



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 81 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Подрыга В.О., Поляков С.В.

Многомасштабное
моделирование истечения
газовой струи в вакуум

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 81. 52 с. doi:[10.20948/prepr-2016-81](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-81)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-81>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

В.О. Подрыга, С.В. Поляков

**Многомасштабное моделирование
истечения газовой струи в вакуум**

Москва — 2016

Подрыга В.О., Поляков С.В.

Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум

Данная работа посвящена трехмерному моделированию течений газов в микроканалах сложных технических систем. Для моделирования используется многомасштабный подход, сочетающий решение уравнений квазигазодинамики и молекулярной динамики в рамках метода расщепления по физическим процессам. Параллельная реализация основана на методе разделения областей и функциональном параллелизме и ориентирована на использование вычислительных систем с центральной и гибридной архитектурами. В качестве иллюстрации подхода рассмотрена задача истечения газовой смеси азота и водорода в вакуум. На данном примере исследована параллельная численная реализация подхода, проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Анализ полученных данных подтвердил эффективность предложенного подхода и показал хорошую масштабируемость разработанного параллельного кода.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, молекулярная динамика, квазигазодинамические уравнения, микроканалы, азот, водород, смеси газов, параллельные алгоритмы, высокопроизводительные вычисления

Viktoriia Olegovna Podryga, Sergey Vladimirovich Polyakov

Multiscale modeling of gas jet outflow to vacuum

This paper is devoted to three-dimensional simulation of gas flows in microchannels of complex technical systems. For simulation the multiscale approach combining the solution of quasigasdynamic equations and the molecular dynamics within the method of splitting into physical processes is used. Parallel implementation is based on the domain decomposition method and the functional parallelism and is oriented on use of computing systems with the central and hybrid architectures. The problem of outflow of nitrogen and hydrogen mixture in a vacuum was considered as illustration of the proposed approach. For this problem the parallel numerical realization of the approach was studied, and comparing of the received numerical results with the experimental data was carried out. Analysis of the obtained results confirmed the efficiency of the offered approach and it has shown the good scalability of the developed parallel code.

Key words: multiscale modeling, molecular dynamics, quasigasdynamic equations, microchannels, nitrogen, hydrogen, gas mixtures, parallel algorithms, high-performance computing

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 15-07-06082-а, 16-07-00206-а, 16-37-00417-мол-а.

1. Введение

Необходимость моделирования сложных нелинейных процессов возникает во многих отраслях знания, в том числе в рамках внедрения нанотехнологий в промышленности. Особенностью математических задач в указанной области является одновременное изучение процессов на многих масштабах, включая микро- и наноуровни. Одним из современных и активно развивающихся подходов является многомасштабный подход, сочетающий в себе методы механики сплошной среды (МСС) и методы частиц, одним из которых является метод молекулярной динамики (МД). Такое сочетание позволяет заменить дорогостоящий и трудно реализуемый физический эксперимент компьютерными вычислениями.

Одной из часто встречающихся практических задач нанотехнологии является газодинамическое напыление наночастиц на поверхности твердых материалов с целью изменения свойств получаемых покрытий. Для реализации этой технологии особый интерес представляют течения газовых смесей в микро- и наноканалах. Поэтому детальное исследование течений газа в микросистемах реальной геометрии является весьма актуальной задачей. Для ее решения необходимо знание с высокой точностью свойств материалов и сред, используемых в технологических процессах.

В представляемой работе исследуется один из аспектов общей проблемы напыления, связанный с расчетами параметров микротечений разреженных газов в условиях технического вакуума. Для правильного описания таких процессов необходимо знание свойств реальных газов и воспроизведение их в численном эксперименте. Здесь следует отметить, что отдельные свойства газов хорошо изучены экспериментально в определенных диапазонах температур и давлений и описаны в литературе. Однако имеются свойства, которые можно предсказать лишь теоретически на основе кинетической теории газов [1]. При этом получаемые теоретические данные соответствуют весьма ограниченному диапазону температур и давлений и могут сильно отличаться от реальных свойств газа. Одним из способов получения недостающей информации о свойствах газовой среды в заданном диапазоне температур и давлений является молекулярно-динамическое моделирование [2-7]. С его помощью можно определять необходимые свойства газов практически из первых принципов.

В данной работе рассматривается конкретная задача об истечении сверхзвуковой струи смеси азота и водорода в вакуум. Для моделирования процесса предлагается многомасштабный подход, который использует два уровня детализации, связанных с размерами конкретной геометрии задачи (десяти средних длин свободного пробега молекул смеси и более) и расстоянием между взаимодействующими молекулами смеси (порядка 1 нм). Данный подход отличается от таких известных методик, как: (а) решение задачи на основе уравнения Больцмана (см., например, [8-12]), (б) расчет свободномолекулярных течений [13-24]. Мотивацией к такой альтернативе

является в первом случае тот факт, что в сильно разреженном газе функция распределения молекул по скоростям превращается в случайный набор дельта-функций и, строго говоря, не является непрерывной. Во втором случае мотивацией является невозможность точного описания взаимодействий молекул газов разных сортов в рамках моделей только твердых сфер (HS или VHS), мягких сфер (VSS) или шероховатых сфер (VRS), поскольку имеется нелинейная зависимость взаимодействия даже двух молекул при столкновении от их расположения, температуры (скорости) и окружения (наличия других соседних молекул).

В рамках предлагаемого подхода рассматриваются четыре основных класса численных алгоритмов.

Алгоритм класса 1 предполагает изучение методами молекулярной динамики свойств газовых сред и свойств твердых поверхностей, с которыми контактирует газовая среда в технических приложениях. В качестве численной реализации подхода в этом случае выступает конечно-разностная схема Верле в скоростной форме [25] (в дальнейшем предполагается также использовать асимптотические методы типа Рунге-Кутты [26]). В результате таких исследований предполагается накопление базы данных по свойствам газов и твердых материалов (в основном металлических или композитных), которая будет использоваться в рамках других алгоритмов расчета. В рамках данной работы такая база данных создана для чистого азота и чистого никеля в диапазоне температур 100 - 400 К и давлений порядка 1 атм. (см. [27-32]).

Алгоритм класса 2 предполагает решение задачи только на макроуровне на основе квазигазодинамической (КГД) системы уравнений [33-37]. При этом свойства компонент газовой смеси (уравнения состояния по давлению и энергии, кинетические коэффициенты – вязкость и теплопроводность, обменные члены в уравнениях для импульса и энергии, параметры граничных условий) определяются из указанной выше базы данных молекулярно-динамических расчетов, накопленной заранее для нужного диапазона температур и давлений. Такие расчеты проводились, например, в работе [38] и еще будут обсуждаться ниже.

Алгоритм класса 3 предполагает одновременное использование в расчетах КГД уравнений и уравнений механики Ньютона для молекул газовой среды. Алгоритм реализуется в рамках метода расщепления по физическим процессам. Он предполагает, что в газовой среде и на ее границах можно ограничиться **локальным** рассмотрением процессов взаимодействия газов смеси между собой и газов с твердой стенкой. В работах [39, 40] такие расчеты уже представлялись, однако здесь будет рассмотрена несколько скорректированная схема вычислений.

Алгоритм класса 4 также предполагает одновременное использование в расчетах КГД уравнений и уравнений механики Ньютона для молекул газовой среды и атомов поверхностного слоя стенки. Отличием данного случая от предыдущего является то, что в некоторых областях среды (обычно на границе

и в зонах сильного перепада параметров газа) молекулярно-динамические расчеты проводятся постоянно без перехода на макроуровень. В этих же областях не используется принцип локальности молекулярных взаимодействий, то есть в общем случае алгоритм является *нелокальным* на молекулярном уровне.

Суммируя сказанное, отметим, что основная цель данной работы состоит в описании деталей алгоритмов классов 3 и 4 (а также их параллельных реализаций) и анализе получаемых расчетных данных в сравнении с численными и натурными экспериментами. В качестве примера выбрана задача об истечении сверхзвуковой струи смеси азота и водорода в вакуум, для которой имеются необходимые экспериментальные данные.

2. Математическая постановка

Рассмотрим течение смеси азота и водорода, истекающей из идеального сопла цилиндрической геометрии в область технического вакуума. Будем считать, что в окружающей среде уже находится небольшое количество этой же смеси при существенно меньшем давлении и температуре, совпадающей с температурой торможения. Тогда во всей расчетной области необходимо использовать многомасштабные многоуровневые вычисления. Как указывалось выше, здесь будет использоваться два основных уровня: макроскопический и микроскопический. Рассмотрим их подробнее.

2.1. Макроскопическое описание

Для описания задачи на макроскопическом уровне будем использовать квазигазодинамические уравнения. В случае смеси газов система КГД уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид [34, 35, 37]. Запишем эти уравнения в трехмерном случае для бинарной смеси газов в инвариантном относительно системы координат виде в размерных переменных (ниже используется система единиц СИ) вместе с уравнениями связей и состояния:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_l &= 0, \quad \mathbf{j}_l = \rho_l (\mathbf{u}_l - \mathbf{w}_l), \\ \mathbf{w}_l &= \tau \left[\frac{1}{\rho_l} \operatorname{div} (\rho_l \mathbf{u}_l) \right] \mathbf{u}_l + \mathbf{w}_l^*, \quad \mathbf{w}_l^* = \tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \frac{1}{\rho_l} \nabla p_l \right], \quad l = a, b; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho_l u_{l,k}) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_l u_{l,k} + \mathbf{e}_k p_l - \mathbf{\Pi}_{l,k}) = S_{l,k}^{(I)}, \\
& \mathbf{\Pi}_{l,k} = (\Pi_{l,j,k}), \quad \Pi_{l,k,j} = \Pi_{l,k,j}^{NS} + \Pi_{l,k,j}^{AD}, \\
& \Pi_{l,k,j}^{NS} = \mu \left(\frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{l,j}}{\partial x_k} + \delta_{k,j} \left(\zeta - \frac{2}{3} \right) \operatorname{div}(\mathbf{u}_l) \right), \\
& \Pi_{l,k,j}^{AD} = \rho_l u_{l,k} w_{l,j}^* + \delta_{k,j} \tau ((\mathbf{u}_l \nabla) p_l), \\
& S_{l,k}^{(I)} = \nu_{ll'} \rho_l (u_{l,k}^* - u_{l,k}), \quad l = a, b, \quad l' = b, a, \quad j, k = 1, 2, 3;
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} E_l + \operatorname{div}(\mathbf{j}_l H_l + \mathbf{q}_l - \mathbf{\Pi}_l \mathbf{u}_l) = S_l^{(E)}, \\
& \mathbf{q}_l = -\kappa \nabla T_l - \tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) \varepsilon_l + p_l (\mathbf{u}_l \nabla) \left(\frac{1}{\rho_l} \right) \right] \rho_l \mathbf{u}_l, \\
& S_l^{(E)} = \nu_{ll'} (E_l^* - E_l), \quad l = a, b, \quad l' = b, a,
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
& E_l = \rho_l \left(\frac{1}{2} |\mathbf{u}_l|^2 + \varepsilon_l \right), \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l \mathfrak{R}_l T_l, \\
& \gamma_l = \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad \tau_l = \frac{\mu_l}{p_l \operatorname{Sc}_l}, \quad \operatorname{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\kappa_l}, \quad \operatorname{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \quad l = a, b.
\end{aligned} \tag{4}$$

Выше предполагается, что смесь состоит из газов a и b с числовыми плотностями (концентрациями) n_l и массовыми плотностями $\rho_l = m_l n_l$ (m_l – масса молекул газа l , $l = a, b$). Каждый газ характеризуется своей температурой T_l и макроскопической скоростью \mathbf{u}_l . Другие параметры компонент смеси: p_l – парциальные давления газов в смеси; E_l , H_l и ε_l – плотности полной энергии, энтальпии и внутренние энергии компонент смеси; μ , ζ , κ и τ – кинетические коэффициенты смеси, а именно: коэффициенты динамической вязкости, относительной объемной вязкости, теплопроводности смеси и время релаксации смеси к квазиравновесному состоянию, выражающиеся через соответствующие коэффициенты компонент смеси $\mu_l = \mu_l(T_l)$, $\zeta_l = \zeta_l(T_l)$, $\chi_l = \chi_l(T_l)$ и $\tau_l = \tau_l(T_l, \rho_l)$. Переменные $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$, $\gamma_l = \gamma_l(T_l, \rho_l)$, $c_{v,l} = c_{v,l}(T_l)$, $c_{p,l} = c_{p,l}(T_l)$ и $\mathfrak{R}_l = k_B / m_l$ – коэффициенты сжимаемости, показатели адиабат, удельные теплоемкости и индивидуальные газовые постоянные компонент смеси (k_B – постоянная Больцмана, Sc_l и Pr_l – числа Шмидта и Прандтля для компонент смеси); \mathbf{j}_l и $\mathbf{\Pi}_l$ – модифицированные

потоки плотности и тензоры вязких напряжений компонент смеси; $\rho_l \mathbf{w}_l$ и $\rho_l \mathbf{w}_l^*$ – векторы КГД поправок к потокам плотности компонент смеси $\rho_l \mathbf{u}_l$; \mathbf{q}_l – векторы тепловых потоков компонент смеси; \mathbf{e}_k ($k=1,2,3$) – единичные орты, div и ∇ – операторы дивергенции и градиента.

Обменные члены $S_{l,k}^{(I)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси. Обменные члены содержат в качестве параметров компоненты скоростей \mathbf{u}_l^* и плотности энергии E_l^* . Эти параметры соответствуют равновесному состоянию смеси, но не реализуются при переходном процессе. Фактически они служат ориентиром для динамических переменных. Также в обменных членах присутствуют $\nu_{ll'}$ – частоты взаимных столкновений между молекулами сорта l с молекулами сорта l' , которые вычисляются через ν_l – частоты взаимных столкновений между молекулами одного сорта.

В [34] в рамках моделей VHS и VSS предложено вычислять векторы скоростей \mathbf{u}_l^* и плотности энергии E_l^* по формулам

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_l^* &= \frac{m_a \mathbf{u}_a + m_b \mathbf{u}_b}{m_a + m_b}, \quad E_l^* = \rho_l \left(\frac{1}{2} |\mathbf{u}_l^*|^2 + \varepsilon_l^* \right), \quad \varepsilon_l^* = c_V (T_l^*) T_l^*, \quad l = a, b; \\ T_a^* &= T_a + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{m_b}{6k_B} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_a|^2 \right), \\ T_b^* &= T_b + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{m_a}{6k_B} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_a|^2 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Там же частоты столкновений предложено вычислять по формулам

$$\begin{aligned} \nu_{ab} &= \nu_a \left(\frac{d_{ab}}{d_a} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_b} \frac{n_b}{n_a}}, \quad \nu_{ba} = \nu_{ab} \frac{n_a}{n_b} = \nu_b \left(\frac{d_{ab}}{d_b} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_a} \frac{n_a}{n_b}}, \\ d_{ab} &= \frac{d_a + d_b}{2}, \quad \nu_l = \frac{p_l}{\mu_l} \Omega_l, \quad l = a, b, \end{aligned} \quad (6)$$

где d_l – диаметры молекул сорта l , Ω_l – безразмерные параметры, характеризующие процесс столкновения молекул сорта l .

Заметим, что наряду с формулами (5) можно воспользоваться непосредственными вычислениями векторов скоростей \mathbf{u}_l^* и плотностей энергии E_l^* на молекулярном уровне. В алгоритмах классов 3 и 4 именно этот подход и используется. Аналогично вместо формул (6) можно производить непосредственные МД вычисления частот столкновений.

Для последующего численного анализа задачи используются локальные скорости звука и средние длины свободного пробега для компонент смеси, которые рассчитываются по формулам [34]:

$$a_l^2 = \left(\frac{\partial p_l}{\partial \rho_l} \right)_s \approx \gamma_l \frac{p_l}{\rho_l}, \quad \lambda_l \approx \frac{\mu_l}{\rho_l \sqrt{Z_l \mathfrak{R}_l T_l}} A_l, \quad l = a, b. \quad (7)$$

Здесь A_l – безразмерные параметры, зависящие от используемой модели взаимодействия молекул (HS, VHS, VSS и т.д.) [33, 34]. Заметим, что для определения длин свободного пробега наряду с аппроксимацией, указанной в (7), можно использовать более точные значения, полученные с помощью МД вычислений.

Также при анализе результатов расчетов могут понадобиться местные значения таких параметров течения, как числа Маха, Рейнольдса и Кнудсена:

$$\text{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \text{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}, \quad \text{Kn}_l = \frac{\lambda_l}{L}, \quad l = a, b. \quad (8)$$

Здесь L – характерный размер задачи.

Коэффициенты вязкости, теплопроводности и сжимаемости, а также удельные теплоемкости для компонент смеси в общем случае определяются с помощью МД вычислений [30, 32]. При этом в алгоритмах класса 2 используется их аппроксимация по значениям, полученным по алгоритмам класса 1 в необходимых диапазонах изменения температур и давлений.

