

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 533.6.011.8

ГИБРИДНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА СТРУИ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА
ПРИ ИСТЕЧЕНИИ ЧЕРЕЗ ОЧЕНЬ ДЛИННЫЙ КАНАЛ В ВАКУУМ

© 2020 г. В. А. Титарев^{1,*}, Е. М. Шахов^{1,**}

¹ 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ ФИЦ ИУРАН, Россия

*e-mail: titarev@ccas.ru

**e-mail: shakhov@ccas.ru

Поступила в редакцию 16.04.2020 г.
Переработанный вариант 20.05.2020 г.
Принята к публикации 07.07.2020 г.

На основе кинетической модели исследуется стационарное истечение одноатомного газа из резервуара высокого давления (число Кнудсена $Kn \ll 1$) через длинный канал между параллельными пластинами в вакуумную камеру при условии постоянства температуры на ограничивающих поверхностях. На основании асимптотических оценок при больших относительных длинах каналов область течения разбивается на три подобласти: 1) окрестность входа в канал; 2) основной участок течения в канале, занимающий почти всю длину канала; 3) окрестность выхода из канала. В подобласти (1) течение не рассматривается в силу малой скорости потока. На основном участке (2) течение медленное и происходит под действием малого градиента давления (область диффузии). В подобласти (3) поток ускоряется, газ расширяется в канале и вакуумной камере. На участке диффузии течение является сплошно-средним, поэтому используются известные результаты линейной одномерной теории течений вязкого газа в длинных каналах (течение Пуайзеля). В подобласти ускоренного течения решается полное нелинейное кинетическое уравнение (S-модель). Условие асимптотического сращивания решений в двух подобластях заменяется граничным условием сопряжения решений в некотором сечении, положение которого выбирается из условия гладкости полного решения задачи. Кинетическое уравнение решается методом установления по времени с помощью консервативной схемы со вторым порядком аппроксимации по всем переменным, реализованной в расчетной программе “Несветай”. Предлагаемый метод решения можно считать гибридным ввиду одновременного решения уравнений Навье–Стокса и кинетического уравнения. Библ. 28. Фиг. 8. Табл. 2.

Ключевые слова: разреженный газ, S-модель, вакуум, асимптотический метод, неявная схема, “Несветай”, суперкомпьютерные расчеты.

DOI: 10.31857/S0044466920110149

ВВЕДЕНИЕ

Проблема истечения газа из каналов в вакуум возникает во многих приложениях. Одним из важных примеров является вопрос о диффузии газа через микротрещины с последующим истечением газа в вакуум. Простейшей моделью микротрещины может служить микроканал между параллельными пластинами. Для теоретического исследования течений в микроканалах и истечения в вакуум необходимо привлекать кинетическую теорию газов, охватывающую все режимы течений, от сплошной среды до разреженного газа. Исследованиям течений разреженного газа в каналах и микроканалах посвящено множество работ, в том числе фундаментальная статья [1] и монография [2]. Подавляющее большинство этих работ основано на линейаризованном одномерном по физическому пространству кинетическом уравнении для длинных каналов и труб при малых перепадах (градиентах) давления и температуры. Возможность и условия локальной линейаризации задачи для длинных труб при конечных перепадах давления установлены в работе [3]. Там же предложен метод исследования течений в длинных каналах конечной длины при произвольных перепадах давления на концах трубы, но в условиях, когда концевыми эффектами можно пренебречь. Метод основан на гипотезе плоских поперечных сечений: в каждом сечении течение определяется путем решения линейного кинетического уравнения для трубы бесконечной длины при известном распределении давления вдоль трубы. После [3] метод систематически

применялся в работах Шарипова и др. (см., например, [4], [5]). Недавно появились работы, в которых предлагаются поправки к решению за счет концевых эффектов [6], [7]. Анализ поправок основан на линейном кинетическом уравнении и потому не пригоден в случае больших отношений давления, в особенности при истечении в вакуум. В работе [8] представлено сравнение имеющихся в литературе численных результатов расчета расхода массы для чисел Кнудсена $Kn \geq 10^{-2}$, полученных с использованием линейных и нелинейных кинетических моделей.

Необходимое условие линеаризации задачи состоит в том, что течение должно быть медленным, скорость потока по абсолютной величине должна быть мала по сравнению со скоростью звука. Необходимость этого условия подчеркнута в [3]. При использовании линейной теории и основанных на ней методов расчета необходимо контролировать выполнение этого условия. В работах по течениям газа в трубах и каналах большой конечной длины, в частности, в [4], [5], обычно приводятся результаты по расходу массы газа, но нигде не упоминается о том, что условие малости скорости потока действительно выполняется. В работе [3] уже в названии декларируется, что метод локальной линеаризации справедлив для длинных труб при любых значениях отношения давлений в камерах, где газ покоится. Однако из условия постоянства расхода газа через любое поперечное сечение канала при изотермическом течении плотность газа монотонно убывает по мере приближения к выходному сечению, а скорость течения возрастает и может достигать сколь угодно больших значений, если отношение давлений достаточно велико. Решение задачи в полной нелинейной постановке без упрощающих предположений для всей области, выполненное в [9] для длинных каналов, показывает, что область больших скоростей потока не ограничивается малой окрестностью выходного сечения канала (порядка ширины канала или радиуса трубы), а простирается на расстояния порядка длины канала. Такое поведение скорости (и плотности) нельзя назвать концевым эффектом. Поведение параметров течения для очень длинных каналов требует дополнительного исследования.

В связи с применением результатов работы [3] необходимо отметить еще одно обстоятельство, связанное с определением понятия “длинный” канал. В начале заметки [3] отмечено, что при малых числах Кнудсена Kn локальная линеаризация задачи возможна при условии, что в сечении трубы справедливо неравенство, которое можно переписать в упрощенном виде $Kn \cdot L \gg 1$, где L — относительная длина трубы или канала (отнесено к радиусу трубы или к ширине канала). Позднее в работах [10], [11] это же условие было получено независимо и интерпретировано как условие, при котором трубу можно считать длинной. Иными словами, при малых числах Кнудсена трубу (или канал) можно считать длинной, если выполняется условие $Kn \cdot L \gg 1$: геометрическое условие $L \gg 1$ не является достаточным. Однако ни в фундаментальных трудах [1], [2], ни в других работах, следующих за [3], выписанное выше условие даже не упоминается.

Подводя итоги сказанному выше, приходим к заключению, что описанная выше приближенная схема, основанная на приближении плоских сечений, работает для достаточно разреженных газов и при значениях отношения давлений порядка единицы. Вопрос о пределах применимости схемы при малых числах Кнудсена в камере высокого давления и при больших значениях отношения давления в камерах, а тем более при истечении в вакуум нуждается в дальнейшей проработке.

