

УДК: 519.876.5

Моделирование начальной стадии истечения двухкомпонентной разреженной газовой смеси через тонкую щель в вакуум

С. С. Ситников^{1,2,a}, Ф. Г. Черемисин^{1,3}, Т. А. Сазыкина^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет),
Россия, 141701, г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Россия, 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

³ Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»,
Вычислительный центр им. Дородницына Российской академии наук,
Россия, 119333, г. Москва, ул. Вавилова, д. 40

E-mail: ^a sergeysitnikov@phystech.edu

Получено 14.04.2021.

Принято к публикации 05.07.2021.

В работе рассматривается процесс формирования течения при истечении двухкомпонентной газовой смеси через тонкую щель в вакуум. Предлагается подход к моделированию течений разреженных газовых смесей в переходном режиме на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана, в котором для вычисления интегралов столкновения используется консервативный проекционно-интерполяционный метод. Приводятся расчетные формулы, детально описана методика вычислений применительно к течению бинарной газовой смеси. В качестве потенциала взаимодействия молекул используется потенциал Леннарда–Джонса. Разработана программно-моделирующая среда, позволяющая проводить исследование течений газовых смесей в переходном режиме на системах кластерной архитектуры. За счет использования технологий распараллеливания кода получено ускорение счета в 50–100 раз. Проведено численное моделирование нестационарного двумерного истечения бинарной аргон–неоновой газовой смеси в вакуум через тонкую щель для различных значений числа Кнудсена. Получены графики зависимости выходного потока компонентов газовой смеси от времени в процессе установления течения. Обнаружены нестационарные области сильного разделения компонентов газовой смеси, в которых отношение концентраций достигает 10 и более. Обнаруженный эффект может иметь приложения в задаче разделения газовых смесей.

Ключевые слова: динамика разреженных газов, бинарные газовые смеси, кинетическое уравнение Больцмана, проекционный метод, нестационарные течения, численное моделирование

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт» (<http://computing.nrcki.ru/>). Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта «Компьютерное моделирование и анализ газодинамических процессов в многоэлементных термоэмиссионных энергетических системах преобразования энергии», № 20-48-242918.

UDC: 519.876.5

Simulation of the initial stage of a two-component rarefied gas mixture outflow through a thin slit into vacuum

S. S. Sitnikov^{1,2,a}, F. G. Tcheremissine^{1,3}, T. A. Sazykina^{1,2}

¹ Moscow Institute of Physics and Technology,
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, 141701, Russia

² National Research Center «Kurchatov Institute»,
1 Akademika Kurchatova pl., Moscow, 123182, Russia

³ Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS,
40 Vavilov st., Moscow, 119333, Russia

E-mail: ^a sergeysitnikov@phystech.edu

Received 14.04.2021.

Accepted for publication 05.07.2021.

The paper considers the process of flow formation in an outflow of a binary gas mixture through a thin slit into vacuum. An approach to modeling the flows of rarefied gas mixtures in the transient regime is proposed based on the direct solution of the Boltzmann kinetic equation, in which the conservative projection method is used to calculate the collision integrals. Calculation formulas are provided; the calculation procedure is described in detail in relation to the flow of a binary gas mixture. The Lennard–Jones potential is used as an interaction potential of molecules. A software modeling environment has been developed that makes it possible to study the flows of gas mixtures in a transitional regime on systems of cluster architecture. Due to the use of code parallelization technologies, an acceleration of calculations by 50–100 times was obtained. Numerical simulation of a two-dimensional outflow of a binary argon–neon gas mixture from a vessel into vacuum through a thin slit is carried out for various values of the Knudsen number. The graphs of the dependence of gas mixture components output flow on time in the process of establishing the flow are obtained. Non-stationary regions of strong separation of gas mixture components, in which the molecular densities ratio reaches 10 or more, were discovered. The discovered effect can have applications in the problem of gas mixtures separation.

Keywords: rarefied gas dynamics, binary gas mixtures, Boltzmann kinetic equation, projection method, unsteady flows, numerical simulation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2021, vol. 13, no. 4, pp. 747–759 (Russian).

The results of the work were obtained using computational resources of MCC NRC «Kurchatov Institute» (<http://computing.nrcki.ru/>). This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, the Government of Krasnoyarsk krai, and Krasnoyarsk Regional Fund for Supporting Scientific and Technologies Activities project nos. 20-48-242918 «Computer modeling and analysis of gas-dynamic processes in multi-element thermoemission energy conversion systems».

Введение

Исследование течения разреженных газов и газовых смесей имеет применение во многих областях науки и техники [Danilatos, 2001; Jamison et al., 2002; Jitschin et al., 1999; Szwemin et al., 1999]. Для случая простого газа задача исследована достаточно хорошо [Sharipov, 2012; Sharipov, Seleznev, 1998], в то время как течения газовых смесей изучены значительно меньше [Sharipov, 2017]. При этом течения газовых смесей часто встречается на практике и имеют большое прикладное значение [Sharipov, 2013]. В данной работе рассматривается процесс формирования течения двухкомпонентной газовой смеси в вакуум для различных значений числа Кнудсена.

