

УДК: 533.561

Решатель уравнения Больцмана на неструктурированных пространственных сетках

М. М. Гаспарян^{1,a}, А. С. Самонов², Т. А. Сазыкина²,
Е. Л. Остапов², А. В. Сакмаров², О. К. Шайхатаров²

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет),
Россия, 141707, г. Долгопрудный (Московская обл.), Институтский переулок, д. 9

² НИЦ «Курчатовский институт»,
Россия, 123182, г. Москва, пл. Курчатова, д. 1

E-mail: ^a mouses.gasparyan@gmail.com

Получено 16.12.2017, после доработки — 26.04.2019.

Принято к публикации 06.05.2019.

Целью данной работы является создание достаточно универсальной вычислительной программы (решателя) кинетического уравнения Больцмана для моделирования течений разреженного газа в устройствах сложной формы. Подробно описывается структура решателя, а его эффективность демонстрируется на примере расчета современной конструкции многотрубчатого насоса Кнудсена. Решение уравнения Больцмана выполняется на фиксированных пространственной и скоростной сетках с помощью метода расщепления по физическим процессам. Дифференциальный оператор переноса аппроксимируется методом конечных разностей. Вычисление интеграла столкновений производится на основе консервативного проекционного метода.

Пространственная неструктурированная сетка строится с помощью внешнего генератора сеток и может включать в себя призмы, тетраэдры, гексаэдры и пирамиды. Сетка сгущается в областях течения с наибольшими градиентами рассчитываемых величин. Трехмерная скоростная сетка состоит из кубических ячеек равного объема.

Большой объем вычислений требует эффективного распараллеливания алгоритма, что реализовано на основе методики Message Passing Interface (MPI). Передача информации от одного узла MPI к другому осуществляется как разновидность граничного условия — таким образом, каждый MPI узел может хранить только ту часть сетки, которая имеет отношение конкретно к нему.

В результате получен график разности давлений в двух резервуарах, соединенных многотрубчатным насосом Кнудсена в зависимости от числа Кнудсена, т. е. получена численными методами характеристика, ответственная за качество работы термомолекулярного микронасоса. Также показаны распределения давления, температуры и концентрации газа в установившемся состоянии внутри резервуаров и самого микронасоса.

Корректность работы солвера проверяется на тестах с распределением температуры газа между двух нагретых до разной температуры пластинок, а также в тесте с сохранением общей массы газа.

Корректность полученных данных для многотрубчатого насоса Кнудсена проверяется на более точных скоростной и пространственной сетках, а также при использовании большего количества столкновений в интеграле столкновений за шаг.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, эффект Кнудсена, неструктурированная сетка, микронасос, функция распределения, интеграл столкновений, проекционный метод

Работа выполнена при поддержке РФФИ (18-08-00523, 18-08-00697, 18-08-00132, 18-08-00495, 18-08-00192).

UDC: 533.561

The Solver of Boltzmann equation on unstructured spatial grids

M. M. Gasparyan^{1,a}, A. S. Samonov², T. A. Sazykina²,
E. L. Ostapov², A. V. Sakmarov², O. K. Shahatarov²

¹ Moscow institute of physic and technology,
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141707, Russia

² NRC Kurchatov institute,
1 Kurchatov sq., Moscow, 123182, Russia

E-mail: ^a mouses.gasparyan@gmail.com

Received 16.12.2017, after completion — 26.04.2019.

Accepted for publication 06.05.2019.

The purpose of this work is to develop a universal computer program (solver) which solves kinetic Boltzmann equation for simulations of rarefied gas flows in complexly shaped devices. The structure of the solver is described in details. Its efficiency is demonstrated on an example of calculations of a modern many tubes Knudsen pump. The kinetic Boltzmann equation is solved by finite-difference method on discrete grid in spatial and velocity spaces. The differential advection operator is approximated by finite difference method. The calculation of the collision integral is based on the conservative projection method.

In the developed computational program the unstructured spatial mesh is generated using GMSH and may include prisms, tetrahedrons, hexahedrons and pyramids. The mesh is denser in areas of flow with large gradients of gas parameters. A three-dimensional velocity grid consists of cubic cells of equal volume.

A huge amount of calculations requires effective parallelization of the algorithm which is implemented in the program with the use of Message Passing Interface (MPI) technology. An information transfer from one node to another is implemented as a kind of boundary condition. As a result, every MPI node contains the information about only its part of the grid.

The main result of the work is presented in the graph of pressure difference in 2 reservoirs connected by a multitube Knudsen pump from Knudsen number. This characteristic of the Knudsen pump obtained by numerical methods shows the quality of the pump. Distributions of pressure, temperature and gas concentration in a steady state inside the pump and the reservoirs are presented as well.

The correctness of the solver is checked using two special test solutions of more simple boundary problems — test with temperature distribution between 2 planes with different temperatures and test with conservation of total gas mass.

The correctness of the obtained data for multitube Knudsen pump is checked using denser spatial and velocity grids, using more collisions in collision integral per time step.

Keywords: Boltzmann equation, Knudsen effect, unstructured grid, micropump, distribution function, collision integral, projection method

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2019, vol. 11, no. 3, pp. 427–447 (Russian).

The work was supported by RFBR (18-08-00523, 18-08-00697, 18-08-00132, 18-08-00495, 18-08-00192).

© 2019 Movses M. Gasparyan, Aleksey S. Samonov, Tatyana A. Sazykina,
Evgeney L. Ostapov, Aleksandr V. Sakmarov, Oleg K. Shakhatarov

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.

To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
or send a letter to Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Введение

Основной проблемой численного моделирования течений разреженного газа являются неприменимость к ним уравнений гидродинамики и необходимость использовать кинетическое уравнение Больцмана, что представляет значительно более сложную задачу [Коган, 1967; Чепмен, Каулинг, 1960]. Вместо непосредственного нахождения из уравнений сплошной среды плотности, температуры, скорости газа, других параметров течения требуется предварительно вычислить функцию распределения молекул газа по скорости, а затем уже рассчитать перечисленные выше величины как интегралы от данной функции по скоростной переменной.

Трудности решения уравнения Больцмана привели к разработке статистических методов моделирования течений разреженного газа, в которых прослеживается динамика достаточно большого числа (в настоящее время — миллионов или десятков миллионов) материальных точек, изображающих молекулы газа. Такие методы показали высокую эффективность при расчете сверх- и гиперзвуковых течений для аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы, особенно для определения интегральных аэродинамических реакций. Характерной особенностью таких течений является сильное взаимодействие разреженного потока с обтекаемым телом. При течениях разреженного газа в микроустройствах возникает принципиально иная ситуация: течение газа является медленным, и необходимо рассчитывать небольшие возмущения потока газа. В этих условиях статистические методы становятся неэффективными из-за присутствующего им статистического шума и низкой точности. Например, метод Бёрда, подробно описанный в [Бёрд, 1991], хорошо работает при сильных возмущениях газового потока и может применяться в задачах аэродинамики больших скоростей, но для медленных течений он практически неприменим.

Мы будем использовать метод решения уравнения Больцмана, предложенный в [Аристов, Черемисин, 1976]. Уравнение решается конечно-разностным методом на дискретной сетке в координатном и скоростном пространствах. Примеры решения уравнения Больцмана таким методом можно найти в [Anikin et al., 2010; Anikin et al., 2015]. Функция распределения зависит от шести переменных: трех компонент молекулярной скорости и трех пространственных координат, а ее нахождение требует решения нелинейного интегро-дифференциального уравнения Больцмана, содержащего 5-мерный интегральный оператор — интеграл столкновений, — учитывающий вклад молекулярных столкновений. Другой метод указан в [Ibragimov, Rjasanow, 2002], но он не прошел проверки на решении достаточно сложных задач.

Ввиду нелинейности кинетического уравнения для его решения требуется построение процесса итераций. Мы используем в качестве итерационного параметра время и решаем зависящее от времени кинетическое уравнение до установления стационарного состояния, после чего вычисляются требуемые гидродинамические величины.

Дадим краткое описание метода решения уравнения Больцмана.

Для описания газа используется функция распределения $f(\vec{r}, \vec{\xi}, t)$. $f(\vec{r}, \vec{\xi}, t)$ определяется как плотность математического ожидания числа молекул в точке фазового пространства $\vec{r}, \vec{\xi}$.

Динамика газа задается уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{\xi}, \nabla) f = \hat{I}[f].$$

Макроскопические параметры газа: концентрация n , средняя скорость \vec{u} , температура T , давление P и другие определяются интегралами по скоростной переменной от функции распределения:

$$n = \int f(\vec{r}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi},$$

$$\vec{u} = \frac{1}{n} \int \vec{\xi} f(\vec{r}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi},$$

$$T = \frac{m}{3nk} \int (\vec{\xi} - \vec{u})^2 f(\vec{r}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi},$$

$$P = nT.$$

Численное решение уравнения ищется методом расщепления по физическим процессам, который будет описан далее.