Целью данной работы является создание гибридного метода построения решения задачи об истечении разреженного газа через очень длинный канал в вакуум из резервуара высокого давления, в котором число Кнудсена мало. На основании асимптотических оценок при больших относительных длинах каналов область течения разбивается на три подобласти: 1) окрестность входа в канал; 2) основной участок течения в канале, занимающий почти всю длину канала; 3) окрестность выхода из канала. В подобласти (1) течение не рассматривается в силу малой скорости потока. На основном участке (2) течение медленное и происходит под действием малого градиента давления (область диффузии). В подобласти (3) поток ускоряется, газ расширяется в канале и вакуумной камере. На участке диффузии течение является сплошнородным, поэтому используются известные результаты линейной одномерной теории течений вязкого газа в длинных каналах (течение Пуайзеля). В подобласти ускоренного течения решается полное нелинейное кинетическое уравнение (S-модель). Условие асимптотического сращивания решений в двух подобластях заменяется граничным условием сопряжения решений в некотором сечении, положение которого выбирается из условия гладкости полного решения задачи. Кинетическое уравнение в области (3) решается методом установления по времени с помощью консервативной схемы конечных объемов со вторым порядком аппроксимации по всем переменным. Предлагаемый метод решения можно считать гибридным ввиду одновременного решения уравнений Навье—Стокса и кинетического уравнения.

1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим стационарное истечение одноатомного газа из резервуара I высокого давления и бесконечной емкости в резервуар II низкого давления также бесконечной емкости через очень длинный плоский канал между параллельными пластинами. Пусть a – ширина канала, l – его длина. Канал называем очень длинным, если относительная длина его $L = l/a > 1000$. В контейнерах I и II вдали от входного и выходного сечений канала газ покоится при давлении, числовой плотности и температуре p_I, n_I, T_I в резервуаре I и p_{II}, n_{II}, T_{II} в резервуаре II. Будем рассматривать случай, когда $T_{II} = T_I$, предполагаем, что температура поверхности канала и поверхности сосудов также постоянна и равна температуре покоящегося газа в сосудах, т.е. $T_w = T_I$.

Введем декартову систему координат (x, y) с началом в центре входного сечения канала. Канал занимает пространство $(0 < x < l, -a/2 < y < +a/2)$, левый резервуар расположен в полупространстве $x < 0$, правый – при $x > l$. При $p_I > p_{II}$ газ течет слева направо из резервуара I в резервуар II. Нас будет интересовать случай очень больших отношений давлений $p_I/p_{II} \gg 1$, включая случай истечения в вакуум, т.е. $p_{II} = 0$. Хотя в окрестности входа в канал газ ведет себя как сплошная среда, по мере приближения к выходному сечению течение все в большей степени приобретает черты разреженности и истекает в вакуум почти как в бесстолкновительном режиме. Таким образом, в рассматриваемом течении число Кнудсена покрывает весь диапазон возможных значений. В этих условиях анализ течения должен быть основан на кинетической теории газов.

Состояние разреженного газа в точке (x, y) в момент времени t определяется функцией распределения молекул по скоростям $f(t, x, y, \xi_x, \xi_y, \xi_z)$, где (ξ_x, ξ_y, ξ_z) – компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям (x, y, z) соответственно. Предполагаем, что функция распределения удовлетворяет уравнению Больцмана с оператором столкновений в форме S-модели [12]:

$$\begin{aligned} \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} &= J, \quad J = v(f^+ - f), \quad v = \frac{p}{\mu}, \\ f^+ &= f_M \left[1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr}) S_\alpha c_\alpha \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) \right], \quad S_i = \frac{1}{n} \int c_i c^2 f d\xi, \\ f_M &= \frac{n}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}, \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{2RT}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь Pr – число Прандтля (Pr = 1 соответствует модели БГК [13]), R – газовая постоянная, μ – коэффициент вязкости, p – давление. Предполагается суммирование по греческим индексам. В дальнейшем будем рассматривать взаимодействие молекул по модели твердых сфер, так что $\mu(T) = \mu_I \sqrt{T/T_I}$.

Макроскопические параметры, такие как числовая n и массовая ρ плотности, вектор средней скорости $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$, давление p , температура T и поток тепла $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ выражаются через функцию распределения в виде интегралов (m – масса молекулы):

$$\begin{aligned} n &= \int f d\xi, \quad n\mathbf{u} = \int \boldsymbol{\xi} f d\xi, \quad \frac{3}{2} mnRT + \frac{1}{2} mn u^2 = \frac{1}{2} m \int \xi^2 f d\xi, \\ \mathbf{q} &= \frac{1}{2} m \int \mathbf{v} v^2 f d\xi, \quad \rho = mn, \quad p = \rho RT. \end{aligned} \quad (2)$$

Граничные условия на верхней поверхности канала $y = +a$ и вертикальных стенках резервуаров задаются в виде локально-максвелловской функции, соответствующей граничному условию диффузного отражения:

$$f = f_w(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n_w}{(2\pi RT_I)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi_n^2}{2RT_I}\right), \quad \xi_n > 0. \quad (3)$$

Здесь $n_w(t, \mathbf{x})$ – плотность отраженных молекул (определяется условиями непротекания), ξ_n – проекция вектора скорости молекулы $\boldsymbol{\xi}$ на внешнюю единичную нормаль к поверхности.

Состояние газа можно характеризовать с помощью числа Кнудсена:

$$Kn = \frac{\lambda}{a}$$

либо, что более удобно в расчетах, параметром разреженности δ (см. [1], [2]):

$$\delta = \frac{ap}{\beta\mu} = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{Kn}, \quad \mu = \frac{5}{16} mn\sqrt{\pi}\beta\lambda,$$

где λ – средняя длина свободного пробега, $\beta = \sqrt{2RT}$ – наиболее вероятная скорость молекул. В рамках настоящей работы в контейнере высокого давления газ рассматривается как сплошная среда

$$Kn_1 \ll 1, \quad \delta_1 \gg 1,$$

в то время как в канале и резервуаре II локальное число Кнудсена может принимать произвольные значения $Kn_1 < Kn < \infty$.

2. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛИННОЙ ТРУБЫ

Проведем простой асимптотический анализ задачи при $L = l/a \gg 1$. Принято считать, что для длинных каналов возможна линеаризация задачи, если локальный относительный градиент давления (и температуры) достаточно мал, т.е.

$$\left| \frac{a dp}{p dx} \right| \ll 1. \tag{4}$$

Это условие неоспоримо, но в общем случае оно не входит в условия задачи. Только в случае малой разности давлений $p_1 - p_{II}$ можно гарантировать, что

$$\frac{a dp}{p dx} = O\left(\frac{p_1 - p_{II}}{p_1 L}\right) \tag{5}$$

и, следовательно, обеспечить выполнение условия (4). Оценку (5) обычно используют и в случае конечного перепада давлений, ссылаясь на то, что для длинных каналов всегда имеет место неравенство (см. [1], [2])

$$\frac{p_1 - p_{II}}{p_1 L} \ll 1. \tag{6}$$

Однако из условия (6) не следует, что оценка (5) справедлива почти для всех сечений канала, за исключением малых окрестностей его концов. В наших условиях давление – функция монотонно убывающая. Положим на время, что давление на концах канала совпадает со значениями p_1, p_{II} в резервуарах. Можно утверждать, что существует интервал $(x_1 < x < x_2)$, в котором оценка (5) имеет место. Интервал (x_2, L) в общем случае может иметь порядок L , тем более при больших значениях отношения давлений p_{II}/p_1 , но всегда значительно больше ширины канала a .

