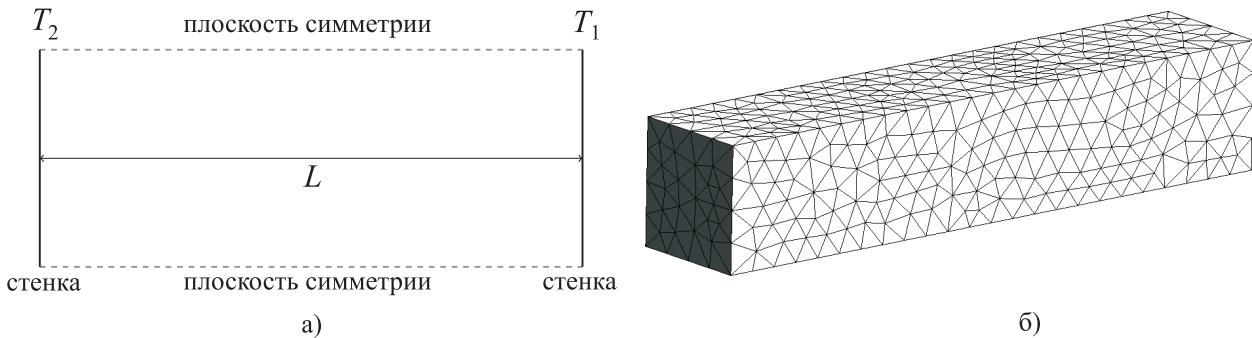


Рис. 8. Модель области между двумя плоскопараллельными пластинами

**3.1.1. Задача теплопроводности. Свободномолекулярный режим.** Рассмотрим две бесконечные плоскопараллельные пластины, между которыми находится газ при  $Kn \rightarrow \infty$ . Молекулы газа не взаимодействуют между собой. Столкновения происходят только со стенками, температуры которых  $T_1$  и  $T_2 > T_1$ .

Схема расчетной модели приведена на рис. 8. На левой и правой стенках параллелепипеда ставилось диффузное отражение молекул с температурой стенки (на рис. 8б выделено темным), от боковых сторон молекулы отражались зеркально (на рис. 8б выделено белым).

Теоретическая зависимость теплового потока от горячей стенки к холодной выражается формулой [27]

$$q = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} n \sqrt{T_1 T_2} (\sqrt{T_2} - \sqrt{T_1}), \tag{1}$$

где  $n$  — плотность газа. Температура газа между стенками выражается формулой

$$T = \sqrt{T_1 T_2}. \tag{2}$$

Сравним результаты численного и теоретического расчетов. На рис. 9 приведено распределение температуры (а) и теплового потока (б) между пластинами.



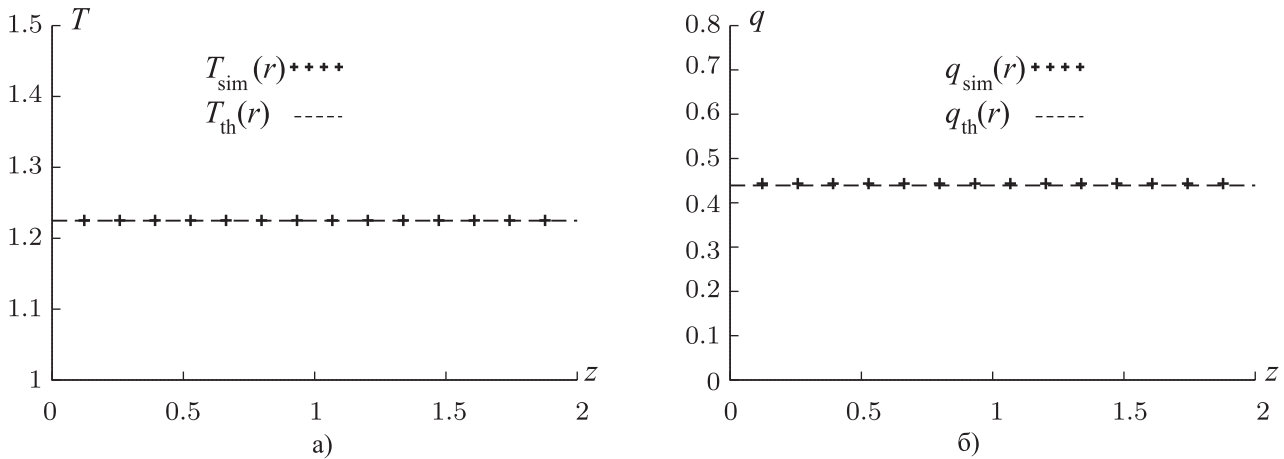


Рис. 9. Распределение температуры (а) и теплового потока (б) между пластинами

В таблице во второй и третьей колонках приведены значения теплового потока  $q$ . В четвертой и пятой колонках даны значения температуры между стенками, полученные из теоретических формул (1) и (2) (индекс th) и в результате расчета (индекс sim).