Параметры газовой смеси определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_a + \rho_b, \quad \mathbf{u} = \frac{\rho_a \mathbf{u}_a + \rho_b \mathbf{u}_b}{\rho}, \quad p = p_a + p_b, \quad E = E_a + E_b, \\ \varepsilon &= \frac{E}{\rho} - \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2, \quad n = n_a + n_b, \quad T = \frac{n_a T_a + n_b T_b}{n}, \quad m = \frac{m_a n_a + m_b n_b}{n}, \\ \mathfrak{R} &= \frac{k_B}{m}, \quad Z = \frac{p}{\rho \mathfrak{R} T}, \quad c_v = \frac{\varepsilon}{T}, \quad c_p = \frac{\rho_a c_{p,a} + \rho_b c_{p,b}}{\rho_a + \rho_b}, \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v}, \\ \tau &= \frac{\mu}{\rho S c}, \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D}, \quad \text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\kappa}. \end{aligned} \quad (9)$$

Формулы (9) реализуются в полном объеме только при наличии известных коэффициентов μ , D , κ . Последние величины, а также относительная объемная вязкость ζ определяются либо по эмпирическим формулам через соответствующие параметры компонент смеси [1, 41-43], либо непосредственно в МД вычислениях.

В данной работе в рамках алгоритмов класса 2 для определения коэффициентов вязкости, диффузии и теплопроводности смеси (состоящей из неполярных молекул газов) использовались следующие формулы [44-48]:

$$\mu = \mu_a \left(1 + G_{ab} \frac{X_b}{X_a}\right)^{-1} + \mu_b \left(1 + G_{ba} \frac{X_a}{X_b}\right)^{-1},$$

$$\zeta = \zeta_a \frac{\mu_a}{\mu} \left(1 + G_{ab} \frac{X_b}{X_a}\right)^{-1} + \zeta_b \frac{\mu_b}{\mu} \left(1 + G_{ba} \frac{X_a}{X_b}\right)^{-1},$$
(10)

$$\kappa = \kappa_a \left(1 + G_{ab} \frac{X_b}{X_a}\right)^{-1} + \kappa_b \left(1 + G_{ba} \frac{X_a}{X_b}\right)^{-1},$$

$$D = D_{ab} = X_a D_b + X_b D_a,$$

$$G_{ll'} = \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_{l'}}} \sqrt{\frac{M_{l'}}{M_l}}\right)^2 \left(2 \sqrt{2 \left(1 + \frac{M_l}{M_{l'}}\right)}\right)^{-1}, \quad l = a, b, \quad l' = b, a.$$
(11)

Здесь $X_l = \frac{\rho_l V}{M_l}$ – мольная доля газа сорта l в объеме V , M_l – молярная масса газа сорта l .

Средние локальная скорость звука и длина свободного пробега, числа Маха, Рейнольдса и Кнудсена для смеси равны:

$$a^2 = \gamma \frac{p}{\rho}, \quad \lambda = \frac{n_a \lambda_a + n_b \lambda_b}{n_a + n_b}, \quad \text{Ma} = \frac{|\mathbf{u}|}{a}, \quad \text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}| \lambda}{\mu}, \quad \text{Kn} = \frac{L}{\lambda}. \quad (12)$$

Система уравнений (1)-(3) замыкается начальными и граничными условиями. Начальные условия соответствуют равновесному состоянию газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. В обсуждаемых ниже расчетах был рассмотрен случай покоящейся газовой среды:

$$\rho_l = \rho_{l,0}, \quad \mathbf{u}_l = 0, \quad P_l = P_{l,0}, \quad T_l = T_0, \quad l = a, b. \quad (13)$$

Здесь $\rho_{l,0}$ и $p_{l,0}$ – начальные плотности и давления компонент газа, T_0 – начальная температура.

На входе в среду задаются параметры смеси, которые зависят от конкретной постановки задачи и в общем случае определяются следующим образом:

$$(\mathbf{u}_l, \mathbf{n}) = u_{in,l}, \quad \rho_l = \rho_{in,l}, \quad T_l = T_{in,l}, \quad l = a, b, \quad (14)$$

где параметры с индексом in соответствуют заданным значениям параметров на входе в среду.

На свободных поверхностях расчетной области задаются так называемые "мягкие" граничные условия (см., например, [33-35]):

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial(\rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p_l}{\partial n} = 0, \quad l = a, b. \quad (15)$$

2.2. Микроскопическое описание

В случае, когда на макроуровне рассчитывается течение бинарной газовой смеси, на микроуровне также рассматриваются молекулы двух сортов a и b . Эволюция исследуемой системы микрочастиц (молекул) описывается уравнениями Ньютона [2-7]. Для системы двух типов частиц эти уравнения имеют следующий вид:

$$m_l \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (16)$$

где i – номер частицы, $l = a, b$ – тип частиц, N_l – полное число частиц типа l , $m_{l,i}$ – масса частицы типа l с номером i , $\mathbf{r}_{l,i} = (r_{x,l,i}, r_{y,l,i}, r_{z,l,i})$ и $\mathbf{v}_{l,i} = (v_{x,l,i}, v_{y,l,i}, v_{z,l,i})$ – радиус-вектор и вектор скорости i -й частицы типа l , $\mathbf{F}_{l,i} = (F_{x,l,i}, F_{y,l,i}, F_{z,l,i})$ – суммарная сила, действующая на данную частицу.

Силы представляют собой сумму компоненты взаимодействия i -й частицы с окружающими частицами, зависящей от потенциальной энергии, и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие:

$$\mathbf{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (17)$$

где U – потенциальная энергия, $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия с внешней средой.

Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия:

$$\begin{aligned}
U &= U_{aa} + U_{bb} + U_{ab} , \\
U_{aa} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \varphi_{i,aa} , \quad \varphi_{i,aa} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_a} \varphi_{aa} (|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{a,j}|) , \\
U_{bb} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} \varphi_{i,bb} , \quad \varphi_{i,bb} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_b} \varphi_{bb} (|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{b,j}|) , \\
U_{ab} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \varphi_{i,ab} , \quad \varphi_{i,ab} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_b} \varphi_{ab} (|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{b,j}|) ,
\end{aligned} \tag{18}$$

где U_{aa} , U_{bb} , U_{ab} – потенциальные функции взаимодействия для систем частиц одного типа газа между собой и между частицами разных типов газа. Каждый вид взаимодействия описывается с помощью соответствующего потенциала φ_{ll} . Для примера рассматривалось течение газовой смеси, состоящей из азота и водорода. В качестве потенциальной функции использовался потенциал Ми в форме "n-6" [49], адаптированный в работе [50] к расчетам как смеси водорода и азота, так и чистых газовых компонент.

Кинетическая энергия системы E_K , кинетическая энергия теплового движения E_T и полная энергия системы E вычисляются отдельно для частиц каждого типа $l = a, b$ следующим образом:

$$\begin{aligned}
E_K &= \sum_i ke_{l,i} , \quad E_T = \sum_i wke_{l,i} , \quad E = E_K + U , \\
ke_{l,i} &= \frac{m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i}|^2}{2} , \quad wke_{l,i} = \frac{m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i} - \mathbf{v}_{l,m}|^2}{2} , \\
\mathbf{v}_{l,m} &= \frac{1}{N_l} \sum_i \mathbf{v}_{l,i} , \quad i = 1, \dots, N_l , \quad l = a, b ,
\end{aligned} \tag{19}$$

$$\tag{20}$$

где ke_i – кинетическая энергия частицы с номером i , wke_i – тепловая кинетическая энергия частицы с номером i , $|\mathbf{v}_{l,i}|$ – длина вектора скорости i -й частицы типа l , $\mathbf{v}_{l,m}$ – скорость центра масс системы частиц типа $l = a, b$.

Температура T системы частиц газа или металла определяется следующим образом [2-7]:

$$T = \frac{2 \langle E_T \rangle}{3 N k_b} , \tag{21}$$

где k_b – постоянная Больцмана, $\langle \rangle$ – усредненное значение по состояниям системы.

Диагональные компоненты тензора давления для системы частиц типа $l = a, b$ определяются по соотношению (22). Индекс типа частиц из формулы удален для наглядности выражения.

$$P_{\alpha\alpha} = \frac{1}{V} \sum_i m_i (v_{i,\alpha} - v_{m,\alpha})^2 + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} \cdot F_{ij,\alpha}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (22)$$

где V – объем рассматриваемой системы, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j$ – сила взаимодействия между i -й и j -й частицами, α – координата x , y или z соответственно.

Давление в системе в трехмерной постановке задачи определяется так:

$$p = \frac{1}{3} (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}). \quad (23)$$

Макропараметры микросистемы для компоненты газа определяются следующим образом [6, 51-53]:

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{k_B T V} \int_0^\infty \langle C^{VISC} \rangle dt, \\ C^{VISC} &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}^{VISC}, \quad C_{\alpha\beta}^{VISC} = p_{\alpha\beta}(t_0 + t) \cdot p_{\alpha\beta}(t_0), \\ p_{\alpha\beta} &= \sum_i m v_{\alpha,i} v_{\beta,i} + \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} F_{ij,\beta}, \quad \alpha\beta = xy, yz, zx, \quad i, j = 1 \dots N; \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle C^{TCOND} \rangle dt, \quad C^{TCOND} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}^{TCOND}, \\ C_{\alpha\alpha}^{TCOND} &= [q_{\alpha}(t_0 + t) \cdot q_{\alpha}(t_0)], \quad q_{\alpha} = \sum_i E_i \mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} (\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{v}_i), \\ E_i &= \frac{m \mathbf{v}_i^2}{2} + \varphi_i, \quad \alpha = x, y, z, \quad i, j = 1 \dots N; \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \mu\zeta &= \frac{1}{k_B T V} \int_0^\infty \langle C^{BVISC} \rangle dt, \quad C^{BVISC} = \frac{1}{9} \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha\beta}^{BVISC}, \\ C_{\alpha\beta}^{BVISC} &= [p_{\alpha\alpha}(t_0 + t) - \langle p_{\alpha\alpha} \rangle] \cdot [p_{\beta\beta}(t_0) - \langle p_{\beta\beta} \rangle], \quad \alpha, \beta = x, y, z; \end{aligned} \quad (26)$$

$$D = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} \langle C^{DIFF} \rangle dt, \quad C^{DIFF} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}^{DIFF}, \quad (27)$$

$$C_{\alpha\alpha}^{DIFF} = \sum_i [v_{\alpha,i}(t_0 + t) \cdot v_{\alpha,i}(t_0)], \quad \alpha = x, y, z, \quad i = 1 \dots N.$$

Здесь C^{VISC} , C^{TCOND} , C^{BVISC} , C^{DIFF} – автокорреляционные функции, t_0 – начальный момент времени при расчетах коэффициентов, $p_{\alpha\beta}$ – недиагональные компоненты тензора давления, E_i – мгновенная полная энергия молекулы i .

Теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении определяются по формулам [2, 5]:

$$c_v = \left(\frac{dE}{dT} \right)_v = \frac{\langle \delta E^2 \rangle_{NVT}}{k_b T^2} = \frac{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle_{NVT}}{k_b T^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_b T^2}, \quad (28)$$

$$c_p = \left(\frac{dH}{dT} \right)_p = \frac{\langle \delta (E + pV)^2 \rangle_{NPT}}{k_b T^2} = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{k_b T^2}, \quad H = NE_i + pV. \quad (29)$$

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным термодинамическим состоянием системы частиц. Расчеты газовых сред обычно стартуют с нормальных условий. Для этого системы частиц приводятся к термодинамическому равновесию при заданных температуре и давлении. В результате распределение частиц по выбранному объему становится равномерным, распределение скоростей частиц по модулю приближается к максвелловскому, а направления скоростей соответствуют заданному среднему импульсу газовой среды.

Граничные условия на молекулярном уровне выбираются в зависимости от моделируемой ситуации. В частности, когда расчеты направлены на определение свойств среды, то рассматривается некоторый выделенный трехмерный ее объем и на границах используются периодические условия. Дополнительно отдельные части микросистем термостатировались [54, 55].

3. Вычислительные алгоритмы и их реализация

Моделирование задач со многими масштабами и уровнями должно происходить согласно определенным правилам. В рассматриваемой задаче эти правила также имеют место. При этом МД расчеты можно проводить как прямым образом, сочетая в одной реализации КГД и МД, так и косвенным образом, накопив соответствующую базу данных, рассчитанных заранее. Также

возможно частичное использование базы данных МД и частичное прямое МД моделирование в сочетании с КГД расчетами. В итоге, представляемая вычислительная технология содержит 4 класса алгоритмов.

3.1. Алгоритмы класса 1

Алгоритмы класса 1 включают прежде всего расчеты свойств материалов методом молекулярной динамики и накопление базы данных молекулярных расчетов (БДМР), описывающей эти свойства. Также данный класс алгоритмов можно использовать для полноценных расчетов газодинамических и связанных с ними других прикладных задач с характерными размерами порядка нескольких микрон (по сути, это ограничение зависит лишь от вычислительной мощности используемой компьютерной техники).

Расчеты в рамках данного класса алгоритмов состоят в задании начального состояния газовой микросистемы и проведении цикла вычислений по схеме Верле [25]. Начальные данные расчета предполагают задание: области расчета и ее объема, стартового количества частиц и их расположения в объеме, распределений скоростей частиц по модулю и направлению, параметров потенциалов взаимодействия, параметров итогового равновесного (квазиравновесного) состояния (например, температуры и среднего импульса), параметров граничных условий, параметров схемы численного интегрирования (подробнее об этом см. [27-32]).

При расчетах свойств газовых смесей были определены так называемые базовые макропараметры чистых компонент газа: Z_l , $c_{v,l}$, $c_{p,l}$, μ_l , ζ_l , κ_l , D_l . Мотивация выбора именно этих макропараметров определяется двумя факторами. Первый фактор состоит в том, что при заданных температуре T_l , давлении p_l и векторе скорости \mathbf{u}_l базовые макропараметры позволяют определить по формулам (4), (7), (8) все остальные макропараметры чистых компонент, а именно: ρ_l , ε_l , E_l , H_l , γ_l , Pr_l , Sc_l , τ_l , a_l , Ma_l , Re_l , Kn_l и др. Второй фактор связан с тем, что именно выбранные макропараметры непосредственно измеряются в натуральных экспериментах, а следовательно, легко верифицируются на основе накопленной обширной информации по свойствам чистых газов.

Отметим далее, что по известным равновесным макропараметрам для чистых компонент газовой среды можно с высокой степенью точности определить равновесные макропараметры газовой смеси. Для этого необходимо задать дополнительно мольные доли компонент смеси X_l , а также молярные массы M_l и провести вычисления по формулам (9)-(11). Также можно использовать формулы (9)-(11) во время МД вычислений, чтобы сравнивать истинную динамику молекулярной системы с квазиравновесным приближением.

3.2. Алгоритмы класса 2

Алгоритмы класса 2 реализуют расчеты течений газовых смесей с помощью численного решения КГД уравнений (детали численной процедуры на основе метода сеток приводятся ниже). При этом все материальные коэффициенты этих уравнений, а также материальные параметры уравнений состояния и граничных условий рассчитываются по приближенным формулам. Однако здесь различаются два принципиальных подхода.

Первый подход предполагает, что используемые в расчетах приближенные формулы материальных коэффициентов и параметров получены либо экспериментальным, либо теоретическим путем и подтверждены многочисленными исследованиями. Преимуществом такого подхода является высокая скорость вычислений и отсутствие необходимости в подтверждении правильности используемых материальных зависимостей. Недостатком такого подхода является то, что не всегда различные материальные коэффициенты и параметры согласованы между собой. В результате такого рассогласования, даже если оно не очень большое, численная процедура в целом оказывается либо неустойчивой, либо дает решение с большой ошибкой.

Для преодоления указанной проблемы рассогласования материальных зависимостей используется второй подход. Он предполагает использование БДМР, которая подготовлена заранее с помощью молекулярно-динамических расчетов, выполненных для необходимого диапазона температур и давлений. При использовании БДМР для получения необходимого значения того или иного материального коэффициента или параметра применяется дробно-рациональная или логарифмическая интерполяция. Это позволяет, во-первых, повысить точность и гарантировать устойчивость вычислений, а во-вторых, уменьшить объем оперативной памяти для хранения БДМР в широком диапазоне температур и давлений. В целом использование БДМР и высокоточных алгоритмов интерполяции существенно уменьшает общее время вычислений и решает проблему рассогласования, поскольку в этом случае все материальные зависимости получаются из расчетов эволюции одного и того же ансамбля частиц.

3.3. Алгоритмы класса 3

Алгоритмы класса 3 реализуют расчеты течений газовых смесей на двух уровнях: макроскопическом и микроскопическом. На макроскопическом уровне численно решаются КГД уравнения. На микроскопическом уровне решаются уравнения Ньютона. Общий алгоритм решения состоит в чередовании макроскопических и микроскопических расчетов на каждом шаге интегрирования. Он реализуется в рамках метода расщепления по физическим процессам [56].

Мотивацией использования алгоритмов данного класса являются два фактора: 1) отсутствие необходимых данных о материальных коэффициентах и

параметрах задачи в нужном диапазоне температур и давлений; 2) нарушение гипотезы сплошности среды в отдельных зонах расчетной области.

