

ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
“ИНФОРМАТИКА И УПРАВЛЕНИЕ”  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 519.6, 533.6.011

На правах рукописи

Титарев Владимир Александрович

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ТЕЧЕНИЙ РАЗРЕЖЕННОГО  
ГАЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СУПЕРЭВМ

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени доктора  
физико-математических наук

Москва, 2017 год

# Оглавление

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>1 Методология решения задач и выбор математических моделей</b>	<b>20</b>
1.1 Методология решения задач . . . . .	20
1.2 Кинетическое уравнение с точным интегралом столкновений	22
1.3 Кинетические уравнения с приближенным интегралом столкновений . . . . .	24
1.4 Граничные и начальные условия . . . . .	26
1.5 Безразмерная форма расчетных уравнений . . . . .	27
1.6 Линеаризованные формулировки . . . . .	29
<b>2 Численный метод</b>	<b>32</b>
2.1 Основные требования к численному методу . . . . .	32
2.2 Общий вид метода дискретных скоростей . . . . .	35
2.3 Вычисление правой части разностной схемы . . . . .	38
2.4 Дискретизация по времени . . . . .	50
2.5 Метод решения двухмерного уравнения . . . . .	53

<b>3 Программные комплексы</b>	<b>60</b>
3.1 Краткое описание разработанных программных комплексов	60
3.2 Двухуровневая модель параллельных вычислений . . . . .	61
3.3 Описание основного пакета программ “Несветай-3Д” . . . . .	68
3.4 Описание пакета “Несветай-2Д” . . . . .	76
<b>4 Течения в микроканалах</b>	<b>77</b>
4.1 Введение . . . . .	77
4.2 Аналитические решения для предельных случаев . . . . .	80
4.3 Течение в трубе бесконечной длины . . . . .	85
4.4 Линеаризованная задача для трубы конечной длины . . . . .	99
4.5 Истечение газа через круглую трубу постоянного радиуса .	116
4.6 Истечение газа в вакуум через коническую трубу . . . . .	140
4.7 Истечение газа в вакуум через составную трубу . . . . .	153
4.8 Истечение газа в вакуум через трубу прямоугольного сечения	169
<b>5 Задачи внешней гиперзвуковой аэродинамики</b>	<b>178</b>
5.1 Особенности моделирования гиперзвуковых течений . . . . .	178
5.2 Алгоритм построения скоростной сетки . . . . .	183
5.3 Расчет обтекания круглого цилиндра . . . . .	185
5.4 Расчет обтекания ВКА ЦАГИ . . . . .	200
5.5 Расчет обтекания сегментально-конического тела . . . . .	220
5.6 Тестирование масштабируемости . . . . .	221
<b>Основные результаты</b>	<b>227</b>
<b>Список литературы</b>	<b>228</b>

# Введение

Диссертация посвящена вычислительному эксперименту в механике разреженного газа: развитию численных методов, реализующих их комплексов параллельных программ и решению с их помощью ряда академических и прикладных задач.

## **Актуальность работы**

Как известно, классические способы моделирования, основанные на уравнениях Навье-Стокса сжимаемого газа, не подходят для описания движений разреженного газа, в котором средняя длина свободного пробега молекул между двумя соударениями становится сравнимой с характерным размером рассматриваемой области течения. Корректное описание течения возможно на основе кинетических подходов [1–6]: уравнения Больцмана, аппроксимирующих кинетических уравнений, метода прямого статистического моделирования, и других.

Важной прикладной областью применения теории разреженных газов является исследование медленных течений в различных микроэлектромеханических устройствах [7], таких как микронасосы и микротурбины, микросопла, системы охлаждения электронных компонентов. При этом течение разреженного газа в прямом канале является наиболее распространенной конфигурацией в микроустройствах; первые экспериментальные из-

мерения расхода массы для круглой трубы принадлежат еще Кнудсену. Анализу решения этой задачи в зависимости от длины и формы канала, величины перепада давления и других параметров посвящено множество работ, см. например обзоры [8, 9].

Другим традиционным приложением уравнений механики разреженного газа является моделирование аэродинамики и теплообмена космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы. При обтекании космического аппарата, особенно при его входе в атмосферу с большой (гиперзвуковой) скоростью, определяющими являются эффекты разреженности и сильной неравновесности течения, см. например [10, 11]. Так как экспериментальные исследования данной задачи сопряжены со значительными техническими трудностями, целесообразно основные аэротермодинамические характеристики изучать методами вычислительной физики.

Указ Президента РФ от 07.07.2011 г. N. 899 устанавливает одним из приоритетных направлений развития российской науки развитие транспортных и космических систем. В список критических технологий входят компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий, технологии и программное обеспечение распределенных и высокопроизводительных вычислительных систем, технологии создания ракетно-космической и транспортной техники нового поколения. Таким образом, развитие численных методов моделирования течений разреженного газа является актуальной задачей математического моделирования.

Наиболее популярным в настоящее время способом моделирования течений разреженного газа, в частности решения задач гиперзвуковой аэродинамики, является метод прямого статистического моделирования (ПСМ), или DSMC в англоязычной терминологии [5]. В нашей стране его развити-

ем и применением занимаются научные коллективы ВЦ РАН [12–14], ЦАГИ [15–20], ИТ СО РАН [21–27], ИТПМ СО РАН [11, 28–35], МФТИ [36–40], ЦНИИМАШ [41]. На основе метода ПСМ созданы хорошо известные программные комплексы SMILE [42], Monaco [43], DAC [44], и другие. Метод статистического моделирования хорошо подходит для широкого класса стационарных задач аэродинамики для больших и умеренных чисел Кнудсена, включая течения с химическими реакциями, но менее эффективен для решения нестационарных задач и расчета медленных течений.

Основной альтернативой использованию статистических методов является прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана с точным или приближенным (модельным) интегралом столкновений для функции распределения молекул по скоростям. Развитием кинетических моделей и созданием расчетных методов занимались коллективы ВЦ РАН (в настоящее время ФИЦ ИУ РАН) [45–62], ИТПМ СО РАН [63–66], МАИ [67–69], МФТИ [58, 70–74], МЭИ [75]. Из иностранных авторов отметим [76–85]. На основе численных методов решения кинетических уравнений созданы Unified Flow Solver (UFS) [61, 86, 87], проблемно-моделирующая среда [70, 88] и пакеты программ в [82, 89, 90].

Из других подходов к моделированию течений разреженного газа следует отметить дискретные модели для уравнения Больцмана [91–93], метод моментов [94–97], кинетические схемы [90, 98–100]. Методы кинетической теории газов активно используются в создании новых моделей высокоскоростных течений, см. например [101–105].

Можно ожидать, что для широкого круга задач программные комплексы, основанные на прямом численном решении кинетических уравнений, будут более эффективными, чем методы, основанные на статистических

подходах. Выигрыш в производительности будет получен благодаря следующим свойствам (i) отсутствие “шума” в решениях (ii) второй и выше порядок аппроксимации решения на пространственных сетках, адаптированных к поверхности (iii) возможность разрабатывать и использовать неявные методы решения задач. Применение схем высокого порядка аппроксимации позволит использовать пространственные сетки с гораздо меньшим числом ячеек (от 10 раз и более). Неявные методы дискретизации по времени существенно ускоряют сходимость к стационарным решениям и позволяют вести расчеты нестационарных задач более экономично. Поэтому развитие численных методов решения кинетического уравнения является перспективным направлением развития данной области науки.

До недавнего времени большинство опубликованных результатов по численному решению кинетических уравнений относились к решению задач с простой плоской или осесимметричной геометрией (пластины, круговой цилиндр, сфера). Другими словами, наблюдалось большое отставание от вычислительной аэродинамики, в которой методы и соответствующие комплексы программы уже давно созданы и активно обобщаются на все более сложные задачи, см. например [106–116]. В последние 10 лет благодаря росту производительности ЭВМ [117–119] началось развитие методов решения пространственных задач для кинетических уравнений. Однако большинство описанных в научной литературе численных методов и комплексов программ не приспособлены для серийных расчетов сложных течений из-за низкого (первого) порядка аппроксимации на произвольных сетках, явного метода дискретизации по времени и необходимости использовать структурированную равномерную сетку в скоростном пространстве, например [86–88]. Последнее условие приводит к неприемлемо большому росту вычислительных затрат при расчете течений с большими скоростями (про-

порционально кубу числа Маха набегающего потока). Частично проблема решена в недавних работах [61, 82], в которых представлен метод решения кинетического уравнения на гексаэдральных сетках, адаптированный для больших чисел Маха. Однако следует отметить, что данные методы не могут применяться на произвольных пространственных сетках; реализующее их программное обеспечение создается в рамках закрытых государственных программ правительств зарубежных стран и недоступно российским организациям.

Другой важной проблемой в создании и практической реализации численных методов решения кинетических уравнений является необходимость иметь возможность использовать с достаточной эффективностью современные гибридные суперЭВМ с десятками тысяч физических ядер / гиперпотоков. Актуальным примером такой ЭВМ является система РСК Петастрим [119], установленная в СПбПУ Петра Великого. Система состоит из 280 узлов с со-процессорами Intel Xeon Phi 5120D. В цитированных выше работах используется одноуровневая модель параллельных вычислений, которая теряет эффективность при проведении вычислений на таких системах. В актуальных иностранных суперЭВМ число x86 ядер может достигать 10 миллионов (компьютер Sunway NaihuLight, КНР). Для создания эффективного параллельного алгоритма необходимо развивать двухуровневую OpenMP + MPI модель решения кинетического уравнения.

Таким образом, актуальной является задача разработки общей методологии моделирования, численных методов и отечественных параллельных отечественных комплексов программ решения пространственных задач теории разреженных газов со сложной геометрией на основе численного решения кинетических уравнений в широком диапазоне чисел Маха и

Кнудсена. Настоящая работа посвящена решению этой задачи.

## **Цели и задачи диссертационной работы**

- Разработка методологии решения пространственных задач механики разреженного газа для течений со сложной геометрией области.
- Разработка нового эффективного численного метода решения кинетического уравнения с приближенными (модельными) интегралами столкновений.
- Создание нового комплекса программ, реализующего данный метод решения и позволяющего проводить вычисления на современных суперЭВМ с десятками тысяч ядер/гиперпотокков.
- Валидация и верификация кинетических уравнений с приближенными интегралами столкновений в приложении к сложным течениям.
- Численное моделирование течений разреженного газа в микроканалах большой конечной длины и сложной формы.
- Численное моделирование обтекания пространственных тел сложной формы гиперзвуковым потоком разреженного газа.

## **Методы исследования**

В диссертации применяются методы механики разреженного газа, вычислительной математики и параллельных вычислительных технологий. Для программной реализации используется язык Fortran 2003 и средства создания параллельных программ на основе OpenMP и MPI.

## **Научная новизна**

- Предложена методология численного моделирования плоских, осе-

симметричных и пространственных течений разреженного газа, включающая в себя разработку численного метода, прикладного параллельного пакета программ и проведение серийных расчетов.

- Разработан новый полностью неявный метод решения кинетического уравнения для областей сложной формы на произвольных сетках как в физическом, так и в скоростном пространствах.
- Предложенный численный метод реализован в новых комплексах параллельных программ “Несветай-2Д” , “Несветай-3Д”<sup>1</sup>
- Впервые проведена верификация и валидация результатов численного решения кинетических уравнений с приближенными (модельными) интегралами столкновений на сложных пространственных задачах, включая задачи гиперзвукового обтекания тела потоком разреженного газа.
- Получено решение задачи о стационарном течении разреженного газа через канал произвольной длины и переменной формы поперечного сечения под действием произвольного перепада давления. Показано хорошее согласие расчетов с имеющимися в литературе результатами. Уточнены границы применимости существующих приближенных методик.
- Впервые продемонстрирована возможность получать за приемлемое для практических приложений время численное решение кинетического уравнения для задачи обтекания реалистичной модели спускаемого аппарата для условий задачи, соответствующих входу аппарата в атмосферу Земли с первой космической скоростью.

---

<sup>1</sup>Большой Несветай - название реки в Ростовской области.