Вычисление интеграла столкновений производится проекционным методом, предложенным в [Черемисин, 1997; Cheremisin, 1997] и использованным в таких работах, как [Tcheremissine, 2006; Cheremisin, 2000]. Данный метод консервативен, т. е. сохраняет массу, импульс и энергию взаимодействующих молекул. При максвелловском распределении молекул по скоростям интеграл столкновений строго равен нулю, и точность его вычисления повышается при приближении к равновесному состоянию газа. Для вычисления интеграла столкновений используется равномерная кубатурная сетка Коробова [Anikin et al., 2012; Korobov, 1959]. Другой метод, в котором учитываются только те столкновения между молекулами, которые принадлежат построенной скоростной сетке, предложен в [Palczewski et al., 1997].

Численное решение уравнения Больцмана будем искать в безразмерных переменных. Для перехода к безразмерным переменным используем следующие параметры газа: характерную температуру T_0 , массу молекулы газа m_0 , эффективный диаметр молекулы газа d_0 , концентрацию газа n_0 . В качестве характерных значений концентрации и температуры в статье взяты их начальные значения в откачиваемом объеме.

По этим параметрам определяются следующие размерные величины:

- $v_0 = \sqrt{\frac{kT_0}{m_0}}$ (характерная тепловая скорость молекул);
- $\lambda_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} n_0 d_0^2}$ (длина свободного пробега молекулы газа);
- $\tau_0 = \frac{\lambda_0}{v_0}$ (среднее время между столкновениями молекул);
- $f^*(\vec{r}^*, \vec{\xi}^*, t^*) = f(\vec{r}, \vec{\xi}, t) \frac{v_0^3}{n_0}$ (безразмерная функция распределения).

При переходе к безразмерным переменным уравнение Больцмана запишется в виде

$$\frac{\partial f^*}{\partial t^*} + (\vec{\xi}^*, \nabla) f^* = \hat{I}[f^*].$$

Число Кнудсена вычисляется по формуле

$$Kn = \frac{\lambda}{L},$$

где L — характерный размер обтекаемого тела или диаметр отверстия, через которое протекает газ (в нашей задаче в качестве характерного размера тела выступает диаметр узких трубок).

Далее все величины предполагаются безразмерными, поэтому значок * будем опускать.

Решатель для решения уравнения Больцмана на пространственной сетке может работать с любой дискретной сеткой, составленной из примитивных пространственных фигур (тетраэдров, пирамид, призм, гексаэдров), на любом количестве ядер. Дискретная сетка строится с помощью программного пакета GMSH [GMSH]. В данной задаче решатель применяется для расчета свойств откачки современной конструкции насоса Кнудсена. Под откачкой в дальнейшем будет пониматься отношение давлений в резервуарах, стоящих по обе стороны насоса.

1. Описание установки

Термомолекулярные насосы основаны на эффекте тепловой транспирации: при наличии градиента температуры на стенке, соединяющей сосуда трубки, в слое газа толщиной порядка длины свободного пробега молекул возникает течение, направленное в сторону увеличения температуры. Такие устройства, как термомолекулярный многотрубочный насос Кнудсена [Knudsen, 1909], описанный в статье [Takata et al., 2007] и подробно изученный в [Muntz et al., 2002; Sone et al., 1996], могут быть использованы, например, при создании современных газовых анализаторов, масс-спектрометров, оптических спектрометров. Традиционные насосы содержат множество подвижных частей и довольно сложную конструкцию, что делает невозможным их реализацию на микроуровне. Термомолекулярные насосы не имеют подвижных частей, они долговечны и более просты в изготовлении на малых масштабах [Teagan, Springer, 1968]. Кроме того, они не используют при работе жидкие масла и не загрязняют ими откачиваемый объем [Han et al., 2007].

Многотрубочный насос Кнудсена позволяет быстрее откачивать объем за счет нескольких рабочих трубок в отличие от обычного насоса Кнудсена, модель которого была рассчитана и описана в [Додулад и др., 2016].

Рассматриваются два сосуда размером $A \times A \times A$, соединенные системой, состоящей из одной широкой трубки радиусом R , имеющей длину L , и 18 трубок радиусом $r < R$, длиной l (рис. 1, рис. 2). В рассматриваемой задаче за единицу длины взят радиус узкой трубки. Все другие линейные размеры отнесены к этому радиусу:

- $A = 20$ — размер сосудов;
- $R = 6.5$ — радиус широкой трубки;
- $L = 5$ — длина широкой трубки;
- $r = 1$ — радиус узких трубок;
- $l = 10$ — длина узких трубок.

Расстояние от центра широкой трубки до центров узких трубок — 2.5 и 4.5 (первый и второй круг). Далее все параметры установки одновременно масштабируются в зависимости от необходимого числа Кнудсена аналогично методу в [Beylich, 2000].

На рис. 1 изображена четверть от всей установки, в которой, вследствие симметрии задачи, осуществляется счет. Показано сечение плоскостью вдоль трубок. На рис. 2 можно увидеть сечение установки плоскостью, перпендикулярной трубкам. Температура на стенках сосудов

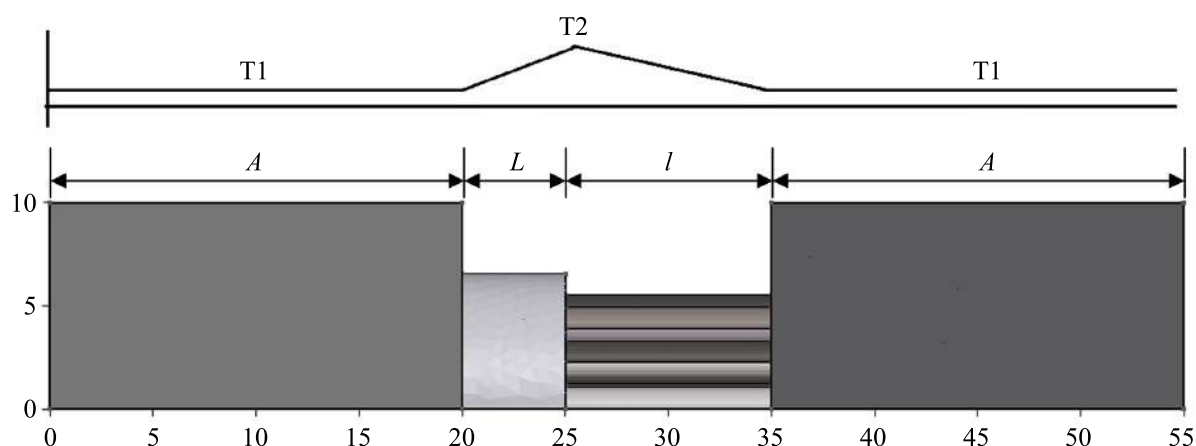


Рис. 1. Продольный вид многотрубочного насоса Кнудсена с заданным распределением температуры на стенках. В условных единицах длины: $A = 20$, $L = 5$, $l = 10$. Температура T_2 между соединением большой трубки с малыми трубками на 20 % выше температуры T_1 стенок сосудов

поддерживается постоянной и равной T_1 , начальная концентрация всюду в устройстве равна n_0 . На стенках трубок задается градиент температуры, показанный на рис. 1. Создание таких граничных условий соответствует нагреву стыка широкой и узких трубок. Температура газа изначально задается равной T_1 . За счет теплового скольжения постепенно происходит перекачка газа из правого сосуда в левый. Данный эффект называется эффектом Кнудсена. Через некоторый промежуток времени отношение давлений и концентраций в сосудах выходит на постоянный уровень — устанавливается режим динамического равновесия. В безразмерных переменных полагаем $T_1 = 1$, $T_2 = 1.2$, $n_0 = 1$.

С помощью зеркальных граничных условий происходит переход от рассмотрения одной установки к рассмотрению периодической мембраны из насосов (рис. 3).

Задача состоит в определении макропараметров в двух резервуарах: давления и концентрации газа после установления динамического равновесия в установке для различных чисел Кнудсена.