По степени разрежения газа выделяют три режима течения: свободномолекулярный, переходный и гидродинамический. Для свободномолекулярного [Narasimha, 1961] и гидродинамического [Alder, 1979] режимов течения решение задачи относительно легко получить аналитически или с помощью численного моделирования. Для переходного режима решение задачи намного сложнее. Численное моделирование течения газа в переходном режиме может быть проведено с использованием модельных кинетических уравнений, то есть упрощенного уравнения Больцмана, или с помощью метода прямого статистического моделирования Монте-Карло (DSMC) [Bird, 1976]. Оба вышеупомянутых подхода имеют известные ограничения на применимость и точность моделирования. Модельные уравнения и DSMC являются широко распространенным инструментом для решения многих практических задач динамики разреженного газа. Однако они не так эффективны для нестационарных течений и течений с малыми числами Кнудсена, а также дают существенную неопределенность численного моделирования. По этой причине в данной работе моделирование производится на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана. Основная трудность при таком подходе заключается в вычислении интегралов столкновений, что является ресурсоемкой задачей, и связана с выполнением законов сохранения массы, импульса и энергии. В нашей работе интегралы столкновений вычисляются с помощью консервативного проекционного метода, предложенного в [Черемисин, 1997, 2000]. Данный метод консервативен по энергии, импульсу и массе и обеспечивает точное равенство интеграла столкновений от максвелловской функции распределения нулю. Последнее существенно увеличивает эффективность метода для течений при малых числах Кнудсена. Метод не подвержен влиянию статистических шумов, что позволяет моделировать течение не только в стационарном режиме, но и во время его установления. Кроме того, его вычислительная сложность вполне приемлема для численного моделирования даже в случае бинарной смеси.

Целью настоящей работы является исследование процесса установления течения при двумерном истечении двухкомпонентной газовой смеси в вакуум для различных режимов течения. Численное моделирование проводится для аргон-неоновой газовой смеси.

Теоретические основы

Для описания поведения двухкомпонентной газовой смеси введем функции распределения для каждого компонента: $f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$, $i = 1, 2$. Макроскопические величины, описывающие состояние каждого компонента смеси, выражаются через функции распределения следующим образом:

– концентрация:

$$n_i(t, \mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} f_i d^3 p, \quad (1)$$

– средняя скорость газа:

$$\mathbf{u}_i(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{n_i m_i} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{p}_i f_i d^3 p, \quad (2)$$

– температура компоненты газа:

$$T_i(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{3k_B n_i m_i} \int_{\mathbb{R}^3} (\mathbf{p}_i - m_i \mathbf{u}_i)^2 f_i d^3 p. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{p}_i и m_i — импульс и масса молекул i -го компонента смеси соответственно, а k_B — постоянная Больцмана.

Эволюция функций распределения во времени описывается кинетическим уравнением Больцмана [Kogan, 1969], которое для случая двухкомпонентной газовой смеси можно записать в виде следующей системы:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} = \sum_{j=1,2} I_{ij}, \quad i=1,2. \quad (4)$$

Здесь $I_{ij}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_i) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{b_{\max}} b db \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_j (f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}'_i) f_j(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}'_j) - f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_i) f_j(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}_j)) g$ — интегралы столкновений, записанные для взаимодействия i -й и j -й компонентов газа.

В выражении для интегралов столкновений в (4) \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j — начальные импульсы двух сталкивающихся молекул, $g = \left| \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_j}{m_j} \right|$ — их относительная скорость, b является прицельным параметром, b_{\max} — радиус обрезки потенциала взаимодействия, φ — азимутальный угол, \mathbf{p}'_i и \mathbf{p}'_j — импульсы молекул после столкновения, определяемые по начальным импульсам \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j , по параметрам столкновения b , φ , с использованием заданного потенциала молекулярного взаимодействия $U(\mathbf{r})$.

В данной работе в качестве потенциала взаимодействия молекул используется потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(\mathbf{r}) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right). \quad (5)$$

Параметры ε , σ для каждого компонента газовой смеси можно найти в [Hirschfelder et al., 1954]. Параметры потенциала взаимодействия различных молекул находятся с помощью комбинационных соотношений [Ferziger, Karer, 1972]

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}, \quad \varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^6 = \sqrt{\varepsilon_i \sigma_i^6 \varepsilon_j \sigma_j^6}. \quad (6)$$

Для удобства используются безразмерные переменные. Рассмотрим двухкомпонентную смесь аргона с концентрацией n_1 и неона с концентрацией n_2 . Пусть характерные параметры $m_0, \sigma_0, \varepsilon_0$ равны соответствующим параметрам аргона. Для смеси $n_0 = n_1 + n_2$ и $T_0 = T_1 = T_2$. Определим характеристическую скорость, время и длину свободного пробега молекул как соответствующие значения для аргона, если бы он был единственным компонентом смеси с плотностью n_0 :

$$v_0 = \sqrt{\frac{kT_0}{m_0}}, \quad \tau = \frac{\lambda}{v_0}, \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0 \sigma_0^2 \Omega_1^{(2,2)}}}, \quad (7)$$

где $\Omega_1^{(2,2)} = \Omega_1^{(2,2)} \left(\frac{kT_0}{\varepsilon_0} \right)$ (см. [Hirschfelder et al., 1954]). Выполним переход к безразмерным пе-

ременным по следующей схеме: $f \rightarrow \frac{f}{n_0(m_0v_0)^{-3}}$, $t \rightarrow \frac{t}{\tau}$, $\mathbf{p} \rightarrow \frac{\mathbf{p}}{m_0v_0}$, $m \rightarrow \frac{m}{m_0}$, $\mathbf{r} \rightarrow \frac{\mathbf{r}}{\lambda}$,

$b \rightarrow \frac{b}{\sigma_0}$, $g \rightarrow \frac{g}{v_0}$. В безразмерных переменных система (4) примет следующий вид:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Omega_1^{(2,2)}} \sum_{j=1,2} I_{ij}, \quad i=1,2, \quad (8)$$

где $I_{ij} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{b_{\max}/\sigma_0} b db \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_j (f_i(\mathbf{p}'_i) f_j(\mathbf{p}'_j) - f_i(\mathbf{p}_i) f_j(\mathbf{p}_j)) g$.

