ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2019, том 59, № 5, с. 860–866

УДК 533.6.011

ПРИМЕНЕНИЕ ГИБРИДНОГО МЕТОДА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОТЕЧЕНИЙ[1)]

© 2019 г. О. И. Ровенская

(119333 Москва, ул. Вавилова, 44, ВЦ ФИЦ ИУ РАН, Россия)

e-mail: olga_rovenskaya@mai.ru

Поступила в редакцию 10.12.2018 г.
Переработанный вариант 11.01.2019 г.
Принята к публикации 11.01.2019 г.

Численно исследуется течение газа в микроканале, вызванное произвольным перепадом давления в широком диапазоне числа Кнудсена. Для моделирования применяется гибридный метод, динамически сращивающий решение S-модельного кинетического уравнения с решением уравнений Навье–Стокса. При этом полное решение достигается сращиванием полупотоков макровеличин на границе между областями, обеспечивая выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии через границу. За счет распараллеливания с использованием библиотеки MPI увеличена эффективность гибридного метода. Точность и надежность применимости гибридного метода для микротечений оцениваются сравнением с полным решением кинетического уравнения. Библ. 15. Фиг. 5.

Ключевые слова: микротечения, гибридный метод, кинетические уравнения.

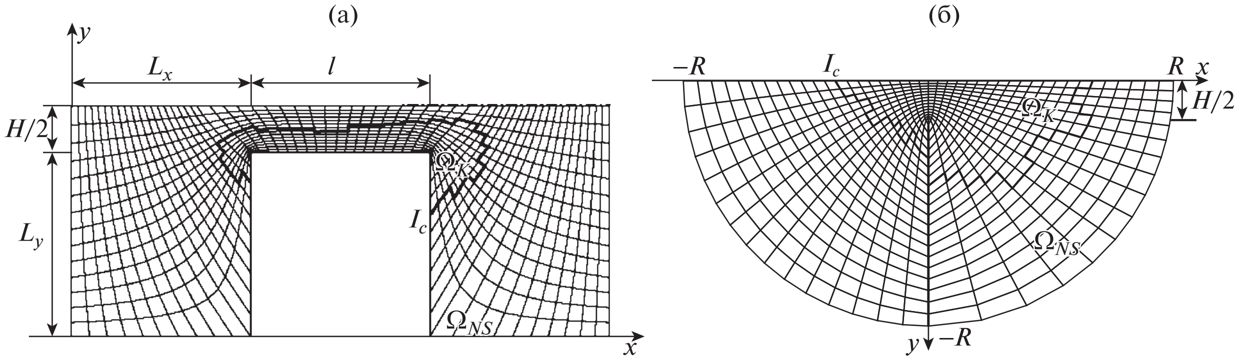
DOI: 10.1134/S0044466919050132

1. ВВЕДЕНИЕ

Бурное развитие нанотехнологий потребовало разработки специальных подходов для их численных исследований [1]. Несмотря на достигнутые успехи, микротечения являются объектом интенсивного исследования, а их изучение до сих пор вызывает различные сложности. Сосуществование разреженных и сплошносредных областей течения является характерной особенностью микротечений. Разреженные течения описываются с помощью кинетических подходов, которые являются численно затратными вследствии дискретизации кинетического уравнения в физическом и скоростном пространствах. Сплошносредные течения хорошо описываются менее дорогостоящими уравнениями Навье–Стокса, которые могут быть менее точными в критических разреженных областях течения. В пограничном слое, образующемся у поверхности твердого тела, неточность уравнений частично преодолевается введением условий скольжения и температурного скачка на твердой поверхности. Однако данные условия справедливы при числах Кнудсена $\mathrm{Kn} \le 0.1$. Кроме того, в микротечениях разреженность играет ключевую роль и уравнения Навье–Стокса даже с учетом условий скольжения не всегда справедливы во всем поле течения.