Помимо критического анализа оценки (5), обратим внимание на следующее обстоятельство. В работах по течениям в длинных каналах предполагается, что давление, плотность и температура в канале не зависят от поперечной координаты. В обоснование этого допущения иногда приводятся соображения качественного характера. Математическое обоснование на уровне простых асимптотических оценок для линеаризованной задачи было дано в работе [14]. Ниже тот же прием используется для обоснования локальной линеаризации кинетического уравнения для длинных каналов при произвольных значениях отношения давлений в резервуарах. Специально рассмотрен случай малых чисел Кнудсена.

Обратимся к кинетическому уравнению (1), следуя работе [14]. Можно предположить, что на интервале (x_1, x_2) первое слагаемое в левой части имеет порядок $1/L$ по сравнению со вторым (в предположении, что компоненты молекулярной скорости ξ_x, ξ_y имеют один порядок) и может быть опущено в нулевом приближении. В результате уравнение принимает вид

$$\xi_y \frac{df}{dy} = v(f^+ - f). \tag{7}$$

При любом конечном значении частоты столкновений ν это уравнение имеет простейшее решение, удовлетворяющее граничному условию и соответствующее локальному термодинамическому равновесию со стенкой

$$f = f_w = \frac{n_w(x)}{(2\pi RT_1)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT_1}\right), \quad u_i = 0, \quad n = n_w(x), \quad T = T_w = T_1. \quad (8)$$

Здесь аргумент x играет роль параметра. Движение в канале возникает вследствие зависимости $n_w(x)$, которая определяется по первому приближению к решению задачи и имеет порядок $1/L$. Уравнение первого приближения получается подстановкой (8) в левую и правую части уравнения (1) и путем линеаризации правой части этого уравнения. В результате получаем линейное, одномерное по физическому пространству уравнение, подобное (7), но неоднородное, содержащее в правой части логарифмическую производную от плотности. В дальнейшем это уравнение нам не понадобится, и мы его не выписываем. Отметим только, что в качестве силы, вынуждающей движение, первоначально выступает производная от плотности, а не от давления, хотя в данном изотермическом случае обе производные равносильны.

Сказанное выше справедливо для любых, но конечных δ . Предел $\delta = \infty$ рассмотрим отдельно и более подробно.

3. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ПРИ $L \rightarrow \infty$, $\delta \rightarrow \infty$

Течение в сплошнородной части считаем изотермическим, так что $T(x) \equiv T_w = T_1$, $\mu(T) \equiv \mu_1$. Оценки членов уравнения (1) по параметру $1/L$ остаются справедливыми, однако при $\delta \rightarrow \infty$ вместо (7) имеет место асимптотическое решение

$$f = f_M. \quad (9)$$

Локально-максвелловское приближение (9) является более общим по сравнению с (8), поскольку в нем присутствуют все пять макропараметров потока (скорость течения, плотность и температура), причем зависимость их от координат произвольна. Применяя обычные оценки при $Kn \rightarrow 0$ в рамках метода Чепмена–Энскога или (что проще) в рамках системы уравнений моментов, получаем обычные уравнения Навье–Стокса. Далее производим оценки членов в этих уравнениях, пользуясь приближением длинного канала, и приходим к выводу, что

$$u_y = 0, \quad dp/dy = dT/dy = dn/dy = 0$$

и что основное уравнение в системе уравнений Навье–Стокса имеет тот же вид, что и для течения Пуазейля в случае несжимаемой жидкости

$$dp/dx = \mu d^2 u/dy^2.$$

Профиль скорости имеет параболический вид

$$u(x, y) = \frac{1}{2\mu_1} \frac{dp}{dx} \left(y^2 - \frac{1}{4} a^2 \right).$$

Расход газа получается интегрированием по координате y и выражается формулой

$$\dot{M} = \int_{-a/2}^{+a/2} \rho(x) u(x, y) dy = -\frac{1}{12\mu_1} \frac{a^3}{\rho(x)} \frac{dp}{dx} = -A_I \rho(x) \frac{dp(x)}{dx} = \text{const}, \quad (10)$$

$$A_I = \frac{a^3}{12\mu_1 RT_1} = \text{const}.$$

Оценим расход, полагая участок диффузии равным всему каналу $x_2 - x_1 = l$, давление на его границах равным давлению в резервуарах $p_1 = p_1$, $p_2 = p_{II}$. Интегрируя (10) по x от $x_1 = x_1 = 0$ до x_{II} , получаем

$$\dot{M} = -\frac{1}{2} A_I \frac{p_2^2 - p_1^2}{x_2 - x_1} \approx \dot{M}_{NS} \equiv -\frac{1}{2} A_I \frac{p_{II}^2 - p_1^2}{l}. \quad (11)$$

Далее, интегрируя (10) от $x_1 = 0$ до произвольного $x \geq x_2$, полагая $\dot{M} \approx \dot{M}_{NS}$, $p_1 \approx p_1$ и подставляя явное выражение для константы A_1 , получаем явные выражения для макропараметров:

$$\begin{aligned} \dot{M}_{NS} &= +\frac{1}{24} \delta_l a \rho_1 \beta_1 \frac{1-\eta^2}{l/a}, \quad \delta_l = \frac{ap_1}{\mu_1 \beta_1}, \quad \eta = p_{11}/p_1, \\ \frac{\rho_{NS}(x)}{\rho_1} = \frac{p_{NS}(x)}{p_1} &= \phi(x) = \sqrt{1 + (\eta^2 - 1) \frac{x}{l}}, \quad u_{NS}(x, y) = \frac{1}{4} p_1^2 \frac{\eta^2 - 1}{p_{NS}(x) \mu_1} \frac{y^2 - \frac{1}{4} a^2}{l}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $\eta = p_{11}/p_1$ – отношение давлений газа в резервуарах. Истечение в вакуум соответствует $\eta = 0$.

4. ГИБРИДНЫЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ПОЛЯ ТЕЧЕНИЯ

Как уже было отмечено, построение решения задачи для $L \geq 10^3$ и высокой плотности газа в первом резервуаре $\delta_1 \gg 1$ путем прямого численного решения кинетического уравнения (1) во всей области течения требует большого расхода вычислительных ресурсов, см., например, [9]. При таких параметрах задачи расход газа и поле течения в большей части канала могут быть с достаточной точностью оценены с помощью приближенных подходов, например, формул (11), (12). Однако течение в кинетической области вблизи выхода из канала $(l-x)/l \ll 1$ и в резервуаре низкого давления, где локальное число Кнудсена велико и течение может становиться сверхзвуковым, с помощью приближенных подходов не определяется.

Предлагаемый здесь гибридный метод решения задачи позволяет построить картину течения в кинетической области $x_2 \leq x < +\infty$ за существенно меньшее время счета по сравнению с прямым расчетом всей задачи по кинетическому уравнению. Основная идея метода состоит в следующем. Сначала при помощи формул (12) выбирается значение параметра x_2 таким образом, чтобы локальное значение параметра разреженности (или числа Кнудсена)

$$\delta_2 = \frac{ap(x_2)}{\beta_1 \mu_1}$$

соответствовало сплошносреднему режиму течения, а максимальное значение локального числа Маха одноатомного газа

$$M_2 = \frac{|u(x_2, y)|}{\sqrt{5RT_1/3}}$$

было мало. Другими словами, течение газа в сечении $x = x_2$ должно быть *медленным течением сплошной среды*. При этом функция распределения будет близка к навье-стоксовской, соответствующей изотермическому течению.