### 3.1.2. Плотный газ.

*Бесконечные плоскопараллельные пластины.* Газ заполняет пространство между двумя бесконечными плоскопараллельными пластинами, температуры которых  $T_1$  и  $T_2 > T_1$ . Расстояние между пластинами принималось  $L = 100\lambda$ . В качестве потенциала взаимодействия молекул берется потенциал упругих сфер. Тепловой поток в безразмерных переменных выражается формулой

$$q(x) = -\chi \nabla T = \frac{75}{64} \sqrt{2\pi T} \frac{dT}{dx}(x). \quad (3)$$

Распределение температуры между стенками имеет вид

$$T(x) = \left( T'_1 \sqrt{T'_1} + \frac{T'_1 \sqrt{T'_1} - T'_2 \sqrt{T'_2}}{L} x \right)^{2/3}. \quad (4)$$

На основании (4) тепловой поток можно записать в виде

$$q(x) = \frac{25}{32} \sqrt{2\pi} \frac{T'_1 \sqrt{T'_1} - T'_2 \sqrt{T'_2}}{L}, \quad (5)$$

где  $T'_1, T'_2$  — значения температуры газа у холодной и горячей стенок соответственно и  $x$  — продольная координата.

Температуры  $T'_1$  и  $T'_2$  отличаются от  $T_1$  и  $T_2$  из-за температурного скачка у стенки. Однако при  $L = 100\lambda$  это разница между  $T'_1, T'_2$  и  $T_1, T_2$  незначительна, как это можно видеть из рис. 10. На рис. 10а приведено распределение температуры между стенками, полученное при численном решении кинетического уравнения Больцмана проекционным методом и по формуле (4).

Здесь и далее используются следующие обозначения:  $T_{\text{sim}}$  — температура, полученная в результате расчетов;  $T_{\text{th}}$  — температура, полученная теоретически;  $q_{\text{sim}}$  — тепловой поток, полученный в результате расчетов;  $q_{\text{temp}}$  — тепловой поток, рассчитанный по формуле (3) с помощью  $T_{\text{sim}}$ ;  $q_{\text{theory}}$  — тепловой поток, рассчитанный по формуле (5).

*Два концентрических цилиндра.* Газ заполняет пространство между двумя бесконечными концентрическими цилиндрами, схема которых приведена на рис. 11. При расчетах радиус внутреннего цилиндра равнялся  $r_1 = 50\lambda$ , его температура бралась  $T_1 = 1$ . Радиус внешнего цилиндра принимался  $r_2 = 150\lambda$ , а температура —  $T_2 = 1.5$ .

Стационарное распределение температуры между цилиндрами вычисляется по формуле

$$T(r) = \left( T'_1 \sqrt{T'_1} + \frac{T'_2 \sqrt{T'_2} - T'_1 \sqrt{T'_1}}{\ln(r_2/r_1)} \ln(r/r_1) \right)^{2/3}, \quad (6)$$

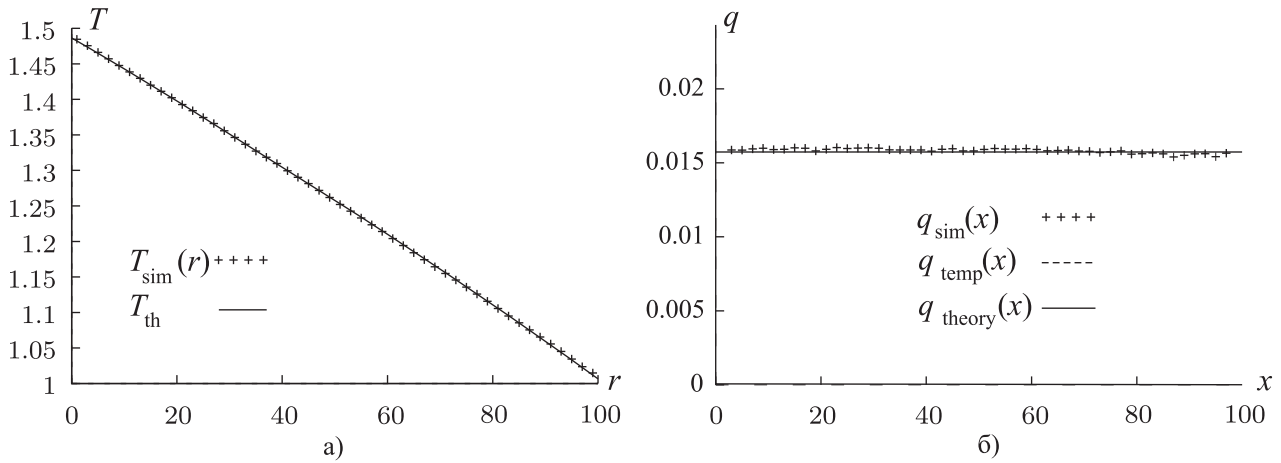


Рис. 10. Распределение температуры (а) и теплового потока (б) между стенками

где  $T'_1$  и  $T'_2$  — температуры газа вблизи внутренней и внешней стенок соответственно.