## **Практическая ценность работы**

Предложенная методология моделирования, разработанные численные методы и комплексы параллельных программ могут быть использованы в работе предприятий аэрокосмического комплекса (РКК Энергия им. С.П. Королева) и для проведения фундаментальных исследований в механике разреженного газа. Некоторые из предложенных методов могут применяться для решения уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений.

## **Достоверность результатов**

Разработанный комплекс программ был верифицирован путем сопоставления результатов на серии широко известных тестовых задач. Сравнение проводилось как с экспериментальными данными, так и с расчетами других авторов на основе ПСМ и решения уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений. Рассматривались течения с широким диапазоном изменения чисел Кнудсена и Маха. Ядро программного комплекса, реализующее неоднородную разностную схему для оператора переноса, используется в программном комплексе [120] и верифицировано на решении уравнений Навье-Стокса в применении к задачам гиперзвуковой аэродинамики спускаемых аппаратов. Параллельная эффективность разработанного программного комплекса подтверждается серией тестовых расчетов, выполненных на различных вычислительных системах при варьировании числа ядер в широком диапазоне до 61440 включительно (256 узлов кластера РСК “ПетаСтрим” с сопроцессорами Intel Xeon Phi 5120D).

## **Основные положения диссертации, выносимые на защиту:**

- Методология численного моделирования пространственных течений разреженного газ на произвольных неструктурированных сетках.

- Новый неявный численный метод решения модельного кинетического уравнения на произвольных неструктурированных сетках, консервативный по интегралу столкновений.
- Комплексы параллельных программ “Несветай-2Д”, “Несветай-3Д” для расчетов двумерных, осесимметричных и трехмерных задач механики разреженного газа.
- Результаты серии расчетов течений одноатомного разреженного газа в микроканалах произвольной длины и формы сечения.
- Результаты численного моделирования задач внешнего обтекания гиперзвуковым потоком разреженного газа, включая трехмерную модель спускаемого аппарата.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы были представлены на следующих российских и международных конференциях:

1. “European Workshop on High Order Nonlinear Numerical Methods for Evolutionary PDEs” (HONOM 2011), University of Trento, Italy, April 2011 (приглашенный доклад).
2. GASMEMS Summer School & Workshop, Bertinoro, Italy, June 6-11, 2011 (приглашенный доклад).
3. 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Zaragoza, Spain, July 9-13th, 2012 (приглашенный доклад).
4. XIV-ая Международная конференция “Супервычисления и математическое моделирование”, 1-5 октября 2012 г., ВНИИЭФ, Саров, Россия.
5. International conference “Numerical geometry, grid generation and scientific

- computing” (NUMGRID2012), ВЦ РАН им. А.А. Дородницина, 17-19 декабря 2012 г.
6. The Third Russian-Chinese Workshop on Numerical Mathematics and Scientific Computing, ИВМ РАН, 11 – 13 сентября 2013 года (приглашенный доклад).
  7. XV-ая Международная конференция “Супервычисления и математическое моделирование”, 13-17 октября 2014 г., ВНИИЭФ, Саров, Россия.
  8. XVII Международная конференция по методам аэрофизических исследований, 30 июня - 06 июля 2014 года, Академгородк, Новосибирск, Россия.
  9. The 2nd European Conference on Non-equilibrium Gas Flows (NEGF15), Eindhoven, the Netherlands, December 9-11, 2015.
  10. Workshop on Non-equilibrium Flow Phenomena in Honor of Mikhail Ivanov’s 70th Birthday. Novosibirsk, Russia June 15-18, 2015 г.
  11. Международная конференция “Суперкомпьютерные дни в России”, МГУ, 28-29 сентября 2015 г.
  12. European Conference on High Order Nonlinear Numerical Methods for Evolutionary PDEs: Theory and Applications (HONOM 2015), 16-20 March, 2015, University of Trento and CIRM-FBK, Italy.
  13. 16-ая Международная конференция “Супервычисления и математическое моделирование”, 3-7 октября 2016г., ВНИИЭФ, Саров, Россия.
  14. Международная конференция “Суперкомпьютерные дни в России”, МГУ, 26-27 сентября 2016 г.
  15. The German-Russian Conference: Supercomputing in Scientific and Industrial Problems 2017/SSIP, High Performance Computing Center, Штутгарт,

Германия, 27-29 марта 2017 г.

16. “HONOM - Conference on High Order Numerical Methods for Evolutionary PDEs”, Штутгарт, Германия, 27-31 марта 2017 года (приглашенный доклад).
17. The 29th International Conference on Parallel CFD, the University of Strathclyde, Glasgow, Scotland, 15-17 May 2017 (приглашенный доклад).
18. Всероссийская конференция по аэрогидродинамике, посвященная 100-летию со дня рождения С.В. Валландера, СПбГУ, Санкт-Петербург, 23 - 25 октября 2017 г.

## **Реализация и внедрение результатов работы**

Исследования выполнялись в рамках

- научной работы автора в Университетах Тренто (Италия) и Крэнфилда (Великобритания).
- научных планов ВЦ им. А.А. Дородницына РАН (2011-2015) и ФИЦ “Информатика и Управление” РАН (с 2015 года по настоящее время)
- работы в лаборатории С.В. Утюжникова (МФТИ, грант Правительства РФ по постановлению N 220, договор N 11.G34.31.0072, с 2011 года по настоящее время)
- проектов РФФИ 12-01-00486, 13-01-00522, 14-08-00604А, 15-01-07911, 15-07-02986

Разрабатываемая методология численного моделирования обтекания возвращаемого аппарата используется в сотрудничестве с РКК “Энергия” им. С.П. Королева.

## **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 30 работ в печатных изданиях, рекомендованных ВАК для опубликования научных результатов докторских диссертаций, включая 26 журнальных публикаций [121–146] и 4 публикации в трудах конференций [147–150]. Получены два свидетельства о регистрации программы [151, 152]. Прочие публикации по теме диссертации: [153, 154].

Вклад автора в совместные работы заключался в формулировке решаемых тестовых задач [122, 126, 129, 130, 134, 138, 140, 143, 154]; разработке численного метода решения задачи [126, 134, 137, 140, 143]; написании программного кода [126, 130, 134, 140]; проведении вычислений [124, 126, 128, 133–135, 137–141, 148, 150]; анализе результатов [134, 143]; совместной разработке численного метода [122, 129, 130, 154]; совместном анализе результатов [122, 124, 126, 128–130, 133–135, 137–141, 146, 148, 150].

Автор выражает искреннюю благодарность всем соавторам и коллегам за сотрудничество. Автор благодарит А.А. Фролову за обсуждение численных подходов и результатов моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа; А.А. Рыжова и А.А. Савельева за помощь в создании многоблочной гексаэдральной сетки для модели ВКА ЦАГИ; Е.А. Бондаря, П.В. Ващенко и А.А. Шевырина за предоставленные результаты расчета обтекания модели ВКА ЦАГИ на основе метода ПСМ.

## **Краткое содержание работы**

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы.

В первой главе сформулирован общий подход к математическому моделированию практических задач механики разреженного газа, развиваемый

в настоящей работе. Предлагаемая методология основана на обобщении идей, активно используемых в настоящее время для моделирования промышленных задач аэродинамики и аэроакустики, но до настоящего времени не применявшейся при решении кинетических уравнений. В настоящей работе развивается направление моделирования течений разреженных газов, основанное на использовании приближенных (модельных) кинетических уравнений. В главе приводится краткий обзор подходов к построению приближенных кинетических уравнений, аппроксимирующих кинетическое уравнение Больцмана с точным интегралом столкновений. Обосновывается выбор S-модельного уравнения Е.М. Шахова [45], использование которого позволяет получить с хорошей точностью основные нужные для практических задач величины - макроскопические параметры газа, силовые и тепловые нагрузки. Описывается переход к безразмерной форме кинетического уравнения и линеаризованные формы уравнения для решения задач с малыми отклонениями течения от покоя.

Вторая глава посвящена описанию разработанного оригинального варианта метода дискретных скоростей решения кинетического уравнения в трехмерном случае. Метод иллюстрируется в приложении к уравнению Больцмана с приближенным S-модельным интегралом столкновений [45] и его частным (упрощенным) вариантом - моделью БГК [155]. Основными особенностями предлагаемого метода являются использование как многоблочных структурированных, так и произвольных неструктурированных сеток независимо в физическом и скоростном пространствах; консервативность по интегралу столкновений; неоднородная дискретизация оператора переноса; полностью неявный экономичный алгоритм продвижения по времени. Данные особенности метода позволили автору создать на его основе программный комплекс, применимый для решения прикладных задач

со сложной геометрией, большими числами Маха набегающего потока и сильными перепадами давления и плотности газа.

В третьей главе работы приводится описание созданных автором программных комплексов “Несветай-2Д”, “Несветай-3Д”. Основное внимание уделяется трехмерному пакету “Несветай-3Д” и реализованной в нем двухуровневой модели параллельных вычислений OpenMP + MPI.

Каждый уровень параллельной реализации основан на декомпозиции расчетной сетки. На верхнем уровне используется технология MPI обмена данными между узлами суперЭВМ; при этом при распределении вычислений между узлами суперЭВМ возможно использование различных вариантов декомпозиции 6-мерной расчетной сетки. В первом подходе используется декомпозиция расчетной сетки в скоростном пространстве. Вторым подход является традиционным для вычислительной аэродинамики и основан на использовании декомпозиции сетки в физическом пространстве.

На нижнем уровне организации параллельных вычислений всегда используется разбиение сетки в физическом пространстве на блоки и использование технологии OpenMP. Для большинства шагов метода решения достаточно использовать простые циклы OMP с динамической балансировкой. Однако параллельная многопоточная реализация метода LU-SGS решения системы уравнений для приращения функции распределения потребовала специальных изменений метода решения для того, чтобы скорость сходимости к стационарному решению не ухудшалась.

В приводимых в работе расчетах используются шестимерные расчетные сетки с числом ячеек до нескольких миллиардов, что требует использование многопроцессорных ЭВМ. Параллельная версия комплекса протестирована на суперкомпьютерах Университета Крэнфилда (Великобритания),

МСЦ РАН, НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, СПбПУ Петра Великого и МФТИ.

Программный комплекс “Несветай-3Д” состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и препроцессоров сетки. Вычислительное ядро представляет собой набор модулей, реализующих базовые операции, необходимые для проведения расчетов: процедуры чтения пространственных сеток в различных форматах, построение информации о связности сетки; алгоритмы реконструкции скалярных функций методом наименьших квадратов на произвольной сетке; процедуры вывода пространственных и поверхностных данных в формате Tecplot. Кинетический решатель является надстройкой над ядром и реализует разностную схему решения кинетического уравнения. Препроцессоры используются для разбиения расчетной сетки при параллельных вычислениях.

В четвертой главе работы представлены результаты численного моделирования стационарных задач течения разреженного газа через микроканалы. С помощью пакета “Несветай-2Д” впервые построено численное решение задачи для трубы бесконечной длины и полностью произвольной формы поперечного сечения. Для трубы конечной длины с помощью основного пакета “Несветай-3Д” детально рассмотрено решение задачи истечения разреженного газа из камеры высокого давления в камеру низкого давления для произвольного значения перепада давления. Решение строилось для круглой трубы постоянного и переменного (конического либо составного) сечения и через трубу прямоугольного сечения. Приведено сравнение результатов вычислений с аналитическим решением задачи Пуайзеля для уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости и приближением плоских сечений [8]. Установлены границы применимости данных подходов для те-

чения разреженного газа.

Часть вычислений проводилась с целью верификации и валидации численного метода и приближенного интеграла столкновений. Так, для стандартной тестовой задачи истечения газа в вакуум через короткую круглую трубу [156] показано хорошее согласие результатов с расчетами по методу ПСМ, решением точного уравнения Больцмана и с экспериментальными данными; получен близкий ко второму порядок сходимости численного метода для основной расчетной величины - расхода массы. Для круглых труб умеренной длины показано хорошее согласие результатов с расчетами [157]. Продемонстрирована эффективность параллельной реализации численного метода для систем с общей памятью и важность использования неявной схемы для быстрой сходимости процесса установления решения задачи.