После этого левый резервуар и часть канала $x < x_2$ заменяются граничным условием для функции распределения для влетающих молекул $\xi_x > 0$ в сечении x_2 . Так как главная часть навье-стоксовской функции распределения является локально-максвелловской функцией, то в качестве граничного условия полагаем

$$f = f_2(\mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n_{NS}(x_2)}{(2\pi RT_1)^{3/2}} \exp(-c_2^2), \quad c_2^2 = \frac{(\xi_x - u_{NS}(x_2, y))^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{\sqrt{2RT_1}}. \quad (13)$$

В оставшейся части канала $x \geq x_2$ и правом резервуаре сохраняются граничные условия диффузного отражения, описанные выше в формуле (3).

Для решения полученной задачи в области $x \geq x_2$ используется метод дискретных скоростей. Для проведения расчетов удобно использовать безразмерные переменные. В отличие от обычного способа перехода к таким переменным в качестве масштаба плотности удобно выбрать не плотность газа в первом резервуаре, а значение плотности $n_2 = n_{NS}(x_2)$ на границе $x = x_2$. Таким

образом, в качестве масштабов длины, скорости, времени, плотности, температуры, давления, потока тепла, функции распределения и вязкости примем величины

$$a, \beta_1, \frac{a}{\beta_1}, n_2, T_1, p_2, mn_2\beta_1^3, n_2\beta_1^{-3}, \mu_1 = \mu(T_1).$$

В качестве масштаба расхода массы \dot{M} принимается величина $\rho_2\beta_1a$. Ниже все безразмерные величины обозначены теми же буквами, что и размерные.

Кинетическое уравнение (1) принимает вид

$$\begin{aligned} \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} &= J, \quad J = v(f^+ - f), \quad v = \delta_2 \frac{\rho}{\mu}, \quad \delta_2 = \delta_1 \phi_2, \quad \phi_2 = \phi(x_2), \\ f^+ &= f_M \left(1 + \frac{8}{5} (1 - \text{Pr}) S_{\alpha} c_{\alpha} \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) \right), \quad f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \\ \mathbf{S} &= \frac{\mathbf{q}}{n T^{3/2}}, \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{T}}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}. \end{aligned} \tag{14}$$

Функция $\phi(x)$ была определена в (12), при этом $\rho_{NS}(x_2)/\rho_1 = p_{NS}(x_2)/p_1 = \phi(x_2) = \phi_2$.

В безразмерном виде выражения (12) для сплошнородного решения $\rho_{NS}(x)$, $u_{NS}(x, y)$, \dot{M}_{NS} принимают вид

$$\begin{aligned} \dot{M}_{NS} &= + \frac{1}{24} \frac{\delta_2}{\phi_2^2} \frac{1 - \eta^2}{L}, \quad \rho_{NS}(x) = p_{NS}(x) = \frac{\phi(x)}{\phi_2}, \\ u_{NS}(x, y) &= \frac{1}{4} \frac{\delta_2 (\eta^2 - 1)}{p_{NS}(x) \phi_2^2} \frac{y^2 - \frac{1}{4}}{L}, \quad T_{NS}(x, y) \equiv 1. \end{aligned} \tag{15}$$

Безразмерные выражения для макроскопических величин имеют обычный вид:

$$\left(n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2} n T + n u^2, \mathbf{q} \right) = \int \left(1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2} \mathbf{v} v^2 \right) f d\boldsymbol{\xi}. \tag{16}$$

Граничные условия (3) на поверхности канала и вертикальных стенках резервуара записываются в виде

$$f_w(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{n_w}{(\pi)^{3/2}} \exp(-\xi^2), \quad \xi_n > 0, \quad n_w = 2\sqrt{\pi} N_i, \quad N_i = - \int_{\xi_n < 0} \xi_n f d\boldsymbol{\xi}. \tag{17}$$

Во входном сечении расчетной области $x = x_2$ граничное условие (13) для функции распределения влетающих молекул $\xi_x > 0$ имеет вид

$$\begin{aligned} f &= f_2(\mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \exp\left(-(\xi_x - u_2(y))^2 - \xi_y^2 - \xi_z^2\right), \\ u_2(y) &= u_{NS}(x_2, y) = \frac{1}{4} \frac{\delta_2 (\eta^2 - 1)}{\phi_2^2} \frac{y^2 - \frac{1}{4}}{L}. \end{aligned} \tag{18}$$

Здесь учтено, что в безразмерных переменных $p_{NS}(x_2) \equiv 1$.

Поставленная двумерная задача допускает существенное упрощение путем введения редуцированных функций распределения, что было использовано в [15]. Так как в настоящей работе расчеты проводились с помощью параллельного трехмерного кода “Несветай”, разработанного ранее первым автором в [16]–[18] и использовавшегося для расчета течений в каналах произвольной формы сечения (см. [11], [19]–[21]), переход к редуцированным функциям не применялся. Вместо этого использовалась трехмерная пространственная сетка с учетом особенностей решаемой плоской задачи.

Стационарное решение задачи строится неявным методом установления по времени второго порядка аппроксимации по всем переменным. Начальные условия для функции распределения в области $x_2 \leq x \leq x_{II}$ имеют вид локально-максвелловской функции с параметрами, взятыми из аналитического решения (15) либо с помощью построения решения уравнений Навье–Стокса

Таблица 1. Расчетные параметры задачи в зависимости от x_2

$L - x_2$	10	25	50	100	200	400
δ_2	31.6	50	70.7	100.	141.4	200
M_2	0.216	0.125	0.097	0.069	0.048	0.033
$3N_{xy}$			11670	16800	18375	21525

вязкого газа с помощью стороннего кода, например [22], [23]. В резервуаре низкого давления в начальный момент времени функция распределения равняется максвелловской с плотностью $n = n_{11} = \eta/\phi_2$, скоростью $u = 0$ и температурой $T_{11} = 1$. Для ускорения вычислений в коде “Несветай” реализован двухуровневый алгоритм организации параллельных вычислений на современных многопроцессорных суперЭВМ с возможностью использования десятков тысяч ядер [24]. В результате может достигаться значительное ускорение относительно расчета на одном ядре.