Поток тепла от горячей стенки к холодной выражается формулой

$$q(r) = \frac{75\sqrt{2\pi T(r)}}{64} \frac{dT}{dr}. \quad (7)$$

С учетом формулы (6) для теплового потока получим

$$q(r) = \frac{25}{32} \sqrt{2\pi} \frac{T'_1 \sqrt{T'_1} - T'_2 \sqrt{T'_2}}{\ln(r_2/r_1)} \frac{1}{r}. \quad (8)$$

Теоретические формулы (6)–(8) показывают зависимость температуры и теплового потока только от расстояния до оси цилиндра. Ввиду симметрии эти физические величины не имеют углового распределения. При расчетах отсутствие зависимости температуры и потока проверялось с помощью трехмерных распределений. Они представлены на рис. 12 в секторе цилиндра и подтверждают, что температура и поток зависят только от расстояния до центра цилиндра.

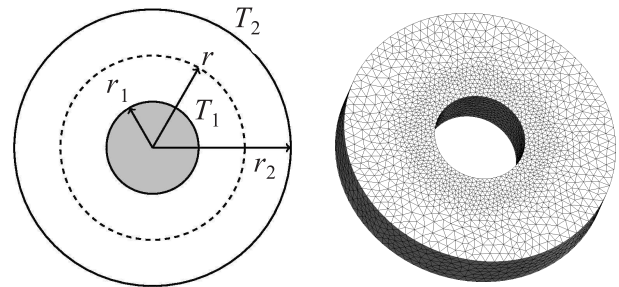


Рис. 11. Модель системы, состоящей из двух концентрических цилиндров

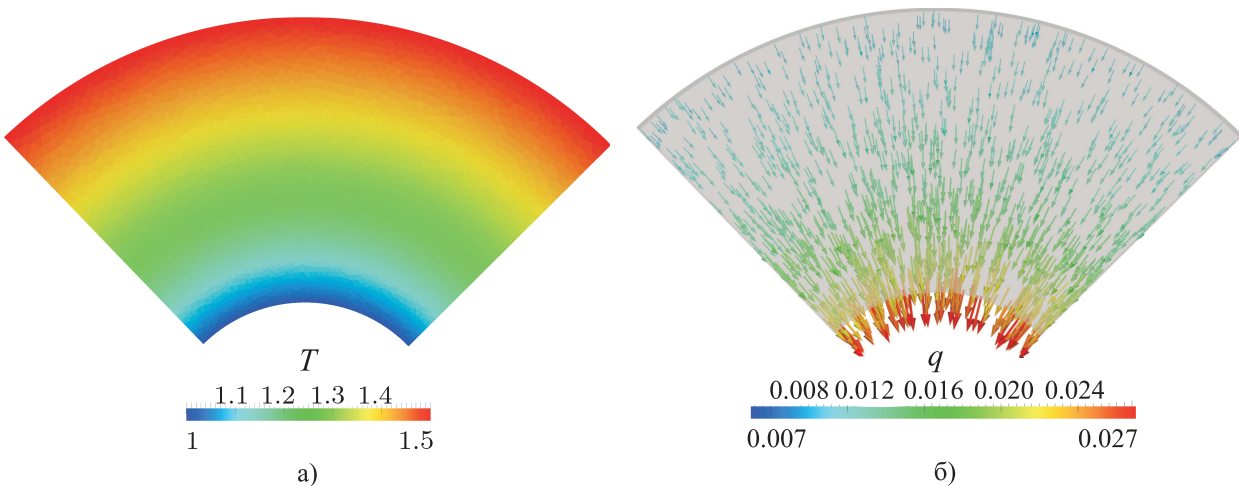


Рис. 12. Распределения температуры (а) и теплового потока (б)

На рис. 13а приведено распределение температуры между стенками, полученное при численном решении кинетического уравнения Больцмана. Учитывается зависимость величин только от расстояния до оси цилиндров. На рис. 13б приведен тепловой поток, полученный с помощью формулы (6) и умноженный на