Пятая глава посвящена решению задач внешнего гиперзвукового обтекания тел потоком разреженного газа с помощью “Несветай-3Д”. Для моделирования течений с большими числами Маха набегающего потока  $M_\infty > 10$  предложен простой метод построения неравномерной сетки в пространстве скоростей. На задаче гиперзвукового обтекания круглого цилиндра проведена оценка точности модельных уравнений и метода решения на неравномерной скоростной сетке. Задача решалась для аргона и азота, чисел Маха набегающего потока  $M_\infty = 10, 25$  и режимов обтекания от разреженного до сплошной среды. Впервые показана хорошая точность S-модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, включая задачу определения теплообмена на поверхности

Проведены расчеты обтекания моделей спускаемых аппаратов реалистичной формы под разными углами атаки с большими числами Маха

набегающего потока. В первой серии расчетов рассматривалось обтекание модели воздушно – космического аппарата (ВКА) ЦАГИ. Проведено сравнение с расчетами комплекса SMILE и показано хорошее согласие для  $M_\infty = 5, 10$  и высоты полета 90 км. Во второй серии расчетов рассматривалось обтекание ВКА и затупленного сегментально – конического тела с надстройками для высоты полета 100 км, скорости набегающего потока до 7900 м/с и угла атаки 25 градусов. Таким образом, впервые показана принципиальная возможность моделирования гиперзвуковых течений вокруг спускаемых аппаратов с помощью численного решения кинетического уравнения за приемлемое время как на многоблочных структурированных сетках, так и на неструктурированных сетках типа тетра-призм.

В заключении диссертации в сжатом виде формулируются основные результаты работы.

Завершается диссертация Списком литературы.

# 1 Методология решения задач и выбор математических моделей

## 1.1 Методология решения задач

Как известно, методы прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана в трехмерной постановке являются очень затратными из-за сложности точного интеграла столкновений и трудностей с созданием неявных разностных методов. Известные автору пакеты программ, реализующие такие методы [70, 86], используют только явные разностные схемы на довольно простых сетках. При этом большинство опубликованных решений пространственных задач приводятся без оценки точности счета или проверки сходимости по сетке. Можно сказать, что данные результаты демонстрируют возможность построения численного решения в принципе, однако не гарантируют требуемой в реальных приложениях точности.

Следует заметить, что для большого класса задач отличия в практически значимых характеристиках течения (расход массы, коэффициенты давления и теплопередачи, и т.д.) между решением точного и приближенного

уравнений невелико и вполне сравнимо с реально достижимой точностью построения численного решения точного уравнения. Поэтому кинетические уравнения с приближенными (модельными) интегралами столкновений сохраняют все преимущества и свойства точного кинетического уравнения, при этом требуя значительно меньших затрат вычислительных ресурсов.

Развитие методов решения кинетических уравнений и реализующих их комплексов программ должно опираться на общую методологию, которая будет задавать направление развития, и формулировать требования к создаваемым программам. Предлагаемая в настоящей работе методология основана на обобщении идей, активно используемых для моделирования промышленных задач аэродинамики и аэроакустики [106, 108–116], но до настоящего времени не применявшейся при решении кинетических уравнений. Основными этапами данной методологии следующие:

1. Выбор подходящей математической модели (приближенного интеграла столкновений), адекватно описывающей моделируемое течение
2. Построение с помощью внешней программы сеточной модели задачи, с использованием в шестимерном фазовом пространстве тетрапризматических расчетных сеток (для оценочных расчетов) и гексаэдральных многоблочных сеток (для расчетов повышенной точности)
3. Разработка неявного численного метода решения кинетического уравнения на произвольных сетках.
4. Создание программного комплекса для современных суперЭВМ с десятками тысяч ядер.
5. Проведение большой серии верификационных расчетов с целью проверки точности выбранного приближенного кинетического уравнения и численного метода, сравнение с экспериментальными данными и

численными результатами других авторов.

6. Проведение основных расчетов, вывод результатов в форматах, пригодных для использования в ведущих программах визуализации, и выдача рекомендаций разработчикам.

В данной главе обосновывается выбор кинетических уравнений с приближенными интегралами столкновений, описывается переход к удобной в вычислениях безразмерной форме записи, выписываются уравнения для двух важных предельных случаев, относящихся к течениям с малыми градиентами макроскопических величин.

## 1.2 Кинетическое уравнение с точным интегралом столкновений

Состояние разреженного газа в точке  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  в момент времени  $t$  определяется функцией распределения молекул по скоростям  $f = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ , где  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  — компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям  $(x_1, x_2, x_3)$  соответственно. В общем случае функция распределения находится путем решения нелинейного интегро-дифференциального уравнения Больцмана. Для одноатомного газа уравнение Больцмана для функции распределения молекул по скоростям в отсутствие внешних сил в общепринятых обозначениях имеет следующий вид [1, 2, 6]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \int (f' f'_1 - f f_1) g d\sigma d\vec{\xi}_1 \equiv I(f, f). \quad (1.2.1)$$

Здесь  $I(f, f)$  - больцмановский интеграл столкновений,  $d\sigma = bdbd\varepsilon$  - эффективное сечение рассеивания молекул,  $g = |\vec{\xi} - \vec{\xi}_1|$  - относительная скорость сталкивающихся молекул.

Макроскопические переменные, такие как числовая плотность  $n$ , температура  $T$ , давление  $p$ , средняя скорость газа  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$  и поток тепла  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ , выражаются через функцию распределения в виде интегралов по пространству молекулярных скоростей:

$$n = \int f d\xi, \quad n\mathbf{u} = \int \xi f d\xi, \quad \frac{3}{2}mnR_gT + \frac{1}{2}mnu^2 = \frac{1}{2}m \int \xi^2 f d\xi,$$

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2}m \int \mathbf{v}v^2 f d\xi, \quad \mathbf{v} = \xi - \mathbf{u}, \quad \rho = mn, \quad p = \rho R_g T, \quad (1.2.2)$$

$$u^2 = u_\alpha u_\alpha, \quad v^2 = v_\alpha v_\alpha, \quad \xi^2 = \xi_\alpha \xi_\alpha, \quad d\xi = d\xi_x d\xi_y d\xi_z.$$

Здесь  $m$  – масса молекулы,  $R_g$  – газовая постоянная, предполагается суммирование по повторяющимся греческим индексам в пределах от 1 до 3. Для прикладных задач важно находить компоненты вектора потока энергии на поверхность тела  $\mathbf{M}$  и силы  $\mathbf{P}$ :

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2} \int \xi \xi^2 f d\xi, \quad \mathbf{P} = m \int \xi_n \xi f d\xi. \quad (1.2.3)$$

С помощью выражений (1.2.3) для задачи внешней аэродинамики можно определить безразмерные коэффициенты давления, трения и теплоотдачи:

$$c_p = \frac{P_n - p_\infty}{\frac{1}{2}\rho_\infty U_\infty^2}, \quad c_f = \frac{P_\tau}{\frac{1}{2}\rho_\infty U_\infty^2}, \quad c_h = \frac{E_n}{\frac{1}{2}\rho_\infty U_\infty^3}, \quad (1.2.4)$$

Здесь индексом  $\infty$  обозначены параметры набегающего потока,  $P_n$  – нормальная компонента силы,  $P_\tau$  – касательная компонента силы,  $E_n$  – нормальная компонента потока энергии  $\mathbf{M}$ .

Трудность численного решения кинетического уравнения (1.2.1) в основном состоит в его высокой размерности, присутствии многомерного интеграла столкновений и сложности построения неявных методов продвижения по времени. Последние результаты в построении методов решения данного уравнения для трехмерных задач приводятся в работах [59–61, 70,

86–88, 158–160]. Основным достижением данных работ является создание более экономичных методов вычисления интегралов столкновения, включая подходы с адаптацией сетки в скоростном пространстве. Несмотря на достигнутый в последние годы прогресс, разработанные на основе данных методов комплексы программ не могут быть использованы для решения практически важных задач со сложной геометрией, так как их использование требует неприемлемо больших затрат машинного времени. В настоящее время основным применением программных комплексов, реализующих численное решение точного уравнения Больцмана, является получение высокоточных решений простых задач.

### 1.3 Кинетические уравнения с приближенным интегралом столкновений

Альтернативой прямому численному решению уравнения Больцмана является метод построения последовательности модельных кинетических уравнений, которые аппроксимируют уравнение Больцмана. Кинетические уравнения с приближенными (модельными) интегралами столкновений предлагались многими авторами, см. например [50, 155, 161–163]. В работах [2, 45] предложена идея построения аппроксимирующей последовательности модельных уравнений, которая состоит в следующем. Заменим в уравнении (1.2.1) точный интеграл столкновений  $I(f, f)$  некоторым приближенным интегралом  $J(f, \mathbf{a})$ , так что кинетическое уравнение принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J(f, \boldsymbol{\xi}, \mathbf{a}(\mathbf{x}, t)).$$

По аналогии с точным уравнением, оператор  $J$  записывается в виде

$$J = Q^+ - \nu f,$$

где  $Q^+$  – приближенный оператор обратных столкновений,  $\nu$  – приближенная частота столкновений. Для нахождения вектора неизвестных параметров  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$  используются условия аппроксимации точного интеграла - приближенным:

$$\int \phi(\boldsymbol{\xi}) I(f, f) d\xi = \int \phi(\boldsymbol{\xi}) J(f, \mathbf{a}) d\xi, \quad \phi(\boldsymbol{\xi}) = 1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}^2, \dots \quad (1.3.5)$$

Отметим, что первые пять интегралов от  $I(f, f)$  в (1.3.5) равняются нулю и выражают законы сохранения массы, импульса и энергии сталкивающихся молекул. Если ограничиться только этими условиями, то приходим к известной модели БГК (или Крука) [155]. Данную модель можно называть кинетическим уравнением пятимоментного приближения (см. [2], стр. 94).

Для построения более точного приближенного интеграла столкновений необходимо использовать интегралы от  $\boldsymbol{\xi}$ , которые вычисляются аналитически только для так называемых псевдомакселловских молекул. В результате получается кинетическое уравнение восьмимоментного приближения, получившее название модели Шахова, или S-модели [2, 45]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} &= J, \quad J = \nu(f^+ - f), \quad \nu = \frac{p}{\mu}, \\ f^+ &= f_M \left[ 1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr}) S_\alpha c_\alpha \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) \right], \quad S_i = \frac{1}{n} \int c_i c^2 f d\boldsymbol{\xi}, \\ f_M &= \frac{n}{(2\pi R_g T)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \mathbf{c} = \mathbf{v} / \sqrt{2R_g T}, \quad c^2 = c_\beta c_\beta. \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

Здесь  $\mu = \mu(T)$  - вязкость, число Прандтля для одноатомного газа  $\text{Pr} = 2/3$ . В частном случае  $\text{Pr} = 1$  модель Шахова сводится к известной и более простой модели БГК [155], минусом которой является неверный переход к режиму сплошной среды ввиду неправильного значения числа Прандтля.

Сравнения с расчетами по точному уравнению Больцмана, методу Монте-Карло и с экспериментальными данными показали хорошую точность S-модели [9, 47, 48, 51, 53, 164, 165]. Успешное применение S-модели стимулировало ее обобщение на течения двухатомного газа с учетом вращательных степеней свободы, и развитие соответствующего численного метода [50, 55, 166]. Тем не менее, несмотря на относительную простоту, S-модель является сложным интегро-дифференциальным уравнением высокой размерности, численное решение которого требует развития высокоточных параллельных численных методов решения.

Отметим, что хотя S-модель не учитывает внутренние степени свободы, ее все же можно применять для моделирования течений двухатомных газов, используя правильное значение числа Прандтля. Фактическая точность результатов должна оцениваться для конкретного класса задач.