В дальнейшем мы будем использовать систему уравнений Больцмана, записанную в форме (8), для моделирования течения бинарной газовой смеси.

Переход от математической модели к численному моделированию

Для численного решения системы (8) воспользуемся методом расщепления по физическим процессам [Aristov, Cheremisin, 1980]. Суть этого метода заключается в том, что на каждой итерации по времени вначале решаются уравнения адвекции:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad i=1,2, \quad (9)$$

а затем полученные промежуточные значения подставляются в качестве начальных условий для уравнений релаксации:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Omega_1^{(2,2)}} \sum_{j=1,2} I_{ij}, \quad i=1,2. \quad (10)$$

Для удобства решения уравнений адвекции применим метод расщепления по пространственным направлениям [Самарский, Вабишевич, 2001], который позволяет свести решение многомерного уравнения переноса к последовательному решению одномерных уравнений переноса вдоль осей координат:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p_x}{m} \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p_y}{m} \frac{\partial f}{\partial y} = 0. \quad (11)$$

Метод разбиения по пространственным направлениям упрощает постановку граничных условий и численное решение уравнений переноса в целом.

Таким образом, мы свели решение системного уравнения (8) к последовательному решению (11) и (10) на каждой итерации по времени.

Решение уравнений релаксации с использованием консервативного проекционного метода

Ключевую проблему для проведения численного моделирования представляет решение уравнений релаксации (10). В данной работе для этой цели используется консервативный проекционный метод [Черемисин, 1997, 2000]. Этот метод консервативен по энергии, импульсу и массе и обеспечивает точное равенство интеграла столкновений от максвелловской функции

распределения нулю, что существенно повышает его эффективность для течений при малых числах Кнудсена, где основной частью решения является максвелловская функция распределения. Консервативный проекционный метод не подвержен влиянию статистических шумов, что позволяет моделировать течение не только в стационарном режиме, но и во время его установления. Последнее имеет принципиальное значение в нашей работе, так как исследуется нестационарный процесс установления течения.

Поскольку консервативный проекционный метод является краеугольным камнем данной работы, кратко поясним его суть. Значение интеграла столкновений в какой-то точке \mathbf{p}_γ можно записать с помощью дельта-функции:

$$I_{ij}(\mathbf{p}_\gamma) = \int_{\mathbb{R}^3} I(\mathbf{p}_i) \delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_\gamma) d^3 p_i = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{b_{\max}/\sigma_0} b db \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_j \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_i (f_i(\mathbf{p}'_i) f_j(\mathbf{p}'_j) - f_i(\mathbf{p}_i) f_j(\mathbf{p}_j)) g \delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_\gamma). \quad (12)$$

Для i -го компонента газовой смеси построим равномерную сетку в импульсном пространстве, заключенную в сферу Ω_i с радиусом достаточно большим, чтобы значения функций распределения вне этой сферы можно было считать пренебрежимо малыми. Пусть V_0 , N_0 — объем сферы и количество узлов импульса $S_i = \{\mathbf{p}_\gamma\}$ в ней соответственно.

В качестве начальных импульсов \mathbf{p}_i , \mathbf{p}_j , берутся всевозможные пары узлов сетки \mathbf{p}_{α_ν} , \mathbf{p}_{β_ν} соответственно. Поскольку импульсы после столкновения не попадают в узлы сетки, они разлагаются с одинаковым весовым коэффициентом r_ν по двум узлам сетки, выбранным из восьми ближайших к нему узлов:

$$\mathbf{p}'_i = (1 - r_\nu) \mathbf{p}_{\lambda_\nu} + r_\nu \mathbf{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}, \quad \mathbf{p}'_j = (1 - r_\nu) \mathbf{p}_{\mu_\nu} + r_\nu \mathbf{p}_{\mu_\nu - s_\nu}. \quad (13)$$

Здесь s_ν — трехмерный вектор смещения к соседнему узлу сетки, компоненты которого могут принимать значения, равные $0, \pm 1$. Коэффициент r_ν выбирается так, чтобы выполнялось условие сохранения энергии

$$\frac{\mathbf{p}'_i{}^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}'_j{}^2}{2m_j} = (1 - r_\nu) \left(\frac{\mathbf{p}_{\lambda_\nu}^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}_{\mu_\nu}^2}{2m_j} \right) + r_\nu \left(\frac{\mathbf{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}_{\mu_\nu - s_\nu}^2}{2m_j} \right). \quad (14)$$

Для вычисления (12) перейдем от интегрирования по b к интегрированию по $\sigma = b^2/2$ и применим равномерную 8-мерную кубатурную сетку Коробова [Коробов, 1989] из N_ν узлов \mathbf{p}_{α_ν} , \mathbf{p}_{β_ν} , φ , σ в области $\Omega_i \times \Omega_j \times [0, 2\pi] \times [0, b_{\max}^2/2\sigma_0^2)$, которая имеет лучшую скорость сходимости по сравнению с методом Монте-Карло. В итоге получаем следующую формулу для интеграла столкновений, в которой используются только узлы сетки:

$$I_{ij}(\mathbf{p}_\gamma) = B \sum_{\nu=1}^{N_\nu} \left[-(\delta_{\gamma,i} + \delta_{\gamma,j}) + (1 - r_\nu)(\delta_{\gamma,\lambda_\nu} + \delta_{\gamma,\mu_\nu}) + r_\nu(\delta_{\gamma,\lambda_\nu + s_\nu} + \delta_{\gamma,\mu_\nu - s_\nu}) \right] \Delta_\nu, \quad (15)$$