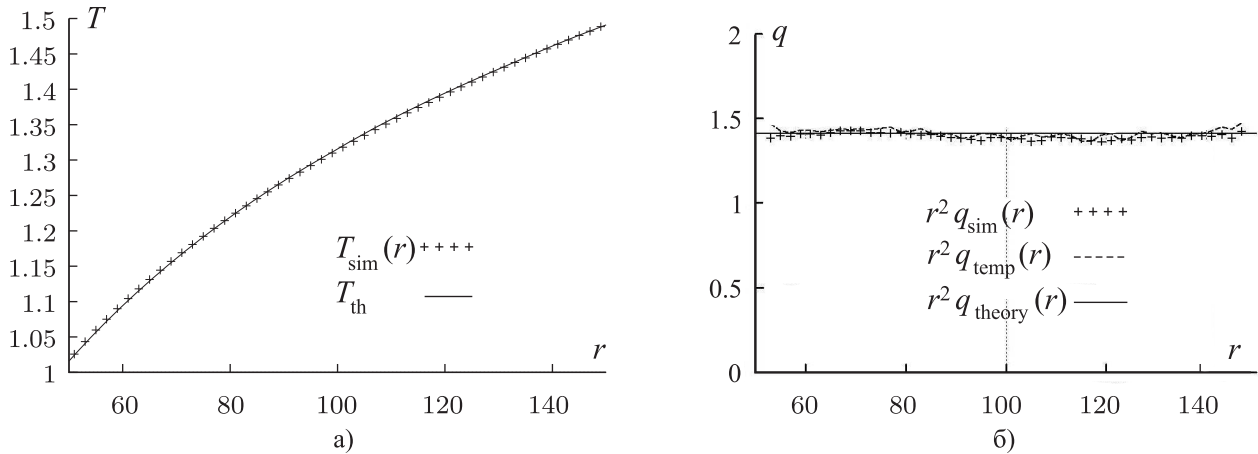


Рис. 13. Распределения температуры (а) и теплового потока (б) между цилиндрами

расстояние до центра цилиндров. Локальный градиент температуры вычислялся с помощью температуры, полученной в ходе расчетов.

*Две концентрические сферы.* Газ заполняет пространство между двумя сферами, схема которых приведена на рис. 14. При выполнении расчетов радиус внутренней сферы равнялся  $r_1 = 50\lambda$ , ее температура бралась  $T_1 = 1$ . Радиус внешней сферы принимался  $r_2 = 150\lambda$ , а температура  $T_2 = 1.5$ .

Стационарное распределение температуры между цилиндрами вычисляется по формуле [28]

$$T(r) = \left( \frac{T'_2 \sqrt{T'_2} r_2 - T'_1 \sqrt{T'_1} r_1}{r_2 - r_1} + \frac{(T'_1 \sqrt{T'_1} - T'_2 \sqrt{T'_2}) r_1 r_2}{(r_2 - r_1)r} \right)^{2/3}, \tag{9}$$

где  $T'_1$  и  $T'_2$  — температуры газа вблизи холодной и горячей стенок соответственно.

Поток тепла от горячей стенки к холодной выражается формулой

$$q(r) = \frac{75 \sqrt{2\pi T(r)}}{64} \frac{dT}{dr}. \tag{10}$$

С учетом (9) получаем для теплового потока следующее выражение:

$$q(r) = \frac{25}{32} \sqrt{2\pi} \frac{T'_1 \sqrt{T'_1} - T'_2 \sqrt{T'_2}}{r_2 - r_1} \frac{r_1 r_2}{r^2}. \tag{11}$$

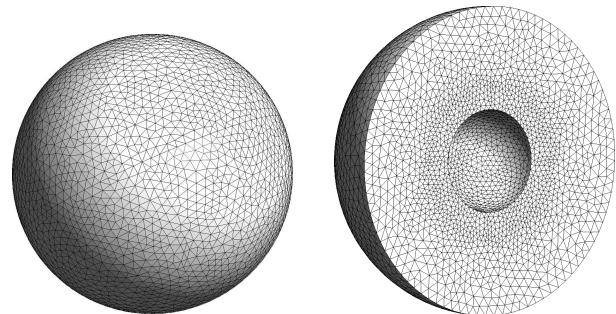


Рис. 14. Модель концентрических сфер

Теоретические формулы (9)–(11) описывают зависимость температуры и теплового потока только от расстояния до оси сферы. Ввиду симметрии эти физические величины не имеют углового распределения. При компьютерном моделировании отсутствие зависимости температуры и потока проверялось с помощью трехмерных распределений, которые представлены на рис. 15 и подтверждают, что температура и поток зависят только от расстояния до центра цилиндра.

На рис. 16а приведено распределение температуры между стенками, полученное при численном решении кинетического уравнения Больцмана. На рис. 16б приведен тепловой поток, полученный по формуле (8), умноженный на квадрат расстояния до центра сфер, и в численном эксперименте. Локальный градиент температуры вычислялся с помощью температуры, полученной в ходе компьютерного моделирования.

**3.2. Проверка схемы второго порядка точности.** Схема второго порядка точности проверялась в задачах, в которых важны силы вязкости газа: течение газа через горизонтальную цилиндрическую трубу (течение Пуазейля) и течение газа между двумя концентрическими цилиндрами, вращающимися вокруг своей оси с разными угловыми скоростями. Эти задачи имеют теоретическое решение. Решение, полученное с помощью вычислительных экспериментов, сравнивалось с точным решением. На основе этого делаются выводы о точности схемы.