Первый фактор связан с тем, что условия течения газа или смеси газов в реальных технических системах могут быть весьма вариативны. Поэтому для использования алгоритмов класса 2 необходимо иметь в рамках текущего расчета быстрый доступ к большим распределенным объемам памяти. Последнее не всегда достижимо. К тому же в БДМР может просто не оказаться нужных данных для покрытия конкретного диапазона значений. В итоге, алгоритм класса 2 оказывается слишком затратен с точки зрения времени и хранения информации. Поэтому его лучше заменить на алгоритм класса 3, который одновременно и накапливает БДМР, и реализует все необходимые вычисления.

Второй фактор связан с тем, что в отдельных случаях невозможно ограничиться расчетами только по макроскопическим уравнениям. В качестве примера можно привести проблемы расчета взаимодействия в сверхзвуковом потоке молекул нескольких газов, существенно различающихся по атомной массе, а также расчеты различных нелинейных пристеночных явлений в случае уменьшения поперечных размеров технической системы до микронного и субмикронного масштабного уровня. В обоих указанных случаях приходится рассматривать нелинейные взаимодействия на микроуровне. В данной работе это реализуется с помощью методов молекулярной динамики.

Предлагаемые алгоритмы класса 3 подразумевают расчеты течений смесей газов с помощью численного решения методом сеток КГД уравнений и прямых МД вычислений на границе газовой среды и в потоке газа. При этом предполагается, что в газовой среде и на ее границах можно ограничиться *локальным* рассмотрением процессов взаимодействия молекул газов смеси между собой и молекул газов с атомами твердых стенок. Принцип локальности позволяет рассматривать молекулярные взаимодействия в каждой ячейке сетки независимо от процессов, протекающих в других ячейках. В такой ситуации МД вычисления выступают в качестве локального подсеточного алгоритма.

Детали алгоритмов класса 3 излагаются ниже. Здесь же подчеркнем, что алгоритмы класса 3 в целом являются затратными по памяти и времени расчетов, но позволяют обойти ограничения алгоритмов класса 2. В итоге, алгоритм класса 3 самостоятельно обеспечивает всеми необходимыми данными полный цикл вычислений и позволяет согласовывать процессы на микро- и макроуровнях, а также производить расчеты для определенного конкретного набора условий и одновременно накапливать базу данных на случай повторных вычислительных экспериментов.

3.4. Алгоритмы класса 4

Алгоритмы класса 4 также подразумевают проведение прямых макроскопических (КГД) и микроскопических (МД) расчетов, которые осуществляются с помощью метода расщепления по физическим процессам.

Отличием данного случая от предыдущего является то, что в некоторых областях среды (обычно на границе и в зонах сильного перепада параметров газа) молекулярно-динамические расчеты проводятся постоянно без перехода на макроуровень. В этих же областях не используется принцип локальности молекулярных взаимодействий, то есть в общем случае алгоритм является **нелокальным** на молекулярном уровне. Преимуществом алгоритмов класса 4 по сравнению с алгоритмами классов 2 и 3 является возможность расчета течений газовых смесей в технических микросистемах с произвольными геометрией и структурой границ, в произвольном диапазоне температур и давлений с учетом локальных и нелокальных процессов взаимодействия газов с окружающей средой. Недостатком алгоритмов класса 4 является их высокая вычислительная емкость.

3.5. Реализация алгоритмов класса 1

Реализация алгоритмов класса 1 связана с решением системы уравнений (16). Решение этой системы проводится в безразмерных переменных с помощью разностной схемы Верле в скоростной форме [25]:

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^n + \mathbf{v}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}^n}{m} \frac{(\Delta t)^2}{2}, \quad \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \frac{\mathbf{F}^{n+1} + \mathbf{F}^n}{2m} \Delta t. \quad (30)$$

Здесь Δt – шаг интегрирования (по времени), n – номер шага, \mathbf{F}^{n+1} – значение силы на данном шаге. Детали реализации численной процедуры (30) приводятся в [30-32].

В начальный момент времени задаются координаты и скорости всех частиц, после чего решаются уравнения движения (16). На каждом шаге по времени вычисляются силы взаимодействия (17), новые координаты и скорости частиц (30) с учетом поставленных граничных условий и внешнего воздействия на систему в зонах расчета, где оно присутствует.

Для достижения желаемых температур газа в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Берендсена [54]. Для достижения желаемой температуры газа и импульса в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Ланжевена [55].

Результатом вычислений по формулам (30) являются равновесные значения макропараметров системы – температуры, давления, плотности, импульса, средней кинетической энергии, а также данные для расчета материальных коэффициентов и других материальных параметров.

3.6. Реализация алгоритмов класса 2-4

Реализация алгоритмов классов 2-4 на макроскопическом уровне опирается на численное решение КГД уравнений (1)-(3). Для расчета макропараметров газа по КГД уравнениям использовался сеточный численный

метод, имеющий в своей основе метод контрольных объемов [57-64]. Предварительно система (1)-(4) с соответствующими материальными уравнениями и начальными и граничными условиями обезразмеривается.

Далее в расчетной области Ω вводится пространственная сетка Ω_h с ячейками C_m ($m=1, \dots, M$), а также сетка по времени ω_t с шагом Δt , который может быть как постоянным, так и переменным. Сетка Ω_h в общем случае является гибридной и включает в себя элементы разных типов. В одномерном случае речь идет об отрезках разной длины (неравномерная сетка); в двумерном случае подразумевается использование треугольников и четырехугольников; в трехмерном случае могут использоваться выпуклые многогранники с числом вершин от четырех до восьми (тетраэдры, пентаэдры, гексаэдры, гептаэдры и октаэдры). В частных случаях сетка Ω_h была декартовой равномерной сеткой с шагом h .

Все параметры компонент газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) относятся к центрам масс элементов сетки, то есть к центрам ячеек. Поточные переменные задаются в центрах граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов на гибридных сетках выполнены по методике, представленной в работе [65]. В случае декартовых сеток использовались аппроксимации, аналогичные предложенным в [34]. Вычислительная схема по времени была явной.

В трехмерном случае итоговые сеточные уравнения на этапе предиктора не содержат обменных членов и имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{l,m} &= \rho_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(\rho)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p}^{(\rho)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho)}, \mathbf{n}_{m,p}), \\ \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m} &= \rho_{l,m} u_{l,k,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} |S_{m,p}|, \\ W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} &= (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho u_k)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad k = x, y, z, \\ \hat{E}_{l,m} &= E_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(E)} |S_{m,p}|, \\ W_{l,n,m,p}^{(E)} &= (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(E)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad m = 1, \dots, M, \quad l = a, b. \end{aligned} \tag{31}$$

Здесь использованы следующие общепринятые обозначения: f_m, \hat{f}_m – значения соответствующих функций на нижнем и верхнем слоях по времени в центре контрольного объема V_m (совпадающего в силу выбранной аппроксимации с ячейкой сетки C_m), $|V_m|$ – величины контрольных объемов V_m , $|S_{m,p}|$ – площади граней $S_{m,p}$ контрольного объема V_m , M_m – количество граней контрольного

объема V_m , $W_{n,m,p}^{(\alpha)}$ – скалярные произведения потока $W_{m,p}^{(\alpha)}$ через грань $S_{m,p}$ на внешнюю нормаль $\mathbf{n}_{m,p}$ к этой грани ($\alpha = \rho, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z, E$).

Заметим далее, что в рамках алгоритмов классов 2 и 3 уравнения (31) решаются на всей сетке, а в рамках алгоритмов класса 4 – лишь на ее подмножестве (см. ниже). Также следует заметить, что локальная погрешность аппроксимации схемы (29) зависит от конкретных аппроксимаций потоковых членов. Использовались такие аппроксимации, которые дают общий порядок схемы $O(t + \hbar)$ на произвольной гибридной сетке (здесь \hbar – средняя длина ребра сеточных элементов). В случае использования регулярных равномерных или квазиравномерных сеток этот порядок повышается до величины $O(t + \hbar^2)$.

Следуя работе [65], в целях обеспечения устойчивости вычислений в уравнения (31) вводилась адаптивная искусственная вязкость. Однако в отличие от [65] она вводилась более простым способом. На дифференциальном уровне ее можно описать следующим образом. Если каждое из уравнений (1)-(3) представить в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div} W = Q, \quad (32)$$

то уравнение с искусственной вязкостью будет иметь вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div} W + \nu \cdot \Delta f = Q, \quad (33)$$

где Δ – оператор Лапласа, $\nu = \nu_1 + \nu_2 \equiv c_1 \hbar + c_2 \hbar^4$ – малый параметр, имеющий смысл искусственной вязкости и одинаковый для всех уравнений (1)-(3), c_1 и c_2 – положительные константы, не зависящие от шага сетки [65].

Величина ν_1 описывает первую адаптивную искусственную вязкость, отвечающую за сглаживание решения в зонах высоких перепадов плотности и температуры. Она отлична от нуля только в указанных зонах и зануляется по мере установления стационарного режима течения. Критерием введения адаптивной искусственной вязкости является скачок массовой плотности и/или плотности энергии в ячейке на величину порядка 3% по сравнению с ее окружением. Если критерий выполнен, то искусственная вязкость вводится на всем шаблоне, содержащем данную ячейку. Со временем критерий перестает выполняться, и искусственная вязкость ν_1 больше не используется.

Величина ν_2 описывает вторую искусственную вязкость, которая вводится во всей области и отвечает за сглаживание решения при установлении стационарного профиля. Данная часть вязкости присутствует на всем протяжении вычислений.

Очевидно, что введение искусственной вязкости указанным способом не изменяет общий порядок аппроксимации схемы (31) и не влияет на ее консервативность (интеграл от членов с искусственной вязкостью равняется 0, поскольку в граничных узлах она не вводится).

Рассмотрим теперь этап корректора, который включает использование МД вычислений и состоит из двух процедур.

Первая процедура касается вычисления параметров обменных слагаемых. В алгоритмах класса 2 она базируется на формулах (5), (6) для вычисления параметров \mathbf{u}_l^* и E_l^* . Все недостающие для реализации этих формул данные берутся либо непосредственно из БДМР, либо интерполируются по полученным предикторным значениям $\hat{\rho}_{l,m}$, $\hat{\mathbf{u}}_{l,m}$, $\hat{E}_{l,m}$ во всех ячейках сетки.

В алгоритмах класса 3, 4 производятся прямые молекулярные расчеты с шагом $\Delta t_m \ll \Delta t$. При этом осуществляется анализ ситуации в реальном времени, то есть учитываются соотношения размерных времен: $t_n \Delta t_m$ и $t_n \Delta t$, где $t_n = x_n / u_n$ – нормирующий множитель времени, использующийся на макроскопическом уровне и определяющийся нормировкой x_n пространственной координаты и нормировкой u_n векторов скорости.

Адекватное описание газодинамического процесса в микросистемах в нестационарном случае при наличии перехода в сверхзвуковую область приводит нас к нормировочным величинам t_n порядка 1 нс и менее. Например, для чистого азота при нормальных условиях скорость звука составляет около 357 мкм/мкс. Тогда при значении x_n порядка 1 мкм получаем время t_n порядка 2.8 нс. Для увеличения устойчивости вычислений величину нормировки скорости обычно повышают в 5-10 раз, что приводит нас к величинам t_n порядка 0.6-0.3 нс. Шаг интегрирования КГД уравнений в таком случае в размерных переменных составляет сотые или тысячные доли нормировочного времени, то есть может достигать 0.6-0.3 пс. Размерный шаг интегрирования $t_n \Delta t_m$ в этих расчетах зависит от формы потенциалов взаимодействия частиц газа и обычно выбирается в пределах 1 фс или менее.

На практике, конкретное время МД вычислений (число подсеточных временных шагов) зависит от качества стартового состояния микросистемы в ячейке (для алгоритмов класса 3) или в домене связанных ячеек (для алгоритмов класса 4). В предлагаемом подходе считается, что при отсутствии данных в БДМР на старте МД процедуры в каждой ячейке реализуется квазиравномерное пространственное распределение частиц по ячейке, соответствующее минимальной внутренней энергии их взаимодействия. При этом распределение модуля скорости газовых частиц соответствует локально-максвелловской функции распределения для трехмерного случая, а распределение направлений вектора скорости обеспечивает заданный суммарный импульс. Тогда общее время МД расчета пропорционально времени максвеллизации рассматриваемой газовой микросреды. Это время может быть

достаточно большим и превышать величину $t_n t_{n, \text{макс}}$ в несколько раз. Для устранения этой проблемы предлагается использовать заранее рассчитанные и помещенные в БДМР равновесные состояния микросистем, которые находятся ближе к желаемому состоянию. В рамках реализованного алгоритма время МД вычислений ограничивается величиной одного газодинамического шага $t_n \Delta t$.

В алгоритмах класса 3 переход к МД уровню осуществляется следующим образом. Сначала для каждой ячейки сетки C_m определяется микрообъем $V_{m, \text{мол}}$ (в общем случае не совпадает с контрольным объемом V_m), в котором следует произвести МД вычисления. Следуя соображениям, изложенным в [40], микрообъем $V_{m, \text{мол}}$ должен быть достаточно малым, чтобы вмещать разумное с вычислительной точки зрения число частиц, и достаточно большим, чтобы реализуемая в МД расчетах статистика была представительной. Было определено эмпирически, что размеры $V_{m, \text{мол}}$ для газовой среды должны быть связаны со средней длиной свободного пробега молекул газа λ_m , вычисленной для данной ячейки сетки. Будем считать, что вокруг центра ячейки C_m описан виртуальный куб (или шар) с длиной ребра (диаметром) не менее $0.5\lambda_m$. Фактически этот куб (шар) является предельным разрешением используемой пространственной сетки Ω_h . При достижении этого разрешения ячейка C_m и микрообъем $V_{m, \text{мол}}$ должны совпадать. Для более грубой сетки $V_{m, \text{мол}}$ будет существенно меньше ячейки C_m .

После определения микрообъема $V_{m, \text{мол}}$ происходит расчет количества частиц каждого сорта, находящихся в нем, а также определяются суммарный импульс и полная энергия, заключенные в данном объеме:

$$\begin{aligned} \bar{N}_{l,m} &= \frac{\hat{\rho}_{l,m} V_{m, \text{мол}}}{m_l}, \quad \bar{\mathbf{P}}_{l,m} = \hat{\rho}_{l,m} V_{m, \text{мол}} \hat{\mathbf{u}}_l, \quad \bar{E}_{l,m} = \hat{E}_{l,m} V_{m, \text{мол}}, \quad l = a, b; \\ \bar{N}_m &= \bar{N}_{a,m} + \bar{N}_{b,m}, \quad \bar{\mathbf{P}}_m = \bar{\mathbf{P}}_{a,m} + \bar{\mathbf{P}}_{b,m}, \quad \bar{E}_m = \bar{E}_{a,m} + \bar{E}_{b,m}, \quad m = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (34)$$

Заметим, что $\hat{E}_{l,m}$ – это плотности энергии, вычисленные при решении КГД уравнений. На основе формул (34) формируется микросистема газовых частиц по правилам, описанным выше. Фактически в последующих МД расчетах замораживаются величины $V_{m, \text{мол}}$, $\bar{N}_{l,m}$, $\bar{\mathbf{P}}_m$ и \bar{E}_m . Сами МД расчеты проводятся так же, как в алгоритмах класса 1. Результатом МД вычислений являются параметры обменных членов \mathbf{u}_l^* и E_l^* .

В алгоритмах класса 4 часть ячеек постоянно закреплена за молекулярными расчетами (производящимися параллельно с КГД вычислениями на каждом шаге по времени по формулам (30)) и не рассматривается на макроскопическом уровне. Как правило, это граничные ячейки сетки Ω_h . В некоторых случаях к ним добавляются внутренние ячейки

Ω_h , где происходят сильно неравновесные процессы, характеризующиеся большими градиентами газодинамических параметров. Обозначим множество всех таких ячеек Ω_B (КГД уравнения в ячейках множества Ω_B не используются). Остальные ячейки сетки обозначим Ω_V (в ячейках этого множества реализуются и КГД, и МД вычисления). В итоге сетка Ω_h представляется в виде объединения двух непересекающихся между собой множеств: $\Omega_h = \Omega_V \cup \Omega_B$.

Переход к МД вычислениям в ячейках множества Ω_B осуществляется один раз в начале общего расчета по формулам, аналогичным (34). При этом сначала ячейки из множества Ω_B объединяются в связные домены $\Omega_B^{(k)}$ ($k = 1, \dots, K_B$). Число доменов $\Omega_B^{(k)}$ обычно невелико и совпадает с количеством несвязанных друг с другом внешних и внутренних границ расчетной области Ω .

Формирование каждого домена $\Omega_B^{(k)}$ начинается с какой-либо конкретной ячейки и происходит до тех пор, пока не найдутся все ее соседи 1-го круга, 2-го и т.д., принадлежащие множеству Ω_B . В каждом построенном домене $\Omega_B^{(k)}$ система микрочастиц является единой. В этом случае конкретный микрообъем $V_{m, \text{мол}}$ входит в какой-либо домен $\Omega_B^{(k)}$ и отдельно не рассматривается.

В ячейках из множества Ω_V переход к МД вычислениям осуществляется на каждом шаге по времени и аналогичен соответствующему переходу в алгоритмах класса 3.