где $\delta_{\alpha,\beta}$ — символ Кронекера, $B = \frac{\pi b_{\max}^2 N_0 V_0}{4 N_\nu \sigma_0^2}$ и

$$\Delta_\nu = \left(f_i(\mathbf{p}_{\lambda_\nu}) f_j(\mathbf{p}_{\mu_\nu}) \right)^{1-r_\nu} \left(f_i(\mathbf{p}_{\lambda_\nu + s_\nu}) f_j(\mathbf{p}_{\mu_\nu - s_\nu}) \right)^{r_\nu} \cdot \left| \mathbf{p}_{\alpha_\nu} / m_i - \mathbf{p}_{\beta_\nu} / m_j \right|.$$

Таким образом, интегралы столкновений в правой части уравнений релаксации (10) могут быть найдены с использованием (13), (14), (15). Подробное описание консервативного проекционного метода для смеси газов приведено в [Dodulad et al., 2016; Черемисин, 2015].

Разработка программно-моделирующей среды

Для выполнения численного моделирования была разработана программно-моделирующая среда, которая позволяет моделировать течение различных бинарных газовых смесей через структуры заданной геометрии путем прямого решения системы кинетических уравнений Больцмана.

Размеры и геометрия счетной области, начальная температура и молекулярные плотности компонентов газовой смеси в сосуде, массы их молекул, а также константы σ_i , ε_i , $\Omega_1^{(2,2)}$, $i = 1, 2$, задаются как входные параметры. В соответствии с введенными параметрами задаются геометрия сеток в координатном и импульсном пространстве и начальные функции распределения. В импульсном пространстве используется однородная сетка. Для моделирования берутся импульсы, лежащие внутри сферы с заданным достаточно большим радиусом. Функции распределения компонентов смеси по импульсам, лежащим вне сферы, полагаются равными нулю. В координатном пространстве для повышения точности численного моделирования используется неравномерный шаг сетки. Шаг пространственной сетки постоянен и минимален вблизи щели и увеличивается с удалением от нее (см. иллюстрацию изменения шага на рис. 1).

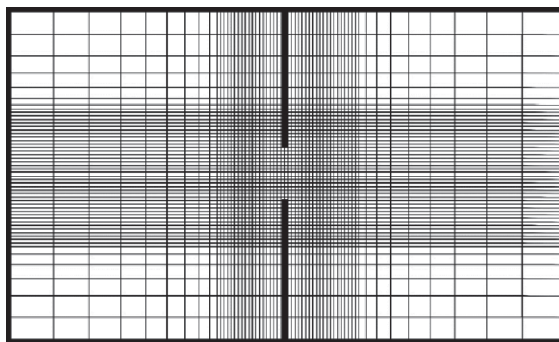


Рис. 1. Иллюстрация изменения шага пространственной сетки

На каждом итерационном шаге по времени вначале решается система уравнений переноса (11), затем система уравнений пространственно-однородной релаксации (10). Вычисленные функции распределения можно использовать на заданном итерационном шаге для расчета требуемых характеристик течения и их последующей визуализации.

Численное решение (11) выполняется на прямоугольной сетке с использованием явной дивергентной разностной схемы первого порядка точности на дискретных значениях импульсов. Граничные условия устанавливаются в соответствии с геометрией задачи. Решение уравнений (11) выполняется параллельно с использованием технологии распараллеливания кода MPI [Quinn, 2004].

Модуль для решения задачи релаксации состоит из двух компонентов. Первый предназначен для табулирования зависимости угла рассеяния сталкивающихся молекул от их относительной скорости и прицельного параметра. Угол рассеяния вычисляется согласно [Попов, Черемисин, 1999]:

$$\theta(g, b) = \pi - 2 \int_0^{y_0} \left(1 - y^2 - \frac{U^*(y)}{mg^2} \right)^{\frac{1}{2}} dy, \quad y = \frac{b}{r}, \quad U^*(y) = U \left(\frac{b}{r} \right), \quad (16)$$

где $U(r)$ — центрально-симметричный потенциал взаимодействия молекул, y_0 — наименьший действительный корень трехчлена под интегралом. В данной работе в качестве потенциала взаимодействия молекул используется потенциал Леннарда–Джонса (5).

Второй компонент разработанного модуля решения задачи релаксации предназначен именно для решения пространственно-однородной релаксационной задачи (10). Он использует подготовленную таблицу угла рассеяния для нахождения импульсов молекул после столкновения \mathbf{p}'_i и \mathbf{p}'_j по их начальным импульсам \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j . Затем (13), (14), (15) используются для вычисления интегралов столкновений в правой части релаксационных уравнений (10). Наконец, решаются уравнения (10). Решение уравнений (10) выполняется параллельно с использованием технологий MPI и OpenMP [Quinn, 2004].

Использование технологий распараллеливания кода позволило получить ускорение вычислений в 50–100 раз, что дало возможность существенно повысить точность моделирования. При этом время на вычисление интегралов столкновений составило менее 10 % от времени решения задачи. Таким образом, замена интеграла столкновений Больцмана релаксационной моделью могла бы дать несущественное ускорение вычислений.

Постановка задачи

Газовая смесь находится в большом сосуде, окруженном вакуумом. Смесь состоит из газов аргона и неона в равных пропорциях, $n_1 = n_2$, $n_0 = n_1 + n_2$. Молекулярные массы компонентов газовой смеси равны $m_1 = 6.64 \cdot 10^{-26}$ кг, $m_2 = 3.35 \cdot 10^{-26}$ кг. Газ находится в термодинамическом равновесии с температурой $T_0 = 273$ К и заданной молекулярной плотностью $n_0 = 10^{22}$ м⁻³. Молекулярные функции распределения обоих компонентов являются максвелловскими по импульсной переменной. Для удобства расчетов область вакуума моделируется также максвелловским распределением компонентов с пренебрежимо малой плотностью.