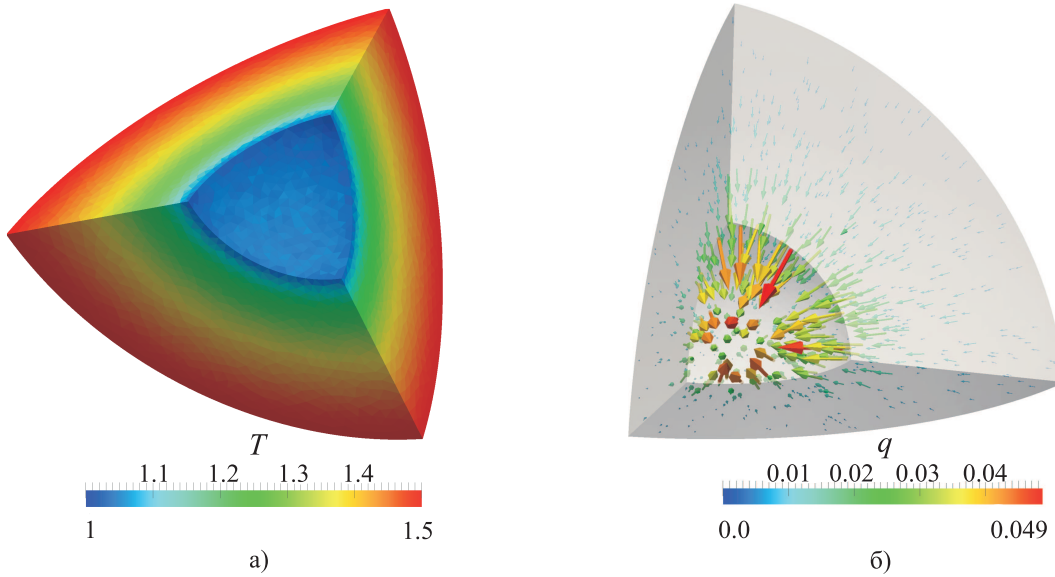


Рис. 15. Трехмерные распределения температуры (а) и теплового потока (б) между сферами

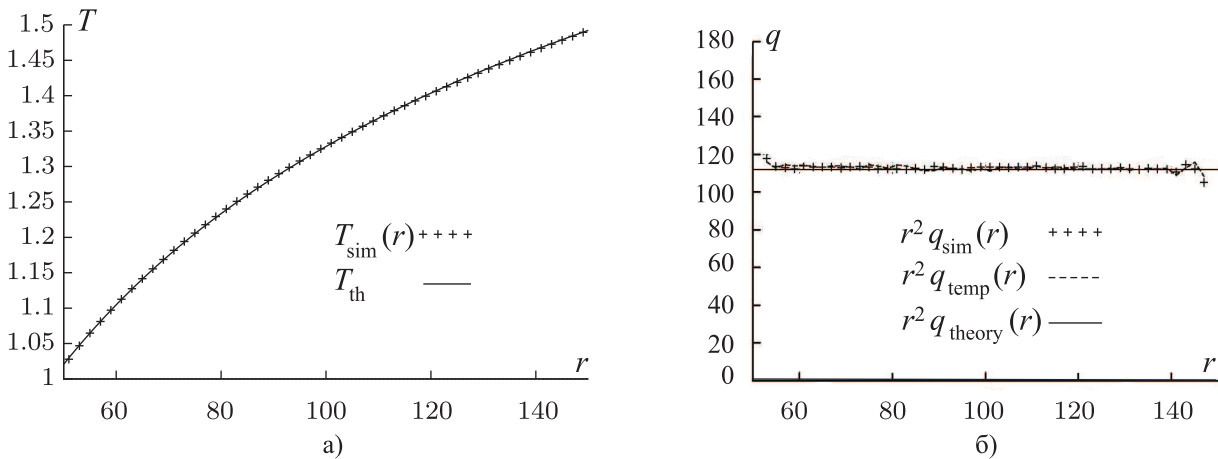


Рис. 16. Распределение температуры (а) и теплового потока (б) между сферами

Силы внутреннего трения в газе характеризуются коэффициентом вязкости  $\eta$ . Для газа, состоящего из твердых шариков,  $\eta$  определяется по формуле [24–26]  $\eta = \frac{75}{64\sqrt{\pi}} \frac{d^2}{m} \sqrt{kT}$ .

**3.2.1. Течение Пуазейля.** Помимо сил нормального давления, в реальных газах на границах движущихся элементов действуют еще касательные силы внутреннего трения. Это явление хорошо проявляется при течении газа через горизонтальную цилиндрическую трубку при малых числах Кнудсена. При таком течении необходимо поддерживать на концах трубки разность давлений, уравнивающую силы вязкости.

Расчетная модель цилиндрической трубки диаметра  $D = 20\lambda$  представлена на рис. 17. Разность давлений на ее концах поддерживается с помощью резервуаров, присоединенных к левому и правому концам трубки. Резервуары достаточно большие, так что изменением разности давлений на концах цилиндрической трубки можно пренебречь.

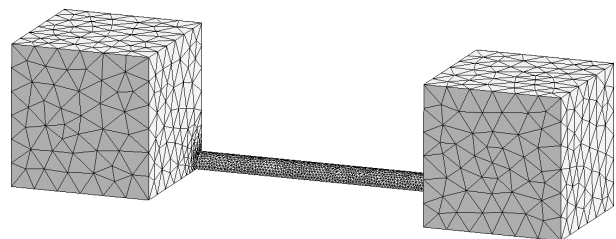


Рис. 17. Модель трубки с большими резервуарами

Скорость течения жидкости в трубке в зависимости от расстояния до оси была найдена Пуазейлем

для течения вязкой жидкости:

$$s(r) = -\frac{\partial p}{\partial z} \frac{r^2}{4\eta} + s_0, \quad (12)$$

где  $\frac{\partial p}{\partial z}$  — градиент давления,  $r$  — расстояние до оси трубки и  $s_0$  — скорость течения на оси трубки.