Вторая процедура связана с получением корректирующих значений основных газодинамических параметров. Она осуществляется на основе следующих уравнений:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m}^{**} &= \hat{\rho}_l \hat{u}_{l,k,m} + \Delta t v_{ll'} \hat{\rho}_{l,m} (\hat{u}_{l,k,m} - \hat{u}_{l,k,m}^*), \quad k = x, y, z, \\ \hat{E}_{l,m}^{**} &= \hat{E}_{l,m} + \Delta t v_{ll'} (\hat{E}_{l,m} - \hat{E}_{l,m}^*), \quad m = 1, \dots, M, \quad l = a, b, \quad l' = b, a. \end{aligned} \quad (35)$$

В алгоритмах класса 2 и 3 формулы (35) используются во всех ячейках сетки, в алгоритмах класса 4 – только в ячейках множества Ω_V .

Также в рамках второй процедуры определяются все параметры смеси. В алгоритмах класса 2 такие вычисления используют либо формулы (4)-(12), либо соответствующие значения из БДМР. В алгоритмах класса 3 и 4 большая часть этих формул заменяется результатами МД вычислений. Фактически в этом случае формулы (35) реализуются внутри МД блока.

Описанные выше алгоритмы классов 2-4 можно теперь компактно сформулировать в терминах алгоритма класса 4. Иллюстрация этого объединенного алгоритма показана на рис. 1.

Перед началом вычислений строится сетка Ω_h , разбивающаяся на множества объемных ячеек Ω_V и граничных ячеек Ω_B .

Затем на построенной сетке Ω_h в ячейках множества Ω_V задается равновесное состояние макросистемы (13); в ячейках множества Ω_B задается равновесное состояние микросистемы, соответствующее по макропараметрам условиям (13).



Рис. 1. Иллюстрация общего алгоритма классов 2-4.

Далее на каждом шаге по времени осуществляется следующая общая двухэтапная процедура. В ячейках множества Ω_V проводится двухуровневый расчет, предполагающий сначала решение КГД уравнений, а затем коррекцию полученных газодинамических характеристик с помощью МД вычислений. В ячейках множества Ω_B осуществляется одноуровневый двухэтапный расчет на основе уравнений молекулярной динамики.

На первом этапе в ячейках множества Ω_V по КГД уравнениям рассчитываются газодинамические переменные, которые передаются в блок МД для расчета обменных членов и пересчета параметров граничных условий на границах множеств Ω_V и Ω_B . В ячейках множества Ω_B производятся расчеты эволюции граничных микросистем, данные которых будут затем формировать параметры условий на границах множеств Ω_B и Ω_V .

На втором этапе в ячейках множеств Ω_V и Ω_B производятся либо аппроксимационные вычисления, либо прямые расчеты, которые позволяют получить все газодинамические переменные на макроуровне с учетом всех

физических процессов, в том числе газодинамические параметры компонент и смеси в целом.

Завершается шаг вычислений проверкой критерия останова, который состоит в определении относительных временных производных от массовой плотности и плотности энергии компонент смеси:

$$\frac{1}{\Delta t} \max_{l=a,b} \left(\left\| \frac{\hat{\rho}_l^* - \rho_l}{\rho_l} \right\|_{C(\Omega_h)}, \left\| \frac{\hat{E}_l^* - E_l}{E_l} \right\|_{C(\Omega_h)} \right) \leq \varepsilon_l. \quad (36)$$

Здесь Δt – безразмерный шаг интегрирования КГД уравнений, ε_l – заданная точность из диапазона значений $5 \cdot 10^{-3} \div 10^{-6}$, $\|\cdot\|_{C(\Omega_h)}$ – равномерная сеточная норма.

3.7. Параллельная реализация алгоритмов

Параллельная реализация алгоритмов классов 1-4 предполагает использование кластера (суперкомпьютера) с центральной или гибридной архитектурой, имеющего на каждом узле несколько многоядерных центральных процессоров (ЦПУ), а также несколько векторных или графических процессоров (ВПУ или ГПУ). Распараллеливание алгоритмов производится на принципах геометрического параллелизма и деления областей и использует алгоритмы динамической балансировки загрузки вычислителей.

Основной газодинамический расчет производится по дискретным КГД уравнениям на сетке, распределенной между узлами кластера с помощью техники "domain decomposition" [66]. В случае использования декартовой сетки при распараллеливании используется решетка вычислителей размерности, соответствующей пространственной размерности задачи. В случае использования нерегулярной гибридной сетки для разбиения ее графа используются пакеты программ METIS [67], ParMETIS [68]. Внутри каждого узла вычислительной системы ячейки сетки распределяются между потоками ЦПУ по тем же алгоритмам, что и между узлами. КГД вычисления являются сильно связанными и потому производятся на ЦПУ. Подробнее эти подходы рассматриваются в [40].

Подсеточные МД вычисления возлагаются на ВПУ или ГПУ при их наличии. В противном случае эти расчеты проводятся потоками ЦПУ. Распараллеливание МД вычислений производится путем разбиения всего множества частиц, относящихся к одной ячейке сетки, на группы одинаковой мощности (подробно эти расчеты представлялись в [28]). В итоге каждый блок трэдов ВПУ или ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки.

Программная реализация алгоритмов всех классов выполнена по гибридной технологии, представленной в [69]. Эта технология имеет иерархическую структуру и использует интерфейсы MPI [70], OpenMP [71] и CUDA [72].

Тестирование разработанного параллельного инструментария проводилось в [28, 40] и других работах. Оно подтвердило достаточно высокую эффективность параллельных расчетов на ЦПУ при использовании сеток размером порядка 1-10 млн. ячеек и более. При использовании гибридных схем распараллеливания для реализаций ЦПУ+ВПУ или ЦПУ+ГПУ на малых конфигурациях скорость вычислений оказывается выше, однако эффективность при этом падает. Ниже будет изучен вопрос о масштабируемости предложенных параллельных алгоритмов, который удобно рассмотреть при описании трехмерных расчетов для выбранной модельной задачи.

4. Результаты моделирования

В данном разделе рассмотрим результаты расчетов течения азот-водородной смеси после выхода из сопла в свободное пространство. Данная задача была выбрана в связи с наличием экспериментальных данных, представленных в работе [73]. Геометрия выбранной нами модельной постановки задачи практически совпадает с описанной в [73] (см. Рис. 2).

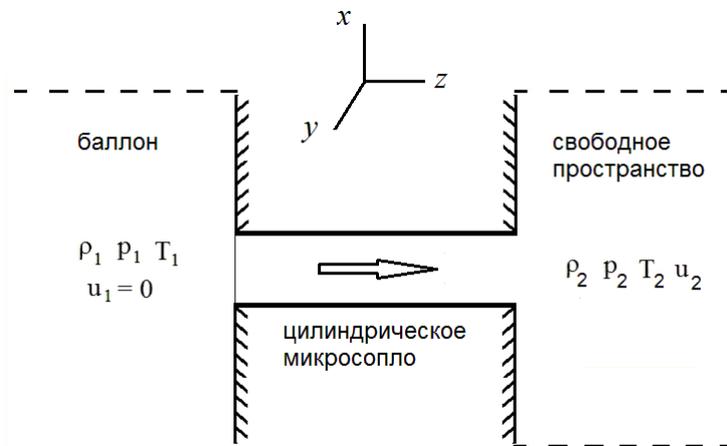


Рис. 2. Геометрия прикладной задачи.

Цилиндрическое микросопло имеет диаметр $D_0 \approx 310$ мкм, длину $L_0 = 6D_0 \approx 1860$ мкм. Оно соединяет баллон с азот-водородной смесью и открытое пространство вакуумной камеры, заполненной изначально той же сильно разреженной смесью. В начальный момент смесь покоится: $u_1 = u_2 = 0$. При этом в баллоне она находится при стандартных нормальных условиях: $T_1 = 295.15$ К, $p_1 = 101325$ Па; в сопле и вакуумной камере она находится при той же температуре, но при более низких давлениях: $T_2 = 295.15$ К, $p_2 = \delta_0 p_1$,

$\delta_0 \sim 10^{-3} \div 10^{-5}$ – параметр откачки. Сопло слева перекрыто перегородкой, которая в начале расчета открывается мгновенно. Внутренняя поверхность сопла считается идеально гладкой и теплоизолированной. Основным параметром в задаче является мольная доля азота в смеси X_b (здесь и далее индексом "a" помечен водород, индексом "b" – азот).

В наших предыдущих работах [38, 39] данная задача была рассмотрена в усеченном виде. Во-первых, вместо полной геометрии рассматривалась только вакуумная камера. Во-вторых, не учитывались форма и реальные размеры сопла. В-третьих, по некоторым параметрам газ считался идеальным (в частности, не учитывался фактор сжимаемости газов). В данной работе эти упрощения были устранены. При этом, также, как в [73], были рассмотрены 4 основных варианта расчета, указанные в таблице 1.

Таблица 1

Параметры вариантов расчетов

№№	Формула	$X_b(N_2)$	δ_0
1	N_2	1	0.00008
2	$2N_2 + H_2$	0.67	0.00010
3	$N_2 + 2H_2$	0.33	0.00013
4	H_2	0	0.00035

Размеры расчетной области были выбраны следующими. Диаметры расчетных частей в баллоне и в вакуумной камере были равны $D_1 = D_2 = 6D_0$. Длина расчетной части в баллоне была равна $L_1 = 10L_0$; длина расчетной части в вакуумной камере была равна $L_2 = 50L_0$. Наряду с истинными размерами исследуемой системы были рассмотрены и существенно меньшие. Для этого величина D_0 уменьшалась максимально в 50 раз до 6.2 мкм. Результаты проведенных численных экспериментов представлены в следующих пунктах.

4.1. Анализ и верификация алгоритмов на микроуровне

Перед анализом численного решения выбранной прикладной задачи были проведены предварительные верификационные расчеты. Прежде всего они касались анализа качества алгоритмов на микроуровне. Такие исследования уже проводились частично в работах [30, 32]. В них было показано, что реализованный МД подход дает хорошее приближение по таким характеристикам, как фактор сжимаемости, коэффициенты диффузии, вязкости,

теплопроводности, теплоемкость при постоянном объеме. В рамках данной работы это исследование было продолжено на примере чистого азота.

В соответствии с концепцией выделения и расчета базовых зависимостей – Z_{N_2} , c_{V,N_2} , c_{p,N_2} , μ_{N_2} , $\mu_{b,N_2} = \mu_{N_2} \zeta_{N_2}$, κ_{N_2} , D_{N_2} – были проведены серии МД вычислений этих характеристик в диапазоне температур от 80 до 400 К при давлении $p_0 = 101325 \text{ Па}$. Полученные данные были аппроксимированы рядом зависимостей и приведены на рис. 3-8 в сравнении с известными экспериментальными и теоретическими данными из [74-82]. Для удобства анализа коэффициенты μ_{N_2} , μ_{b,N_2} , κ_{N_2} , D_{N_2} и время релаксации τ_{N_2} нормированы на их значения $\mu_{N_2}^0 = 1.667 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$, $\mu_{b,N_2}^0 = 1.288 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$, $\kappa_{N_2}^0 = 2.419 \cdot 10^{-2} \text{ Вт} / \text{м} \cdot \text{К}$, $D_{N_2}^0 = 1.850 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2 / \text{с}$, $\tau_{N_2}^0 = 2.283 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ при температуре $T_0 = 273.15 \text{ К}$.

Как видно из рисунков, построенные аппроксимации в целом хорошо согласуются с данными указанных выше источников. Исключение составляют зависимости удельных теплоемкостей в области низких температур (менее 100 К), где азот постепенно переходит в жидкую фазу. Для этой зоны следует учесть зависимость теплоемкостей c_{V,N_2} и c_{p,N_2} от плотности (давления). Также имеется некоторое расхождение в кривых динамической и объемной вязкости, которое наблюдается и в литературе в связи со сложностью определения этих величин в теории и в экспериментах. Тем не менее, полученные данные были использованы ниже при расчетах выбранных модельных задач.

На рис. 8 представлены зависимости чисел Прандтля, Шмидта и нормированного времени релаксации. Они иллюстрируют необходимые для реализации КГД расчеты зависимости от температуры. Нормировка времени релаксации ($\tau_{N_2}^0 = 2.283 \cdot 10^{-10} \text{ с}$) подтверждает тот факт, что КГД система содержит лишь малые поправки к уравнениям Навье-Стокса, которые играют существенную роль при расчетах в области гиперзвука и больших числах Кнудсена.

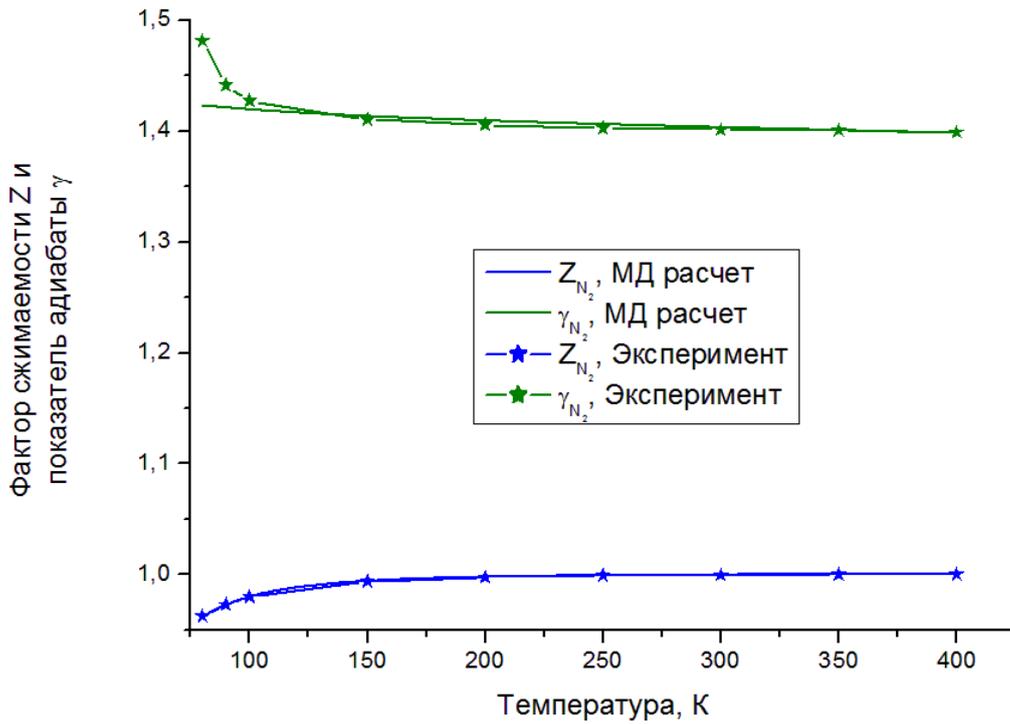


Рис. 3. Фактор сжимаемости Z_{N_2} и показатель адиабаты γ_{N_2} азота в зависимости от температуры при $p_0 = 101325 \text{ Па}$.

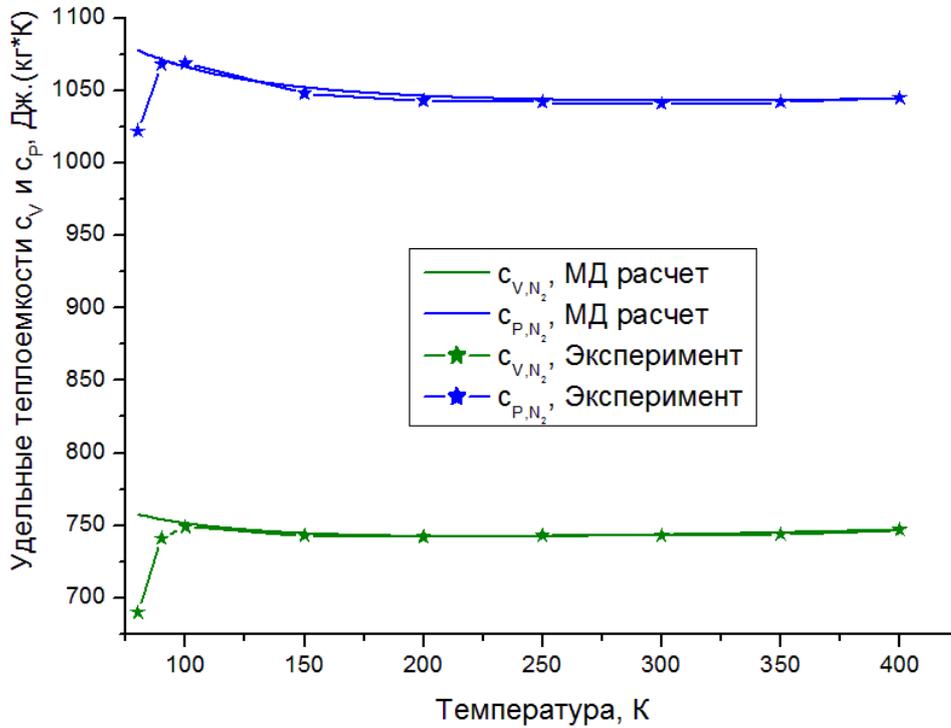


Рис. 4. Зависимости удельных теплоемкостей азота c_{v,N_2} и c_{p,N_2} от температуры при $p_0 = 101325 \text{ Па}$.