В начальный момент времени начинается истечение газа через тонкую щель. Течение можно рассматривать как развивающееся в плоскости, перпендикулярной щели. Следовательно, оно является двумерным в физическом пространстве с симметрией вдоль прямой линии, проведенной от середины щели. Длина щели значения не имеет. Схема постановки задачи для численного моделирования представлена на рис. 2.

В левой части счетной области (LRR_1L_1) находится сосуд с газовой смесью (LPP_1L_1), справа — сосуд с вакуумом (PRR_1P_1). Сосуды разделены непроницаемой тонкой стенкой PP_1 , в которой есть небольшая щель DD_1 . Задача двумерная. Благодаря симметрии (MM' — ось симметрии) счет ведется только в верхней полуплоскости $MLRM'$. Зеркальные условия устанавливаются на оси симметрии MM' . На стенках PD , LP , LM ставятся диффузные граничные условия, а на PR и RM' — условие отсутствия втекания газа в область.

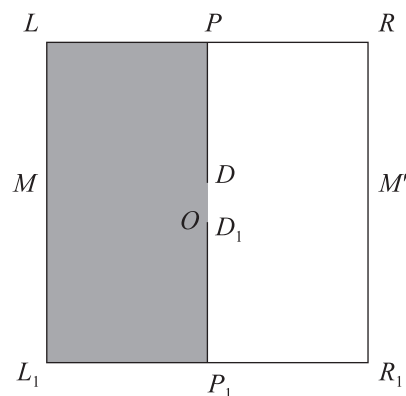


Рис. 2. Постановка задачи

Перейдем к безразмерным переменным. Теперь температура, масса, молекулярная плотность, скорость, время, расстояние, импульс безразмерны и измеряются в терминах T_0 , m_0 , n_0 , v_0 , τ , λ , $m_0 v_0$ соответственно. Начальные температуры и молекулярные плотности компонентов газовой смеси равны $T_1 = T_2 = 1$ и $n_1 = n_2 = 0.5$.

Реальные длины свободного пробега молекул компонентов смеси (с учетом столкновений с молекулами того же компонента и молекулами другого) определены в [Chapman, Cowling, 1952]:

$$\lambda_{1 \text{ mix}} = \frac{1}{\pi \left(n_1 d_1^2 \sqrt{2} + n_2 d_{12}^2 \sqrt{1 + \frac{m_1}{m_2}} \right)}, \quad \lambda_{2 \text{ mix}} = \frac{1}{\pi \left(n_2 d_2^2 \sqrt{2} + n_1 d_{12}^2 \sqrt{1 + \frac{m_2}{m_1}} \right)}, \quad (17)$$

где d_1 , d_2 — диаметры молекул компонентов газовой смеси в модели твердых сфер, $d_{12} = \frac{d_1 + d_2}{2}$. В качестве диаметров молекул мы используем характерные диаметры из потенциала

взаимодействия молекул Леннарда–Джонса $d_1 = \sigma_1 \sqrt{\Omega_1^{(2,2)}}$, $d_2 = \sigma_2 \sqrt{\Omega_2^{(2,2)}}$, $d_{12} = \sigma_{12} \sqrt{\Omega_{12}^{(2,2)}}$.

Будем характеризовать режим течения числом Кнудсена, которое определим как

$$Kn = \frac{\lambda_{1 \text{ mix}}}{d} = \frac{1.08 \cdot \lambda}{d}, \quad (18)$$

где λ определяется формулой (7) и $d = DD_1$ — ширина щели.

Параметры численного моделирования

Было выполнено численное моделирование истечения газовой смеси «аргон–неон» для чисел Кнудсена, равных $1.27 \cdot 10^{-1}$, $2.57 \cdot 10^{-1}$, $5.99 \cdot 10^{-1}$, 1.63, 16.6. Шаг сетки в импульсном пространстве был одинаковым во всех экспериментах и составлял 0.2. Радиус сферы в импульсном пространстве был равен 5.7. Шаг пространственной сетки в области щели варьировался в зависимости от геометрии задачи. Коэффициент растяжения шага пространственной сетки составлял 1.15. Максимальный шаг пространственной сетки составлял около 120. Шаг по времени определялся согласно условию Куранта–Фридрихса–Леви. Размеры расчетной области были выбраны достаточно большими, чтобы их можно было считать бесконечными в текущей задаче. Мощность интегральной сетки Коробова составляла приблизительно $N_V = 1.5 \cdot 10^6$.

Полученные результаты

На рис. 3 представлены графики зависимости линейного расхода компонентов газовой смеси от времени в процессе установления течения для различных значений числа Кнудсена: в переходном режиме (рис. 3, *b, c*), вблизи гидродинамического (рис. 3, *a*) и свободномолекулярного (рис. 3, *d*). Расход измеряется в безразмерных единицах $J_0 = n_0 \cdot v_0 \cdot \lambda$, время дано в τ .