## 1.4 Граничные и начальные условия

На границах области в физическом пространстве необходимо задать  $f$  для молекул, вектор скорости которых направлен внутрь расчетной области ( $\xi_n > 0$ ). В работе рассматриваются несколько вариантов задания граничных условий на поверхности тела. Основным является условие диффузного отражения с полной тепловой аккомодацией к температуре поверхности  $T_w$ . При этом функция распределения отраженных молекул записывается в виде:

$$f_w = \frac{n_w}{(2\pi R_g T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2R_g T_w}\right). \quad (1.4.7)$$

Здесь  $\xi_n$  - проекция вектора скорости молекулы  $\xi$  на внешнюю нормаль к поверхности тела. Плотность  $n_w$  отраженных молекул находится из усло-

вия непротекания:

$$n_w = \sqrt{\frac{2\pi}{R_g T_w}} N_i, \quad N_i = - \int_{\xi_n < 0} \xi_n f d\xi. \quad (1.4.8)$$

Второе условие соответствует испарению или конденсации с заданными плотностью  $n_w$  и температурой  $T_w$ :

$$f_w = \frac{n_w}{(2\pi R_g T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2R_g T_w}\right), \quad \xi_n > 0. \quad (1.4.9)$$

При наличии у задачи плоскостей симметрии возможно использование граничного условия зеркального отражения молекул

$$f(t, \mathbf{x}, \xi) = f(t, \mathbf{x}, \xi_1), \quad \xi_1 = \xi - 2\xi_n \mathbf{n} \quad (1.4.10)$$

Для граничного условия набегающего потока функция распределения задается в виде локально-максвелловской с заданными значениями макроскопических величин.

В качестве начальных условий, как правило, используется локально - максвелловская функция, соответствующая некоторому начальному распределению макроскопических величин:

$$f(t = 0, \mathbf{x}, \xi) = f_M(n_0(\mathbf{x}), \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), T_0(\mathbf{x}), \xi) \quad (1.4.11)$$

## 1.5 Безразмерная форма расчетных уравнений

Для проведения расчетов удобнее использовать безразмерные переменные. Пусть  $n_*$ ,  $T_*$ ,  $l_*$  — некоторые характерные значения числовой плотности, температуры и пространственной координаты. Введем характерные

значения давления и скорости  $p_* = mn_*R_gT_*$ ,  $v_* = \sqrt{2R_gT_*}$ . Перейдем к безразмерным переменным по формулам

$$\begin{aligned} \mathbf{x}' &= \frac{\mathbf{x}}{l_*}, & t' &= \frac{v_*}{l_*}t, & n' &= \frac{n}{n_*}, & p' &= \frac{p}{p_*}, & T' &= \frac{T}{T_*}, \\ \mathbf{u}' &= \frac{\mathbf{u}}{v_*}, & \boldsymbol{\xi}' &= \frac{\boldsymbol{\xi}}{v_*}, & \mathbf{q}' &= \frac{\mathbf{q}}{mn_*v_*^3}, & f' &= \frac{f}{n_*v_*^3}. \end{aligned} \quad (1.5.12)$$

Степень разреженности газа характеризуется параметром разреженности  $\delta$ , который обратно пропорционален числу Кнудсена  $\text{Kn}$ , определенному по длине свободного пробега  $\lambda_*$ :

$$\delta = \frac{l_*p_*}{\mu_*v_*} = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{Kn}}, \quad \text{Kn} = \frac{\lambda_*}{l_*}.$$

Далее будем обозначать безразмерные величины теми же буквами, что и размерные, поскольку это не приводит к неоднозначности. Кинетическое уравнение принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} &= J, \quad J = \nu(f^+ - f), \\ f_M &= \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \nu = \frac{\delta p}{\mu}, \\ f^+ &= f_M \left( 1 + \frac{8}{5}(1 - \text{Pr})S_\alpha c_\alpha \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) \right), \quad \mathbf{S} = \frac{\mathbf{q}}{nT^{3/2}}. \end{aligned} \quad (1.5.13)$$

Для макроскопических величин получаем:

$$\left( n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2}nT + nu^2, \mathbf{q} \right) = \int \left( 1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}v^2 \right) f d\boldsymbol{\xi}. \quad (1.5.14)$$

В безразмерных переменных граничное условие диффузного отражения (1.4.7) переписывается в виде

$$f_w = \frac{n_w}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right), \quad n_w = 2\sqrt{\frac{\pi}{T_w}}N_i, \quad N_i = - \int_{\xi_n < 0} \xi_n f d\boldsymbol{\xi}. \quad (1.5.15)$$

Для условия испарения/конденсации (1.4.9) имеем

$$f_w = \frac{n_w}{(\pi T_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right), \quad \xi_n > 0. \quad (1.5.16)$$

Выражения (1.2.3) для векторов силы и потока энергии принимают вид

$$\mathbf{P} = 2 \int \xi_n \boldsymbol{\xi} f d\xi, \quad \mathbf{M} = \frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi} \xi^2 f d\xi. \quad (1.5.17)$$

При этом аэродинамические коэффициенты (1.2.4) выражаются через безразмерную функцию распределения как

$$c_p = \frac{P_n - p_\infty}{S_\infty^2}, \quad c_f = \frac{P_\tau}{S_\infty^2}, \quad c_h = 2 \frac{E_n}{S_\infty^3}, \quad (1.5.18)$$

где  $S_\infty$  - безразмерная скорость набегающего потока, иногда называемая скоростным числом.

## 1.6 Линеаризованные формулировки

Для некоторых классов задач можно предположить, что функция распределения слабо отклоняется от максвелловской с некоторыми фиксированными параметрами  $n_0$ ,  $T_0$ . Примером такой задачи является изотермическое течение разреженного газа через трубу конечной длины, соединяющую два резервуара, под действием малого перепада давлений между резервуарами [136, 146, 167]. При таких предположениях кинетическое уравнение можно линеаризовать, полагая:

$$f = f_0(1 + h), \quad h = h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}), \quad |h| \ll 1, \quad (1.6.19)$$

$$f_0 = \frac{n_0}{(\pi T_0)^{3/2}} \exp(-\xi^2/T_0) \equiv \frac{1}{\pi^{3/2}} \exp(-\xi^2).$$

Здесь учтено, что в безразмерных переменных  $n_0 = T_0 = p_0 = 1$ . Макроскопические величины

$$\hat{n} = \frac{n - n_0}{n_0}, \quad \hat{T} = \frac{T - T_0}{T_0}, \quad \mathbf{u}, \quad \mathbf{q}$$

определяются через функцию  $h$  по формулам

$$\begin{aligned} \hat{n} &= \int f_0 h d\boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{u} = \int \boldsymbol{\xi} f_0 h d\boldsymbol{\xi}, \quad \frac{3}{2}(\hat{n} + \hat{T}) = \int \xi^2 f_0 h d\boldsymbol{\xi}, \\ \mathbf{q} &= -\frac{5}{4}\mathbf{u} + \frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi} \xi^2 f_0 h d\boldsymbol{\xi}, \quad d\boldsymbol{\xi} = d\xi_x d\xi_y d\xi_z. \end{aligned} \quad (1.6.20)$$

Кинетическое уравнение для возмущения  $h$  получается подстановкой (1.6.19) в полное уравнение (1.5.13) и линеаризации около  $|h| \ll 1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial h}{\partial x_\alpha} &= \delta(h^{(S)} - h), \\ h^{(S)} &= \hat{n} + 2\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\xi} + (\xi^2 - \frac{3}{2})\hat{T} + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr})(\xi^2 - \frac{5}{2})\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\xi}, \\ \hat{S}_i &= 2q_i. \end{aligned} \quad (1.6.21)$$

Граничные условия для (1.6.21) формулируются следующим образом. На поверхности тела для граничного условия диффузного отражения с заданной температурой поверхности  $\hat{T}_w$  в общем виде имеем

$$h = h_w = \hat{n}_w + (\xi^2 - \frac{3}{2})\hat{T}_w, \quad \xi_n = \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} > 0, \quad (1.6.22)$$

В настоящей работе в случае трехмерного линеаризованного уравнения всегда будет использоваться постоянная температура поверхности, так что  $\hat{T}_w = 0$  и для плотности отраженных молекул  $\hat{n}_w$  получаем выражение

$$\hat{n}_w = -2\sqrt{\pi} \int_{\xi_n < 0} \xi_n f_0 h d\boldsymbol{\xi}. \quad (1.6.23)$$

На бесконечности для функции распределения молекул, летящих внутрь расчетной области, задается обычное условие

$$h = h_\infty = \frac{n_\infty - n_0}{n_0}. \quad (1.6.24)$$

Дальнейшее упрощение уравнения возможно в случае большого значения отношения длины к радиусу  $L/a \gg 1$ , так что концевыми эффектами

можно пренебречь. Детали вывода расчетного уравнения для возмущения функции распределения  $h_1$  могут быть найдены в [168, 169]. Уравнение становится двумерным в физических переменных и имеет вид

$$\begin{aligned}\xi_x \frac{\partial h_1}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial h_1}{\partial y} &= \delta(h_1^{(s)} - h_1) - \xi_z \frac{dh_w}{dz}, \\ \frac{\partial h_w}{\partial z} &= \frac{d\hat{n}_w}{dz} + \left(\xi^2 - \frac{3}{2}\right) \frac{d\hat{T}_w}{dz} = K_p + \left(\xi^2 - \frac{5}{2}\right) K_T, \\ h_1^{(s)} &= 2\xi_z u_z + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr}) \hat{S}_z \xi_z \left(\xi^2 - \frac{5}{2}\right), \quad \hat{S}_z = 2q_z.\end{aligned}\tag{1.6.25}$$

Здесь  $K_p$ ,  $K_T$  - постоянные значения градиентов давления и температуры вдоль оси трубы (в данном случае оси  $oz$ ). Скорость газа и поток тепла вычисляются по формулам

$$u_z = \int \xi_z f_0 h_1 d\boldsymbol{\xi}, \quad q_z = \frac{1}{2} \int \xi_z \left(\xi^2 - \frac{5}{2}\right) f_0 h_1 d\boldsymbol{\xi}.\tag{1.6.26}$$

Отметим, что решение уравнения (1.6.25) линейно пропорционально величинам  $K_p$ ,  $K_T$ .

## 2 Численный метод

### 2.1 Основные требования к численному методу

Несмотря на относительную простоту по сравнению с точным уравнением Больцмана, кинетическое уравнение с приближенным интегралом столкновений является сложным интегро-дифференциальным уравнением высокой размерности, численное решение которого сопряжено с несколькими трудностями. Заметим, что приближенный (модельный) интеграл столкновений является функцией от макропараметров газа, которые определяются интегрированием функции распределения в пространстве скоростей. Первой трудностью является высокая размерность данного интегро-дифференциального уравнения, в пространственном случае равная шести (три координаты в физическом пространстве и еще три - в скоростном). Второй трудностью является наличие разрывов функции распределения, которые неизбежно возникают при наличии выпуклых граничных поверхностей. Разрывы распространяются вдоль характеристик уравнения. Хотя в двухмерном случае для простых задач, таких как расчет обтекание пластины [47, 170, 171], возможно построение методов решения с выделением разрывов, в общем случае программная реализация алгоритма явного вы-

деления разрывов чрезвычайно затруднена. Более того, при использовании алгоритма второго порядка аппроксимации численный метод остается линейным и потому согласно теореме С.К. Годунова немонотонен. Таким образом, требуется использовать методы сквозного счета второго порядка аппроксимации.

Численное решение кинетического уравнения при малых числах Кнудсена сопряжено с дополнительными вычислительными трудностями, которые отсутствуют для больших чисел Кнудсена. Первая трудность возникает при расчете стационарных задач методом итераций. С уменьшением числа Кнудсена кинетическое уравнение становится жестким; при этом число Кнудсена играет роль малого параметра, стоящего перед дифференциальной частью уравнения. Как показывает практика, метод неявных итераций эффективен при больших и умеренных числах Кнудсена; однако при уменьшении числа Кнудсена, например до  $Kn = 1/10$ , сходимость метода существенно ухудшается. Поэтому необходимо стационарное решение строить методом установления по времени, что добавляет еще одну координату (размерность задачи) - время. Вторая трудность численного решения кинетического уравнения связана с необходимостью использовать конечно-разностные схемы высокого порядка аппроксимации, по крайней мере по пространству. В противном случае эффекты схемной вязкости будут забирать физические неравновесные эффекты [172]. Как уже говорилось, при этом такие схемы должны быть монотонными.