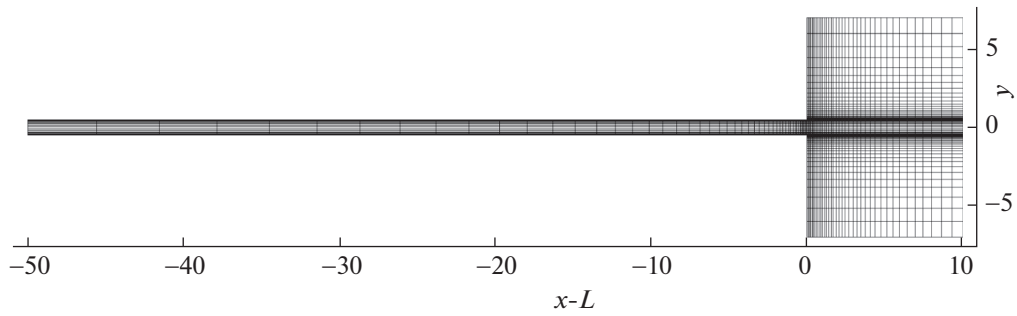
5. ПРИМЕР РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЯ В КАНАЛЕ

Далее в работе рассматривается только наиболее интересный случай истечения газа в вакуум $p_{11}/p_1 = 0$. Для иллюстрации эффективности нового метода решения были выбраны следующие значения относительной длины канала и параметра разреженности в резервуаре высокого давления: $L = 10^6$, $\delta_1 = 10^4$.

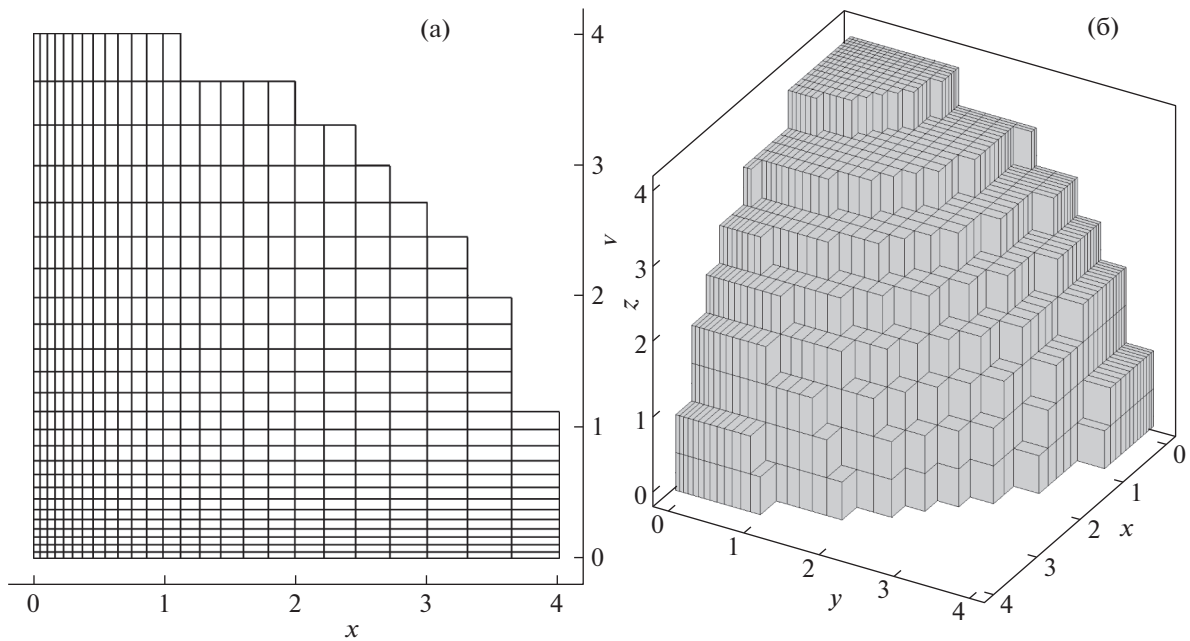
Расчеты проводились для значений длины оставшейся в расчете части канала $L - x_2 = 50, 100, 200$, что позволяет исследовать влияние положения границы x_2 на решение задачи. Остановимся коротко на параметрах расчетной сетки. Разбиение на ячейки в физическом пространстве проводилось следующим образом. Поперек канала использовалось неравномерное разбиение на 21 ячейку со сгущением к боковой поверхности; размер первой ячейки у поверхности $h_n = 0.02$. Вдоль канала расчетная сетка сгущалась к выходу $x = L$, так что у выходного сечения размер ячейки $hs = 0.05$. Вблизи сечения x_2 размер ячейки по направлению координаты x выбирался автоматически программой построения сетки. В направлении z расчетная область имела единичный размер и разбивалась на 3 ячейки.

В табл. 1 приведены зависимости от выбора положения границы x_2 значения параметра разреженности δ_2 , числа Маха на оси M_2 и общего числа расчетных ячеек в физическом пространстве $3N_{xy}$, где N_{xy} – число ячеек в плоскости $x - y$. Для $x_2 = 10, 25$ расчетная сетка не строилась. Видно, что для всех выбранных значений x_2 число Маха M является приемлемым для метода, однако значение δ_2 принимает подходящие значения только с $L - x_2 \geq 50$. При этом достаточно ограничиться $x_2 \leq 200$. На фиг. 1 приведен вид расчетной области и сетки в физическом пространстве для $L - x_2 = 50$. Хорошо видно сгущение сетки к выходному сечению канала и его стенкам. В то же время шаг сетки по координате x вблизи границы $x = x_2$ является довольно большим, так как изменения расчетных величин вдоль канала вблизи x_2 малы.

Для точности вычисления макропараметров газа во втором резервуаре существенное влияние оказывает выбор параметров расчетной сетки в скоростном пространстве. Для аккуратного нахождения расхода массы достаточно ограничиться равномерной сеткой с шагом $\Delta\xi = 0.4$, однако при вычислении макропараметров в области разреженного течения $x > L$ с большими локальными значениями числа Кнудсена проявляется так называемый эффект луча (ray effect), результатом которого является появление колебаний в функции распределения и полях макроскопических величин [25], [26]. Поэтому требуется использовать неравномерную скоростную сетку с сильным сгущением узлов. В настоящей работе такая сетка строилась в три этапа. Сначала в плоскости $\xi_x - \xi_y$ задавалась двумерная сетка из 50×50 ячеек со сгущением до $\Delta\xi = 0.05$ вблизи точки $\xi_x = \xi_y = 0$. На втором этапе трехмерная расчетная сетка по скорости получается трансляцией двумерной сетки вдоль координаты ξ_z с шагом $\Delta\xi_z = 0.4$. В окончательной сетке остаются узлы, лежащие внутри сферы (см. [27], [28]) $|\xi| \leq 3.5\sqrt{\max T} \approx 4$. Полученная сетка приведена на



Фиг. 1. Расчетная область и сетка в плоскости $x - y$ для $x_2 = L - 50$.



Фиг. 2. Детали скоростной сетки в плоскости $\xi_x - \xi_y$ (а) и в четверти пространства скоростей.