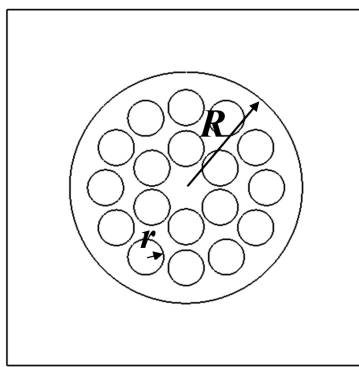


Рис. 2. Поперечный вид многотрубчатого насоса Кнудсена. В условных единицах длины: $R = 6.5$, $r = 1$

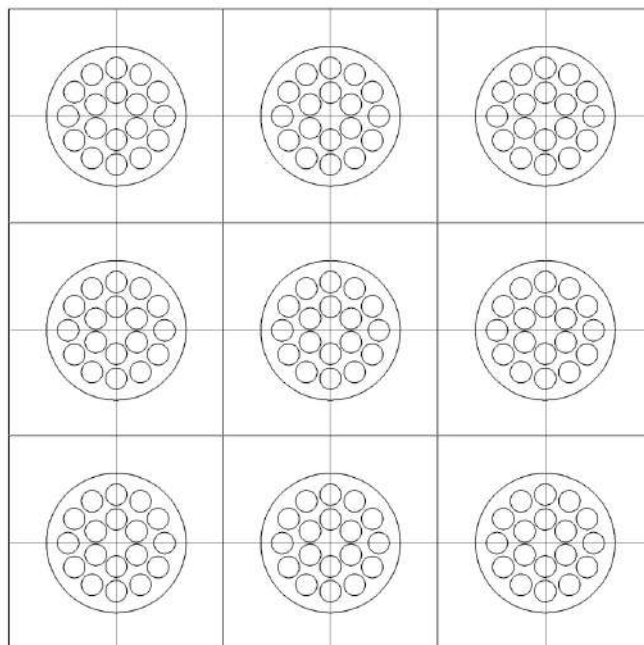


Рис. 3. Мембрана из многотрубчатых насосов Кнудсена. Моделирование мембраны может быть произведено путем создания зеркального граничного условия на стенках сосудов у четверти многотрубчатого насоса Кнудсена

2. Пространственная сетка установки

В резервуарах создается тетраэдрическая сетка, а в трубках — призматическая. Количество тетраэдров в используемой сетке примерно 9000 элементов, призм — 30 000. С помощью «полей» (fields) в GMSH сетка сделана таким образом, чтобы она была плотнее около границ и постепенно укрупнялась в резервуарах.

На рис. 5 показан срез установки плоскостью, перпендикулярной трубкам. Все треугольники на рисунке — основания призм. На рис. 4 показана сетка всей установки. Места сужения представлены на рис. 6 и рис. 7.

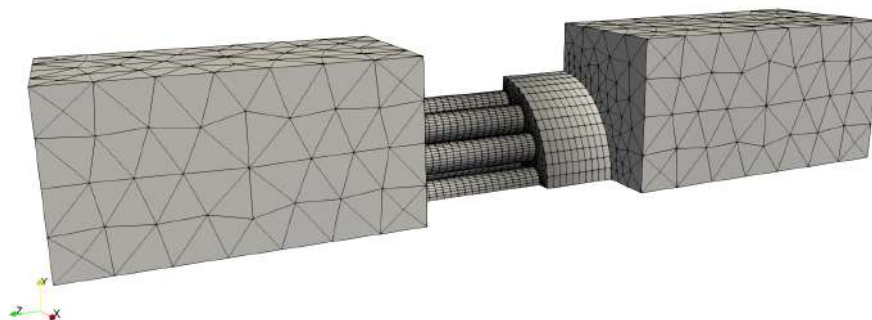


Рис. 4. Общий вид пространственной сетки из тетраэдров и призм четверти многотрубчатого насоса Кнудсена

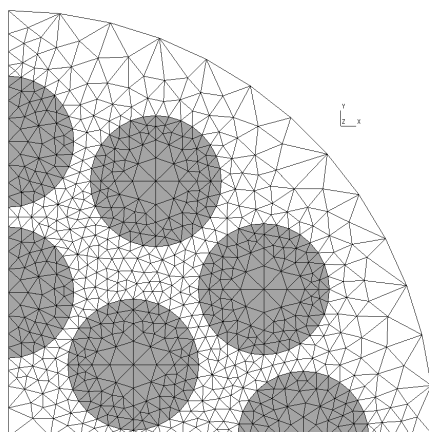


Рис. 5. Поперечный вид пространственной сетки. Каждый треугольник — основание призмы в большой трубке многотрубчатого насоса Кнудсена

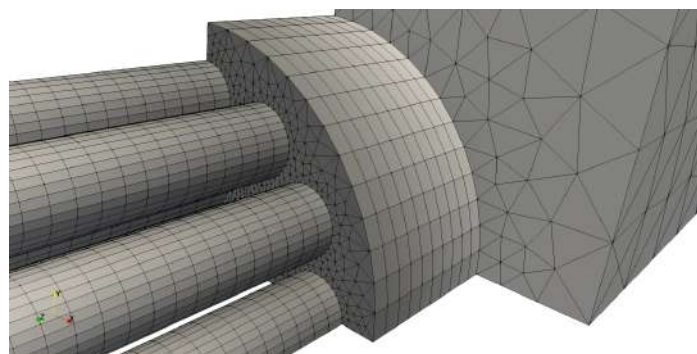


Рис. 6. Сужение сетки около широкой трубки многотрубчатого насоса Кнудсена

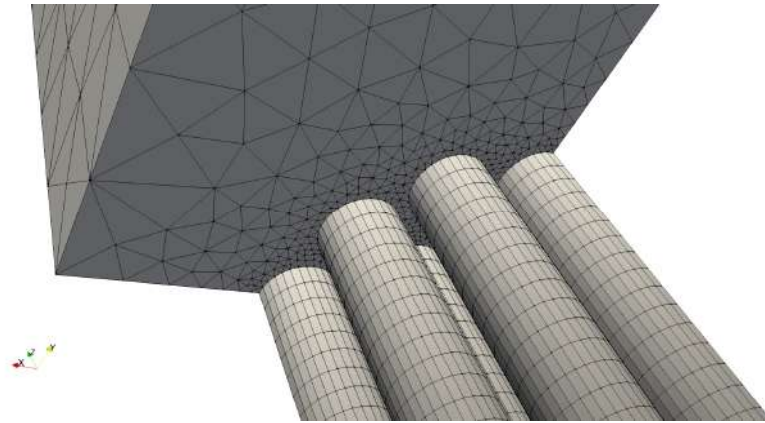


Рис. 7. Сужение сетки около узких трубок многотрубчатого насоса Кнудсена

3. Численное решение кинетического уравнения

Для построения скоростной сетки строится кубическая равномерная сетка с $|\vec{\xi}_x|, |\vec{\xi}_y|, |\vec{\xi}_z| < \xi_{cut}$, которая затем обрезается до шара радиусом ξ_{cut} .

Запишем уравнение Больцмана для дискретной функции распределения:

$$\frac{\partial f_{i\gamma}}{\partial t} + \vec{\xi}_\gamma \frac{\partial f_{i\gamma}}{\partial \vec{r}} = \hat{I}[f_{i\gamma}].$$

Уравнение будем решать методом расщепления по физическим процессам (1), (2), (3). Обозначим $f(\vec{r}_i, \vec{\xi}_\gamma, t_n) = f_{i\gamma}^n$.

$$f_{i\gamma}^* = f_{i\gamma}^n + \frac{\tau}{2V_i} \sum_{k=1}^K (\vec{\xi}_\gamma, \vec{n}_{ik}) f_{ik\gamma}^n S_{ik}, \quad (1)$$

$$f_{i\gamma}^{**} = f_{i\gamma}^* + \int_{\tau}^{t+\tau} \hat{I}_{i\gamma} dt, \quad (2)$$

$$f_{i\gamma}^{n+1} = f_{i\gamma}^{**} + \frac{\tau}{2V_i} \sum_{k=1}^K (\vec{\xi}_\gamma, \vec{n}_{ik}) f_{ik\gamma}^{**} S_{ik}, \quad (3)$$

где τ — шаг по времени, V_i — объем i -й пространственной ячейки, K — количество граней i -й пространственной ячейки, S_{ik} — площадь грани между i -й и k -й пространственными ячейками, \vec{n}_{ik} — нормаль к грани между i -й и k -й пространственными ячейками, направленная в сторону i -й пространственной ячейки.

Для численного решения уравнения Больцмана необходимо определить $f_{i\gamma}^n$ для каждой ячейки фазового пространства. В зависимости от способа вычисления потока на границах ячейки i и ячейки k может меняться порядок схемы по пространству.

При использовании схемы первого порядка точности $f_{ik\gamma}^n$ вычисляется как

$$f_{ik\gamma}^n = \begin{cases} f_{i\gamma}^n, & (\vec{n}_{ik}, \vec{\xi}_\gamma) < 0, \\ f_{k\gamma}^n, & (\vec{n}_{ik}, \vec{\xi}_\gamma) > 0. \end{cases}$$

Данный метод является реализацией первого порядка точности решения кинетического уравнения Больцмана. Явный метод удобен для распараллеливания по пространству путем разбиения на области, однако его недостатком является очень малый шаг по времени из-за мелких ячеек и условия Куранта.

Граничные условия задаются путем создания фиктивной ячейки рядом с реальной ячейкой (фиктивная ячейка внутри себя содержит f_{wy}^n), а затем рассматривается перетекание газа из фиктивной ячейки в реальную, как будто рядом с реальной ячейкой находится другая реальная ячейка (подробнее будет сказано в программной реализации).

Граничное условие на плоскостях симметрии, ограничивающих счетную область (зеркальное граничное условие), имеет вид

$$f_{wy'} = f_{iy}, \quad \bar{\xi}_{\gamma'} = \bar{\xi}_{\gamma} - 2(\bar{\xi}_{\gamma}, \bar{n})\bar{n}. \tag{4}$$

Его вид и дискретность скоростной сетки накладывают некоторые ограничения на использование данного граничного условия — оно может быть применено лишь к поверхностям, относительно которых узлы скоростной сетки будут расположены симметрично, иначе для скоростного узла $\bar{\xi}_{\gamma}$ в сетке не будет найден парный узел $\bar{\xi}_{\gamma'}$.