Создание гибридных методов, использующих кинетический подход в локальных разреженных областях течения, и сплошносредное описание в остальной части течения для моделирования многомасштабных течений представляет собой важную область исследования в последние годы [2]–[10]. Наиболее популярным подходом при создании гибридного метода является разбиение физического пространства на кинетическую и сплошносредную подобласти, используя некоторый критерий. При этом в кинетической подобласти в основном используются методы Монте-Карло [2]–[7]. В разработанном гибридном подходе [8]–[10] применяется прямое численное решение кинетического уравнения, что предпочтительнее для процедуры сращивания решений, так как в этом случае и кинетический, и гидродинамический подходы используют схожие численные схемы. Для расщепление течения на подобласти используется критерий, основанный на градиентах макровеличин и локальном числе Кнудсена Kn, предложенный в [7].

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта № 18-01-00899).



Фиг. 1. Расчетная область течения: канал (а), щель (б).

В данной работе гибридный метод используется для исследования течения разреженного газа в плоском микроканале, вызванного произвольным перепадом давления. Рассматривается также предельный случай – течение через щель, когда влиянием твердых стен на течение можно пренебречь. Оценивается ускорение гибридного метода в сравнении с кинетическим подходом.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается двумерное течение моноатомного газа в канале высоты H и длины $l = 10H$, соединяющего резервуары размера $L_x \times L_y = 5H \times 3H$ (см. фиг. 1), заполненных газом. Также моделируется предельный случай $l = 0$ – течение газа через щель, расположенную на бесконечно тонкой пластине, разделяющей резервуары (см. фиг. 1). Выбор области моделирования в случае трещины обусловлен спецификой построения сетки и представляет собой полукруг радиуса R. Течение симметрично относительно $y = 0$, поэтому моделируется только нижняя половина области течения. Жирная линия на фиг. 1 показывает подвижную границу I_c между кинетической $\Omega_{\rm K}$ и сплошносредной $\Omega_{\rm NS}$ подобластями.

Предполагается, что вдали от канала (трещины) газ находится в состоянии равновесия при температуре T_0 и давление p_0 в первом резервуаре и при давлении p_e ($p_0 > p_e$) и той же температуре T_0 во втором. Температура стенок канала и пластины T_w совпадает с температурой газа T_0. Вследствие перепада давления между резервуарами возникает течение газа в канале (или через щель). Таким образом, течение газа определяется величиной перепада давления p_0/p_e и параметром разреженности газа $\delta = p_0H/\mu_0v_0$, здесь $v_0 = (2RT_0)^{0.5}$ – тепловая скорость, μ_0 – динамическая вязкость газа при температуре T_0, R – газовая постоянная.

Основной характеристикой течения является безразмерный поток массы $W = \dot{m}/m_{fm}$, который нормируется на значение потока в свободномолекулярном режиме $m_{fm} = p_0/\pi^{0.5}v_0$. Поток массы через канал $\dot{m}$ равен:

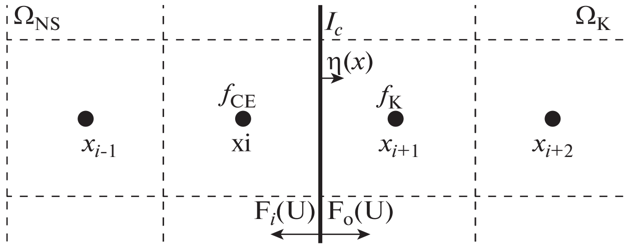
$$\dot{m} = 2\int\limits_0^{H/2} \rho(x,y)u(x,y)dy. \tag{1}$$

3. ГИБРИДНЫЙ МЕТОД

Схематичное изображение процедуры сращивания решения S-модельного кинетического уравнения с решением уравнений Навье–Стокса, выполняемой в гибридном методе, показано на фиг. 2. Для определения размера и положения кинетической подобласти $\Omega_{\rm K}$ выбран критерий, основанный на оценке локального числа Кнудсена Kn и градиентов макропараметров [7], [8]:

$$Kn_{GL}(\mathbf{x}) = \max_{P=\rho,|V|,T}\left(\frac{\lambda}{P(\mathbf{x})}\left|\nabla P(\mathbf{x})\right|\right); \tag{2}$$

здесь $P = (\rho, |\mathbf{V}|, T)$ – вектор макропараметров течения. Считается, что если $\mathrm{Kn}_{GL}(\mathbf{x})$ больше некоторого критического значения ε, решается кинетическое уравнение, а в остальной области те-



Фиг. 2. Схема сращивания кинетического и сплошносредного решений.