Третья трудность численного решения кинетического уравнения связана с необходимостью использования методов решения, консервативных по интегралу столкновений. Если при больших числах Кнудсена для уменьшения ошибки в выполнении законов сохранения достаточно сгустить сетку

по молекулярной скорости, то при малых числах Кнудсена такой подход требует неоправданно подробных сеток. Имеющиеся в литературе подходы к построению консервативных схем для модельного уравнения можно разделить на два типа. В первом типе методов функции  $f^S$  из приближенного интеграла столкновений умножается на корректирующий многочлен от  $\xi$ . Коэффициенты этого многочлена находятся таким образом, чтобы выполнялись законы сохранения массы, импульса и энергии [172, 173]. Во втором типе методов для уравнений типа БГК макроскопические параметры находятся непосредственно из условий консервативности, записанных в виде интегральных сумм на скоростной сетке [80, 81]. В настоящей работе используется подход автора [121, 174], применимый к произвольной кинетической модели, включая модели Е.М. Шахова и В.А. Рыкова.

В данной главе описывается разработанный оригинальный вариант метода дискретных скоростей решения кинетического уравнения с приближенными интегралами столкновений. Основное внимание уделяется описанию метода решения кинетического уравнения в трехмерном случае (1.5.13). В общих чертах, разработанный метод представляет собой квазимонотонную полностью неявную схему Годунова, консервативную по приближенному интегралу столкновений. Возможно использование как многоблочных структурированных, так и произвольных неструктурированных сеток независимо как в физическом, так и в скоростном пространствах; при этом дискретизация оператора переноса является неоднородной и может подстраиваться под тип используемых элементов сетки. Перечисленные особенности численного метода решения выгодно отличают его от имеющихся в литературе и позволяют создавать на его основе эффективные параллельные программные комплексы.

В настоящей работе решение осесимметричных задач всегда строится на основе решения трехмерных уравнений. Хотя это и кажется парадоксальным, но полностью трехмерный метод решения оказывается более быстрым, более точным и более надежным, чем методы, основанные на решении кинетического уравнения в осесимметричной системе координат [81, 167, 173]. При использовании данной системы координат в кинетическом уравнении появляются члены с производными по молекулярной скорости и с коэффициентом, обратно пропорциональным радиальной координате. Данные особенности уравнения сильно усложняют процедуру решения. В результате, для решения задачи в пространственной постановке может потребоваться меньше узлов расчетной сетки, чем для осесимметричной.

Отметим, что трехмерный численный метод можно использовать и для решения плоских задач, задавая пространственную сетку специального вида. Такой подход позволяет развивать только один программный код вместо трех. Тем не менее, для некоторых приложений, таких как расчет течений в очень длинных каналах, использование двумерных уравнений (1.6.25) и соответствующего специализированного метода решения все же является предпочтительным.

## 2.2 Общий вид метода дискретных скоростей

Рассмотрим общую схему метода решения. В пространстве молекулярных скоростей несобственные интегралы от функции распределения заменим собственными интегралами по некоторой ограниченной области. Вид области и ее размеры определяются решаемой задачей. Введем расчет-

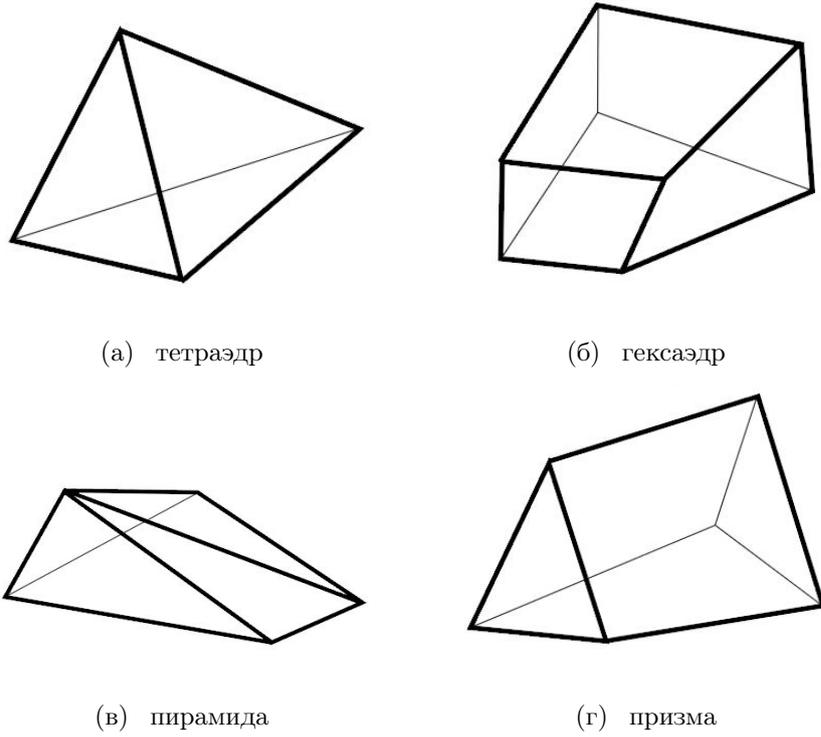


Рисунок 2.1 – Типы ячеек сетки.

ную (как правило, конечно-объемную) сетку с узлами (центрами ячеек)  $\xi_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})$ . Общее количество узлов сетки обозначим через  $N_\xi$ .

Основным критерием выбора размеров расчетной области в переменных  $\xi$  является малость отбрасываемых интегралов от “хвостов” функции распределения. При этом размер ячейки  $\Delta\xi$  должен быть достаточным для разрешения пиков функции распределения. Как правило, в качестве оценки при выборе данных параметров используется интегрирование локально-максвелловской функции

$$f = n(\pi T)^{-3/2} \exp(-(\xi - \mathbf{u})^2/T).$$

Практика расчетов показывает, что использование следующих выражений обеспечивает выполнение перечисленных требований:

$$|\xi_k| \leq \max_{i=1}^{N_{space}} (\alpha \sqrt{T} + |u_k|), \quad \Delta\xi \geq (0.5 \dots 1) \min_{i=1}^{N_{space}} T, \quad k = 1, 2, 3. \quad (2.2.1)$$

Здесь параметр равен  $\alpha = 3 \dots 4$ . Следует заметить, что в данной работе используется единая скоростная сетка для всех ячеек пространственной сетки, в отличие от адаптивных методов, описанных в [61, 82].

Функции  $\mathbf{f}$ ,  $\mathbf{f}^{(S)}$  будем задавать в центрах ячеек скоростной сетки, интерпретируя их как векторы длины  $N_\xi$  с компонентами

$$f_j = f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j), \quad f_j^{(S)} = f^{(S)}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j), \quad (2.2.2)$$

Кинетическое уравнение (1.5.13) переписывается в виде системы из  $N_\xi$  уравнений, записанной в векторной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\Xi_\alpha \circ \mathbf{f}) = \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \nu(\mathbf{f}^{(S)} - \mathbf{f}). \quad (2.2.3)$$

Здесь  $\Xi_k$  — вектор, компонентами которого являются  $k$ -компонента молекулярной скорости во всех узлах сетки:  $\Xi_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \xi_{k3}, \dots, \xi_{kN_\xi})^T$ ; через  $\circ$  обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов:  $c = a \circ b$  — вектор с компонентами  $c_i = a_i b_i$ . Отметим, что в существующей литературе, как правило, используется скалярная запись кинетического уравнения для заданного значения  $\boldsymbol{\xi}_j$ . Однако для реализации на современных многоядерных процессорах с векторными регистрами удобнее использовать запись кинетического уравнения как векторного закона сохранения (2.2.3). Помимо удобства программной реализации, векторная запись (2.2.3) дает возможность новой по сравнению ранними работами [127] интерпретации неявной разностной схемы для кинетического уравнения.

Далее, расчетная область в физических переменных разбивается на контрольные объемы (ячейки)  $V_i$  тетраэдральной, пирамидальной, гексаэдральной или призматической формы, см. рис. 2.1. Каждая из ячеек образована несколькими треугольными или четырехугольными гранями  $A_{li}$ , где  $l$

— номер грани. Общее количество ячеек равняется  $N_{\text{space}}$ . Для получения разностной схемы уравнение (2.2.3) интегрируется по четырехмерному контрольному объему области  $V_i \times [t^n, t^{n+1}]$ , объемный интеграл от конвективных производных преобразуется в сумму поверхностных интегралов по граням расчетной ячейки от потоков  $\Phi_k$ , спроецированных на нормали к граням.

Интегрирование по ячейке  $V_i$  и стандартная аппроксимация интегралов от потоков и правой части приводит к полудискретной схеме

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i &= -\frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \Phi_{li} + \mathbf{J}_i, \\ \Phi_{li} &= \int_{A_{li}} (\xi_{nli} \circ \mathbf{f}) dS, \quad \xi_{nil} = n_{1l} \mathbf{E}_1 + n_{2l} \mathbf{E}_2 + n_{3l} \mathbf{E}_3. \end{aligned} \tag{2.2.4}$$

Формулы (2.2.4) определяют общий шаблон для построения противопоточной схемы типа С.К. Годунова на произвольной шестимерной сетке в фазовом пространстве. Выбор конкретной разностной схемы семейства (2.2.4) определяется способом аппроксимации правой части  $\mathbf{R}_i$  и методом продвижения по времени.

## 2.3 Вычисление правой части разностной схемы

Вычисление величины  $\mathbf{R}_i$  в каждой ячейке физического пространства требует задания способа вычисления численных потоков схемы  $\Phi_{li}$  и модельного интеграла столкновений  $\mathbf{J}_i$ .

## 2.3.1 Аппроксимация оператора переноса

### Общая схема

Для нахождения потоков схемы  $\Phi_{li}$  с помощью квази-монотонной схемы второго порядка аппроксимации необходимо знать значения функции распределения в центре грани. Как обычно бывает в противопоточных схемах типа С.К. Годунова, для каждой грани пространственной сетки имеются два значения функции распределения  $\mathbf{f}^-$ ,  $\mathbf{f}^+$ , соответствующие экстраполяции из каждой из двух прилегающих ячеек (индексы ячейки и грани опущены для простоты). Для граней сетки, лежащих на границах расчетной области в физическом пространстве, значение  $\mathbf{f}^+$  находится из граничного условия. Значение потока находится по формуле

$$\Phi_{li} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\xi}_{nli} \circ [\mathbf{f}^- + \mathbf{f}^+ - \text{sign}(\boldsymbol{\xi}_{nli}) \circ (\mathbf{f}^+ - \mathbf{f}^-)] |A_{li}|. \quad (2.3.5)$$

Возможно использование и более простой формулы типа потока Русанова [175].

Сначала рассмотрим процедуру экстраполяции значений функции распределения на внутренние грани сетки, после чего опишем процедуру аппроксимации граничных условий. Подробное описание различных подходов к данной проблеме можно найти в книгах [176, 177] и других. В общем случае, реконструкция решения из средних значений внутри ячейки в схеме высокого порядка аппроксимации дается формулой

$$\mathbf{f}_{li} = \mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{li}^{\text{correction}}. \quad (2.3.6)$$

Для нахождения поправки  $\mathbf{f}_{li}^{\text{correction}}$  могут использоваться различные подходы. В наиболее общем способе величины  $\mathbf{f}_{li}$  выражаются с помощью метода

наименьших квадратов. Для гексаэдральных ячеек можно использовать более экономичную аппроксимацию по направлениям. Далее общим подходом для произвольной сетки является использование неоднородной разностной схемы, в которой для областей с гексаэдральными ячейками используется реконструкция по направлениям, в то время как в остальных областях – метод наименьших квадратов.