Для вязкой жидкости скорость течения на границе обращается в нуль. Из этого условия определяется постоянная  $s_0$ . В случае газа возможно скольжение вдоль стенок, и скорость в приграничной области имеет некоторое малое, но конечное значение. Постоянная  $s_0$  определяется с помощью значения скорости  $s_R$  газа у стенок трубки. Значение  $s_R$  определяется из численного эксперимента.

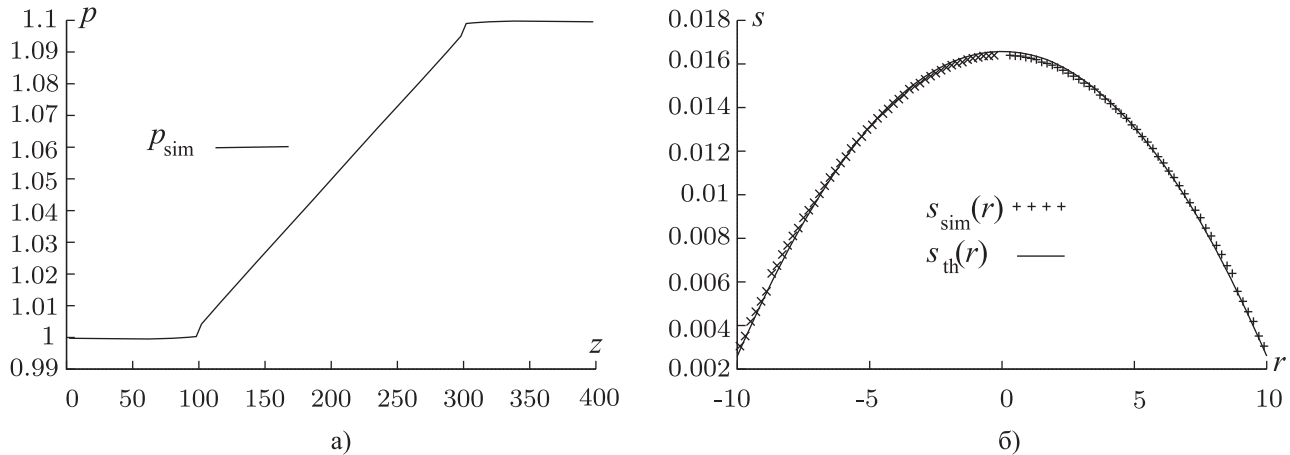


Рис. 18. Распределение давления (а) и скорости течения газа (б) вдоль трубки между сферами

На рис. 18а приведено распределение давлений вдоль направления тока газа. На рис. 18б приведено распределение скорости газа вдоль радиуса трубки. Сплошной линией показана кривая  $s_{th}(r)$ , полученная с помощью формулы (12). Крестиками обозначена кривая  $s_{sim}(r)$  — результат расчетов течения Пуазейля.

**3.2.2. Вращающиеся цилиндры.** Рассматривается установившееся движение газа между двумя равномерно вращающимися коаксиальными цилиндрами. Пусть  $R_1$  и  $R_2$  — радиусы цилиндров, а  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  — их угловые скорости. Из-за сил внутреннего трения газ начинает вращаться вместе с цилиндрами. Поскольку цилиндры вращаются с разными угловыми скоростями, возникает некоторое распределение угловой скорости газа. Для вязкой несжимаемой жидкости угловая скорость вращения в установившемся режиме зависит от расстояния до оси цилиндров согласно формуле

$$\Omega(r) = \frac{\Omega_2 R_2^2 - \Omega_1 R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} + \frac{\Omega_2 - \Omega_1}{R_2^2 - R_1^2} \frac{R_1^2 R_2^2}{r^2}. \quad (13)$$

Газ не является несжимаемой жидкостью, а формула (13) не описывает его движение в данной задаче. Однако в случае малых чисел Кнудсена зависимость (13) может быть использована для приближенного описания зависимости угловой скорости вращения газа от расстояния до центра цилиндров. В наших вычислительных экспериментах предполагалось, что цилиндры вращаются в разные стороны с угловыми скоростями  $\Omega_1 = -0.04$  и  $\Omega_2 = 0.013$ . Радиусы цилиндров равнялись  $R_1 = 10\lambda$  и  $R_2 = 30\lambda$ . На рис. 19б представлено распределение абсолютной величины угловой скорости газа в зависимости от оси вращения. Кривая  $\Omega_{th}(r)$  получена при значениях угловой скорости газа у цилиндров  $\Omega'_1 = -0.0285$  и  $\Omega'_2 = 0.0127$ , где  $\Omega'_1$  и  $\Omega'_2$  — угловые скорости вращения газа у стенок цилиндров. Эти угловые скорости отличаются от  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  из-за проскальзывания газа.