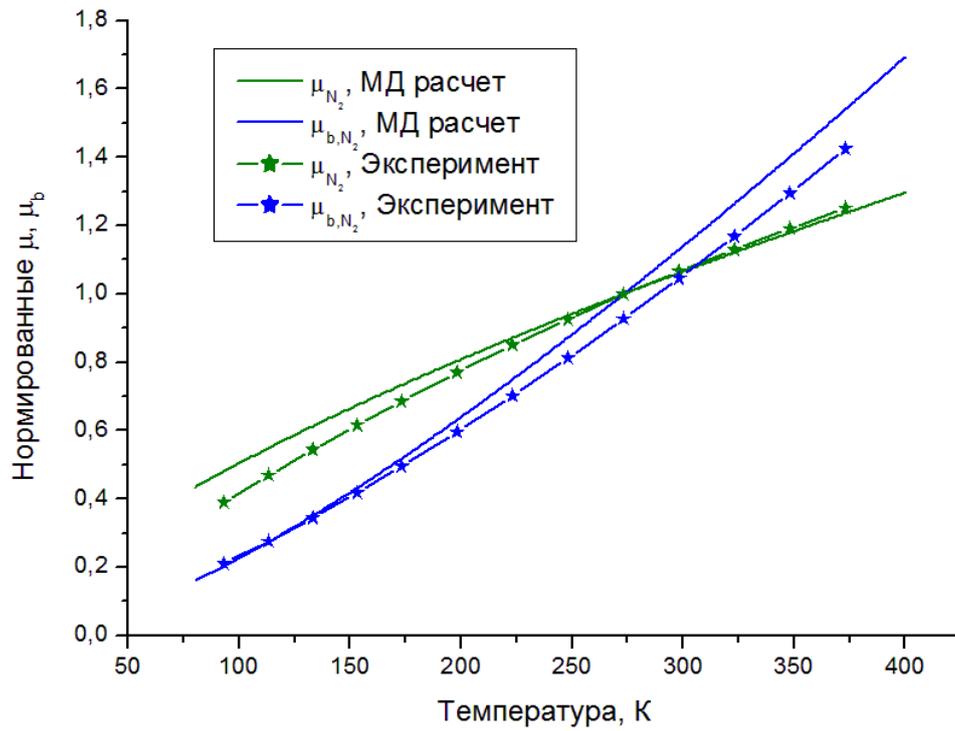


Рис. 5. Коэффициенты нормированной динамической и относительной объемной вязкости азота $\mu_{N_2} / \mu_{N_2}^0$ и $\mu_{b,N_2} / \mu_{b,N_2}^0$ в зависимости от температуры.

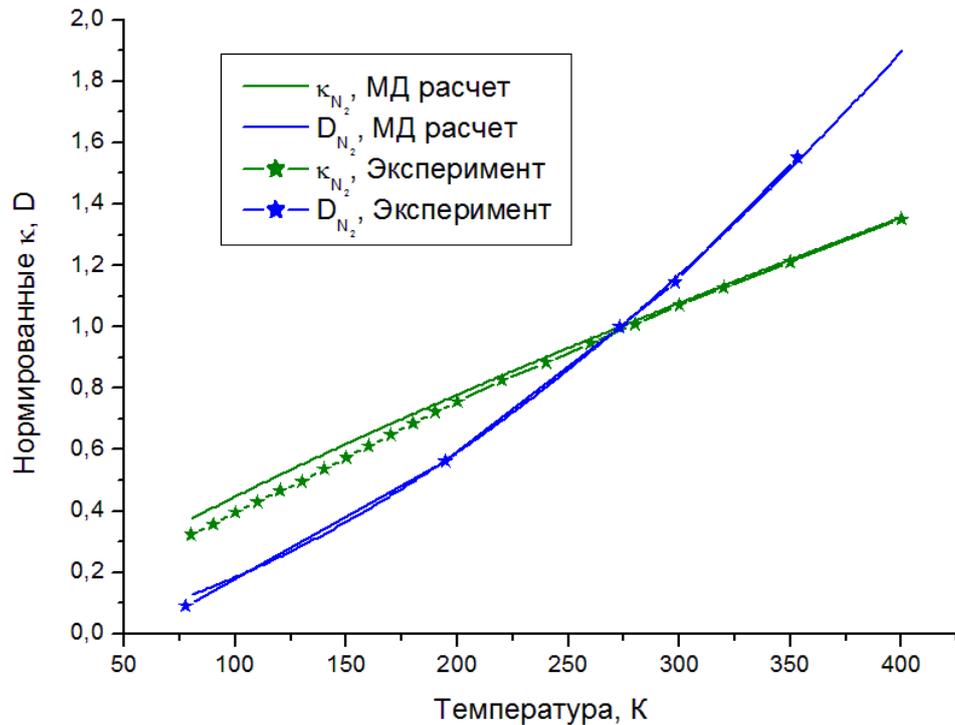


Рис. 6. Нормированные коэффициенты теплопроводности и диффузии азота $\kappa_{N_2} / \kappa_{N_2}^0$ и $D_{N_2} / D_{N_2}^0$ в зависимости от температуры.

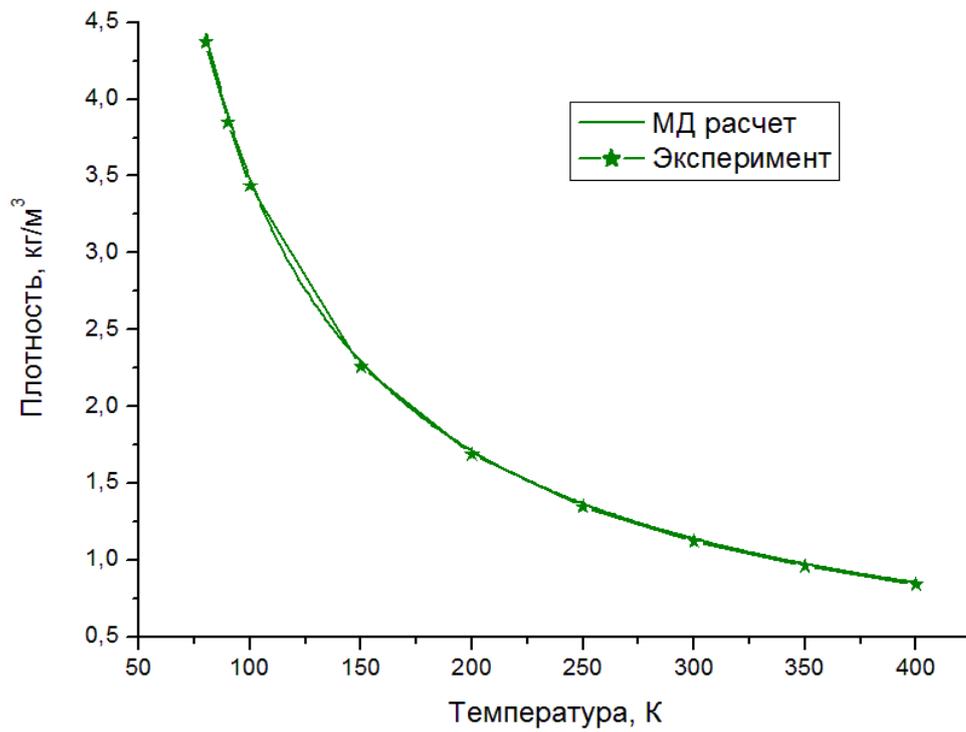


Рис. 7. Зависимость плотности азота ρ_{N_2} от температуры, рассчитанная по уравнению состояния при $p = p_0$.

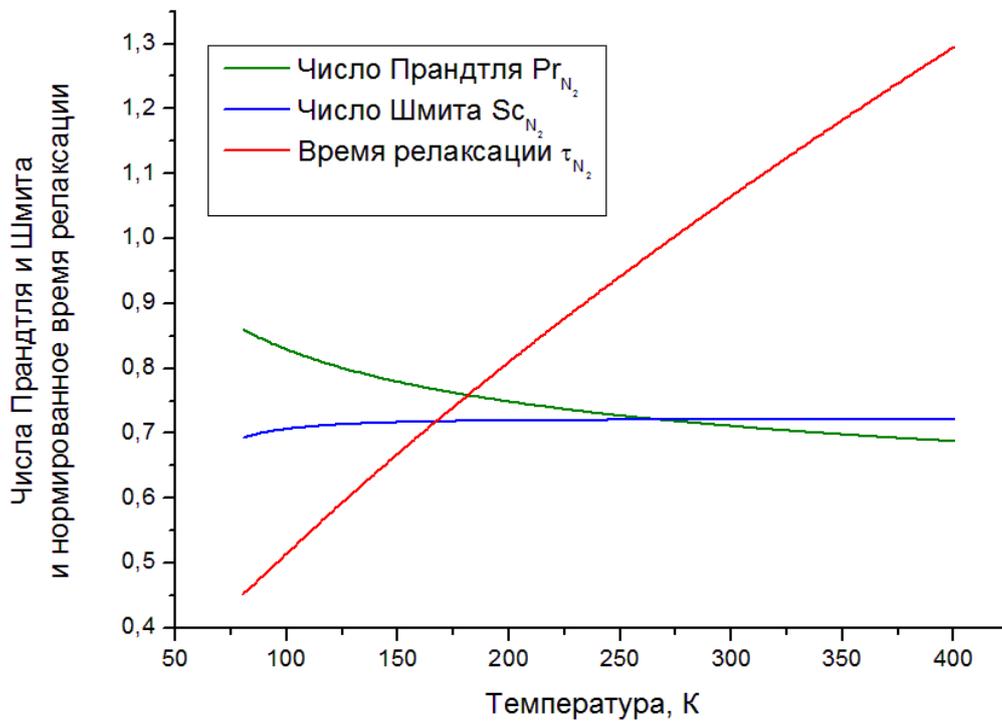


Рис. 8. Зависимость чисел Прандтля и Шмидта Pr_{N_2} и Sc_{N_2} и нормированного времени релаксации $\tau_{N_2} / \tau_{N_2}^0$ от температуры.

4.2. Анализ и верификация алгоритмов на макроуровне

Для анализа алгоритмов классов 2, 3 и 4 прежде всего был исследован первый из них, характеризующий решение задач на макроуровне. Для этого было проведено несколько тестов.

Первый одномерный тест был связан с одномерным расчетом задачи о распаде сильного разрыва в комбинации с имитацией испускания струи газа из баллона с высоким давлением. Для этого была выбрана исходная геометрия задачи с длиной расчетной области $L = L_1 + L_0 + L_2 = 61L_0 = 366D_0$. При обезразмеривании задачи в качестве x_n выбирался диаметр сопла D_0 , в качестве нормировки скорости u_n выбиралась величина $a_{N_2}^* = 12 \cdot a_{N_2}$, где $a_{N_2} = a_{N_2}(T_0, p_0) \approx 350.58$ мкм/мкс – скорость звука в азоте при нормальных условиях. Расчеты проводились на последовательности сеток $\bar{\omega}_x^{(k)} = \{x_i^{(k)} = -50 + h_x^{(k)}, i = 0, \dots, N_x^{(k)}\}$, $h_x^{(k)} = L_x / N_x^{(k)}$, $L_x = L / x_n$, $N_x^{(k)} = 366 \cdot 2^{(k-1)}$, $k = 1, 2, 3, 4$ (здесь за ноль по координате x выбран левый край микросопла). Расчеты проводились на равномерной сетке по времени с шагом $\Delta t = 10^{-3} (h_x^{(k)})^2$. Искусственная вязкость была равна $\nu = \frac{3}{2} \cdot h_x^{(k)} + \frac{1}{8} \cdot (h_x^{(k)})^4$. Как и в [83], первая адаптивная искусственная вязкость вводилась только в зоне скачка газодинамических параметров и была отлична от нуля лишь на первой стадии расчета. Расчеты проводились до установления с точностью $\varepsilon_t = 10^{-3}$.

Результаты расчетов, иллюстрирующие сходимость по сетке, представлены на рис. 9-12. Профили плотности, давления, температуры и скорости показаны на момент физического времени $t = 7.37$ мкс, когда разрыв сильно расплылся, но еще не достиг левого конца расчетной области. Анализ приведенных данных показывает, что существенно изменяются в процессе эволюции решения лишь профили скорости и температуры, поскольку внутренняя энергия используется на первоначальный разгон газа. При этом через всю область проходит тепловая ударная волна. Параметры тепловой волны, безусловно, зависят от качества используемой разностной схемы и сеточного разрешения. Как показывают рис. 9-12, примененная схема с искусственной вязкостью является монотонной по плотности и давлению. Разностная схема для уравнения энергии таким свойством не обладает, однако итоговый результат правильно реагирует на сгущение сетки. В итоге увеличение разрешения дает все более резкие профили плотности и давления и уменьшает колебания температуры до разумного уровня.

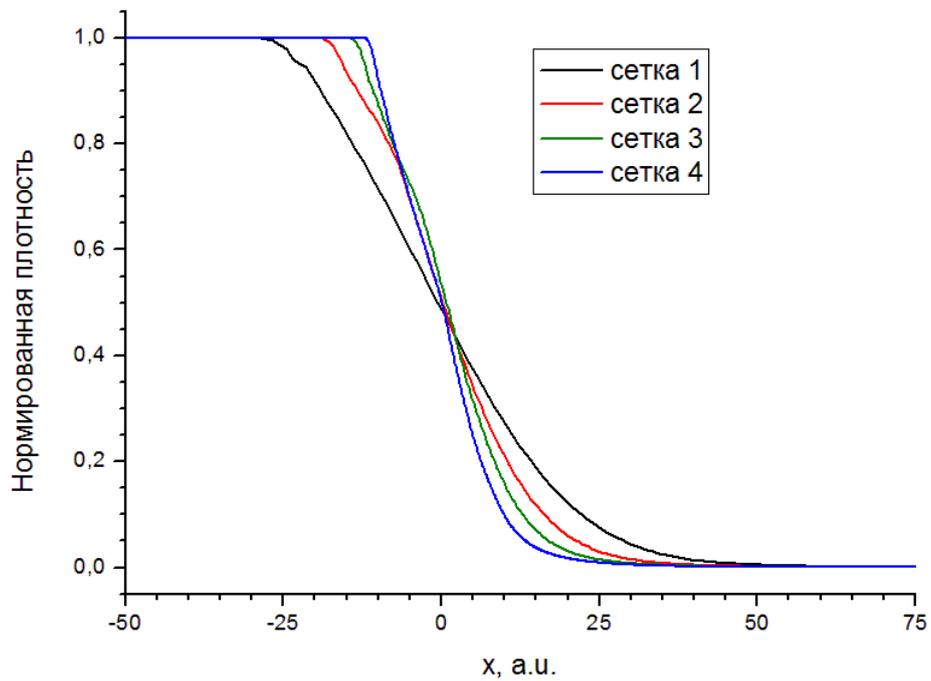


Рис. 9. Профили плотности на момент времени $t = 7.37$ мкс в расчетах на последовательности сеток.

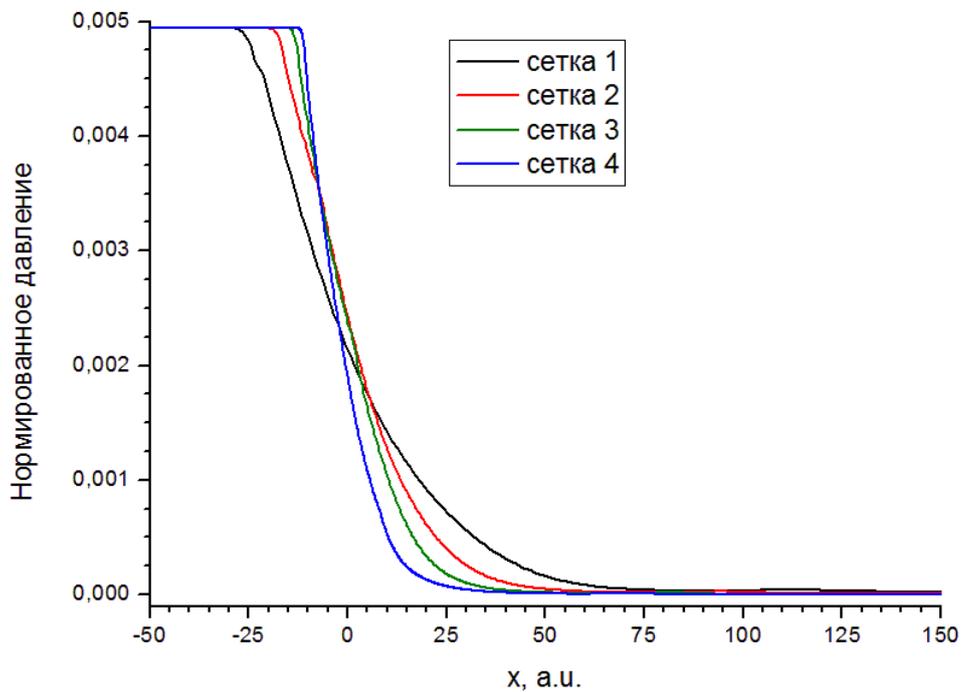


Рис. 10. Профили давления на момент времени $t = 7.37$ мкс в расчетах на последовательности сеток.