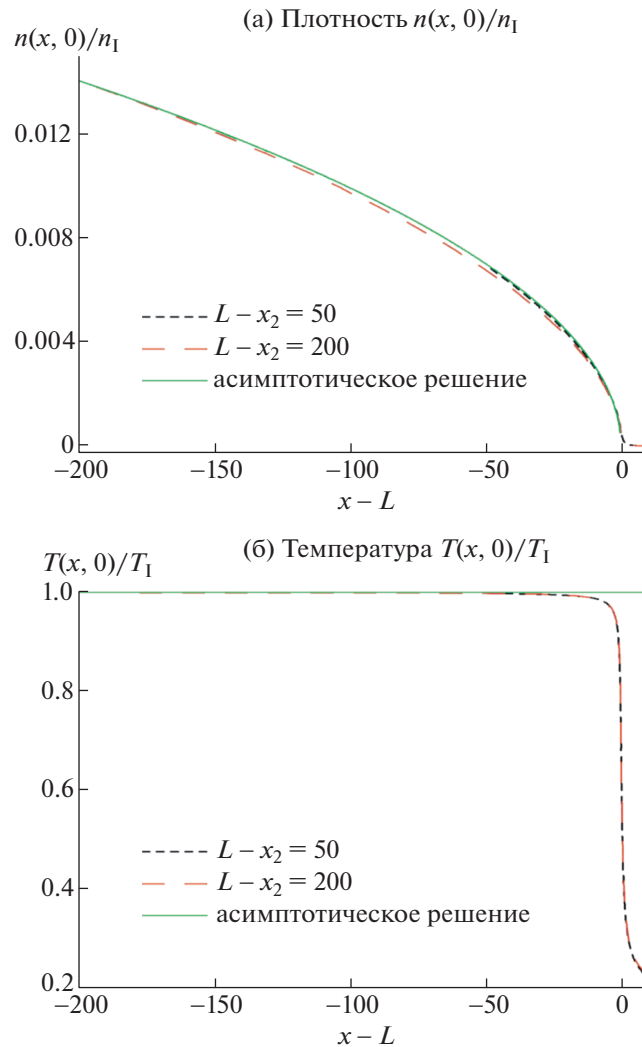
фиг. 2. Полное число ячеек в скоростной сетке равнялось 29816. Для $L - x_2 = 200$ общее число ячеек 6-мерной расчетной сетки ≈ 548 млн.

Перейдем к рассмотрению результатов. При этом при визуализации поля плотности для удобства будем использовать более привычную безразмерную величину n/n_1 , а не расчетную n/n_2 .

Одним из способов оценки правильности выбора положения границы x_2 является совпадение расхода массы, вычисленного по кинетическому решению, со сплошнoсредним значением \dot{M}_{NS} , которое используется для постановки граничного условия в сечении x_2 . Помимо этого, в расчетах контролируется условие постоянства расхода по длине канала при $x_2 \leq x \leq L$. В табл. 2 при-

Таблица 2. Результаты расчета расхода массы \dot{M} в зависимости от x_2

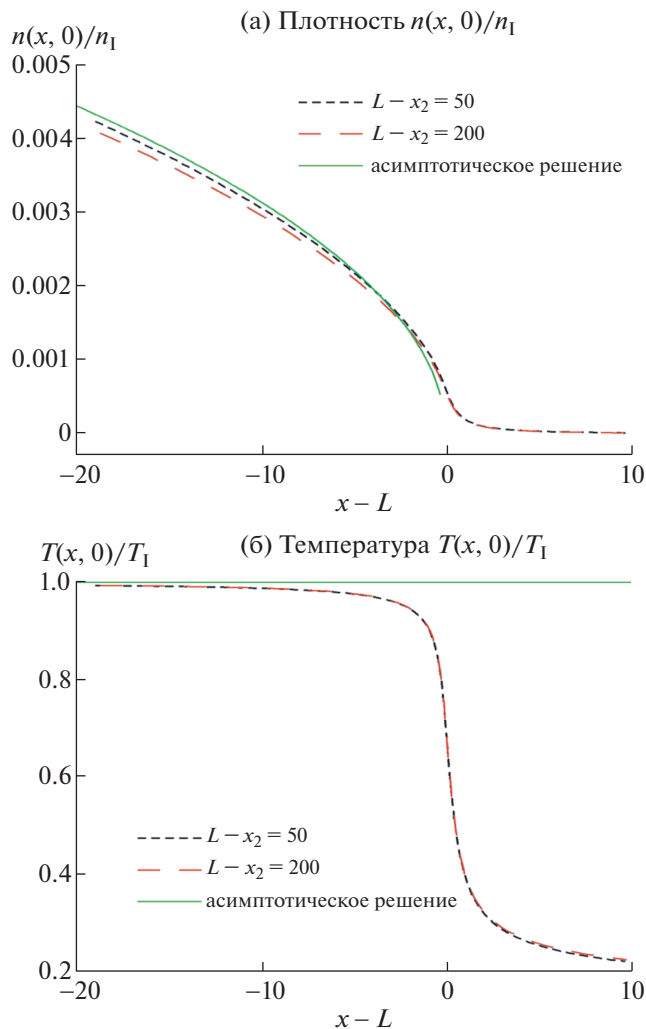
Длина секции канала $L - x_2$	50	100	200
Ошибка в $\dot{M} = \text{const}$	0.5%	0.8%	1.0%
Отклонение \dot{M} от \dot{M}_{NS}	7.0%	4.0%	2.0%



Фиг. 3. Распределение безразмерных плотности и температуры вдоль оси x в сравнении с асимптотическим решением (3).

ведены результаты расчета расхода массы и величина отклонения среднего по длине канала расхода от значения \dot{M}_{NS} в зависимости от x_2 . Для всех значений $L - x_2$ видна хорошая точность выполнения условия $\dot{M} = \text{const}$. При этом отклонение расхода от сплошноредного значения убывает практически линейно с ростом длины секции канала $L - x_2$. В целом для расчета расхода массы выбор $x_2 = 200$ обеспечивает высокую для практических приложений точность (и оптимальный по соотношению точность/затраты машинного времени результат). Тем более, что для многих инженерных приложений достаточно обеспечить 10%-ю точность расчета расхода массы [8]. Как показали тестовые расчеты на грубых пространственных сетках, дальнейший перенос границы x_2 в глубь канала существенно увеличивает требуемое для построения стационарного решения число шагов по времени, но не позволяет принципиально уменьшить отклонение \dot{M} от сплошноредной оценки \dot{M}_{NS} .

На фиг. 3 приведено распределение безразмерных плотности и температуры газа вдоль оси канала и резервуара II для $L - x_2 = 50, 200$ в сравнении с асимптотическим решением (12) во всей расчетной области. На фиг. 4, 5 представлены распределения безразмерных плотности, температуры, давления и числа Маха в окрестности выхода из канала и внутри резервуара II. Видно хорошее согласие профилей макроскопических величин, полученных для разных значений x_2 . Условие постоянства температуры в канале выполняется с высокой точностью вплоть до окрест-



Фиг. 4. Распределение безразмерных плотности и температуры вдоль оси x в сравнении с асимптотическим решением (12) вблизи выхода из канала $x - L = 0$.