На рис. 20 представлено трехмерное распределение скорости газа  $s = \Omega r$  между цилиндрами. Из этого рисунка следует, что скорость газа не имеет углового распределения, а зависит только от радиуса до оси цилиндра.

Рассмотренная задача лежит в основе практического метода определения вязкости жидкостей и газов. Внутренний цилиндр подвешивается в исследуемой жидкости или газе в вертикальном положении на тонкой нити, а наружный приводится в равномерное вращение с угловой скоростью  $\Omega_2$ . Измеряется угол закручивания нити  $\varphi$ , при котором внутренний цилиндр находится в равновесии. Равновесное состояние наступает тогда, когда момент вязких напряжений уравнивается моментом закрученной нити  $k\varphi$ , где  $k$  — модуль кручения.

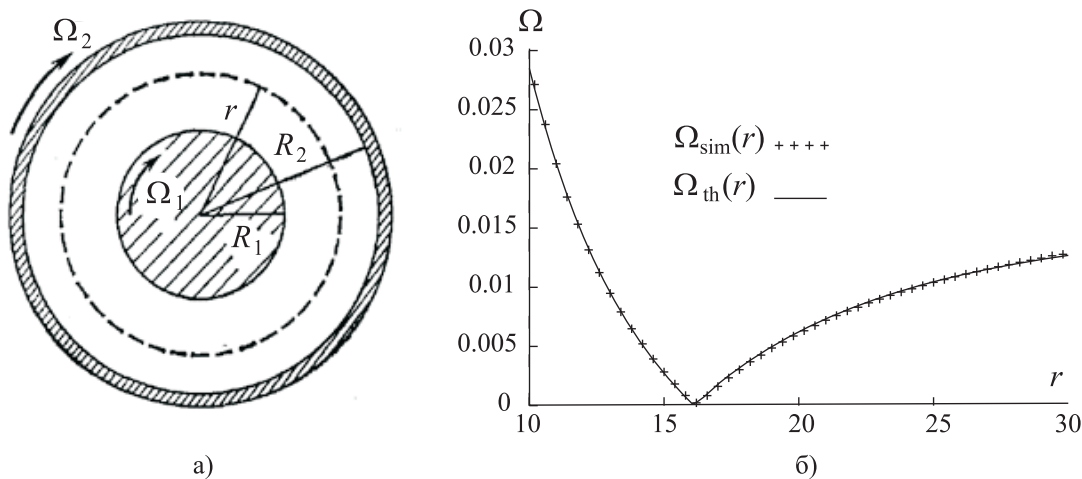


Рис. 19. Вращающиеся цилиндры (а) и зависимость угловой скорости газа от расстояния до оси цилиндров (б)

**4. Заключение.** В настоящей статье описана проблемно-моделирующая среда, позволяющая описывать течения газов на микроуровне с помощью решения уравнения Больцмана. Инновационность программы состоит в том, что в расчетной модели кинетическое уравнение Больцмана берется полным, а интеграл столкновений рассчитывается проекционным методом. Это стало возможным благодаря развитию вычислительных систем, позволяющих моделировать задачу на нескольких узлах с высокой тактовой частотой (свыше 3000 МГц), и эффективному распараллеливанию метода численного решения кинетического уравнения Больцмана. Аппроксимация уравнения переноса с помощью неструктурированных сеток позволила проводить расчеты прикладных задач.

В статье описаны тестовые задачи, имеющие теоретическое решение. В основе первого класса задач лежала способность газа проводить тепло. Вычислялись распределения температуры и теплового потока газа в системе. Полученные результаты сравнивались с теоретическими расчетами для моделей плоскопараллельных пластин, концентрических цилиндров и сфер при использовании схемы первого порядка точности.

Применение схемы второго порядка точности показано на задачах, в основе которых лежат силы внутреннего трения газа. Рассматривалось течение газа через прямолинейную цилиндрическую трубку (течение Пуазейля) и движение газа между двумя вращающимися концентрическими сферами.

С помощью описанной проблемно-моделирующей среды моделировались такие устройства, как классический насос Кнудсена [10, 11], змейчатый насос, комбинированный насос [9], цилиндрические и изогнутые трубки [9] при различных плотностях газа в диапазоне чисел Кнудсена  $0.005 \leq Kn \leq 50$ . В работе [11] результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными. Показано, что метод может с высокой точностью определять распределение макропараметров и пригоден для расчета течений в описанных устройствах.

Развитие проблемно-моделирующей среды направлено на возможность моделирования смесей газов и внутренних степеней свободы каждой из компонент. Математический аппарат численного решения полного обобщенного уравнения Больцмана описан в [29–31]. Необходимы реализация этих алгоритмов и разработка тестовых задач для проверки точности метода. В ближайшем будущем эти задачи будут решаться разработчиками проблемно-моделирующей среды.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M. A model for collision processes in gases // Phys. Rev. 1954. **94**. 511–525.