чения, т.е. $\mathrm{Kn}_{\mathrm{GL}}(\mathbf{x}) < \varepsilon$, решаются уравнения Навье–Стокса. В работе [10] показано, что значение $\varepsilon = 0.1$ гарантирует разность между гибридным и кинетическим решением около 1%.

В кинетической подобласти течения, $\mathbf{x} \in \Omega_{\mathrm{K}}$, решается S-модельное кинетическое уравнение [11], которое можно записать в безразмерном виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \delta\rho\sqrt{T}(f_S - f); \tag{3}$$

здесь $f = f(t, \mathbf{x}, \xi)$ – функция распределения молекул по скоростям, т.е. вероятность обнаружить частицу со скоростью $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ в точке пространства $\mathbf{x} = (x, y)$ в момент времени t, f_{S} – стандартная локальная функция Шахова [11], $c = \xi - \mathbf{V}$ – собственная скорость молекул, $\mathbf{V} = (u, v)$ – массовая скорость газа. Для обезразмеривания уравнения (3) использовались равновесные параметры газа ρ_0 и T_0 и высота микроканала (трещины) H. В работе используется модель твердых шаров, тогда безразмерная вязкость вычисляется как $\mu = T^{0.5}$.

В остальной, сплошносредной подобласти течения Ω_{NS} решаются вязкие сжимаемые уравнения Навье–Стокса:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{x}} = 0. \tag{4}$$

Здесь $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho e_{\mathrm{tot}})^{\mathrm{T}}$ – вектор макровеличин, $e_{\mathrm{tot}} = e + \mathbf{V}^2/2$ – полная энергия в единице массы, $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ – вектор потоков, включающий конвективные и диффузионные (вязкие) компоненты.

В кинетическом подходе макровеличины плотность ρ, импульс $\rho\mathbf{V}$ и внутренняя энергия единицы массы e вычисляются интегрированием по всему скоростному пространству:

$$\rho = \int f d\boldsymbol{\xi}, \quad \rho(u, v)^{\mathrm{T}} = \int (\xi_x, \xi_y)^{\mathrm{T}} f d\boldsymbol{\xi}, \quad \rho e = \frac{1}{2}\int \mathbf{c}^2 f d\boldsymbol{\xi}. \tag{5}$$

Так как течение является двумерным, можно аналитически упростить задачу, убрав компоненту вектора скорости ξ_z [12], [13]. Кинетическое уравнение (3) дискретизируется в физическом и скоростном пространствах и решается, используя явно-неявную схему [12], [13]. Этап переноса в уравнении (3) аппроксимируется явной конечно объемной схемой. Потоки вычисляются с помощью TVD схемы с ограничителем в виде minmod.

Численное решение уравнений Навье–Стокса основано на конечно-разностном и конечно-объемном методах второго порядка точности по пространству и времени [9], [10]. Для интегрирования по времени используется схема Кранка–Николса.

Сращивание между решениями уравнений Навье–Стокса и кинетического уравнения достигается с помощью согласования полупотоков массы, импульса и энергии через границу между подобластями I_c [9], [10]

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})\big|_{I_c} = \mathbf{F_i}(\mathbf{U}) \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) + \mathbf{F_o}(\mathbf{U}) \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}). \tag{6}$$

На границе I_c для молекул, входящих в подобласть Ω_{K}, задается функция распределения по скоростям Чепмен–Энскога $f_{\mathrm{CE}}(t, \boldsymbol{\xi}, \mathbf{x})$ [14] с макропараметрами, вычисленными в сплошносредной подобласти течения Ω_{NS}. Полупотоки массы, импульса и энергии $\mathbf{F_i}(\mathbf{U}) \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})$, входящие в подобласть Ω_{NS} из кинетической подобласти Ω_K, вычисляются на основе решения кинетического уравнения в Ω_K (см. фиг. 2):

$$\mathbf{F_i(U)}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) = \int\limits_{\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})<0} \boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) f(t,\boldsymbol{\xi},\mathbf{x})\mathbf{s}(\boldsymbol{\xi})^{\mathrm{T}} d\boldsymbol{\xi}, \tag{7}$$

где $\mathbf{s}(\boldsymbol{\xi}) = (1, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}^2/2)$ – вектор столкновений, $f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ – решение кинетического уравнения (3).