Был обнаружен эффект, заключающийся в образовании нестационарных областей сильного разделения компонентов газовой смеси в начальный момент истечения, отношение концентраций компонентов внутри которых достигает 10 и выше. Указанные области формируются на щели в начальный момент времени и затем удаляются от нее вдоль оси симметрии со скоростью около 0.2. Со временем размер областей увеличивается, а отношение концентраций в них становится меньше. Обнаруженный эффект проявляется при всех значениях числа Кнудсена из

исследованного диапазона. На рис. 4 представлено отношение концентраций компонентов газовой смеси в области вакуума в различные моменты времени для числа Кнудсена $Kn = 1.27 \cdot 10^{-1}$. Координаты и время приведены в безразмерных переменных. На рис. 5 представлено то же отношение для числа Кнудсена $Kn = 16.6$. Обнаруженный эффект может иметь приложения в задаче разделения газовых смесей, которая имеет большое прикладное значение [Sabouri, Darbandi, 2019].

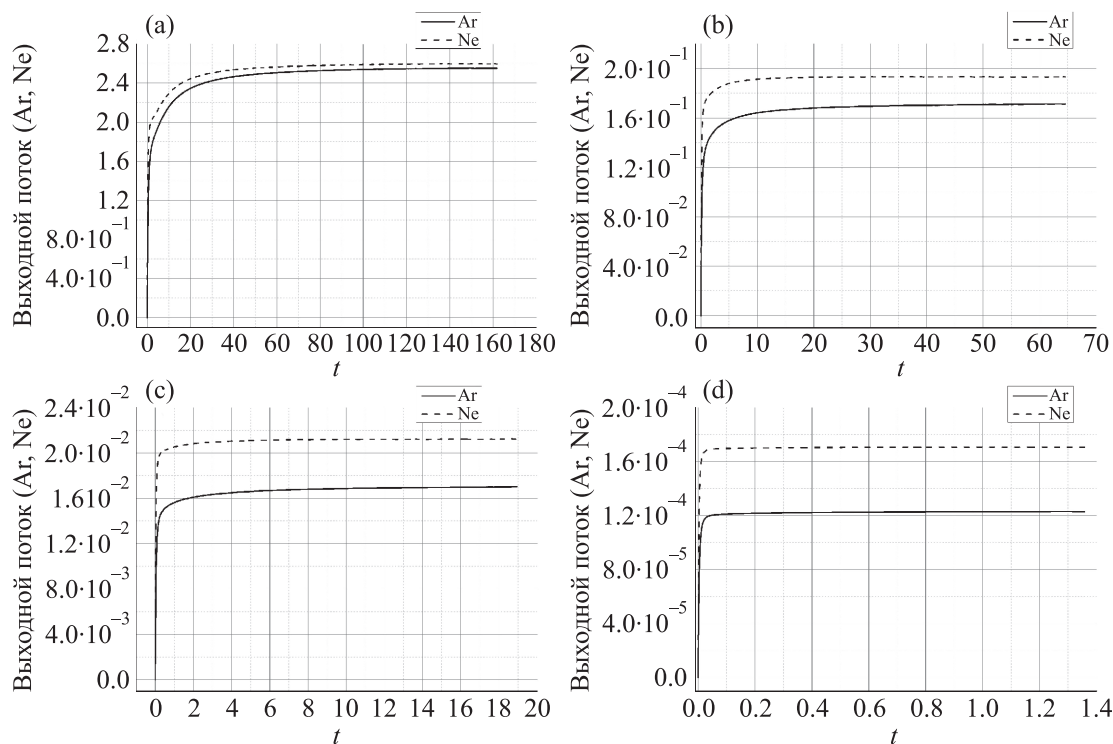


Рис. 3. Зависимость расхода компонентов газовой смеси от времени: а) $Kn = 1.27 \cdot 10^{-1}$; б) $Kn = 5.99 \cdot 10^{-1}$; в) $Kn = 1.63$; г) $Kn = 16.6$

Заключение

В работе рассматривается процесс формирования течения при двумерном истечении двухкомпонентной газовой смеси через тонкую щель в вакуум. Предложен подход к моделированию течений разреженных газовых смесей в переходном режиме на основе прямого решения кинетического уравнения Больцмана, в котором для вычисления интегралов столкновения используется консервативный проекционный метод. Детально описана методика вычислений применительно к течению бинарной газовой смеси. Разработана программно-моделирующая среда, позволяющая проводить исследование течений газовых смесей в переходном режиме на системах кластерной архитектуры. За счет использования технологий распараллеливания кода получено ускорение счета в 50–100 раз. Проведено численное моделирование нестационарного двумерного истечения бинарной аргон-неоновой газовой смеси из сосуда в вакуум для различных значений числа Кнудсена. Получены графики зависимости выходного потока компонентов газовой смеси от времени в процессе установления течения. Представленные результаты имеют прикладное и теоретическое значение, а также могут служить в качестве тестового расчета, поскольку они получены с использованием точного уравнения Больцмана. Обнаружены нестационарные области сильного разделения компонентов газовой смеси, в которых отношение концентраций достигает 10 и более. Обнаруженный эффект может иметь приложения в задаче разделения газовых смесей.