## Метод наименьших квадратов

Для построения разностной схемы используется кусочно-линейное представление неизвестной величины в пространственной ячейке, обеспечивающее второй порядок аппроксимации по пространству. Ниже для простоты будем выписывать расчетные формулы для скалярной величины  $f$ , опуская индекс скоростной сетки и зависимость от времени  $t$ .

В общем случае коэффициенты кусочно-линейного представления вычисляются при помощи использования значений  $f$  в ячейках шаблона реконструкции, который строится путем рекурсивного добавления к ячейке  $V_i$  ее непосредственных соседей и всех соседей ячеек, уже добавленных к шаблону. Процесс добавления ячеек сетки к шаблону продолжается до тех пор, пока не достигнуто требуемое число ячеек в шаблоне. Для удобства обозначений введем дополнительно к глобальному индексу пространственной переменной  $i$  локальную нумерацию ячеек в шаблоне с помощью индекса  $m$ , начинающегося от нуля. Ячейка  $V_i$  обозначается  $V_{i0}$ , а все последующие ячейки в шаблоне как  $V_{im}$ ,  $m = 1, \dots, M$ . Соответственно значения функции распределения в ячейках шаблона обозначаются как  $f_{im}$ ; при этом  $f_i \equiv f_{i0}$ .

Нахождение коэффициентов реконструкционного многочлена удобно ве-

сти в локальной системе координат. Пусть  $(x_k, y_k, z_k)$ ,  $k = 1, \dots, 4$  - координаты четырех вершин элемента  $V_i$ . Переход к локальной системе координат  $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  для ячейки  $V_i$  задается линейным преобразованием вида

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_4 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 & y_4 - y_1 \\ z_2 - z_1 & z_3 - z_1 & z_4 - z_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix}. \quad (2.3.7)$$

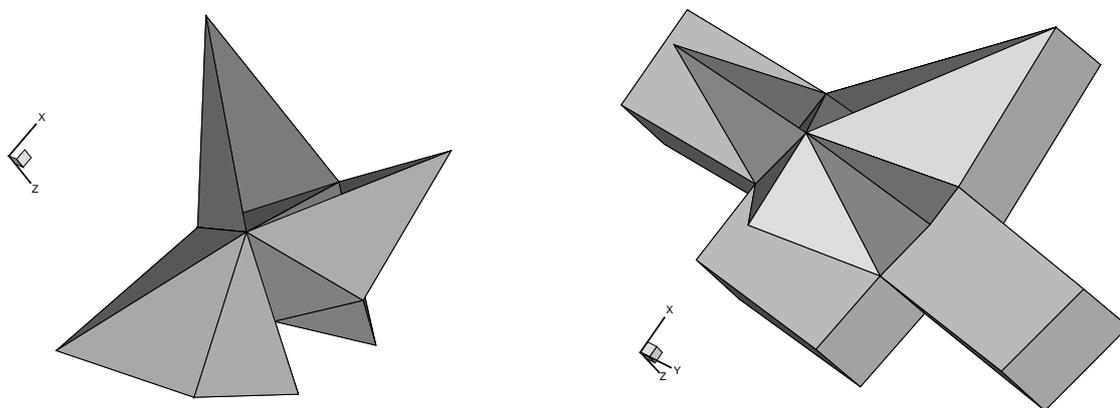
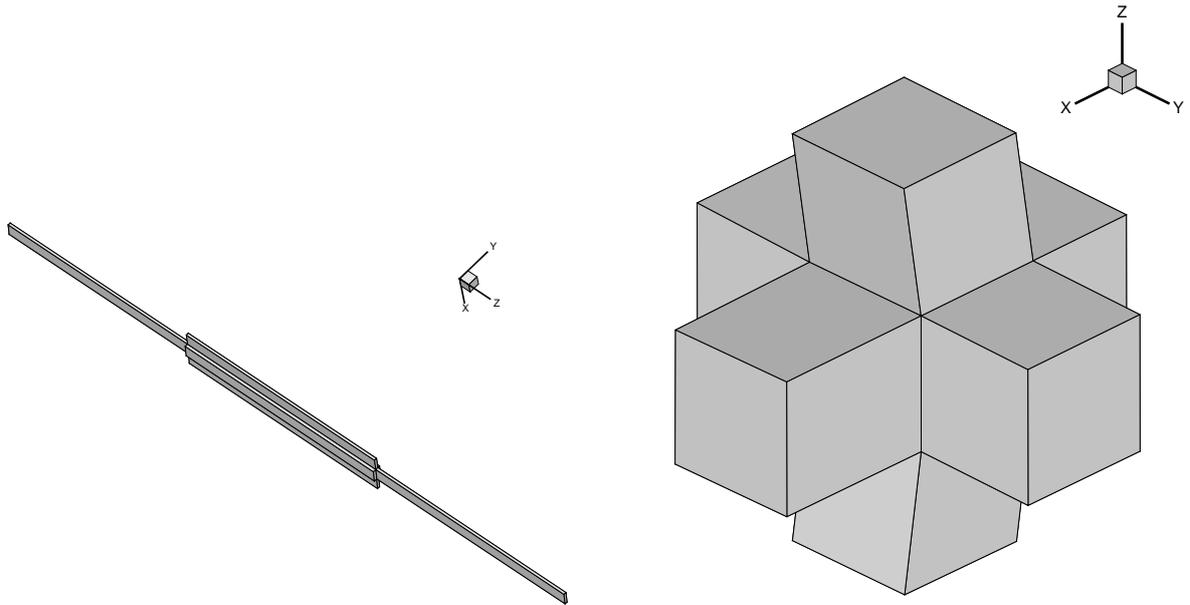


Рисунок 2.2 – Типичные шаблоны схемы второго порядка на неструктурированной сетке в физической системе координат.

Шаблон реконструкции в локальной системе координат получается применением обратного отображения и состоит из ячеек  $V'_{im}$ ,  $m = 0, \dots, M$ . В настоящем пакете программ полагается  $M = 9$  для тетраэдральных ячеек и  $M = 6$  для всех остальных. На фигуре 2.2 показаны типичные шаблоны схемы второго порядка на неструктурированной сетке. Фигура 2.3 иллюстрирует влияние перехода к локальной системе координат для шаблона в пристеночном слое. Видно, что ячейки шаблона становятся близкими к идеальным.

В локальной системе координат  $\hat{\mathbf{x}}$  реконструкционный многочлен  $p_i(\hat{\mathbf{x}})$



(а) исходная система координат  $(x, y, z)$

(б) локальная система координат  $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

Рисунок 2.3 – Преобразование шаблона при переходе из физической в локальную систему координат для гексаэдральной сетки.

записывается в виде разложения по базисным функциям  $e_k(\hat{\mathbf{x}})$ :

$$p_i(\hat{\mathbf{x}}) = f_i + \sum_{k=1}^3 a_k e_k(\hat{\mathbf{x}}), \quad e_k \equiv \hat{x}_k - \frac{1}{V'_{i0}} \int_{V'_{i0}} \hat{x}_k d\hat{\mathbf{x}}. \quad (2.3.8)$$

Для нахождения неизвестных коэффициентов  $a_k$  потребуем, чтобы для каждой ячейки  $V'_{im}$ ,  $m = 1, \dots, M$  из шаблона среднее значение многочлена  $p_i$  равнялось среднему значению решения  $f_{im}$ :

$$\frac{1}{V'_{im}} \int_{E'_{im}} p_i(\hat{\mathbf{x}}) d\hat{\mathbf{x}} = f_{i0} + \frac{1}{V'_{im}} \sum_{k=1}^3 \int_{V'_{im}} a_k e_k d\hat{\mathbf{x}} = f_{im}. \quad (2.3.9)$$

Для линейной (не ТВД) схемы можно положить средние значения решения  $f_i^{(l)}$  по каждой грани  $l$  ячейки равными средним значениям реконструкционного многочлена  $p_i^{(l)}$ . Подставляя выражения для коэффициентов многочлена в (2.3.8) и вычисляя поверхностные интегралы от базисных

функций, получаем  $p_i^{(l)}$  в виде линейной комбинации значений функции распределения в ячейках шаблона:

$$p_i^{(l)} = \sum_{m=0}^M \omega_{ilm} f_{im} \quad (2.3.10)$$

Коэффициенты  $\omega_{ilm}$  не зависят от значений функции распределения и определяются только геометрией пространственной сетки.

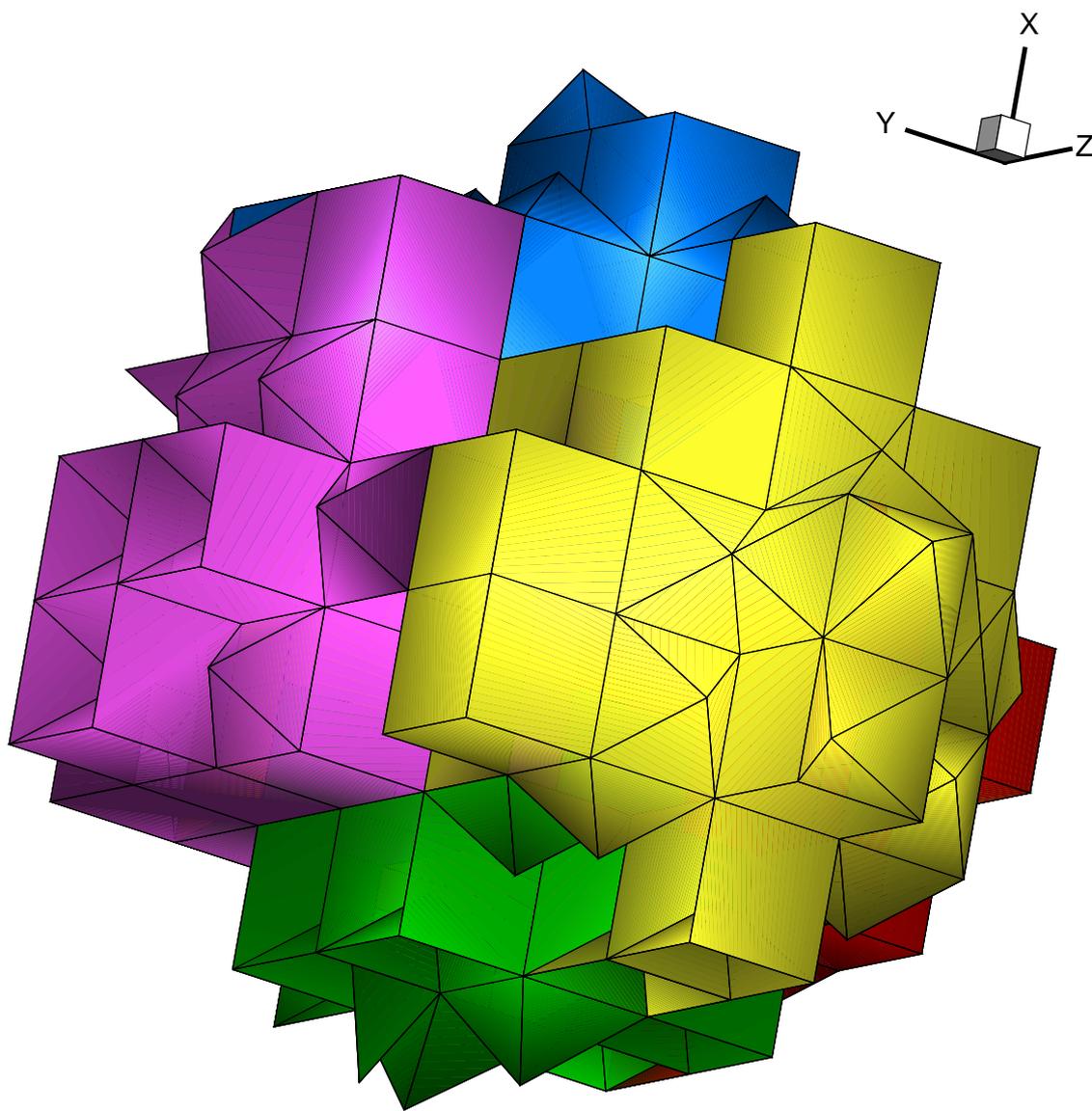


Рисунок 2.4 – Шаблон схемы WENO третьего порядка.