Диффузное граничное условие Максвелла учитывает равенство падающих на поверхность и отраженных от нее молекул и имеет вид

$$f_{wy}^n = \frac{\sum_{(\bar{\xi}_{\beta}, \bar{n}) > 0} (\bar{\xi}_{\beta}, \bar{n}) f_{i\beta}^n}{\sum_{(\bar{\xi}_{\beta}, \bar{n}) < 0} |(\bar{\xi}_{\beta}, \bar{n})| \exp\left(-\frac{m\xi_{\beta}^2}{2T_w}\right)} \exp\left(-\frac{m\xi_{\gamma}^2}{2T_w}\right). \tag{5}$$

Минимальный шаг по времени для используемой явной схемы вычисляется из условия неполного вытекания газа из ячейки, т. е. в любой момент времени по вышеописанной схеме из нее не должно выйти больше вещества, чем она содержит. Таким образом, получаем

$$\tau = \frac{\min_i \frac{V_i}{\max(\text{proj}S_i)}}{\max_g \xi_{cut}^g}.$$

i пробегает по всем ячейкам рассматриваемой системы.

g — индекс всех рассматриваемых газов в системе.

$\text{proj}S_i$ — проекция фигуры i (ячейки) на произвольную плоскость.

В схеме используется шаг $\tau / 2$ при переносе газа, что полностью обеспечивает выполнение данного условия.

4. Программная реализация

4.1. Дискретизация пространства. Пакет GMSH

Для построения пространственной сетки используется программный пакет GMSH. Программа позволяет использовать четыре вида фигур (рис. 8): тетраэдр, призма, пирамида, гексаэдр.

Однако сделаем небольшое замечание: в GMSH под призмой понимается скорее клин (wedge), так как угол между основанием и боковой стороной не обязан быть равным 90° (рис. 9), что необходимо учитывать в решателе при вычислении объемов ячеек и площадей граней.

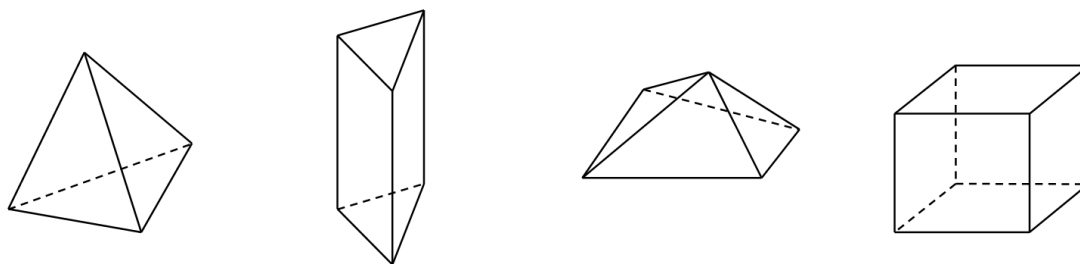


Рис. 8. Возможные фигуры в генераторе пространственных сеток GMSH

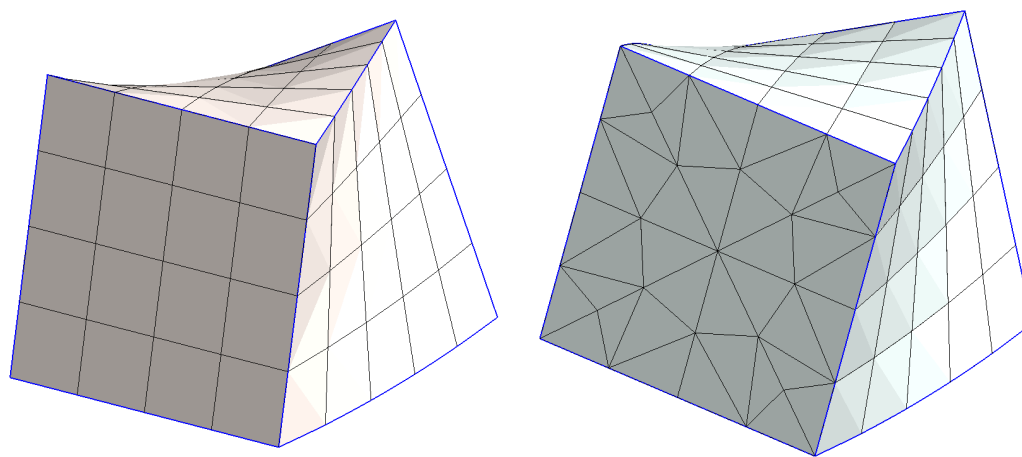


Рис. 9. Возможные дискретизации пространства в генераторе пространственных сеток GMSH

Пакет GMSH позволяет оптимизировать построенную им сетку с помощью внутренних подпрограмм, в результате чего в сетке используются ячейки с большим «качеством», что позволяет выбрать больший шаг по времени τ .

4.2. Применение MPI для распараллеливания

Пакет позволяет разбить пространственную сетку на части (рис. 10). Каждую отдельную часть в решателе будет выполнять отдельный процесс. GMSH не просто разбивает неструктурированную сетку, но также использует специальные алгоритмы для минимизации площади соприкосновения процессов.

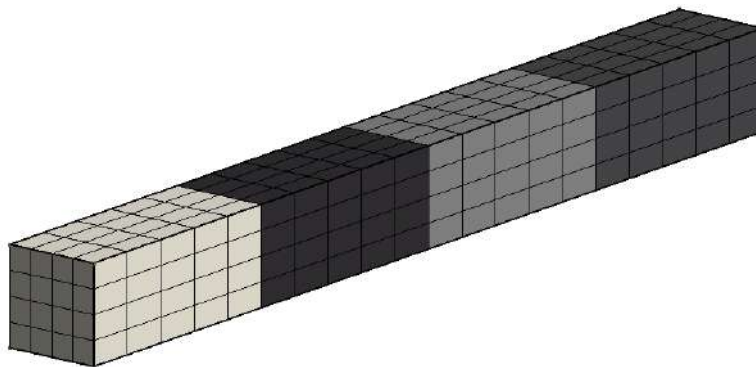


Рис. 10. Разделение трубки на четыре части с помощью алгоритмов минимизации площади соприкосновения между частями в генераторе сеток GMSH для распараллеливания на кластерах

Решатель может выполнять вычисления как на одном ядре, что удобно при отладке программы, так и на нескольких ядрах, что используется при исполнении громоздких расчетов. Выполнение кода сразу в нескольких потоках реализовано с помощью технологии MPI (Message Passing Interface). В нашей программе используется подход SPMD (Single Process, Multiple Data), который означает выполнение одного и того же кода на всех параллельных процессах. Передача функции распределения между двумя соседними процессами осуществляется через специальное граничное условие, внутри которого реализована передача сообщений с помощью MPI.

4.3. Программа для анализа сеточного файла

Описание геометрии устройства задается в файле `.geo`. GMSH считывает этот файл, а затем уже строит с его помощью неструктурированную сетку.

Полученную сетку GMSH сохраняет в собственном формате `.msh`, в котором записываются все грани на поверхностях устройства, все ячейки с их точками в виде:

```
id type Ntags phys.gr. elem.ent. Npart.tags part1 part2 ... id_point1 id_point2 ....
```

Если оставить только используемые нами параметры, то GMSH сохраняет `id` фигуры, ее тип, к какой части (процессу) фигура принадлежит — `part1, part2...`; точки, составляющие фигуру, — `id_point1, id_point2...`. Однако GMSH не сохраняет грани между ячейками, что необходимо для моделирования любого уравнения на построенной пространственной сетке.

Для исправления этого недостатка была написана программа, находящая по файлу `.msh` все грани между ячейками и сохраняющая их в свой формат (похожий на `.msh`), в котором грани сохраняются в виде

```
id type id_ent1 id_ent2 id_point1 id_point2 ....
```

`id_ent1` — ячейка, содержащая рассматриваемую грань.

`id_ent2` — вторая ячейка, содержащая рассматриваемую грань либо тип граничного условия для грани (граничные условия на поверхностях фигуры задаются в специальном отдельном файле и обрабатываются вместе с файлом `.msh`).

Создание файла, в котором описаны все точки системы, ячейки и грани между ячейками, позволяет один раз запустить анализатор файла `.msh` для одной неструктурированной сетки, а затем уже запускать на этой сетке решатель с различным количеством временных шагов или различными начальными условиями, различным количеством газов в системе, а также с различными параметрами газов.

Блок-схему работы анализатора файла `.msh` можно представить так, как показано на рис. 11.