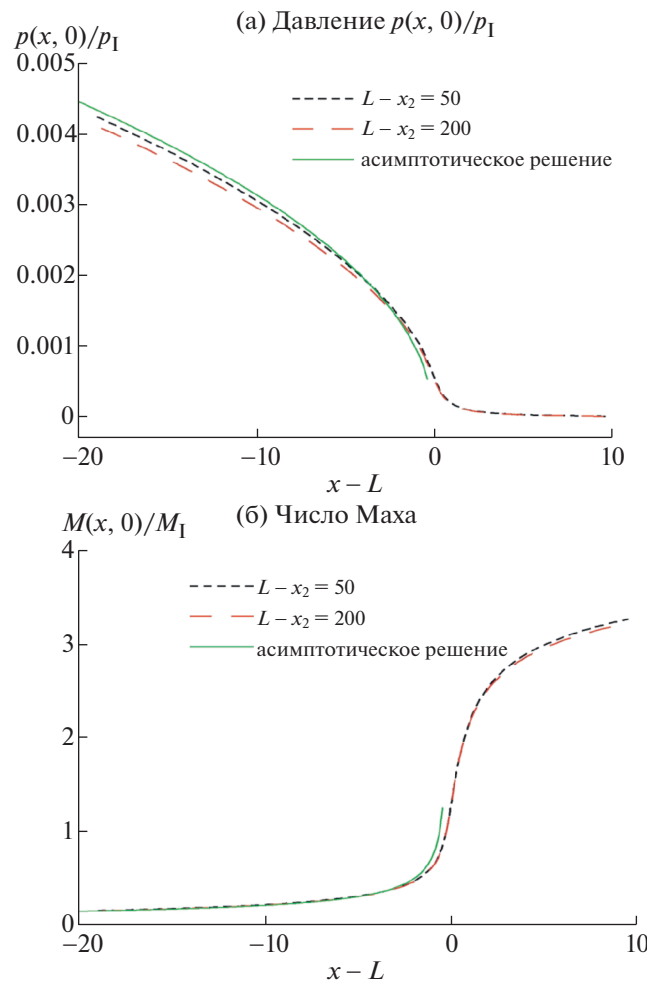
ности выходного сечения. Отклонение температуры от константы хорошо согласуется с разгоном газа до около- и сверхзвуковых скоростей вблизи выходного сечения и в резервуаре II. Согласие с асимптотическим решением также является вполне приемлемым в области сплошно-среднего течения, что подтверждает правильность работы нашего метода.

Из представленных кривых можно сделать следующий вывод: если основной целью расчетов является получение струи газа в области вакуума, требования по точности вычисления \dot{M} могут быть ослаблены. Численное решение задачи при $L - x_2 = 50$ требует примерно в 10 раз меньше времени, чем для $L - x_2 = 200$, и может быть получено за разумное время на современном десктопном компьютере с 16 физическими ядрами.

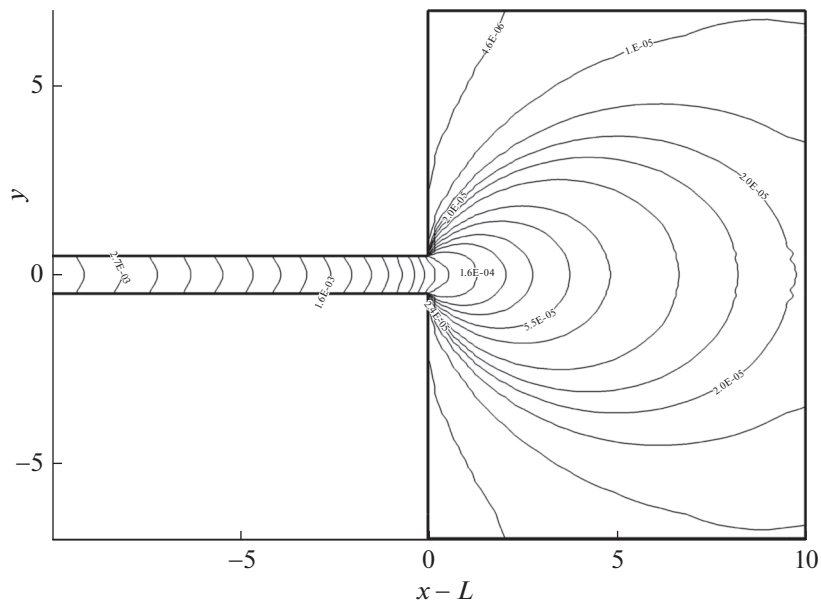
На фиг. 6, 7, 8 представлены линии уровня температуры, плотности и числа Маха для случая $L - x_2 = 200$. Снова отмечаем хорошее выполнение условия постоянства температуры в канале вплоть до окрестности выходного сечения. Для выбранного размера резервуара II в линиях уровня всех расчетных величин практически отсутствуют характерные для эффекта луча артефакты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

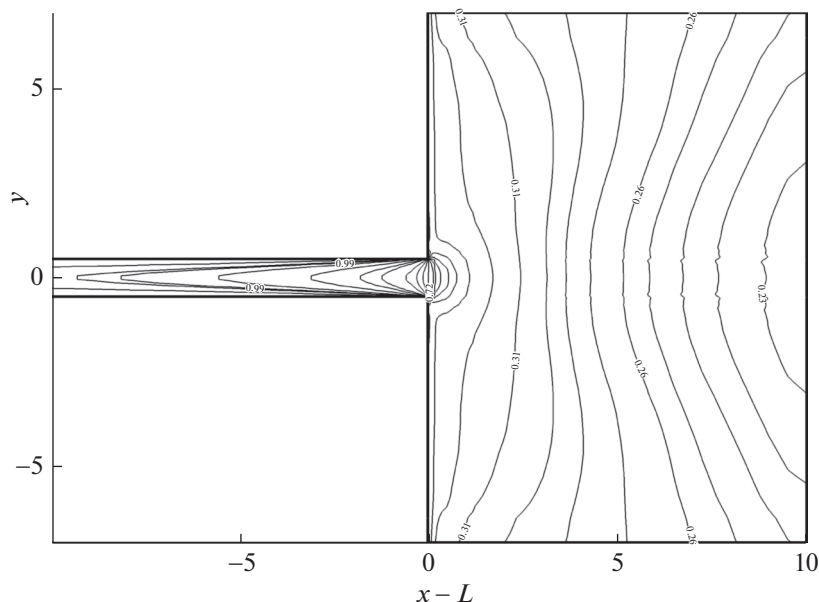
В работе предложен гибридный метод построения поля течения разреженного газа, возникающего при истечении через очень длинный плоский канал из резервуара высокого давления в резервуар низкого давления, включая случай истечения в вакуум. В основе метода лежат следу-



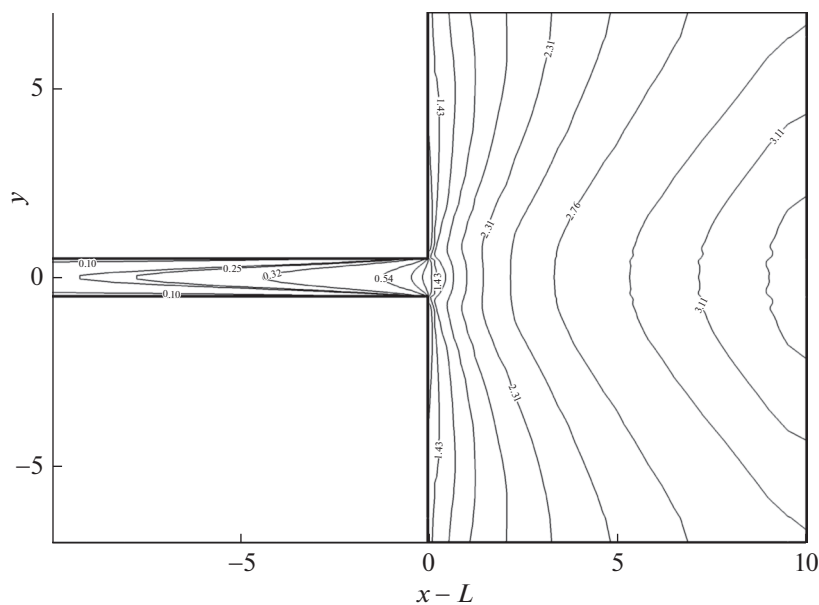
Фиг. 5. Распределение безразмерного давления и числа Маха вдоль оси x в сравнении с асимптотическим решением (12) вблизи выхода из канала $x - L = 0$.