Как известно, линейные схемы высокого порядка точности немонотонны в областях быстрого изменения решения (теорема Годунова 1959 года).

Для подавления паразитных осцилляций в блок реконструкции вводится так называемый ограничитель наклонов  $\psi_i$ . Использование ограничителя равносильно замене степеней свободы  $a_k$  на модифицированные степени свободы  $\tilde{a}_k = \psi_i a_k$  в формуле (2.3.8). Для расчета стационарных течений с умеренными градиентами решения удобен гладкий ограничитель наклонов, предложенный в [178]. Обозначим через  $f_{\min}$ ,  $f_{\max}$  минимальное и максимальное значение функции распределение в ячейках  $i$  и ее непосредственных соседях. Тогда величины  $\psi_i$  определяется формулой в [178]:

$$\psi_i = \min_l \psi_{il}, \quad \psi_{il} = \begin{cases} \Psi\left(\frac{\Delta_1}{\Delta_l}\right), & p_i^{(l)} > f_i, \\ \Psi\left(\frac{\Delta_2}{\Delta_l}\right), & p_i^{(l)} \leq f_i, \end{cases}, \quad (2.3.11)$$

где функция  $\Psi$  дается формулой

$$\Psi(y) = \frac{y^2 + 2y}{y^2 + y + 2}$$

и

$$\Delta_1 = f_{\max} - f_i, \quad \Delta_2 = f_{\min} - f_i, \quad \Delta_l = p_i^{(l)} - f_i.$$

Для задач гиперзвуковой аэродинамики более надежным является ограничитель Барта [179].

Окончательно средние значения функции распределения  $f_i^{(l)}$  по граням ячейки, используемые в вычислениях, выражаются через средние значения  $p_i^{(l)}$  по формуле

$$f_i^{(l)} = f_i + \psi_i \cdot (p_i^{(l)} - f_i) = f_i + \psi_i \cdot \left( \sum_{m=0}^M \omega_{ilm} f_{im} - f_i \right). \quad (2.3.12)$$

При этом схема первого порядка соответствует выбору  $\psi_i \equiv 0$ , в то время как  $\psi_i \equiv 1$  приводит к линейной (не ТВД) схеме второго порядка аппроксимации по пространству.

Описанная процедура реконструкции на неструктурированной сетке позволяет использовать полиномиальные представления более высокого порядка. Однако проведенные тестовые расчеты показали, что кусочно-линейное представление, соответствующее схеме второго порядка аппроксимации, обеспечивает наилучшее соотношение между точностью получаемых результатов и затратами машинного времени. Это объясняется тем, что ТВД ограничитель сводит на нет потенциальные преимущества использования схемы более высокого порядка. Данную проблему можно обойти при помощи использования схемы типа WENO. Для произвольной неструктурированной трехмерной сетки такая схема разработана в [129]. На фигуре 2.4 показана система шаблонов такой схемы для третьего порядка аппроксимации, полученная объединением так называемых угловых или секторных шаблонов. Схема типа WENO обеспечивает равномерно высокий порядок аппроксимации, но при этом значительно более медленная. Поэтому на настоящем этапе работ было принято решение ей не пользоваться.

## Реконструкция по направлениям

Для гексаэдральных ячеек возможно использование локально-одномерного подхода, в котором значения  $f_{li}$  находятся одномерной интерполяцией вдоль сеточных линий в направлении нормали к грани:

$$f_{li}^{\text{correction}} = \psi_{li}^{1d}(\mathbf{S}_L, \mathbf{S}_R)\Delta_l, \quad (2.3.13)$$

где  $\Delta_l$  – расстояние от центра ячейки  $i$  до центра грани  $l$ ;  $\mathbf{S}_L$  и  $\mathbf{S}_R$  - левая и правая оценки наклона решения. Метод применим только для гексаэдров и частично призм. Для нахождения ограничителя наклонов могут использоваться подходы minmod [180, 181], van Leer [182] и другие.

Полученная таким образом аппроксимация оператора переноса применима для расчета разрывных течений.

### 2.3.2 Аппроксимация граничных условий

Чтобы обеспечить расчет граничного условия зеркального отражения от плоскости симметрии (1.4.10) скоростная сетка строится таким образом, чтобы обеспечить попадание вектора скорости отраженной молекулы  $\xi_1 = \xi - 2\xi_n \mathbf{n}$  в узел сетки. После этого расчет г.у. тривиален:

$$f(t, \mathbf{x}, \xi) = f(t, \mathbf{x}, \xi_1)$$

Далее, для всех граней ячеек сетки, лежащих на поверхности тела, интегрированием по  $\xi$  вычисляются макроскопические параметры, входящие в выражения для функции распределения отраженных молекул для граничного условия диффузного отражения (1.5.15). При заданной температуре поверхности  $T_w$  плотность отраженных молекул  $n_w$  на каждом шаге по времени

$$n_w = -\frac{N_i}{N_r}, \quad N_i = \sum_{\xi_n < 0} (\xi_n f)_j \omega_j \xi,$$

$$N_r = \frac{1}{(\pi T_w)^{3/2}} \sum_{\xi_n \geq 0} \left[ \xi_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{T_w}\right) \right]_j \omega_j$$

В результате обеспечивается точное выполнение условия непротекания

$$\sum_{\xi_n \geq 0} [\xi_n f_w]_j \omega_j + \sum_{\xi_n < 0} [\xi_n f]_j \omega_j \equiv 0$$

Обобщение на случай равновесной температуры поверхности требует итераций (детали опущены).

Остальные граничные условия рассчитываются тривиально.

Важно отметить, что описанная численная реализация граничных условий сохраняет консервативность метода по правой части.

### 2.3.3 Расчет макроскопических величин

#### Общая схема

Опишем способ вычисления макроскопических величин, обеспечивающий консервативность метода по правой части. Рассмотрим прямую аппроксимацию выражений для макропараметров газа

$$(\mathbf{U}, \mathbf{q}) = \left( n, n\mathbf{u}, \frac{3}{2}nT + n\mathbf{u}^2, \mathbf{q} \right) = \sum_{\alpha} \left( 1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \frac{1}{2}\mathbf{v}v^2 \right)_{\alpha} f_{\alpha}\omega_{\alpha}. \quad (2.3.14)$$

С другой стороны, интегрируя схему с весами  $1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2$ , мы должны получить дискретный аналог уравнений сохранения массы, импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{U} + D_h(\mathbf{\Pi}) = \boldsymbol{\delta}_{\text{Kn}}, \quad \boldsymbol{\delta}_{\text{Kn}} = \sum_{\alpha} (1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2)^T J_{\alpha}\omega_{\alpha}. \quad (2.3.15)$$

В идеальном мире (при точном интегрировании) схема должна быть консервативна

$$\boldsymbol{\delta}_{\text{Kn}} \equiv \mathbf{0} \quad (2.3.16)$$

Однако при использовании прямой аппроксимации для  $\mathbf{U}$  мы получаем неконсервативную схему [121], причем величина ошибки обратно пропорциональна числу Кнудсена:

$$|\boldsymbol{\delta}_{\text{Kn}}| \approx \frac{1}{\text{Kn}} O(\Delta\xi^2).$$

Для проведения расчетов с большим числом шагов по времени или малыми числами Кнудсена необходимо обеспечить выполнение условия (2.3.16).

Основная идея предлагаемого метода расчета макроскопических величин состоит в прямой аппроксимации условий на модельный интеграл столкновений (1.3.5), использовавшихся при выводе S-модели. Рассмотрим отдельно случай полного нелинейного интеграла S- или БГК-модели и случай линеаризованного интеграла в S-модели.

## Метод для нелинейного интеграла столкновений

Вектор простых переменных  $\mathbf{W} = (n, \mathbf{u}, T, \mathbf{q})^T$  находится из системы уравнений

$$\mathbf{H}(\mathbf{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{\xi} \\ \xi^2 \\ \mathbf{v}v^2 \end{pmatrix}_j (f^{(S)} - f)_j \omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2 \text{Pr } \mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.3.17)$$

Здесь  $\omega_j$  - веса обычной квадратуры второго порядка точности.

Для каждой пространственной ячейки  $i$  система из восьми уравнений (2.3.17) решается методом Ньютона

$$\begin{aligned} M(\mathbf{W}^{s-1})(\mathbf{W}^s - \mathbf{W}^{s-1}) &= -\mathbf{H}(\mathbf{W}^{s-1}), \\ M &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{W}}, \quad s = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.3.18)$$

В качестве начального приближения используются значения, полученные из приближения (2.3.14).

Медленной частью метода Ньютона является вычисление матрицы Якоби  $M$  системы уравнений (2.3.17), представляющей из себя дискретные суммы от производных  $f^{(S)}$  по макроскопическим переменным. Точное вычисление  $M$  требует существенных затрат машинного времени, особенно для более сложных кинетических моделей, таких как модель Рыкова двух-атомного газа [50]. Следуя [123], перейдем в выражении для матрицы  $M$  от численного интегрирования к точному (аналитическому). В результате

$M$  выражается в явном виде через макропараметры газа

$$J \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u & n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w & 0 & 0 & n & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e & 2nu & 2nv & 2nw & \frac{3}{2}n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} - \text{Pr} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} - \text{Pr} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} - \text{Pr} \end{pmatrix}. \quad (2.3.19)$$

Как правило, использование приближенной формулы для  $M$  существенно уменьшает время счета для  $\delta \leq 1000$ , несмотря на потерю квадратичной сходимости итераций.

В частном случае  $\text{Pr} = 1$  (модель БГК [155]) функция  $f^{(S)}$  не содержит значений вектора потока тепла, так что последние три уравнения системы (2.3.17) становятся избыточными. В данном случае система (2.3.17) совпадает с методом, предложенным в [80, 183] для БГК модели.

### Метод для линеаризованного интеграла столкновений

Для линеаризованного интеграла столкновений система уравнений (2.3.17) значительно упрощается:

$$\int \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{\xi} \\ \xi^2 \\ \boldsymbol{\xi}\xi^2 \end{pmatrix} f_0(h^{(S)} - h)d\boldsymbol{\xi} + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2\text{Pr}\mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.3.20)$$

В дискретном виде получаем линейную систему

$$\sum_{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi_{\alpha} \\ \xi_{\alpha}^2 \\ \xi_{\alpha} \xi_{\alpha}^2 \end{pmatrix} f_{0,\alpha} h_{\alpha}^{(S)} \omega_{\alpha} + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \\ 2 \text{Pr } \mathbf{q} \end{pmatrix} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{b} = \sum_{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi_{\alpha} \\ \xi_{\alpha}^2 \\ \xi_{\alpha} \xi_{\alpha}^2 \end{pmatrix} f_{0,\alpha} h_{\alpha} \omega_{\alpha},$$

которую можно переписать в матричном виде как линейную систему

$$H \hat{\mathbf{W}} = \mathbf{b}. \quad (2.3.21)$$

для вектора простых переменных

$$\hat{\mathbf{W}} = (\hat{n}, u_1, u_2, u_3, \hat{T}, q_1, q_2, q_3)^T.$$

Решение находится без итераций. Постоянная матрица  $H$  размера  $8 \times 8$  вычисляется один раз при инициализации счета и не зависит от номера пространственной ячейки или номера шага по времени. Вектор правой части пересчитывается на каждом шаге по времени.