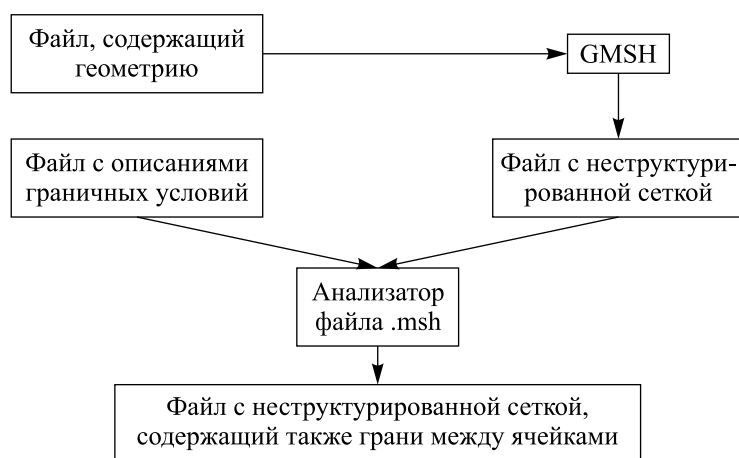


Рис. 11. Блок-схема работы анализатора сгенерированного с помощью GMSH файла пространственной сетки (`.msh` файла) для получения связей между ячейками

4.4. Структура решателя и цикл выполнения программы

Важной частью моделирования кинетического уравнения Больцмана на неструктурированной пространственной сетке является решатель. Он является программой, написанной с использованием объектно ориентированного подхода. Распишем сначала структуру наследования классов ячеек и граничных условий (рис. 12, рис. 13).

Каждый MPI-процесс содержит некоторое количество реальных ячеек (GeomFig), соединенных между собой гранями (Face). Через грань происходит соединение либо с другой ячейкой этого же процесса, либо с фиктивной ячейкой граничного условия (Boundary3D), либо с реальной ячейкой другого MPI-процесса (Connection).

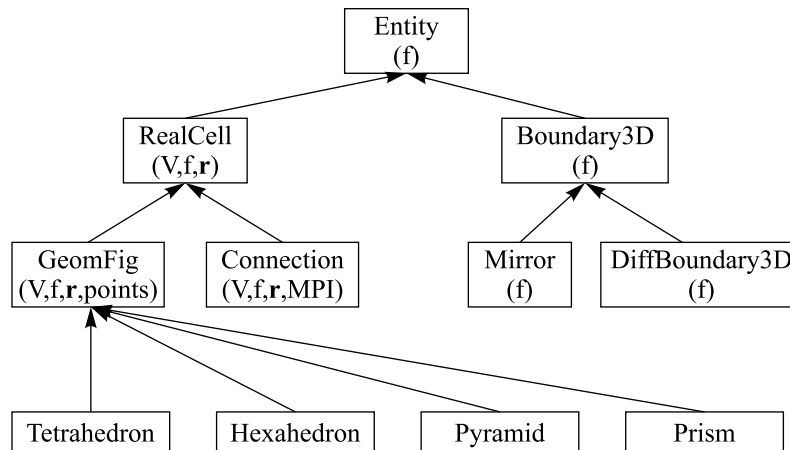


Рис. 12. Иерархия классов ячеек пространственной сетки и граничных условий в решателе

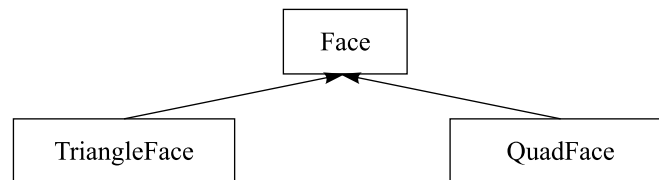


Рис. 13. Иерархия классов граней между ячейками пространственной сетки в решателе

Каждая ячейка (класс GeomFig) — отдельный объект, который содержит в себе в виде полей класса всю информацию, относящуюся только к нему (объем V , свой центр масс \mathbf{r} , свою функцию распределения и другие параметры), а также указатели на свои грани. Грани имеют указатели на один объект класса GeomFig, а также указатель на Entity — вторым указателем может быть как реально существующая ячейка, так и граничное условие. Таким образом, сами ячейки не могут узнать, соединены они с граничным условием или нет. Однако этого не требуется, так как цель любого объекта, наследуемого от Entity, — это вернуть функцию распределения с помощью виртуального метода. Для реально существующей ячейки это просто возврат функции распределения с предыдущего временного шага, а для граничного условия — вычисление возвращаемой функции с помощью формул (4), (5). Схема соединения классов представлена на рис. 14.

Опишем теперь подробнее свойства каждого класса.

Entity — самый верхний класс в иерархии (интерфейс). Цель объекта, который наследуется от этого класса, — это определить метод возврата функции распределения.

Boundary3D — класс означающий, что наследуемые от него объекты являются граничными условиями. Данный класс сделан, чтобы легко можно было реализовывать дополнительные граничные условия и добавлять их в программу.

Mirror — класс зеркального граничного условия. При вызове виртуального метода возврата функции распределения обращает относительно своей грани функцию распределения из соседней ячейки согласно (4), а затем возвращает полученное значение.

DiffBoundary3D — класс диффузного граничного условия. При вызове виртуального метода возврата функции распределения вычисляет отраженную функцию распределения согласно (5), т. е. возвращает функцию распределения Максвелла. Обладает отдельным параметром в качестве поля класса, характеризующим тип данного диффузного граничного условия — температурой стенки T_w .

RealCell — объект этого класса является реальной ячейкой, которая имеет свой объем V , центр масс \mathbf{r} , функцию распределения f . Данный класс создан с прицелом на реализацию метода второго порядка точности. Для первого порядка не важен центр масс ячейки, так как функция распределения считает постоянной в пределах одной ячейки. Во втором порядке появляется градиент, поэтому для вычисления функции распределения в одной из точек внутри ячейки требуется знать центр масс: $f(\vec{r}) = f(\vec{r}_0) + (\vec{r} - \vec{r}_0, \vec{\nabla} f(\vec{r}_0))$.

GeomFig — объект этого класса является реальной ячейкой, которая принадлежит данному процессу (ядру). Этот класс содержит все, что относится к реальной ячейке: объем V , центр масс \mathbf{r} , функцию распределения f , а также методы для вычисления концентрации, давления, температуры и т. п. Именно в этом классе реализуются формулы (1), (2), (3).

Connection — объект этого класса является реальной ячейкой, но в соседнем MPI-процессе (ядре). Это небольшая копия ячейки из объектов класса GeomFig соседнего процесса в этом процессе. Содержит методы для передачи функций распределения между процессами с помощью MPI, а также некоторые данные из соседнего процесса, которые могут помочь в работе (например, центр масс \mathbf{r} и объем V).

Tetrahedron, Hexahedron, Pyramid, Prism — специальные классы, в которых реализованы функции вычисления объема, центра масс в зависимости от специфики фигуры. Также содержат все точки и грани, которые соответствуют фигуре.

Face — объект этого класса является гранью. Содержит указатель на объект класса GeomFig, на объект класса Entity. Соответственно, один указатель — реальная ячейка в данном MPI-процессе, а второй — может быть как реальной ячейкой, так и граничным условием.

TriangleFace, QuadFace — треугольная грань и четырехугольная грань соответственно. Содержат методы для вычисления центра грани, площади, нормали.

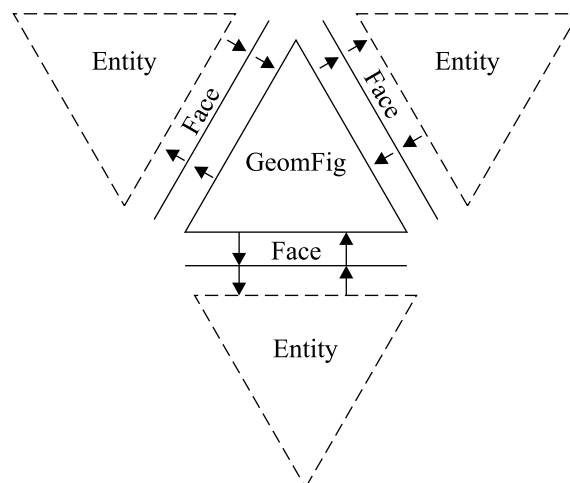


Рис. 14. Схема соединения классов ячеек и граней пространственной сетки в решателе кинетического уравнения Больцмана. GeomFig — любая геометрическая фигура, представляющая собой ячейку пространственной сетки, Entity — ячейка или граничное условие, Face — грань, через которую происходит расчет перетекания газа