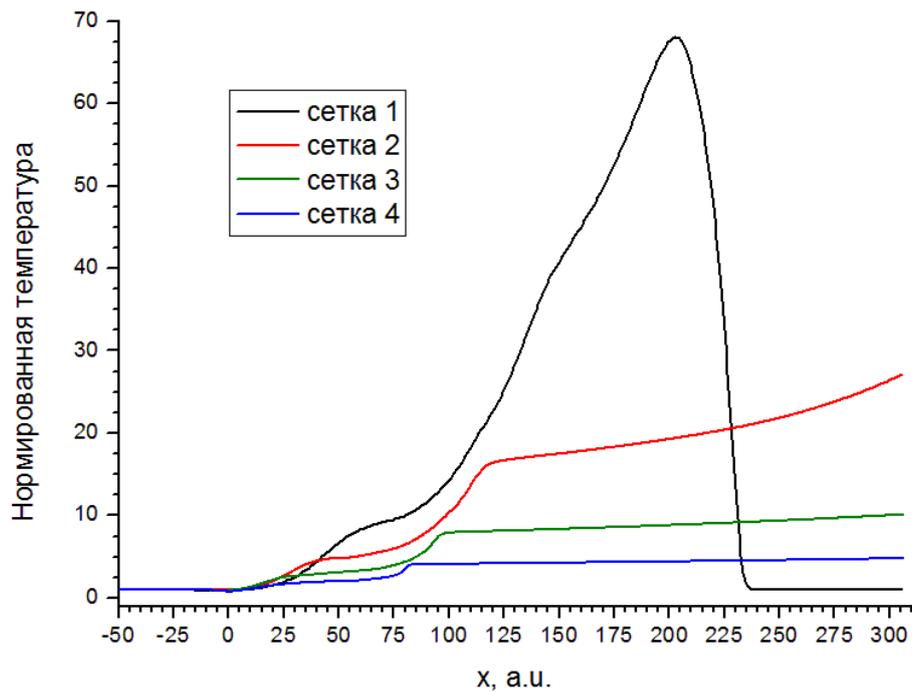


Рис. 11. Профили температуры на момент времени $t = 7.37 \mu\text{с}$ в расчетах на последовательности сеток.

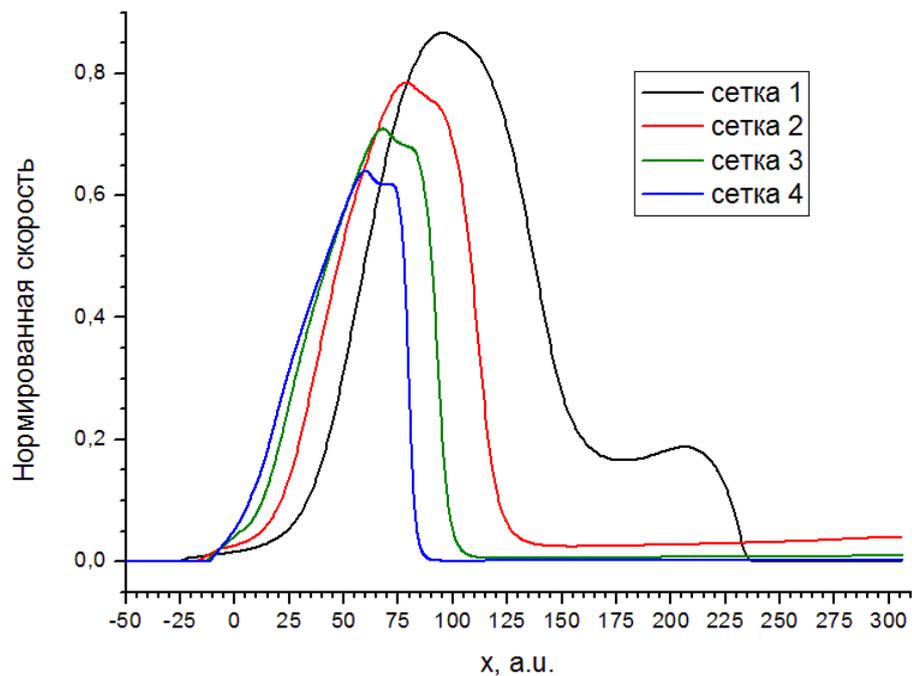


Рис. 12. Профили скорости на момент времени $t = 7.37 \mu\text{с}$ в расчетах на последовательности сеток.

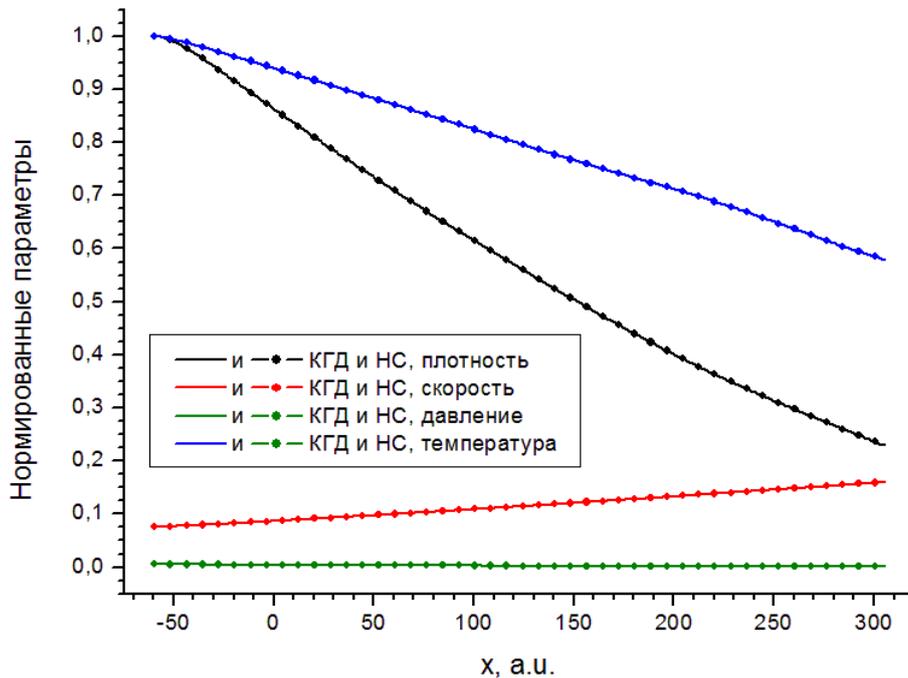


Рис. 13. Стационарные профили плотности, скорости, давления и температуры, рассчитанные на сетке 2.

Приведенные расчеты также показывают, что адаптивная искусственная вязкость ν_1 , имеющая первый порядок по шагу сетки, в совокупности с измельчением сетки позволяет устранить нефизичные скачки температуры и скорости. Если данный алгоритм реализовать на адаптивной к зоне разрыва сетке, то измельчение последней не будет приводить к существенным вычислительным затратам, но позволит существенно улучшить точность расчетов. К тому же при выходе решения на регулярный или стационарный режим адаптивная искусственная вязкость отключается, а суммарная искусственная вязкость выходит на вязкость ν_2 , имеющую порядок малости, меньший, чем погрешность аппроксимации исходной схемы.

На рис. 13 показаны стационарные профили плотности, скорости, давления и температуры, полученные на сетке 2. Анализ полученных данных показал, что стационарные профили решения слабо зависят от шага сетки. В частности, если стационарные профили для сеток 1 и 2 немного отличаются, то для сеток 2, 3 и 4 эти отличия практически не видны.

Второй тест касался сравнения решений, получаемых в рамках разработанного алгоритма по КГД уравнениям (функция τ отлична от нуля в уравнениях (1)-(3)) и по уравнениям Навье-Стокса (функция $\tau \equiv 0$ в уравнениях (1)-(3)). Сравнение производилось как для стартовой стадии расчета, так и в стационаре.

В таблице 2 приведены отличия указанных выше профилей плотности, давления, температуры и скорости от их аналогов, полученных на основе системы уравнений Навье-Стокса. Как видно из таблицы, максимальные

отличия видны на профилях температуры и скорости. В то же время при сгущении сетки эти отличия уменьшаются.

При установлении стационарных профилей отличия практически исчезают. В подтверждение этому на рис. 13 представлены кружками профили, полученные по уравнениям Навье-Стокса на сетке 2. Как видно из рисунка, профили, полученные по уравнениям Навье-Стокса, мало отличаются от профилей, полученных по КГД уравнениям.

Таблица 2

**Нормы разницы плотности, давления, температуры
и скорости, полученные при решении модельной задачи
по КГД уравнениям и по уравнениям Навье-Стокса
на последовательности сеток в момент времени 7.37 мкс**

№ сетки	$\ \rho_{QGD} - \rho_{NS}\ _C$	$\ P_{QGD} - P_{NS}\ _C$	$\ T_{QGD} - T_{NS}\ _C$	$\ u_{QGD} - u_{NS}\ _C$
1	1.489065e-04	3.610558e-05	6.697678e+01	3.416233e-01
2	3.325793e-04	4.858511e-05	2.606323e+01	6.628984e-01
3	5.433237e-04	4.312629e-05	2.138386e+01	7.265100e-01
4	9.930080e-04	3.506289e-05	1.724653e+01	6.530866e-01

4.3. Анализ и верификация алгоритмов смешанного типа

Дополнительное тестирование было связано с проведением расчетов в условиях двух- и трехмерной реальной геометрии. Подобные расчеты проводились для чистых компонент и для смеси в работах [38, 39]. Однако там расчеты проводились только в области вакуумной камеры. Здесь рассмотрим результаты двумерных расчетов, выполненных по алгоритмам класса 2 в области, содержащей часть баллона, микросопло и часть вакуумной камеры, как показано на рис. 2. Параметры геометрии были такие же, как в эксперименте [73]: $L = L_1 + L_0 + L_2 = 61L_0 = 366D_0$ (общая длина) и $D_1 = D_2 = 6D_0$ (общий диаметр). Параметр нормировки x_n был равен $0.5D_0$. В безразмерных переменных длина области составила $L_x = 732$, диаметр $D_y = D_z = 12$.

В двумерном случае расчеты проводились в прямоугольнике $L_x \times D_y$ на декартовой сетке с параметрами $h_x^{(k)} = h_y^{(k)} = 2^{-k}$, $N_x^{(k)} = 732 \cdot 2^k$, $N_y^{(k)} = 12 \cdot 2^k$, $N_C^{(k)} = N_x^{(k)} \cdot N_y^{(k)}$, $k = 1 \div 6$. В трехмерном случае расчеты проводились в цилиндре квадратного сечения с общими габаритами $L_x \times D_y \times D_z$ на декартовой

сетке с параметрами $h_x^{(k)} = h_y^{(k)} = h_z^{(k)} = 2^{-k}$, $N_x^{(k)} = 732 \cdot 2^k$, $N_y^{(k)} = N_z^{(k)} = 12 \cdot 2^k$, $N_C^{(k)} = N_x^{(k)} \cdot N_y^{(k)} \cdot N_z^{(k)}$, $k = 1 \div 4$. Параметры сеток приведены в таблице 3. Там же приведены значения физических объемов и числа частиц азота в ячейке сетки при нормальных условиях.

Таблица 3

Параметры декартовых сеток

№ сетки	d^*	Число расчетных ячеек	Число ячеек, граничащих с металлом	Объем трехмерной ячейки сетки, мкм^3	Число молекул азота в 3D-ячейке** сетки при н.у.	Число молекул азота в 3D-ячейке** сетки при $p=0.00008$
2.1	2	34656	92	465484.38	1.16e+13	9.26e+8
2.2	2	138624	180	58185.55	1.45e+12	1.16e+8
2.3	2	554496	356	7273.19	1.81e+11	1.45e+7
2.4	2	2217984	708	909.15	2.26e+10	1.81e+6
2.5	2	8871936	1412	113.64	2.83e+9	2.26e+5
2.6	2	35487744	2820	14.21	3.53e+8	28258
3.1	3	829824	1432	465484.38	1.16e+13	9.26e+8
3.2	3	6638592	5880	58185.55	1.45e+12	1.16e+8
3.3	3	53108736	23800	7273.19	1.81e+11	1.45e+7
3.4	3	424869888	95736	909.15	2.26e+10	1.81e+6

*) Здесь d – размерность пространства.

***) На молекулярном уровне всегда используются трехмерные ячейки.

Вначале представим, как выглядит решение с учетом баллона и сопла. На рис. 14 представлены двумерные распределения плотности, давления, температуры, модуля скорости и концентрации молекул азота на начальном этапе развития процесса в момент времени $t = 0.055 \text{ мкс}$, полученные на сетке 2.2. Данный момент времени соответствует прохождению тепловой волны через середину микросопла.

Динамику процесса проследим на примере распределения концентрации молекул азота. На рис. 15, 16 показаны распределения нормированной на величину 10^{24} м^{-3} концентрации в различные моменты времени. Анализ

приведенных данных показывает, что прохождение газа в микросопле реализуется симметричным образом и соответствует физике процесса.

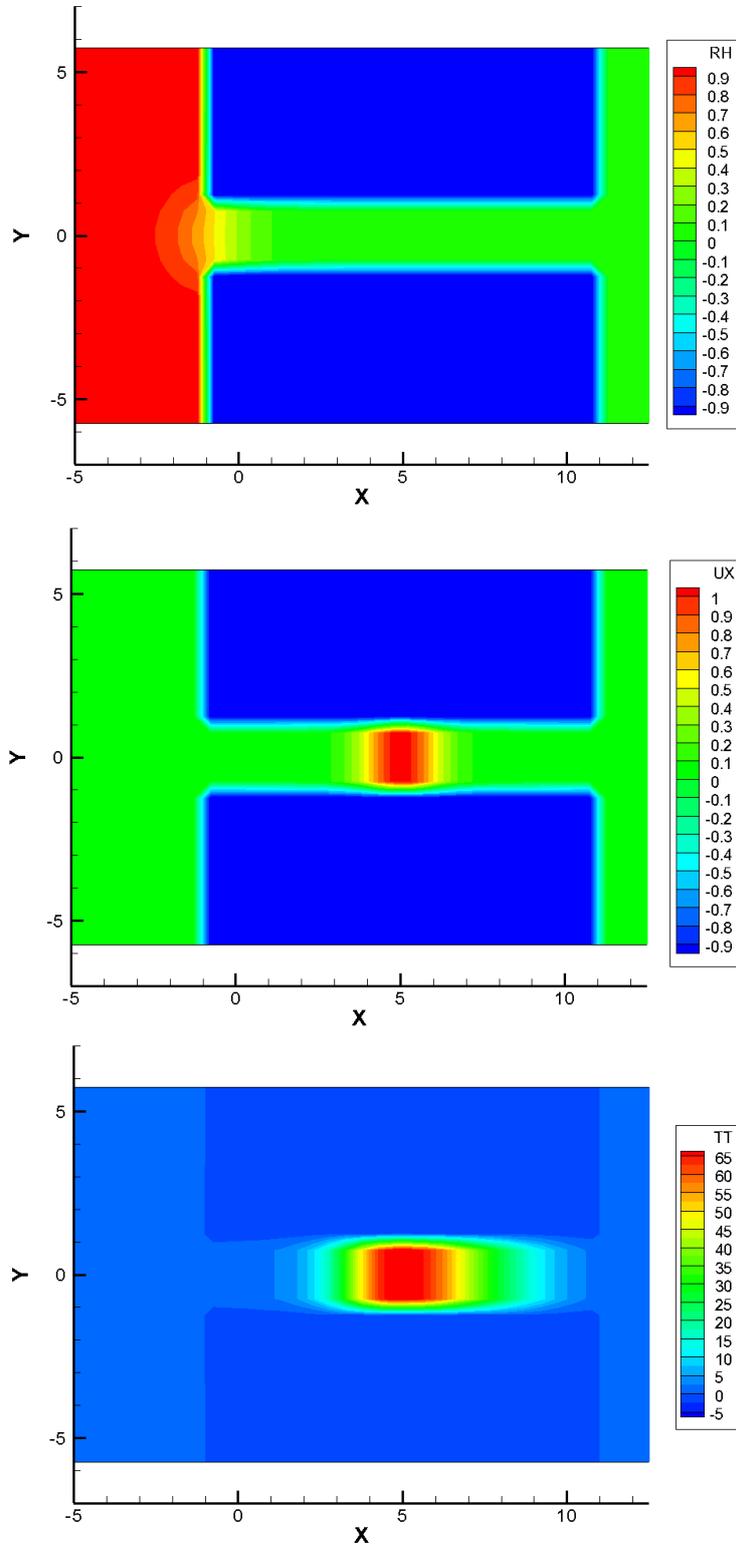


Рис. 14. Распределения плотности (сверху), продольной скорости (в середине) и температуры (внизу) в момент времени $t = 0.055 \mu\text{с}$, рассчитанные на сетке 2.2.