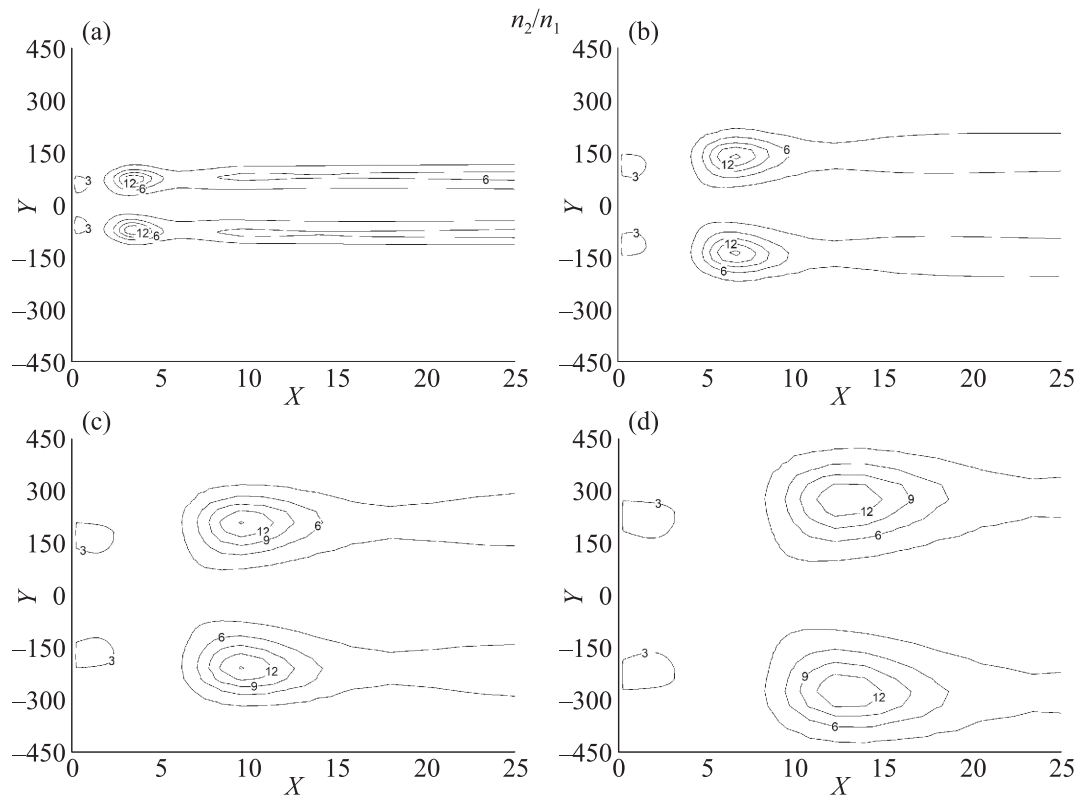


Рис. 4. Отношение концентраций компонентов газовой смеси, $\text{Kn} = 1.27 \cdot 10^{-1}$ при: а) $t = 18$; б) $t = 36$; в) $t = 54$; д) $t = 72$

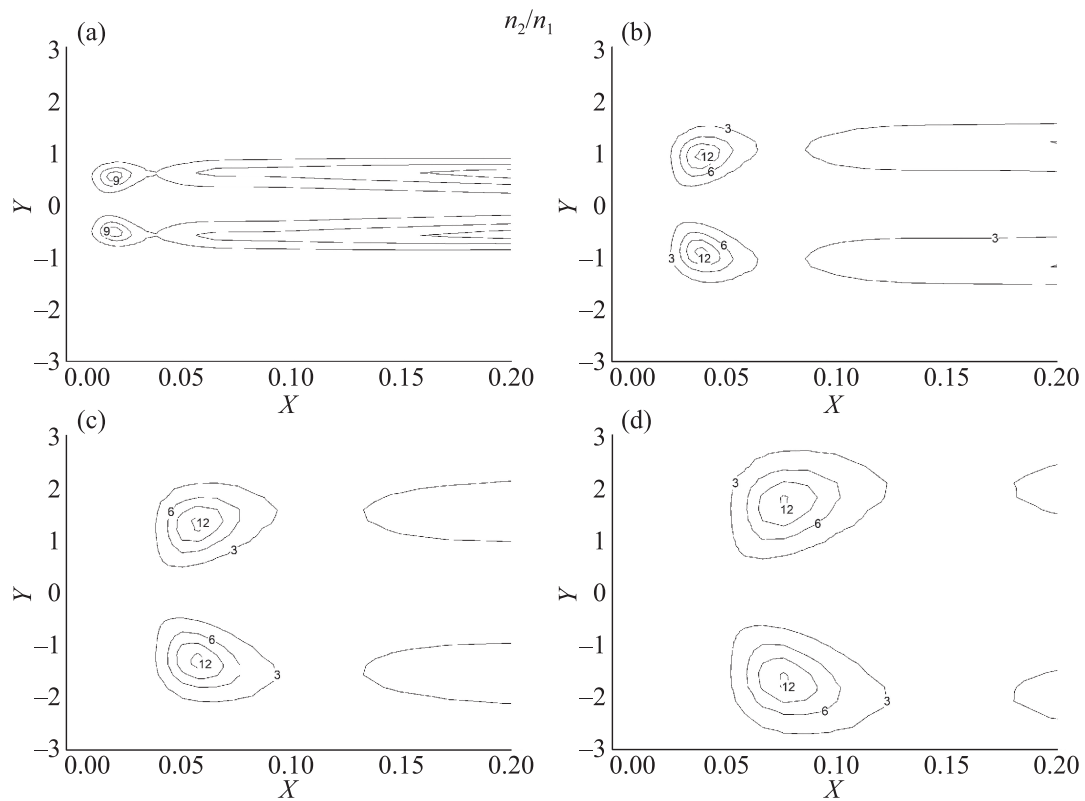


Рис. 5. Отношение концентраций компонентов газовой смеси, $\text{Kn} = 16.6$ при: а) $t = 0.124$; б) $t = 0.248$; в) $t = 0.372$; д) $t = 0.496$

Список литературы (References)