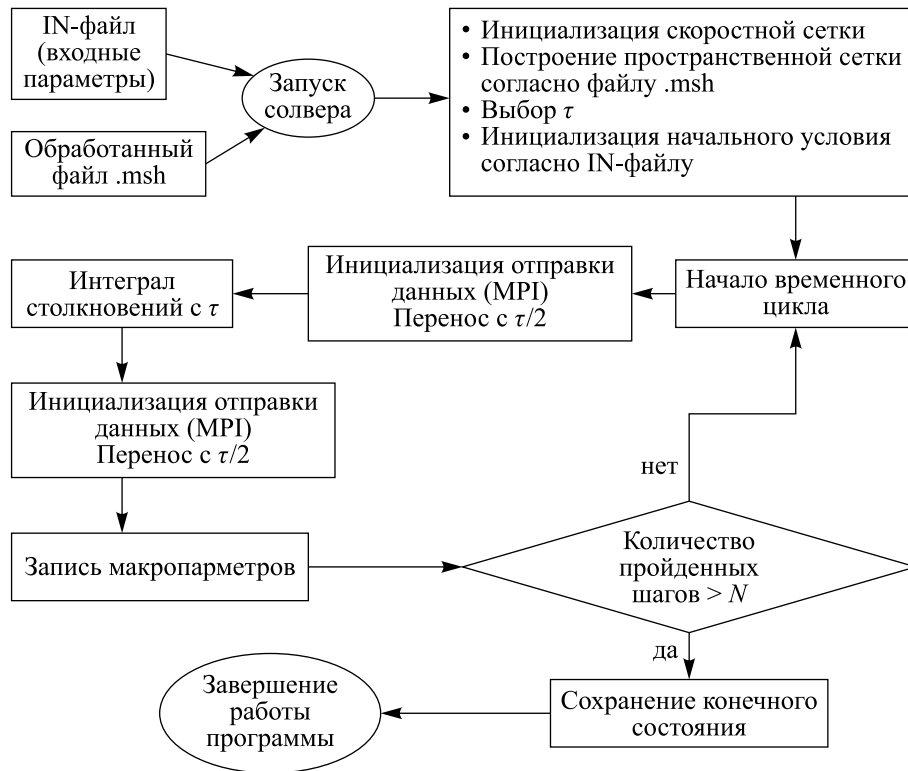


Рис. 15. Блок-схема процесса выполнения временных шагов решателя кинетического уравнения Больцмана

Также в программе имеются и другие классы, такие как Solver3D, который содержит всю сеть ячеек, граней, скоростные сетки газов в системе, правила сохранения результатов программы; классы для записи макропарметров в разные форматы. Однако подробное описание таких классов не требуется, так как они напрямую не связаны с расчетом течения газа.

Сам процесс выполнения временных шагов проходит так, как показано на рис. 15.

5. Результаты

5.1. Тесты

Для проверки корректности выполнения программы были проведены некоторые тесты.

Сохранение массы газа

Первым и самым простым тестом является тест на сохранение массы: в результате выполнения программы масса всего газа в установке не должна изменяться, а лишь колебаться около первоначального значения с точностью, сравнимой с машинной. Данный тест позволяет проверить корректность вычисления объемов ячеек, площадей граней. После нескольких тысяч временных шагов относительное изменение массы всего газа составляет

$$\frac{\Delta m}{m} \approx 10^{-14}.$$

Задача теплопроводности. Свободномолекулярный режим

Задается газ между двумя плоскопараллельными стенками с разной температурой $T_1 = 0.4$, $T_2 = 0.7$ (рис. 16). Для моделирования бесконечных стенок задано зеркальное граничное условие на боковых гранях. Газ в такой модели движется свободно (т. е. не задействован интеграл столкновений), соударяясь лишь со стенками. В результате температура газа между двумя бесконечными плоскостями с разной температурой должна стать постоянной и равной $T = \sqrt{T_1 T_2} = 0.52915$.

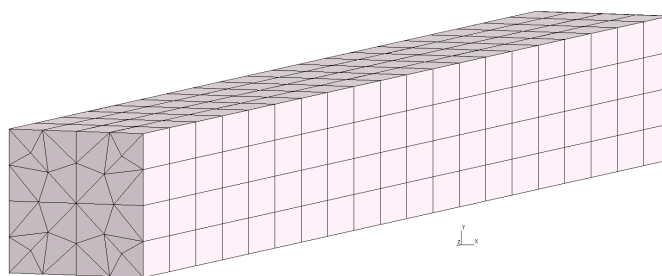


Рис. 16. Пример призматической дискретизации пространства задачи теплопроводности между двумя нагретыми до разной температуры стенками

Были получены результаты для гексаэдральной, тетраэдральной и призматической дискретизаций пространства.

Таблица 1. Температуры в стационарном состоянии для задачи теплопроводности между двумя нагретыми до разной температуры стенками для различной дискретизации пространства при отсутствии столкновений между молекулами

	T	N_f	τ
Гексаэдры	0.529957	10 000	0.03284
Призмы	0.529958	20 000	0.01036
Тетраэдры	0.529956	40 000	0.00536

Сделаем небольшое замечание: так как скоростная сетка дискретна, то интегрирование по ней сводится к сумме, что приводит к погрешности вычисления макропараметров. Например, если задать температуру газа равной 1 (максвелловское распределение), то температура газа, вычисленная через сумму на дискретной сетке, будет равной 0.999724. Чем больше количество ячеек в модели, тем точнее интегрирование и, соответственно, значение макропараметров.

Задача теплопроводности ($Kn = 0.1$)

Если же в предыдущем примере задействовать интеграл столкновений с потенциалом упругих сфер [Аристов и др., 1990; Ohwada, 1996], то температура от левой стенки к правой должна изменяться практически линейно в середине ($z = L/2$, где L — расстояние между пластинами), что и получено в расчете (рис. 17). Экспериментальные данные для подобной задачи представлены в [Teagan, Springer, 1968].

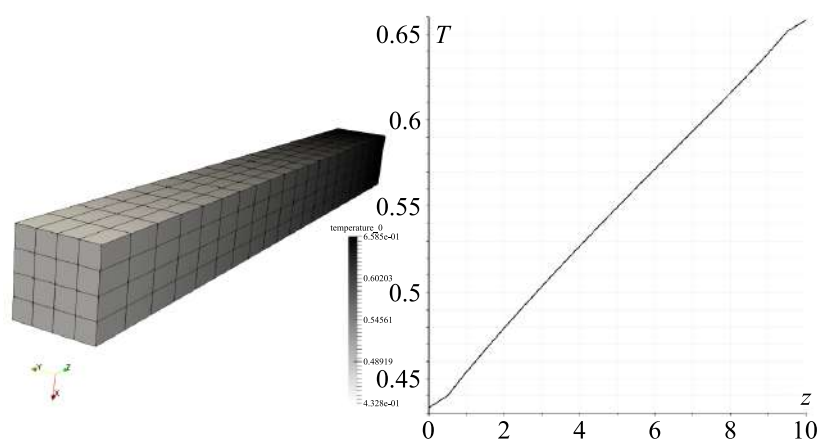


Рис. 17. Задача теплопроводности при числе Кнудсена 0.1 — распределение температуры между двумя нагретыми до разной температуры стенками. Представлена гексаэдральная дискретизация пространства

5.2. Откачка для разных чисел Кнудсена

Для описанного выше многотрубчатого насоса были получены результаты откачки при разных числах Кнудсена. График откачки в динамике приведен для числа Кнудсена 0.62 на рис. 18, по оси абсцисс отложено число шагов по времени.

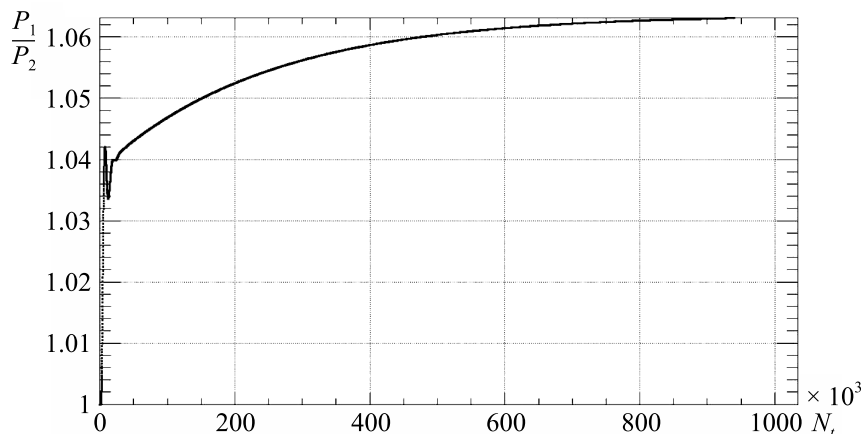


Рис. 18. Отношение давлений в резервуарах между мембраной из многотрубчатых насосов Кнудсена в зависимости от количества пройденных временных шагов

На графике вначале откачки можно заметить локальный максимум, который связан с первоначальным вылетом газа из малых и большой трубок, так как они имеют более горячие стенки.

Макропараметры газа в конце расчета представлены на рис. 19–21. В начале расчета концентрация газа везде равна 1, температура газа равна 1.

График отношений давления в левом резервуаре к давлению в правом (откачка) для различных чисел Кнудсена от 0.05 до 4.5 с использованием интеграла столкновений с потенциалом твердых сфер представлен на рис. 22.