Исходящие полупотоки $\mathbf{F_o(U)}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})$ из сплошносредной подобласти Ω_{NS} в кинетическую Ω_K вычисляются интегрированием функции распределения Чепмен–Энскога с макропараметрами, вычисленными в Ω_{NS}

$$\mathbf{F_o(U)}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) = \int\limits_{\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})>0} \boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) f_{\mathrm{CE}}(t,\boldsymbol{\xi},\mathbf{x})\mathbf{s}(\boldsymbol{\xi})^{\mathrm{T}} d\boldsymbol{\xi}. \tag{8}$$

При таком подходе автоматически выполняется сохранение потока массы, импульса и энергии через границу I_c. Положение границы I_c между подобластями Ω_K и Ω_{NS} определяется на каждом шаге по времени. Если точка пространства, находящаяся в Ω_{NS} на предыдущем шаге по времени, перемещается в Ω_K, то функция распределения в ней задается в виде функции Чепмен–Энскога.

Если входная/выходная граница попадает в сплошносредную подобласть Ω_{NS}, полная температура и давление на входе задаются равными p_0 и T_0, т.е. температуре и давлению в левом резервуаре, а давление на выходе равно давлению в правом резервуаре p_e. Если входная/выходная границы находятся в кинетической подобласти Ω_K, для молекул входящих в подобласть, задается локально-максвелловская функция распределения с параметрами, соответствующими условиям в резервуарах. На твердой поверхности в кинетической подобласти Ω_K задаются диффузные граничные условия с полной аккомодацией. Если твердая поверхность попадает в Ω_{NS}, то задаются условия скольжения и температурный скачок.

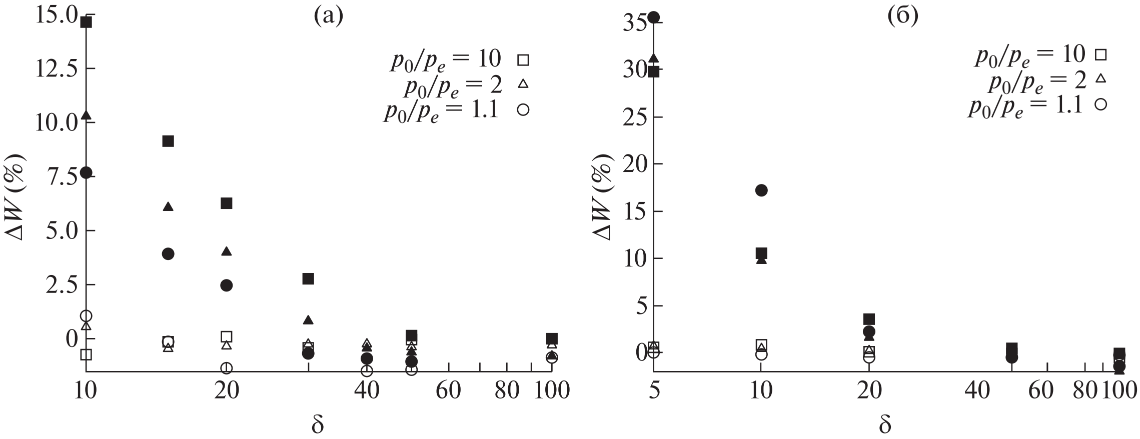
Гибридный код написан на C++ (код для решения кинетического уравнения и процедуры сращивания) и на Fortran для решения системы уравнений Навье–Стокса. Для повышения эффективности гибридный код распараллелен с помощью MPI (message passing protocol) [15]. Расчеты выполнены на многоядерной системе, состоящей из 2 процессоров с 4 ядрами Intel(R) Xeon(R) E5520 CPU, 2.27 (2.93) GHz, 8 MB Cache.

4. ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Численное моделирование течения газа в микроканале и микрощели проводилось для отношений давлений $p_0/p_e = 1.1$, 2, 10 и параметре разреженности газа δ, варьирующегося от 100 (режим скольжения) до 1 (переходный режим). Для большинства расчетов в физическом пространстве используется неоднородная структурированная криволинейная сетка с числом узлов в направлении по потоку, равным 360, и с 40 узлами в поперечном направлении. Размер минимального шага по потоку равен 0.02, в поперечном направлении – 0.008 для канала и 0.017 для щели. В случае течения со значительными градиентами макропараметров ($p_0/p_e = 10$) использовалась более подробная сетка размера 400 × 60.