- Коробов Н. М.* Тригонометрические суммы и их приложения. — М.: Наука, 1989.
Korobov N. M. Trigonometricheskie summy i ikh prilozheniya [Trigonometric sums and their applications]. — Moscow: Nauka, 1989 (in Russian).
- Попов С. П., Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод решения уравнения Больцмана для центрально-симметричных потенциалов взаимодействия // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1999. — Т. 39, № 1 — С. 163–176.
Popov S. P., Cheremisin F. G. A conservative method for solving the Boltzmann equation with centrally symmetric interaction potentials // Comput. Math. Math. Phys. — 1999. — Vol. 39, Iss. 1. — P. 156–169. (Original Russian paper: *Popov S. P., Cheremisin F. G.* Konservativnyi metod resheniya uravneniya Bol'tsmana dlya tsentral'no-simmetrichnykh potentsialov vzaimodeistviya // Zh. vychisl. matem. i matem. fiz. — 1999. — Vol. 39, No. 1. — P. 163–176.)
- Самарский А. А., Вабишев П. Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики. — М.: Наука, 2001.
Samarskii A. A., Vabishchevich P. N. Additivnyye skhemy dlya zadach matematicheskoi fiziki [Additive schemes for problems of mathematical physics]. — Moscow: Nauka, 2001 (in Russian).
- Черемисин Ф. Г.* Введение в консервативный проекционный метод вычисления интеграла столкновений и метод решения уравнения Больцмана. — М.: МФТИ, 2015.
Tcheremissine F. G. Vvedenie v konservativnyi proektsionnyi metod vychisleniya integrala stolknovenii i metod resheniya uravneniya Bol'tsmana. [Introduction to the conservative projection method for calculating the collision integral and the method for solving the Boltzmann equation]. — Moscow: MFTI, 2015 (in Russian).
- Черемисин Ф. Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады Академии наук. Сер. Физика. — 1997. — Т. 21 — С. 197–203.
Tcheremissine F. G. Conservative method for calculating the Boltzmann collision integral // Doklady Physics. — 1997. — Vol. 42 — P. 607–610. (Original Russian paper: *Cheremisin F. G.* Konservativnyi metod vychisleniya integrala stolknovenii Bol'tsmana // Doklady Akademii nauk. Ser. Fizika. — 1997. — Vol. 21 — P. 197–203.)
- Черемисин Ф. Г.* Решение уравнения Больцмана при переходе к гидродинамическому режиму течения // Доклады Академии наук. Сер. Физика. — 2000. — Т. 373, № 4. — С. 483–486.
Tcheremissine F. G. Solution of the Boltzmann equation in transition to the fluid dynamic regime // Doklady Physics. — 2000. — Vol. 373, Iss. 4. — P. 483–486. (Original Russian paper: *Cheremisin F. G.* Reshenie uravneniya Bol'tsmana pri perekhode k gidrodinamicheskomu rezhimu techeniya // Doklady Akademii nauk. Ser. Fizika. — 2000. — Vol. 373, No. 4. — P. 483–486.)
- Alder G. M.* The numerical solution of choked and supercritical ideal gas flow through orifices and convergent conical nozzles // J. Mech. Engng. Sci. — 1979. — Vol. 21. — P. 197–203.
- Aristov V. V., Cheremisin F. G.* The conservative splitting method for solving Boltzmann's equation // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1980. — Vol. 20 — P. 208–225.
- Bird G. A.* Molecular Gas Dynamics. — Clarendon Press, 1976.
- Chapman S., Cowling T. G.* The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. — Cambridge University Press, 1952.
- Danilatos G. D.* Direct simulation Monte Carlo study of orifice flow // Rarefied Gas Dynamics — 2001. — P. 924–932.
- Dodulad O. I., Kloss Y. Y., Potapov A. P., Tcheremissine F. G., Shuvalov P. V.* Simulation of rarefied gas flows on the basis of the Boltzmann kinetic equation solved by applying a conservative projection method // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2016. — Vol. 56. — P. 996–1011.
- Ferziger J. H., Kaper H. G.* Mathematical Theory of transport processes in gases. — North-Holland, 1972.
- Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B.* Molecular Theory of Gases and Liquids. — John Wiley & Sons, Inc., 1954.
- Jamison A. J., Ketsdever A. D., Muntz E. P.* Gas dynamic calibration of a nano-Newton thrust stand // Rev. Sci. Instrum. — 2002. — Vol. 73. — P. 3629–3637.

- Jitschin W., Ronzheimer M., Khodabakhshi S.* Gas flow measurement by means of orifices and venturi tubes // *Vacuum*. — 1999. — Vol. 53. — P. 181–185.
- Kogan N. M.* Rarefied Gas Dynamics. — Plenum, 1969.
- Narasimha R.* Orifice flow of high Knudsen numbers // *J. Fluid Mech.* — 1961. — Vol. 10. — P. 371–384.
- Quinn M. J.* Parallel programming in C with MPI and OpenMP. — McGraw-Hill Science, Engineering & Mathematics, 2004.
- Sabouri M., Darbandi M.* Numerical study of species separation in rarefied gas mixture flow through micronozzles using DSMC // *Physics of Fluids*. — 2019. — Vol. 31. — P. 042004.
- Sharipov F.* Ab initio simulation of gaseous mixture flow through an orifice // *Vacuum*. — 2017. — Vol. 143. — P. 106–118.
- Sharipov F.* Benchmark problems in rarefied gas dynamics // *Vacuum*. — 2012. — Vol. 86. — P. 1697–1700.
- Sharipov F.* Gaseous mixtures in vacuum systems and microfluidics // *J. Vac. Sci. Technol. A*. — 2013. — Vol. 31.
- Sharipov F., Seleznev V.* Data on internal rarefied gas flows // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. — 1998. — Vol. 27. — P. 657–706.
- Szwemin P., Szymanski K., Jousten K.* Monte Carlo study of a new PTB primary standard for very low pressure // *Metrologia*. — 1999. — Vol. 36. — P. 562–564.