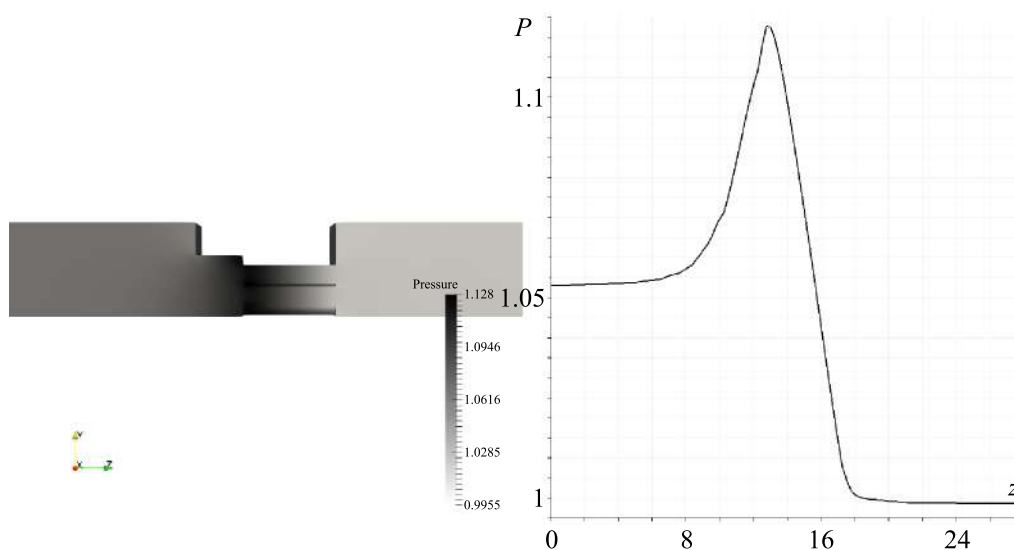


Рис. 19. Давление газа в многотрубчатом насосе Кнудсена в установившемся режиме. Начальное значение давления равно 1 во всей установке

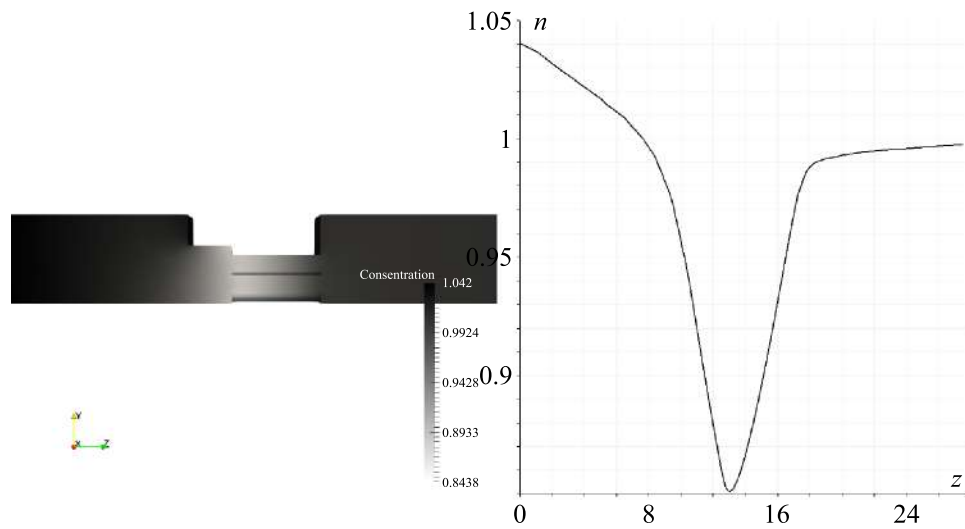


Рис. 20. Концентрация газа в насосе в установившемся режиме. Начальное значение концентрации равно 1 во всей установке

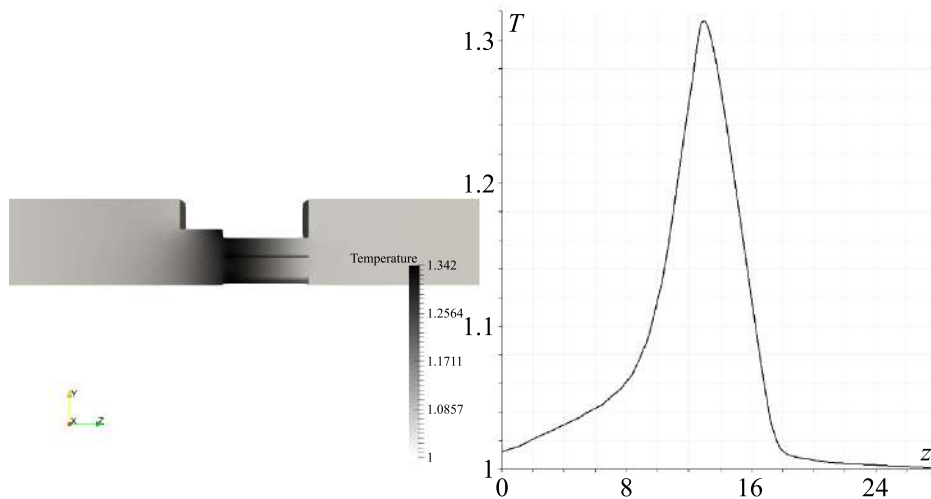


Рис. 21. Температура газа в насосе в установившемся режиме. Начальное значение температуры равно 1 во всей установке

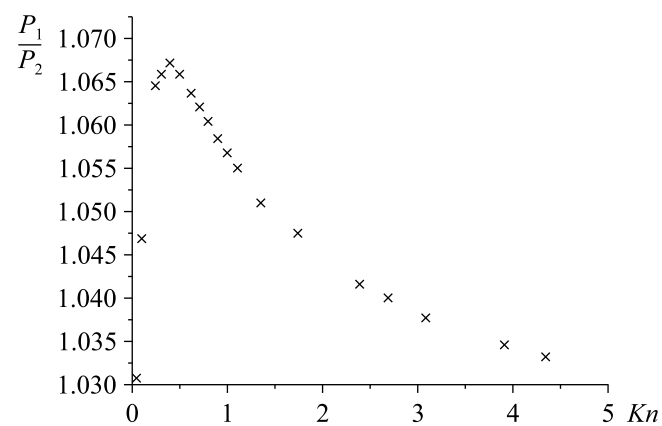


Рис. 22. Зависимость откачки (отношения давлений в резервуарах) от чисел Кнудсена для мембраны из многотрубчатых насосов

5.3. Погрешности вычислений

Для проверки полученных данных по точности заданной скоростной сетки были проведены расчеты при $Kn = 0.4$ (где достигается максимум откачки), но с другим количеством скоростных узлов N_v и с другим количеством генерируемых столкновений N_{col} между молекулами в интеграле столкновений. Пик графика является наиболее нестабильной областью, поэтому для оценки погрешностей сверху было выбрано значение $Kn = 0.4$.

В таблице 2 относительная погрешность считается как абсолютная разница откачек, деленная на само значение откачки по умолчанию (без единицы).

Для проверки точности полученных результатов в зависимости от подробности пространственной сетки была сгенерирована сетка, содержащая 21 000 тетраэдров и 96 000 призм (рис. 23, 24).

Таблица 2. Погрешности откачки при использовании более точных скоростных сеток

N_v	N_{col}	$\frac{P_1}{P_2}$ (откачка)	Относительная погрешность (%)
4224	50 000	1.06715	— (условия по умолчанию)
4224	100 000	1.06717	0.03
4224	200 000	1.06699	0.24
33552	50 000	1.06702	0.19

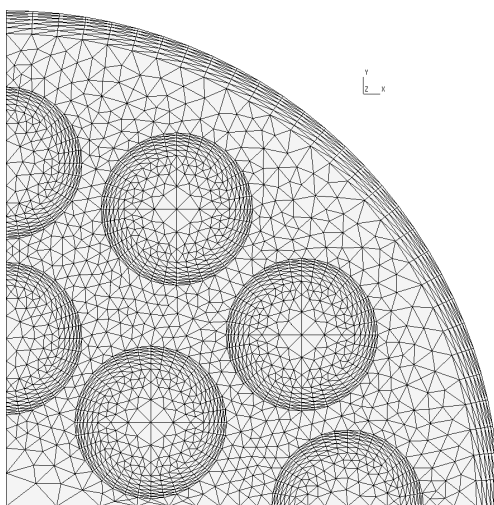


Рис. 23. Срез сетки в большой трубке. Подробная пространственная сетка многотрубчатого насоса Кнудсена. Каждый треугольник — основание призмы

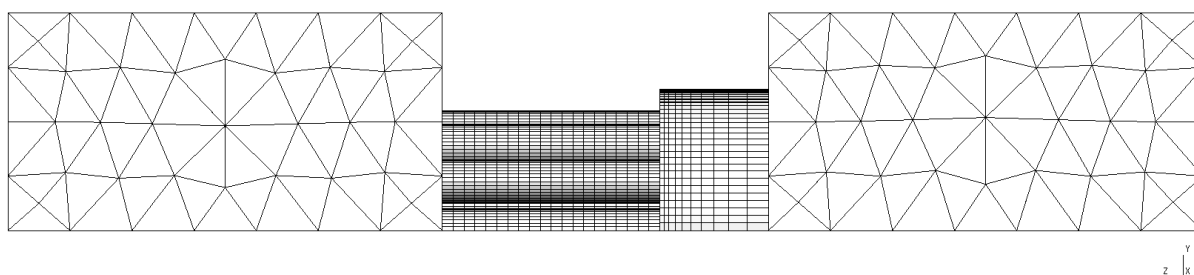


Рис. 24. Продольный вид подробной пространственной сетки многотрубчатого насоса

Полученное значение откачки $\frac{P_1}{P_2} = 1.0669$, что соответствует относительной погрешности в 0,37 %.