Однородная двумерная сетка задавалась в пространстве скоростей. Размер скоростной сетки удовлетворяет условию $v_{\max} \geq \max(|u|, |v|) + 3.5T_{\max}^{0.5}$. Для большинства расчетов число узлов по каждому направлению скорости выбиралось равным 24 и размер скоростного пространства был ограничен максимальным значением $v_{\max} = 5.2$. Для максимального перепада давления $p_0/p_e = 10$ размер скоростного пространства и число узлов в скоростном пространстве увеличивались до $v_{\max} = 7.6$ и 48 узлов (по каждому направлению) соответственно.

Влияние параметров сетки на поле течения оценивалось с помощью сравнения потока массы для расчетов на грубой сетке, состоящей из 240 × 40 узлов. Разница между результатами, полученными на грубой и более мелкой сетках, не превышала нескольких процентов. Оптимально число узлов в скоростном пространстве выбиралось таким образом, что удваивание их числа не изменяет поток массы более чем на 1–1.5%.



Фиг. 3. ΔW_{NS} (сплошные символы) и ΔW_h (пустые символы): канал (а), щель (б).

В гибридном методе шаг по времени выбирается из условия $\Delta t = \min(\Delta t_{\text{K}}, \Delta t_{\text{NS}})$. При этом в кинетическом подходе шаг по времени Δt_{K} должен удовлетворять условию устойчивости Куранта–Фридрихса–Леви (CFL), где CFL = 0.4, а в сплошносредном подходе шаг может быть произвольным Δt_{NS}. Решение считалось установившимся, если выполнилось условие $\|\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n\|_{L2} < \Delta$, где L_2 – норма и $\Delta = 10^{-7}$.

5. АНАЛИЗ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

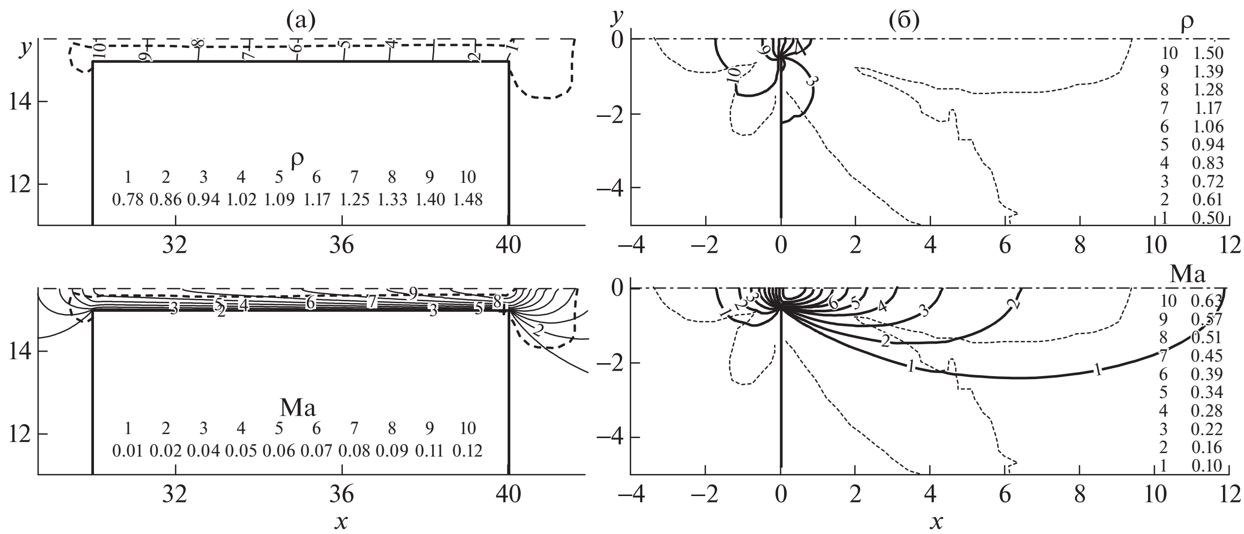
Будем считать, что кинетический подход, основанный на решении S-модельного уравнения, является эталонным методом. Оценим отклонение потока массы W, полученных гибридным методом W_h и с помощью решения уравнений Навье–Стокса W_{NS} от эталонного кинетического решения W_{S}. Для этого вычислим относительные разности ΔW_h и ΔW_{NS} как:

$$\Delta W_{(h,\text{NS})} = 1 - W_{(h,\text{NS})}/W_{\text{S}}.$$

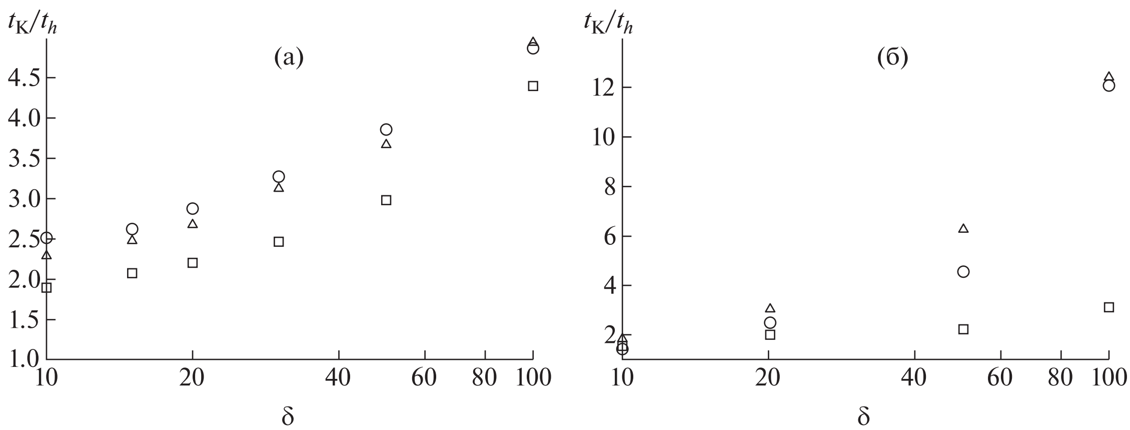
На фиг. 3 показаны относительные разности ΔW_{NS} и ΔW_h для течения через канал (фиг. 3а) и щель (фиг. 3б) при $p_0/p_e = 10$, 2 и 1.1 и параметре разреженности δ от 5 до 100. Когда газ слаборазрежен ($\delta \geq 50$), потоки массы, полученные кинетическим, гибридным и методами Навье–Стокса, отличаются не более чем на 2%. Начиная с $\delta = 20$ разница между кинетическим и решением уравнений Навье–Стокса ΔW_{NS} становится заметной (>5%) и растет с увеличением разреженности газа. Следует отметить, что в случае течения через щель, превышение 5% порога достигается позже, при $\delta = 15$, чем для течения в канале, вследствие более слабого воздействия твердых границ на течение через щель. Максимальное отклонение $\Delta W_{\text{NS}} = 35\%$ для течения через щель при $\delta = 5$ и 15% при $\delta = 10$ для течения в канале. При этом разность между гибридным и кинетическим решением ΔW_h порядка 1–2%, во всем рассматриваемом диапазоне параметра разреженности δ.

Пример, распределение контурных линий плотности и числа Маха около щели и вдоль канала, а также положение границы I_c между кинетической областью Ω_{K} и сплошносредной Ω_{NS} показаны на фиг. 4 для $\delta = 10$ и $p_0/p_e = 2$. Можно видеть, что линии, пересекающие границу I_c, демонстрируют плавный переход, что говорит о правильном сращивании кинетического и сплошносредного решений.

Время, требуемое для одного шага гибридного кода, t_h, представляет собой сумму времен, требующихся для решения S-модельного уравнения в N_{K} кинетических точках (подобласть Ω_{K}), уравнений Навье–Стокса в $N_{\text{total}} - N_{\text{K}}$ точках (подобласть Ω_{NS}) и процедуры сращивания (N_{total} – полное число узлов в физическом пространстве). Так как время, затрачиваемое на решение уравнений Навье–Стокса и процедуру сращивания, достаточно мало, то время t_h, необходимое гибридному методу, определяется числом кинетических точек N_{K}, в которых решается модельное кинетическое уравнение.