Фиг. 6. Линии уровня плотности n/n_1 для случая $L - x_2 = 200$.



Фиг. 7. Линии уровня плотности T/T_1 для случая $L - x_2 = 200$.



Фиг. 8. Линии уровня числа Маха M для случая $L - x_2 = 200$.

ющие соображения. При достаточной большой длине канала расход массы газа определяется медленным течением в основном участке канала, и при малых числах Кнудсена представляет собой изотермическое течение Пуайзеля. Окрестность истечения газа в резервуар низкого давления охватывает малую часть длины канала, но значительно больше ширины канала. Структура истекающей струи описывается нелинейным кинетическим уравнением с известным значением расхода массы, задаваемым на входе в рассматриваемую окрестность, т.е. в сечении $x = x_2$, положение которого определяется условием удовлетворения равенства потоков массы. Данное уравнение решается неявным методом дискретных скоростей. Так как в предлагаемом подходе кинетическое уравнение решается в относительно небольшой от размера всего канала области течения, требуемое для построения решения время счета сокращается на порядки по сравнению с прямым кинетическим расчетом течения во всем канале. Приведенные примеры расчетов показывают работоспособность и высокую точность метода при расчете истечения газа в вакуум.

Расчеты проводились на вычислительных мощностях Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (<http://www.jssc.ru/>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sharipov F., Seleznev V.* Data on internal rarefied gas flows // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1998. Т. 27. № 3. С. 657–706.
2. *Шарипов Ф.М., Селезнев В.Д.* Движение разреженных газов в каналах и микроканалах // Екатеринбург. УРО РАН, 2008. 231 с.
3. *Sharipov F., Seleznev V.D.* Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 1994. V. 12. № 5. P. 2933–2935.
4. *Graur I., Sharipov F.* Non-isothermal flow of rarefied gas through a long pipe with elliptic cross section // *Microfluidics and Nanofluidics.* 2009. V. 6. № 2. P. 267–275.
5. *Varoutis S., Day C., Sharipov F.* Rarefied gas flow through channels of finite length at various pressure ratios // *Vacuum.* 2012. V. 86. № 12. P. 1952–1959.
6. *Pantazis S., Valougeorgis D., Sharipov F.* End corrections for rarefied gas flows through capillaries of finite length // *Vacuum.* 2013. V. 97. P. 26–29.
7. *Pantazis S., Valougeorgis D., Sharipov F.* End corrections for rarefied gas flows through circular tubes of finite length // *Vacuum.* 2014. V. 101. P. 306–312.
8. *Valougeorgis D., Vasileiadis N., Titarev V.* Validity range of linear kinetic modeling in rarefied pressure driven single gas flows through circular capillaries // *European Journal of Mechanics / B Fluids, Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows.* 2017. V. 64. P. 2–7.
9. *Titarev V.A.* Rarefied gas flow in a planar channel caused by arbitrary pressure and temperature drops // *Int. J. of Heat and Mass Transfer.* 2012. V. 55. № 21–22. P. 5916–5930.
10. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // *Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Int. Symp., AIP Conf. Proc.* 1501. 2012. P. 465–472.
11. *Титарев В.А., Шахов Е.М.* Концевые эффекты при истечении разреженного газа через длинную трубу в вакуум // *Известия РАН. Механ. жидкости и газа.* 2013. № 5. С. 146–158.
12. *Шахов Е.М.* Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // *Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа.* 1968. № 5. С. 142–145.
13. *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* 1954. V. 94. № 3. P. 511–525.
14. *Шахов Е.М.* Линеаризированная двумерная задача о течении разреженного газа в длинном канале // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1999. Т. 39. № 7. С. 1240–1249.
15. *Конопелько Н.А., Титарев В.А., Шахов Е.М.* Нестационарное течение разреженного газа в микроканале из-за распада разрыва давления // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2016. Т. 56. № 3. С. 476–489.
16. *Титарев В.А.* Программный комплекс Несветай-3Д моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа // *Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журнал.* 2014. № 6. С. 124–154.
17. *Titarev V.A.* Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows // *Computers & Fluids, Special issue “Nonlinear flow and transport”.* 2018. V. 169. P. 62–70.
18. *Titarev V.A.* Numerical methods for model kinetic equations and their application to external high-speed flows // *Continuum Mechanics, Applied Mathematics and Scientific Computing: Godunov’s Legacy.* Springer, Cham. 2020. P. 353–358.
19. *Titarev V.A.* Rarefied gas flow in a circular pipe of finite length // *Vacuum.* 2013. V. 94. P. 92–103.
20. *Titarev V.A., Shakhov E.M.* Rarefied gas flow into vacuum through a pipe composed of two circular sections of different radii // *Vacuum. Special Issue “Advances in Vacuum Gas Dynamics”* 2014. V. 109. P. 236–245.
21. *Titarev V.A., Shakhov E.M., Frolova A.A.* Shock wave reflection from a short orifice open to vacuum // *Vacuum.* 2019. V. 161. P. 232–241.
22. *Петров М.Н., Тамбова А.А., Титарев В.А., Утюжников С.В., Чикиткин А.В.* Программный комплекс FlowModellium для расчета высокоскоростных течений сжимаемого газа // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2018. Т. 58. № 11. С. 1932–1954.
23. *Chikitkin A., Petrov M., Titarev V., Utyuzhnikov S.* Parallel versions of implicit LU-SGS method // *A Special Issue of Lobachevskii Journal of Mathematics on “Parallel Structure of Algorithms”.* 2018. V. 39. № 4. P. 503–512.
24. *Титарев В.А., Утюжников С.В., Чикиткин А.В.* OpenMP + MPI параллельная реализация численного метода для решения кинетического уравнения // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2016. Т. 56. № 11. С. 1949–1959.
25. *Chai J.C., Lee HaeOk.S., Patankar Suhas.V.* Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method // *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals.* 1993. V. 24. № 4. P. 373–389.
26. *Brull S., Mieussens L.* Local discrete velocity grids for deterministic rarefied flow simulations // *J. Comput. Phys.* 2014. V. 266. P. 22–46.
27. *Aristov V.V.* Direct Methods for Solving the Boltzmann Equation and Study of Nonequilibrium Flows // *Kluwer Academic Publishers.* Dordrecht/Boston/London, 2001. P. 294.
28. *Kolobov V.I., Arslanbekov R.R., Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A.* Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement // *J. Comput. Phys.* 2007. V. 223. P. 589–608.