Из таблицы 2 видно, что отклонения в значении откачки происходят как в сторону уменьшения, так и в сторону увеличения значения, т. е. эффекты от погрешностей могут компенсировать друг друга. Однако суммирование всех относительных погрешностей даст оценку сверху, как если бы все отклонения имели один и тот же знак (суммирование относительных погрешностей возможно, так как знаменателем является одна и та же величина). Суммарная относительная погрешность использования скоростной ($N_v = 4224$, $N_{\text{столкн}} = 50\,000$) и пространственной (39 000 элементов) сеток в эксперименте составляет 0.83 % = (0.03 + 0.24 + 0.19) + 0.37, что говорит о состоятельности используемой дискретизации и о возможности использования более грубых сеток при расчетах для ускорения времени выполнения программы, если ограничиться точностью, например, в 3 %.

6. Заключение

Был создан решатель с первым порядком точности по пространству для решения кинетического уравнения Больцмана на сетках с тетраэдральной, призматической, пирамидальной и гексаэдральной дискретизациями пространства. Решатель был применен для расчета современной конфигурации откачивающей мембраны из многотрубчатых насосов Кнудсена. Проведенные тесты говорят о высокой точности полученных результатов моделирования течения.

По результатам работы можно сделать вывод, что рассмотренный многотрубчатый насос Кнудсена позволяет получить откачку около 7 % для числа Кнудсена 0.4 .

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>).

Авторы выражают благодарность Ю. Ю. Клоссу, Ф. Г. Черемисину за оказанную помощь при написании настоящей статьи.

Список литературы (References)

- Аристов В. В., Иванов М. С., Черемисин Ф. Г.* Решение задачи об одномерной теплопередаче в разреженном газе двумя методами // Журнал вычислительной математики и физики. — 1990. — Т. 30, № 4. — С. 623–626.
- Aristov V. V., Ivanov M. S., Tcheremisin F. G.* Reshenie zadachi ob odnomernoy teploperedache v razrejennom gaze dvum'a metodami [Solution of the problem about one dimensional heat transfer in rarefied gas with two methods] // Jurnal vychislitelnoi matematiki i fiziki [Computational mathematics and physics journal].
- Аристов В. В., Черемисин Ф. Г.* Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // ДАН СССР. — 1976. — Т. 231, № 1. — С. 49–52.
- Aristov V. V., Tcheremissine F. G.* Rassheplenie neodnorodnogo kineticheskogo operatora uravneniya Bol'mana [Splitting of nonuniform kinetic operator of Boltzmann equation] // DAN SSSR [Dokl. AS USSR]. — 1976. — Vol. 231, No. 1. — P. 49–52 (in Russian).
- Бёрд Г.* Молекулярная газовая динамика. — М.: МИР, 1991.
- Bird G. A.* Molecular Gas Dynamics. — Oxford: Clarendon Press, 1976.
- Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Потапов А. П., Черемисин Ф. Г., Шувалов П. В.* Моделирование течений разреженного газа на основе решения кинетического уравнения Больцмана консервативным проекционным методом // Журнал вычислительной математики и физики. — 2016. — Т. 56, № 6. — С. 89–105.

- Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Potapov A. P., Tcheremissine F. G., Shuvalov P. V.* Modelirovanie techenii razrejenogo gaza na osnove resheniya kineticheskogo uravneniya Bol'cmana konservativnim projekcionnim metodom [Simulation of rarefied gas flows based on the solution of the Boltzmann kinetic equation using the conservative projection method] // *Jurnal vychislitelnoi matematiki i fiziki* [Computational mathematics and physics journal]. — 2016. — Vol. 56, No. 6. — P. 89–105 (in Russian).
- Kogan M. H.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
Kogan Maurice N. Rarefied Dynamics. — Springer US, 1969.
- Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. — М.: Издательство иностранной литературы, 1960.
Sydney Chapman T. G. Cowling the Mathematical Theory of Non-uniform Gases. — Cambridge University Press, 1990.
- Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. — 1997. — Т. 357, № 1. — С. 1–4.
Tcheremissine F. G. Konservativnii metod vychisleniya integrala stolknovenii Bol'cmana [Conservative method of calculating the Boltzmann collision integral] // *Doklady RAN* [Reports RAS]. — 1997. — Vol. 357, No. 1. — P. 1–4 (in Russian).
- Черемисин Ф. Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Вычислительная математика и математическая физика. — 2006. — Т. 7, № 2. — С. 329–343.
Tcheremissine F. G. Reshenie kineticheskogo uravneniya Bol'cmana dl'a vysokoskorostnykh techenii [Solution of Boltzmann kinetic equation for highspeed flows] // *Vychislitelnie matematika i matematicheskaya fizika* [Computational mathematics and mathematical physics]. — 2006. — Vol. 7, No. 2. — P. 329–343 (in Russian)
- Anikin Yu. A., Derbakova E. P., Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Martynov D. V., Rogozin O. A., Shuvalov P. V., Tcheremissine F. G.* Computing of gas flows in micro- and nano-scale channels on the base of the Boltzmann Kinetic equation // *Proc. Comput. Sci.* — 2010. — Vol. 1, No. 1. — P. 735–744.
- Anikin Yu. A., Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Martynov D. V., Shuvalov P. V., Tcheremissine F. G.* Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // *Vacuum.* — 2012. — Vol. 86, No. 11. — P. 1170–1777.
- Anikin Yu. A., Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu.* Method of calculating the collision integral and solution of the Boltzmann kinetic equation for simple gases, gas mixtures and gases with rotational degrees of freedom // *International Journal of Computer Mathematics.* — 2015. — Vol. 92, No. 9. — P. 1775–1789.
- Beylich A.* Solving the kinetic equation for all Knudsen numbers // *Phys. Fluids.* — 2000. — Vol. 12, No. 2. — P. 444–465.
- Cheremisin F. G.* Conservative method of calculating the Boltzmann collision integral // *Dokl. Phys.* — 1997. — Vol. 42. — P. 607–610.
- Cheremisin F. G.* Solving the Boltzmann equation in the case of passing to the hydrodynamic flow regime // *Dokl. Phys.* — 2000. — Vol. 45, No. 8. — P. 401–404.
- GMSH [Электронный ресурс]: geuz.org/gmsh/ (дата обращения: 25.04.2019).
GMSH [Electronic resource]: geuz.org/gmsh/ (accessed 25.04.2019).
- Han Y. L., Muntz E. P., Alexeenko A., Young M.* Experimental and Computational Studies of Temperature Gradient-Driven Molecular Transport in Gas Flows through Nano/Microscale Channels Nanoscale and Microscale // *Thermophysical Engineering.* — 2007. — Vol. 11, No. 1-2. — P. 151–175.
- Ibragimov I., Rjasanow S.* Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid // *Computing.* — 2002. — Vol. 69, No. 2. — P. 163–186.
- Knudsen M.* Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularströmung // *Ann. der Phys.* — 1909. — Vol. 336, No. 1. — P. 205–229.
- Korobov N. M.* Approximate evaluation of multiple integrals // *Dokl. Akad. Nauk SSSR.* — 1959. — Vol. 124. — P. 1207–1210.

- Muntz E. P., Sone Y., Aoki K., Vargo S., Young M.* Performance Analysis and Optimization Considerations for a Knudsen Compressor in Transitional Flow // *J. Vac. Sci. Technol. A.* — 2002. — Vol. 20, No. 1. — P. 214–224.
- Ohwada T.* Heat flow and temperature and density distributions in a rarefied gas between parallel plates with different temperatures. Finite-difference analysis of the nonlinear Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *Physics of Fluids.* — 1996. — Vol. 8. — P. 2153–2160.
- Palczewski A., Schneider J., Bobylev A. V.* Consistency result for a discrete-velocity model of the Boltzmann equation // *SIAM J. Numer. Anal.* — 1997. — Vol. 34, No. 5. — P. 1865–1883.
- Sone Y., Waniguchi Y., Aoki K.* One-way flow of a rarefied gas induced in a channel with a periodic temperature distribution // *Phys. Fluids.* — 1996. — Vol. 8. — P. 2227–2235.
- Takata S., Sugimoto H., Kosuge S.* Gas separation by means of the Knudsen compressor // *European J. Mechanics, B/Fluids.* — 2007. — Vol. 26, No. 2. — P. 155–181.
- Tcheremissine F. G.* Solution to the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows // *Comput. Math. Math. Phys.* — 2006. — Vol. 46, No. 2. — P. 315–329.
- Teagan W. P., Springer G. S.* Heat-transfer and density-distribution measurements between parallel plates in the transition regime // *Phys. Fluids.* — 1968. — Vol. 11, No. 3. — P. 497–506.