Фиг. 4. Распределение плотности и числа Маха для $\delta = 10$ и $p_0/p_e = 2$: канал (а), щель (б).



Фиг. 5. Относительное ускорение гибридного метода для □ – $p_0/p_e = 10$; △ – $p_0/p_e = 2$; ○ – $p_0/p_e = 1.1$: канал (а), щель (б).

Достигнутое гибридным методом ускорение оценивалось как $s = t_K/t_h$, где t_K – время решения кинетического уравнения во всем поле течения, т.е. в N_{total} точках. Максимальное ускорение, достигаемое в расчетах $s \approx 12$ при $\delta = 100$, и падает с уменьшением δ, до минимального ускорения около 2 при $\delta = 10$, так как с увеличением разреженности газа растет число кинетических точек N_K.

ВЫВОДЫ

Гибридный метод, основанный на сращивании решений кинетического уравнения и уравнений Навье–Стокса, использовался для численного моделирования течения в микроканале и щели. Показано, что результаты, полученные гибридным методом, хорошо совпадают с кинетическими результатами, даже при тех условиях, когда сплошносредный подход (уравнения Навье–Стокса) дают полностью не корректные результаты. Гибридный метод демонстрирует ускорение от 12 до 2 раз в сравнении с решением кинетического уравнения. При этом ускорение гибридного метода зависит от степени разреженности газа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Karniadakis G., Ali Beskok A.* Microflows: fundamentals and simulation. Berlin: Springer, 2001.
2. *Le Tallec P., Mallinger F.* Coupling Boltzmann and Navier-Stokes equations by half fluxes // J. Comput. Phys. 1997. V. 136. P. 51–67.
3. *Carlson H.A., Roveda R., Boyd I.D., Candler G.V.* A Hybrid CFD-DSMC method of modeling continuum-rarefied flows // AIAA. 2004. P. 2004–2180.
4. *Wijesinghe H.S., Hornung R., Garsia A.L., Hadjiconstantinou H.N.* Three-dimensional hybrid continuum-atomistic simulations for multiscale hydrodynamics // J. Fluids Engng. 2004. V. 126. P. 768–777.
5. *La Torre F., Kenjeres S., Moerel J-L., Kleijn C.R.* Hybrid simulations of rarefied supersonic gas flows in micronozzles // Comput. and Fluids. 2011. V. 49. P. 312–322.
6. *Roveda R., Goldstein D.B., Varghese P.L.* Hybrid Euler/direct simulation Monte Carlo calculation of unsteady slit flow // J. Spacecraft Rockets. 2000. V. 37. № 6. P. 753–760.
7. *Schwartzentruber T.E., Boyd I.D.* A hybrid particle-continuum method applied to shock waves // J. Comput. Phys. 2006. V. 215. P. 402–416.
8. *Rovenskaya O., Croce G.* Heat transfer in rough microchannels under rarefied flow conditions // Eur. J. Mech. B: Fluids. 2018. V. 72. P. 706–715.
9. *Rovenskaya O., Croce G.* Numerical simulation of gas flow in rough microchannels: hybrid kinetic–continuum approach versus Navier–Stokes // Microfluidics and Nanofluidics. 2016. V. 20. № 5. P. 1–15.
10. *Rovenskaya O., Croce G.* Application a hybrid solver to gas flow through a slit at arbitrary pressure ratio // Vacuum. 2014. V. 109. P. 266–274.
11. *Шахов Е.М.* Метод исследования движения разреженного газа. М.: Наука, 1974.
12. *Rovenskaya O.I.* Kinetic analysis of surface roughness in a microchannel // Comput. and Fluids. 2013. V. 77. P. 159–165.
13. *Rovenskaya O.* Comparative analysis of the numerical solution of full Boltzmann and BGK model equations for the Poiseuille flow in a planar microchannel // Comput. and Fluids. 2013. V. 81. P. 45–56.
14. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностр. лит., 1960.
15. *Snir M., Dongarra J., Kowalik J.S., Huss-Lederman S., Otto S.W., Walker D.W.* MPI – The complete references. Cambridge: MIT Press, 2000.