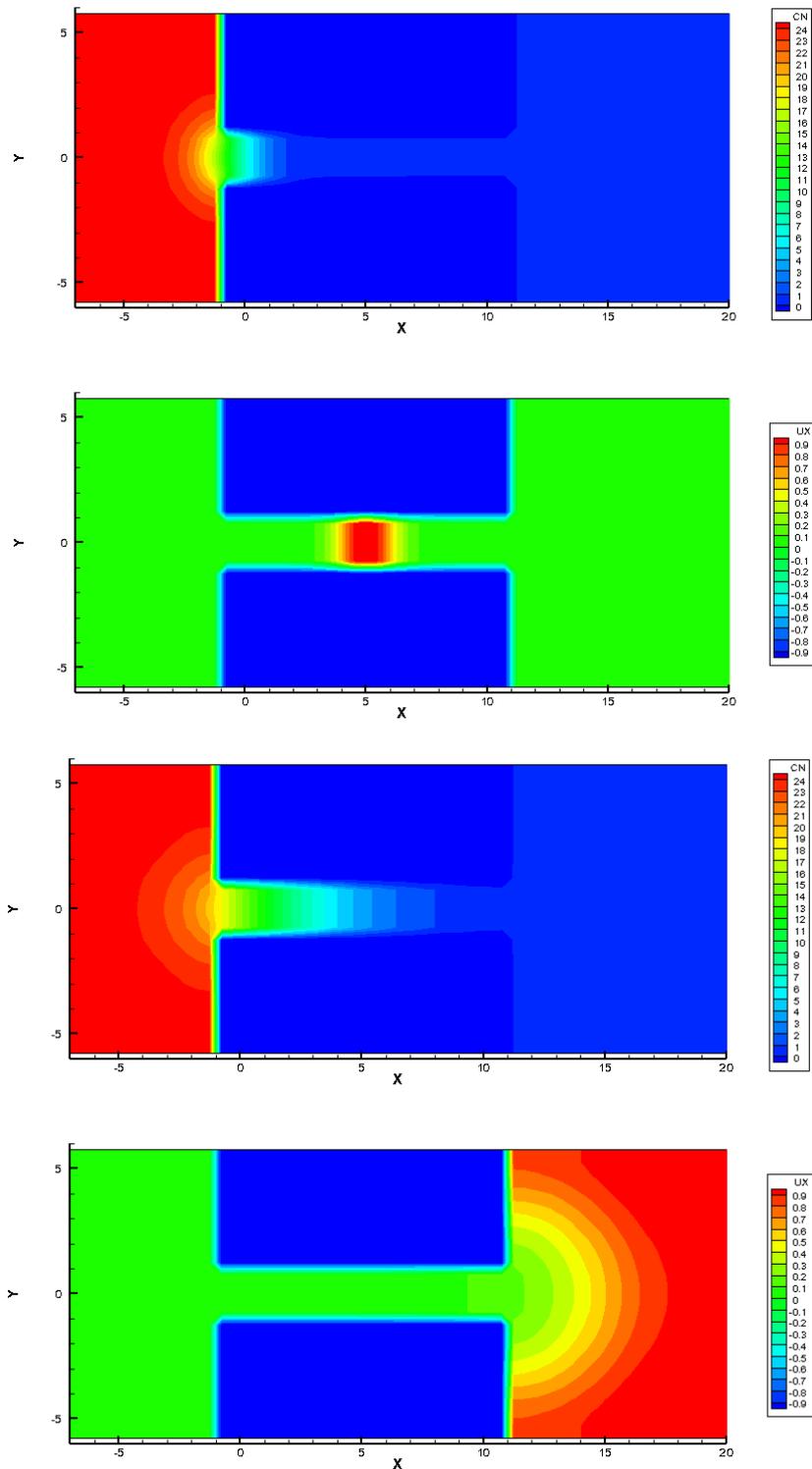


Рис. 15. Распределения нормированной концентрации молекул азота и продольной компоненты скорости в моменты времени $t = 0.0553, 0.553 \mu\text{с}$, рассчитанные на сетке 2.2. Рисунки располагаются соответственно сверху вниз; сначала показана концентрация, затем продольная скорость.

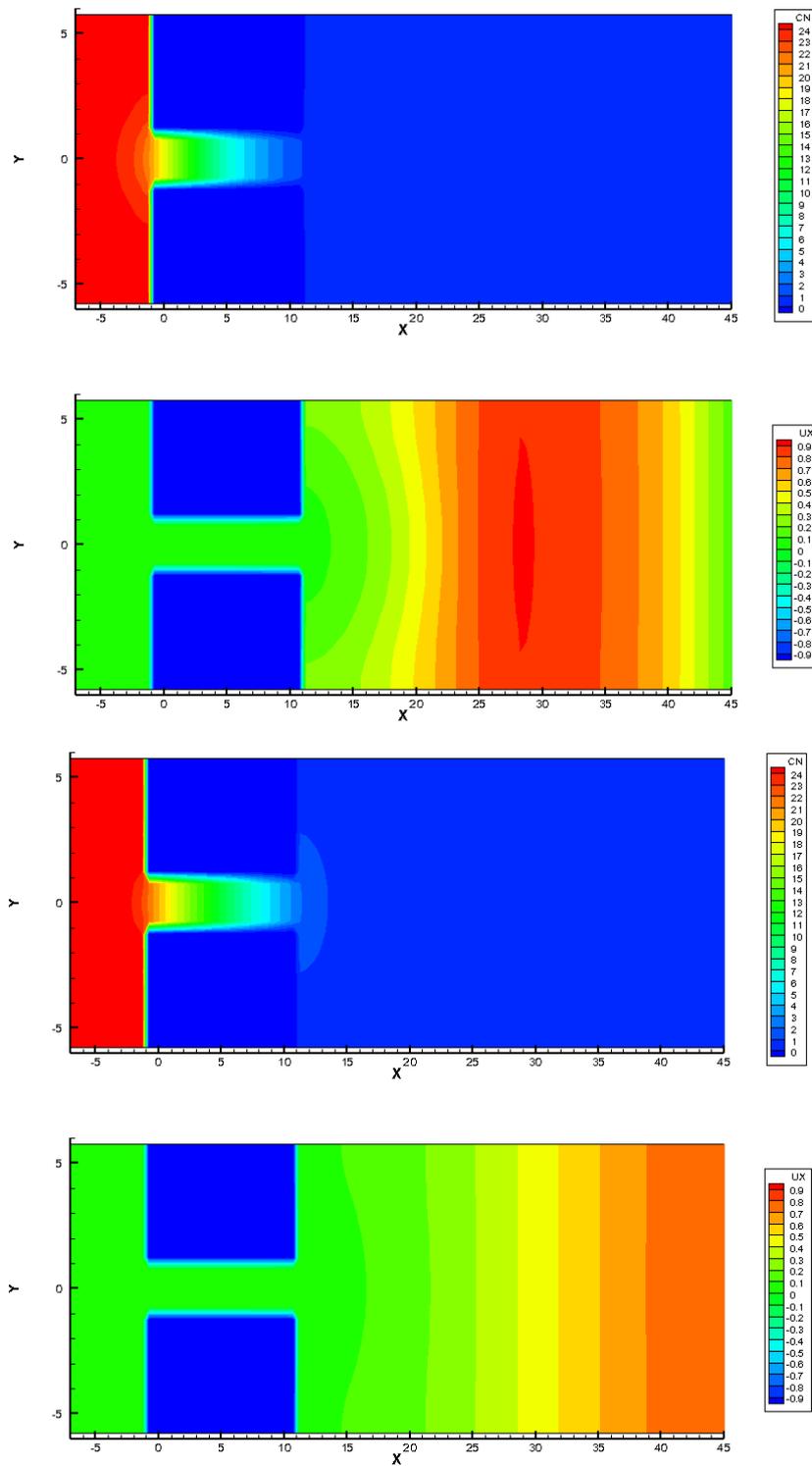


Рис. 16. Распределения нормированной концентрации молекул азота и продольной компоненты скорости в моменты времени $t = 1.106, 2.211 \mu\text{s}$, рассчитанные на сетке 2.2. Рисунки располагаются соответственно сверху вниз; сначала показана концентрация, затем продольная скорость.

По алгоритмам класса 2 были проведены и трехмерные расчеты на указанных выше сетках. Они подтвердили полученные в двумерном случае результаты, а именно динамику распределений основных газодинамических параметров. Отличие трехмерных расчетов от двумерных выразилось в разнице времен формирования конкретных распределений. В частности, отличались примерно в 1.3 раза времена выхода тепловой волны из микросопла. По-видимому, это связано с выбранной квадратной формой микросопла.

Обсудим далее данные двухмерных расчетов смеси азота и водорода, выполненных на основе алгоритмов класса 2 и использующие полученные методом молекулярной динамики материальные коэффициенты вязкости, теплопроводности, диффузии, сжимаемости и теплоемкости. Расчеты проводились на сетках 2.2-2.4. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными работы [73]. На рис. 17, 18 показаны профили нормированной концентрации компонент смеси на оси вакуумной камеры для четырех вариантов параметров. Как видно из рисунка, основное поведение кривых совпадает с данными эксперимента. Таким образом, с помощью разработанного подхода возможно получение информации о реальных физических процессах.

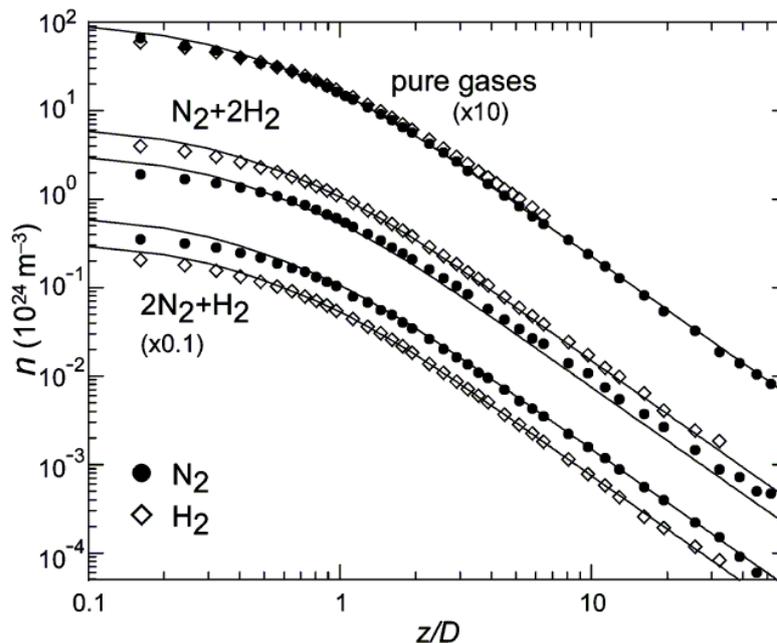


Рис. 17. Установившиеся профили нормированной концентрации смеси, полученные в натурном эксперименте [73].

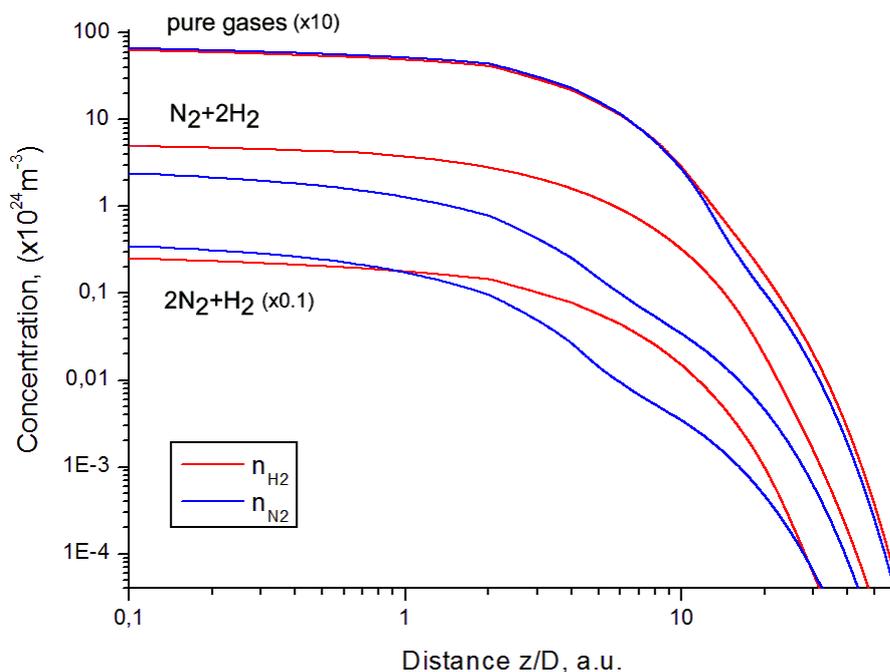


Рис. 18. Установившиеся профили нормированной концентрации смеси, полученные при численном расчете.

В заключение пункта кратко рассмотрим параллельные версии алгоритмов класса 2, 3. Для этого отметим, что для алгоритмов класса 2 использование вычислительных систем с центральной или гибридной архитектурой не столь принципиально, поскольку алгоритмы класса 2 являются однородными и связаны с одноуровневыми расчетами. В предыдущих работах, однако, нами показано, что в этом случае наиболее эффективной архитектурой является центральная.

В алгоритмах класса 3 применение гибридной архитектуры принципиально, поскольку это позволяет существенно ускорить вычисления на молекулярном уровне. Безусловно, ситуация зависит и от конкретной расчетной конфигурации. Обсудим это на примере двух- и трехмерных расчетов, параметры сеток в которых указаны в таблице 3. Из таблицы видно, что число ячеек, граничащих с металлом, невелико и возможность проведения в них прямых вычислений по алгоритмам молекулярной динамики зависит от количества частиц, используемых на молекулярном уровне. В [40] предложена следующая стратегия. Если число частиц в ячейке велико (см. табл. 3), а рассчитываемый процесс позволяет проводить МД вычисления в ячейках независимо (выполнено условие локальности), то вместо полного ансамбля частиц в ячейке можно рассмотреть вблизи ее центра объем V_λ , определяемый средней длиной свободного пробега λ , соответствующей состоянию газа в ячейке. Приведем конкретный пример.

Для азота при нормальных условиях расчетная средняя длина свободного пробега $\lambda_{N_2} \approx 75 \text{ нм}$. В объеме V_λ , величина которого равна λ^3 , при нормальных

условиях содержится около 10490 молекул. Расчет взаимодействия такого числа молекул за разумное время вполне под силу современному центральному процессору и тем более графическому ускорителю. Однако следует учитывать, какое число шагов по времени делает МД алгоритм в рамках каждой ячейки сетки (см. ниже).

В сильно разреженном газе количество молекул в ячейке снижается (см. табл. 3), а объем V_λ выходит за рамки ячейки и содержит большое число молекул. Например, при температуре $T_0 = 273.15K$ и давлении 0.00008 атм величина $\lambda_{N_2} \approx 937.56 \text{ мкм}$, величина объема V_λ составляет порядка $8.24 \cdot 10^8 \text{ мкм}^3$, а количество частиц в объеме V_λ составляет порядка $1.64 \cdot 10^{12}$. В рамках алгоритма класса 3 в таком случае имеются 2 возможности. Первая возможность относится к случаю грубой сетки, когда число частиц в ячейке велико (см. табл. 3, сетки 2.1-2.5, 3.1-3.4). В этой ситуации можно воспользоваться базой данных БДМР и не проводить расчеты на молекулярном уровне. Вторая возможность связана с прямыми МД расчетами при относительно малом числе частиц (табл. 3, сетка 2.6). Заметим также, что в рамках рассматриваемой нами задачи при использовании алгоритмов класса 3, в ячейках, куда не дошла ударная волна (а также волна разрежения в тыльной зоне баллона), расчет можно вообще не проводить.

Обсудим теперь ситуацию, когда МД вычисления в ячейке проводятся. В рамках алгоритма класса 3 это делается для ячеек, содержащих газ при нормальных или близких к ним условиях. В этом случае будем ориентироваться на количество частиц в объеме V_λ . Расчеты на молекулярном уровне для выбранной нами задачи проводились с шагом $\Delta t_{\text{МД}} = 0.002 \text{ пс}$. При этом на макроуровне шаг разностной схемы составлял $\Delta t_{\text{КГД}} = 9.2 \text{ пс}$. Максимальное время МД расчета в ячейке $t_{\text{МД, макс}}$ было ограничено сверху величиной $\Delta t_{\text{КГД}}$ (то есть максимально требовалось 5000 шагов на МД вычисления). Заметим, что для процессов взаимодействия молекул газа с атомами металлической поверхности время $t_{\text{МД, макс}}$ мало, но приемлемо (максимально может потребоваться порядка 100 пс). Для воспроизведения процессов взаимодействия молекул газа между собой в пограничном слое время $t_{\text{МД, макс}}$ недостаточно (максимально может потребоваться порядка 10 пс). Однако, учитывая, что процесс сильно нестационарный, достижение равновесия на молекулярном уровне на каждом шаге расчета не требуется. К тому же, по мере накопления данных в БДМР, стартовое состояние системы молекул газа вблизи поверхности металла будет приближаться к равновесному.

Рассмотрим теперь данные тестирования алгоритмов класса 2 (расчеты в рамках КГД-блока) и 3 (расчеты КГД и МД-блока) при решении двумерной задачи для чистого азота на сетках 2.1-2.4. Тесты проводились на кластере ФУПМ МФТИ с центральными процессорами Intel Xeon E5-2667 v3 @ 3.20GHz

и графическими процессорами NVidia Tesla K40m. Результаты расчетов приведены в таблице 4. Для чистоты эксперимента использовалось одно ядро ЦПУ и ГПУ целиком. КГД-расчеты проводились во всех случаях на ЦПУ, МД-расчеты проводились на ЦПУ и ГПУ.