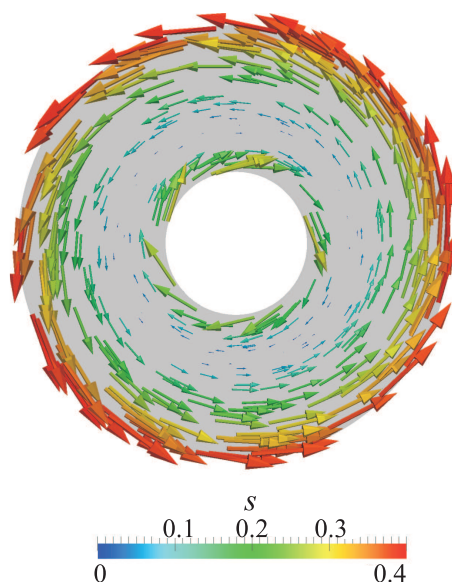


Рис. 20. Распределение скорости газа между вращающимися цилиндрами

2. *Holway L.H.* New statistical models for kinetic theory: methods of construction // *Phys. Fluids*. 1966. **9**, N 9. 1658–1673.
3. *Шахов Е.М.* Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // *Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа*. 1968. № 5. 142–145.
4. *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
5. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // *Докл. РАН*. 1997. **357**, № 1. 53–56.
6. *Tcheremissine F.* Direct numerical solution of the Boltzmann equation // *Proc. 24th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics*. AIP Conference Proceedings. New York, 2005. 677–685.
7. *Додулад О.И., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Rogozin O.A., Рябченко В.В., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В.* Проблемно-моделирующая среда для расчета и анализа газокинетических процессов // *Нано- и микросистемная техника*. 2011 (в печати).
8. *Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В.* Разработка программного солвера для решения задач динамики разреженного газа в кластерной архитектуре // *Вестник компьютерных и информационных технологий*. 2011 (в печати).
9. *Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г.* Компьютерное моделирование и анализ технических характеристик термомолекулярных микронасосов // *Журн. технич. физики*. 2011 (в печати).
10. *Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г.* Разработка методов компьютерного моделирования и анализа микронасоса Кнудсена // *Информационные технологии*. 2010. № 10. 30–35.
11. *Аникин Ю.А., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г.* Компьютерное моделирование и анализ эксперимента Кнудсена 1910 года // *Нано- и микросистемная техника*. 2010. № 8. 6–14.
12. *Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г.* Численный метод анализа свойств микронасосов Кнудсена // *Вычислительные методы и программирование*. 2011. **12**. 16–27.
13. *Мартынов Д.В., Rogozin O.A., Черемисин Ф.Г., Сазыкина Т.А., Цуриков Д.Ф.* Компьютерные модели микронасоса Кнудсена на основе численного решения уравнения Больцмана // *Материалы VIII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2010)*. Алушта, 25–31 мая 2010. 284–287.
14. *Geuzaine C., Remacle J.-F.* GMSH: a finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. 1996 (<http://www.geuz.org/gmsh>).
15. *Schoberl J.* Netgen-4.3. 2003 (<http://www.hpem.jku.at/netgen/>).
16. *Si H.* Tetgen: A quality tetrahedron mesh generator and three-dimensional Delaunay triangulator. 2006 (<http://tetgen.berlios.de/>).
17. *Hendrickson B., Leland R.* The Chaco user's guide. Version 2.0. Sandia Tech. Report SAND94–2692. 1994 (<http://www.sandia.gov/~bahendr/chaco.html>).
18. *Moulitsas I., Karypis G.* Architecture aware partitioning algorithms // *Proc. of the 8th Int. Conf. on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP)*. 2008 (<http://www.cs.umn.edu/~metis>).
19. *Аристов В.В., Черемисин Ф.Г.* Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // *Докл. АН СССР*. 1976. **231**, № 1. 49–52.
20. *Коробов Н.М.* Тригонометрические суммы и их приложения. М.: Наука, 1989.
21. *Paraview Guide / Kitware–2008* (<http://www.paraview.org/>).
22. *NCL Reference Pages* (<http://www.ncl.ucar.edu/>).
23. *Williams T., Kelley C.* Gnuplot 4.4. 2010 (<http://www.gnuplot.info/>).
24. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Теоретическая физика. Т. 10. М.: Физматлит, 2002.
25. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: Иностранная литература, 1960.
26. *Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B.* Molecular theory of gases and liquids. New York: Wiley, 1954.
27. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
28. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Т. 1. Москва, 1979.
29. *Черемисин Ф.Г.* Решение кинетического уравнения Ван Чанг–Уленбека // *Докл. РАН*. 2002. **387**, № 4. 1–4.
30. *Черемисин Ф.Г.* Моделирование вращательно-поступательных и колебательно-поступательных переходов в молекулярном разреженном газе // *Материалы XXXII Академических чтений по космонавтике*. Москва, 2008. 157.
31. *Tcheremissine F.G., Agarwal R.K.* A conservative numerical method for solving the generalized Boltzmann equation for an inert mixture of diatomic gases // *AIAA Paper 1581*, Orlando, 2009.

Поступила в редакцию  
10.02.2011