Таблица 4

Времена решения двумерной модельной задачи (1000 шагов по времени, чистый азот) с помощью алгоритмов класса 2 и 3 на ЦПУ и ГПУ

№ сетки	Время расчета КГД-блока по алгоритму класса 2 на ядре ЦПУ, с	Время расчета МД-блока по алгоритму класса 3 на ядре ЦПУ, с	Время расчета МД-блока по алгоритму класса 3 на ядре ЦПУ и на ГПУ, с	Соотношение КГД и МД вычислений для алгоритма класса 3 на ядре ЦПУ, %	Соотношение КГД и МД вычислений для алгоритма класса 3 на ядре ЦПУ и ГПУ, %
2.1	12.538	1425.793	44.831	0.87	21.86
2.2	50.681	2793.157	86.145	1.78	37.04
2.3	208.226	5523.461	174.332	3.63	54.43
2.4	845.794	10986.325	348.157	7.15	70.84

Мотивация такого тестирования состоит в следующем.

Во-первых, если использовать все ядра ЦПУ, то ускоряться будут оба блока (и КГД, и МД). В тоже время, когда задача попадет на кластер с множеством узлов, на которые попадают несколько MPI-процессов, то использование мультитредового режима может быть затруднено.

Во-вторых, реализация КГД блока также могла быть выполнена и на ГПУ. Однако тогда пришлось бы на каждом шаге по времени часть данных пересылать на ЦПУ для последующего обмена с другими узлами. Такой подход резко снизил бы эффективность расчета, поскольку истинно граничных ячеек обычно меньше, чем граничных ячеек, появившихся в результате декомпозиции области в целях распараллеливания. В тоже время реализация МД-блока на ГПУ требует лишь однократной стартовой инициализации и последующего обновления данных в небольшом числе граничных ячеек на каждом шаге по времени.

Рассмотрим далее получившиеся результаты. Их анализ показывает, что на грубых сетках основная доля вычислений приходится на МД-блок, и лишь использование такого мощного ГПУ как Tesla K40m помогает ускорить расчет. При дроблении сетки ситуация постепенно изменяется, поскольку количество

граничных ячеек растет медленнее, чем количество ячеек в объеме. В результате соотношение КГД и МД вычислений выравнивается, а использование ГПУ в определенный момент изменяет ситуацию в пользу МД блока.

Рассмотрим теперь решение двумерной модельной задачи для чистого азота в параллельном режиме. Тестирование проводилось на суперкомпьютере МВС10П МСЦ РАН с центральными процессорами Intel Xeon E5-2690 с частотой 2.90 ГГц и векторными процессорами Intel Xeon Phi 7110X с частотой 1.1 ГГц. Область расчета распределялась между MPI-процессами на основе двумерного разбиения с учетом вытянутости области по координате x . При решении задачи по алгоритму класса 2 использовались только центральные процессоры. При решении задачи по алгоритму класса 3 для реализации МД-блока использовались векторные процессоры. Обмен данными между ЦПУ и ВПУ производился по MPI-каналам. Все граничные ячейки распределялись по доступным ВПУ равномерно и независимо от решетки ЦПУ. В частности, когда использовались от 1 до 16 MPI-процессов для КГД вычислений на ЦПУ на одном узле, тогда же использовались 2 дополнительных MPI-процесса для передачи данных на 2 ВПУ того же узла. Результаты тестирования в виде масштабирования вширь приведены в таблице 5.

Таблица 5

**Масштабируемость вширь параллельных алгоритмов класса 2,3
при решении двумерной модельной задачи (1000 шагов по времени)**

№ сетки	Время решения задачи по алгоритму класса 2, с	Количество MPI-процессов на ЦПУ	Время решения задачи по алгоритму класса 3, с	Количество MPI-процессов на ЦПУ и ВПУ
2.1	14.815	1	608.531	1x2
2.2	15.092	4	1190.341	4x2
2.3	15.864	16	2353.674	16x2
2.4	16.903	64	1170.129	64x8
2.5	18.316	256	582.45	256x32
2.6	19.285	1024	-	-

Анализ данных таблицы 5 показывает, что при решении задачи по алгоритму класса 2 на ЦПУ масштабируемость вширь остается высокой вплоть до сеток размером порядка 50 млн. ячеек. При решении задачи по алгоритму

класса 3 на ЦПУ и ВПУ видна нелинейная зависимость времени вычислений, обусловленная тем, что производительность ВПУ не так велика, как у ГПУ, и этих устройств необходимо брать существенно больше. При этом быстрые вычисления КГД блока перекрываются медленными МД вычислениями. Однако с ростом размерности задачи и числа ВПУ можно достичь супермасштабируемости (см. строку для сетки 2.5) за счет того, что объем МД вычислений в граничной ячейке фиксирован, а количество граничных ячеек растет слабее, чем количество объемных ячеек. Данная тенденция только усиливается при проведении трехмерных расчетов.

Заключение

Сформулируем в заключении основные результаты работы.

Рассмотрена проблема моделирования нелинейных газодинамических процессов в микроканалах технических систем реальной геометрии. Основную трудность анализа таких систем представляет многомасштабность протекающих в них процессов, которая приводит в некоторых зонах расчетной области к нарушению гипотезы сплошности. Для решения данной проблемы предложен новый многомасштабный двухуровневый подход, сочетающий многокомпонентное макроскопическое описание газовой среды на основе квазигазодинамических уравнений и микроскопическое описание процессов взаимодействия газовых частиц между собой и с твердыми элементами конструкции на основе методов молекулярной динамики. Предложена численная реализация подхода в рамках метода расщепления по физическим процессам. Ее основу образуют сеточные конечно-объемные по пространству и явные по времени аппроксимации квазигазодинамических уравнений на сетках различного типа, а также схема Верле, реализующая молекулярные вычисления. В рамках подхода разработаны 4 класса алгоритмов, а также их параллельные реализации, позволяющие проводить исследования с нужной степенью детализации при наличии соответствующих вычислительных ресурсов. Представленная вычислительная технология позволяет моделировать многокомпонентные течения газа с учетом сложной геометрии микроканалов, а также определять свойства реальных газов, в том числе материальные коэффициенты квазигазодинамических уравнений и параметры уравнений состояния и граничных условий. Технология апробирована на задаче истечения сверхзвуковой струи азота и водорода в вакуум. Проведенные численные эксперименты позволили верифицировать основные численные процедуры и подтвердить их корректность. Полученные расчетные параметры течения хорошо согласуются с известными теоретическими и экспериментальными данными. Перспектива работы состоит в применении технологии к новым актуальным задачам технической газовой динамики и нанотехнологии.

Библиографический список

1. Hirschfelder J.O., Curtis C.F., Bird R.B. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York: Wiley, 1964.
2. Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer simulation of liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987.
3. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статистической физике // *Успехи физических наук*. 1978. Т. 125, Вып. 3. С. 409–448.
4. Haile J.M. *Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods*. New-York: John Wiley & Sons, Inc., 1992.
5. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation. From Algorithm to Applications*. New-York: Academic Press, 2002.
6. Rapaport, D.C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 2004.
7. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24, №6. С. 3–44.
8. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // *Докл. АН СССР*. 1976. 231, №1. С. 49–52.
9. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // *Доклады РАН*. 1997. Т. 357, №1. С. 53–56.
10. Веденяпин В.В. *Кинетические уравнения Больцмана и Власова*. М.: Физматлит, 2001.
11. Кривовичев Г.В. Об устойчивости решеточной кинетической схемы Больцмана для расчета плоских течений. // *Вычислительные методы и программирование*. 2011. Т. 12, Вып. 1. С. 194–204.
12. Titarev V.A. Efficient Deterministic Modelling of Three-Dimensional Rarefied Gas Flows // *Commun. Comput. Phys.* 2012. V. 12, No. 1. P. 161–192.
13. Никитин Е.Е. *Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах*. М.: Химия, 1970.
14. Закиров М.А. Свободномолекулярные течения в сложных каналах // *Ученые записки ЦАГИ*. 1973. Т. 4, Вып. 2. С. 112–119.
15. Берд Г. *Молекулярная газовая динамика*. М.: Мир, 1981.
16. Жданов В.М., Алиевский М.Я. *Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах*. М.: Наука, 1989.
17. Bird G.A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow*. Oxford: Science simulations, 1994.
18. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. *Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа*. М.: Азбука, 2008.

19. Власов В.И. Улучшение метода статистических испытаний (Монте-Карло) для расчета течений разреженных газов // Докл. АН СССР. 1966. Т.167, №5. С. 1016–1018.
20. Горелов С.Л., Ерофеев А.И. Влияние внутренних степеней свободы на обтекание пластины гиперзвуковым потоком разреженного газа // Изв. АН СССР, МЖГ. 1978. № 6. С. 151–156.
21. Смирнов Б.М. Модель твердой сферы в физике плазмы и газа // УФН. 1982. Т. 138, Вып. 3. С. 517–533.
22. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель шероховатых сферических молекул переменного диаметра // Математическое моделирование. 1997. Т. 9, № 10. С. 43–49.
23. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель вращательно-колебательного взаимодействия молекул для метода прямого статистического моделирования // Математическое моделирование. 2000. Т. 12, №9, С. 55–64.
24. Горелов С.Л. Компьютерное моделирование аэротермодинамики летательных аппаратов в верхних слоях атмосферы. // Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы. М.: ЦАГИ, 2015.
25. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. V. 159. P. 98–103.
26. Еленин Г.Г., Шляхов П.И. Геометрическая структура пространства параметров трехстадийных симплектических методов Рунге-Кутты // Математическое моделирование. 2011. Т. 23, №5. С. 16–34.
27. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, №11. С. 39–48.
28. Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // Вычислительные методы и программирование. 2015. Т. 16, №1. С. 123–138.
29. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование установления термодинамического равновесия в никеле // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, №3. С. 3–19.
30. Подрыга В.О. Определение макропараметров реального газа методами молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, №7. С. 80–90.
31. Подрыга В.О., Поляков С.В., Жаховский В.В. Атомистический расчет перехода в термодинамическое равновесие азота над поверхностью никеля // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, №7. С. 91–96.

32. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 80. doi:10.20948/prepr-2016-80
33. Елизарова Т.Г., Соколова М.Е., Шеретов Ю.В. Квазигазодинамические уравнения и численное моделирование течений вязкого газа // ЖВМиМФ. 2005. Т. 45, №3. С. 545–556.
34. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
35. Шеретов Ю.В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
36. Злотник А.А. О квазигазодинамической системе уравнений с общими уравнениями состояния и источником тепла // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, №7. С. 53–64.
37. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады академии наук. 2014. Т. 459, №4. С. 395–399.
38. Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Моделирование течений газовых смесей в микроканалах // Вестник РУДН, серия "Математика. Информатика. Физика". 2014. №3. С.154–163.
39. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, №7. С. 65–74.
40. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование. 2016. Т. 17, Вып. 2. С. 147–165.
41. Голубев И.Ф. Вязкость газов и газовых смесей. М.: Физматгиз, 1959.
42. Chapman S., Cowling T.G. The Mathematical Theory of Non-uniform Gases. Cambridge University Press, 1939.
43. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982.
44. Wilke C.R. A Viscosity Equation for Gas Mixtures // J. Chem. Phys. 1950. V. 18. P. 517–519.
45. Sutherland W. The Viscosity of Mixed Gases // Philosophical Magazine Series 5. 1895. V. 40(246). P. 421–431.
46. Wassiljewa A. Heat Conduction in Gas Mixtures // Physikalische Zeitschrift. 1904. V. 5(22). P. 737–742.

47. Darken L. S. Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems // Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers. 1948. V. 175. P. 184–201.
48. Krishna R. and J.M. van Baten. Validating the Darken relation for diffusion in fluid mixtures of varying densities by use of MD simulations // Chem. Eng. Technol. 2006. V. 29. P. 761–765.
49. Von Mie G. Zur kinetischen theorie der einatomigen korper // Ann. Phys. Leipzig. 1903. V. 11, №8. P. 657–697.
50. Фокин Л.Р., Калашников А.Н. Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИДИФ // Теплофизика высоких температур. 2009. Т. 47, №5. С. 675–687.
51. Meier K., Laesecke A., Kabelac S. Transport coefficients of the Lennard-Jones model fluid. III. Bulk viscosity // J. Chem. Phys. 2005. V. 122, No. 1. Art. 014513.
52. Meier K. Computer Simulation and Interpretation of the Transport Coefficients of the Lennard-Jones Model Fluid. Aachen: Shaker, 2002.
53. Levesque D., Verlet L., Kurkijarvi J. Computer “experiments” on classical fluids. IV. Transport properties and time-correlation functions of the Lennard-Jones liquid near its triple point // Phys. Rev. A. 1973. V. 7, No. 5. P. 1690–1700.
54. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., W.F. van Gunsteren et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 3684–3690.
55. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике. М.: Наука, 1990.
56. Марчук Г.И. Методы расщепления. М: Наука, 1988.
57. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики: лекции для студентов НГУ. Новосибирск: НГУ, 1966.
58. Ильин В.П. Разностные методы решения эллиптических уравнений. Новосибирск: НГУ, 1970.
59. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
60. Самарский А.А., Андреев В.Б.. Разностные методы для эллиптических уравнений. М.: Наука, 1976.
61. Фрязинов И.В. Метод баланса и вариационно-разностные схемы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1980. Т. 20, №7. С. 1332–1343.

62. Li R., Chen Zh., Wu W. Generalized difference methods for differential equations. Numerical analysis of finite volume methods. New York: Marcel Dekker Inc., 2000.
63. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method. / In: "Handbook of Numerical Analysis" (Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions), 2000. V. VII. P. 713–1020.
64. LeVeque R.J. Numerical methods for conservation laws. Basel: Birkhauser, 2008.
65. Попов И.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости для уравнений газовой динамики на треугольных и тетраэдральных сетках // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, №6. С. 109–127.
66. Toselli A., Widlund O. Domain Decomposition Methods / Algorithms and Theory. Springer Series in Computational Mathematics. V. 34. Berlin: Springer, 2005.
67. Karypis G., Kumar V. METIS – A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices. URL: <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis>
68. Karypis G., Schloegel K., Kumar V. ParMETIS – Parallel Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering Library. URL: <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis>
69. Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // Известия ЮФУ. Технические науки. 2012. № 6 (131). С. 105–115.
70. Официальная документация и учебные пособия по MPI: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>
71. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>
72. CUDA Toolkit Documentation v.7.5. Santa Clara (CA, USA): NVIDIA Corporation, September 2015. URL: <http://docs.nvidia.com/cuda/index>
73. Ramos A., Tejada G., Fernandez J.M., Montero S. Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence. J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113. P. 8506–8512.

74. Варгафтик Н.Б. Теплофизические свойства веществ. Справочник. М.: Наука, 1972.
75. Кикоин И.К. (ред.). Таблицы физических величин. М.: Атомиздат, 1976.
76. Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д., Спиридонов Г.А., Цымарный В.А. Термодинамические свойства азота. ГСССД. Серия: монографии. М.: Издательство стандартов, 1977.
77. ГСССД 4-78. Азот жидкий и газообразный. Плотность, энтальпия, энтропия и изобарная теплоемкость при температурах 70-1500 К и давлениях 0,1-100 МПа. М.: Издательство стандартов, 1978.
78. ГСССД 49-83. Азот. Второй вириальный коэффициент, коэффициенты динамической вязкости, теплопроводности, самодиффузии и число Прандтля разреженного газа в диапазоне температур 65-2500 К. Таблицы стандартных справочных данных. Вигасин А.А., Люстерник В.Е., Фокин Л.Р. М.: Издательство стандартов, 1984.
79. ГСССД 89-85 Азот. Коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности при температурах 65...1000 К и давлениях от состояния разреженного газа до 200 МПа. Таблицы стандартных справочных данных. Козлов А.Д., Кузнецов В.М. и др. М.: Издательство стандартов, 1986.
80. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989.
81. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины. Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
82. Cramer M.S. Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases // *Physics of fluids*. 2012. V. 24. Art. 066102 (23 p.).
83. Попов И.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости численного решения уравнений газовой динамики. М.: КРАСАНД, 2015.

Оглавление

1. Введение	3
2. Математическая постановка.....	5
2.1. Макроскопическое описание	5
2.2. Микроскопическое описание	10
3. Вычислительные алгоритмы и их реализация	13
3.1. Алгоритмы класса 1	14
3.2. Алгоритмы класса 2	15
3.3. Алгоритмы класса 3	15
3.4. Алгоритмы класса 4	16
3.5. Реализация алгоритмов класса 1	17
3.6. Реализация алгоритмов класса 2-4	17
3.7. Параллельная реализация алгоритмов	24
4. Результаты моделирования	25
4.1. Анализ и верификация алгоритмов на микроуровне.....	26
4.2. Анализ и верификация алгоритмов на макроуровне	31
4.3. Анализ и верификация алгоритмов смешанного типа	35
Заключение.....	45
Библиографический список.....	46