## 2.4 Дискретизация по времени

Для стационарных задач решение находится с помощью метода установления. Используется неявная одношаговая схема без итераций на верхнем слое, которая выводится обычным образом. Рассмотрим

$$\frac{\Delta \mathbf{f}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1}, \quad \Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{f}_i^{n+1} - \mathbf{f}_i^n.$$

Выполняя линейризацию, получаем

$$\frac{\Delta \mathbf{f}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^n + \left( \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{f}} \right) \Delta \mathbf{f}_i. \quad (2.4.22)$$

Проведем приближенную линейризацию (2.4.22) по времени. Для модельного интеграла столкновений будем опускать достаточно сложную зависимость макроскопических величин от  $\mathbf{f}_i$  так что

$$\mathbf{J}_i^{n+1} \approx \mathbf{J}_i^n - \nu_i^n \Delta \mathbf{f}_i. \quad (2.4.23)$$

Проводя линейризацию численного потока, будем учитывать зависимость потока от значений  $\mathbf{f}$  в ячейке  $i$  и ее непосредственном соседе  $i_l$  по грани  $l$ , что соответствует противопоточной схеме первого порядка аппроксимации по пространству. Дополнительно учтем, что  $j$ -ая компонента  $\Phi_{il}^{n+1}$  зависит только от  $j$ -ых компонент  $\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_{i_l}$ . Получаем

$$\Phi_{li}^{n+1} \approx \Phi_{li}^n + \frac{\partial \Phi_{li}^n}{\partial \mathbf{f}_i^n} \circ \Delta \mathbf{f}_i + \frac{\partial \Phi_{li}^n}{\partial \mathbf{f}_{i_l}^n} \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l}. \quad (2.4.24)$$

Здесь учтено, что производные от  $\Phi_{li}$  по  $\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_{i_l}$  являются диагональными матрицами и могут быть записаны в виде векторов.

Численный поток на нижнем слое  $\Phi_{li}^n$  вычисляется с полным порядком аппроксимации по пространству, используя необходимое количество соседних ячеек.

Группируя члены, получаем линейризованный вид разностной схемы для компоненты  $j$  вектора  $\mathbf{f}$ :

$$\begin{aligned} & \left( \left( \frac{1}{\Delta t} + \nu_i^n \right) \mathbf{I}_\xi + \frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \frac{\partial \Phi_{li}^n}{\partial \mathbf{f}_i^n} \right) \circ \Delta \mathbf{f}_i \\ & + \frac{1}{|V_i|} \sum_{l=1} \left( \frac{\partial \Phi_{li}^n}{\partial \mathbf{f}_{i_l}^n} \right) \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l} = \mathbf{R}_i^n. \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

Здесь  $\mathbf{I}_\xi = \text{diag}(1, \dots, 1)^T$  — единичная матрица размерности  $N_\xi$ . Соотношения (2.4.25) связывают приращения решения в ячейке  $V_i$  и ее соседях для всех ячеек пространственной сетки  $i = 1, \dots, N_{\text{space}}$ .

При решении системы (2.4.25) будем полагать, что в левой части численный поток аппроксимируется противопоточной схемой первого порядка.

Возможны два варианта метода. В первом варианте метода для получения явных выражений для производных от численного потока используется функция Русанова с аргументами  $\mathbf{f}_i$ ,  $\mathbf{f}_{i_l}$ . Неявный конечно-объемный метод (2.4.25) переписывается в виде

$$\begin{aligned} & \left( \left( \frac{1}{\Delta t} + \nu_i^n \right) \mathbf{I}_\xi + \frac{1}{2|V_i|} \sum_l (\boldsymbol{\xi}_{il} + \xi_{il}^{\max} \mathbf{I}_\xi) |A_{il}| \right) \circ \Delta \mathbf{f}_i + \\ & \frac{1}{2|V_i|} \sum_l (\boldsymbol{\xi}_{il} - \xi_{il}^{\max} \mathbf{I}_\xi) |A_{il}| \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l} = \mathbf{R}_i^n. \end{aligned} \quad (2.4.26)$$

Более аккуратным способом дискретизации левой части является использование точной противопоточной формулы. Неявная схема (2.4.25) переписывается в виде

$$\begin{aligned} & \left( \left( \frac{1}{\Delta t} + \nu_i^n \right) \mathbf{I}_\xi + \frac{1}{2|V_i|} \sum_l \boldsymbol{\xi}_{il} \circ (\mathbf{I}_\xi + \text{sign} \boldsymbol{\xi}_{il}) |A_{il}| \right) \circ \Delta \mathbf{f}_i + \\ & \frac{1}{2|V_i|} \sum_l \boldsymbol{\xi}_{il} \circ (\mathbf{I}_\xi - \text{sign} \boldsymbol{\xi}_{il}) |A_{il}| \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l} = \mathbf{R}_i^n. \end{aligned} \quad (2.4.27)$$

Схема (2.4.26) является менее трудозатратной с вычислительной точки зрения. С другой стороны, форма записи метода (2.4.27) является более надежной при расчете течений газа с большими градиентами решения. Вариант (2.4.26) является новым и предлагается в настоящей работе, в то время как (2.4.27) использовался во всех предыдущих работах автора.

Очевидно, что система (2.4.27) обладают свойством диагонального преобладания. Группируя члены и выделяя в явном виде коэффициент перед  $\Delta \mathbf{f}_{ij}$ , получаем

$$\mathbf{d}_i \circ \Delta \mathbf{f}_i + \Delta t \sum_l \mathbf{c}_{il} \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l} = \Delta t \mathbf{R}_i^n. \quad (2.4.28)$$

Соотношения (2.4.28) связывают приращения решения в ячейке  $V_i$  и ее соседях для всех ячеек пространственной сетки  $i = 1, \dots, N_{\text{space}}$ ; Для решения (2.4.28) используется приближенная факторизация разреженной матрицы

системы на основе подхода, предложенного в [184]. Система решается в два этапа. Сначала выполняется обратный ход метода, и находятся промежуточные значения  $\Delta \mathbf{f}_i^*$ :

$$\mathbf{d}_i \circ \Delta \mathbf{f}_i^* = - \sum_{l:i_l < i} \mathbf{c}_{il} \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l}^* + \Delta t \mathbf{R}_i^n, \quad i = N_{space}, \dots, 1. \quad (2.4.29)$$

Прямой ход метода выдает окончательные значения для приращения решения:

$$\mathbf{d}_i \circ \Delta \mathbf{f}_i = \Delta \mathbf{f}_i^* - \sum_{l:i_l > i} \mathbf{c}_{il} \circ \Delta \mathbf{f}_{i_l}, \quad i = 1, \dots, N_{space}. \quad (2.4.30)$$

Использование формул (2.4.29), (2.4.30) не требует хранения в памяти матрицы системы уравнений; выполняемое число операций линейно пропорционально числу пространственных ячеек  $N_{tot}$ . Сравнительные расчеты показывают, что один шаг неявного метода требует лишь на 30% больше машинного времени, чем соответствующего явного.

Описанный выше численный метод может быть использован для анализа нестационарных решений [185–187]. Для этого вместо (2.4.22) следует использовать обычный явный метод Рунге-Кутты либо схему расщепления по физическим процессам.

## 2.5 Метод решения двухмерного уравнения

Процедура решения в плоском случае в целом является частным случаем трехмерного метода и основана на работах [123–125, 128, 131]. Кинетическое уравнение (1.6.25) допускает упрощение, предварительное интегрирование по  $\xi_z$ . Имея в виду формулы (1.6.26) для необходимых макропараметров, введем редуцированные функции распределения, соответствующие инте-

гралы по  $\xi_z$

$$\phi(x, y, \xi_x, \xi_y) = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} \xi_z \\ \xi_z(\xi_z^2 - \frac{3}{2}) \end{pmatrix} h e^{-\xi_z^2} d\xi_z. \quad (2.5.31)$$

Заметим, что (2.5.31) отличается от способа понижения размерности задачи, использовавшегося в [84, 188].

Выражения (1.6.26) для скорости течения и теплового потока принимают вид

$$\begin{aligned} w &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g \phi_1 d\xi_x d\xi_y, \quad g(\zeta) = \frac{1}{\pi} e^{-\zeta^2}, \quad \zeta^2 = \xi_x^2 + \xi_y^2, \\ q &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(\zeta) [(\zeta^2 - 1)\phi_1 + \phi_2] d\xi_x d\xi_y. \end{aligned} \quad (2.5.32)$$

Уравнение для определения компонент  $\phi$  получается умножением уравнения для  $h$  на  $\xi_z g_0$ ,  $\xi_z(\xi_z^2 - 3/2)g_0$  и последующим интегрированием по  $\xi_z$  в пределах от  $-\infty$  до  $\infty$ . Имеем

$$\begin{aligned} D\phi &= \mathbf{J} + \mathbf{R}, \quad \mathbf{J} = \delta(\phi^{(S)} - \phi), \quad D = \xi_x \frac{\partial}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial}{\partial y}, \\ \phi^{(S)} &= \begin{pmatrix} w + \frac{4}{15}q(\zeta^2 - 1) \\ \frac{2}{5}q \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_1 + \frac{1}{2}\varepsilon_2(\zeta^2 - 1) \\ \frac{3}{4}\varepsilon_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.5.33)$$

Здесь  $\varepsilon_1 = K_p$ ,  $\varepsilon_2 = K_T$ . Граничные условия для  $\phi$  остаются такими же, как для  $h$  – однородными. Если форма сечения канала имеет линии симметрии, то размер пространственной области можно уменьшить, используя на этих линиях граничное условие зеркального отражения [123].

Численное решение кинетического уравнения (2.5.33) строилось с учетом на установление с помощью неявного консервативного метода высокого порядка аппроксимации. Запишем кинетическое уравнение (2.5.33) в неста-

ционарной форме:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -D(\phi) + \mathbf{J} + \mathbf{R}. \quad (2.5.34)$$

Введем в физических переменных  $\mathbf{x} = (x_1, x_2) = (x, y)$  расчетную сетку из треугольных и четырехугольных ячеек  $E_i$ . Обозначим  $|E_i|$  – площадь ячейки,  $A_{il}$  – длина стороны  $l$ ; полное число ячеек  $N_{tot}$ . В пространстве молекулярных скоростей  $(\xi_x, \xi_y)$  несобственные интегралы от функции распределения заменим собственными интегралами по квадратной области  $|\xi_x|, |\xi_y| \leq \xi_0$ ,  $\xi_0 = 4$ , которую разобьем на  $N_\xi \times N_\xi$  ячеек с центрами  $\xi_\alpha = (\xi_{x,\alpha}, \xi_{y,\alpha})$ . Пусть  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ ,  $\phi_\alpha^n = \phi(t^n, \mathbf{x}, \xi_\alpha)$ ,  $\delta_\alpha^n = \phi_\alpha^{n+1} - \phi_\alpha^n$ .

Неявный одношаговый метод для уравнения (2.5.34) имеет вид:

$$\begin{aligned} \{1 + \Delta t (\nu_0 + D_\alpha)\} \delta_\alpha^n &= \Delta t \mathbf{L}_\alpha^n, \\ \mathbf{L}_\alpha^n &= - (D_\alpha \phi_\alpha)^n + \mathbf{J}_\alpha^n + \mathbf{R}_\alpha. \end{aligned} \quad (2.5.35)$$

Здесь индекс  $\alpha$ , стоящий у оператора  $D$ , означает использование скорости  $\xi_\alpha$ . Переход от дифференциальной формы записи (2.5.35) к разностной осуществляется интегрированием по ячейке  $E_i$ . Пусть  $\phi_{i\alpha}^n$  – среднее значение  $\phi$  по пространству для ячейки  $E_i$  в момент времени  $t^n$  для узла скоростной сетки  $\xi_\alpha$ . Пространственные производные в левой части схемы аппроксимируются направленными разностями первого порядка точности, в то время как правая часть схемы аппроксимируется со вторым порядком точности с применением кусочно-линейной процедуры реконструкции (восстановления).

Обозначим через  $\sigma_l(i)$  номер ячейки, прилегающей к стороне  $l$  ячейки  $E_i$ . Разностная форма (2.5.35) принимает вид системы из  $N_{tot}$  линейных

уравнений для  $\delta_{i\alpha}^n$ :

$$(1 + \nu_i^n \Delta t) \delta_{i\alpha}^n + \frac{\Delta t}{|E_i|} \sum_l \xi_{\alpha nl} \hat{\mathbf{f}}(\delta_{i\alpha}^n, \delta_{\sigma_l(i),\alpha}^n) |A_{il}| = \Delta t \mathbf{L}_{i\alpha}^n, \quad (2.5.36)$$

$$\delta_{i\alpha}^n = \phi_{i\alpha}^{n+1} - \phi_{i\alpha}^n, \quad \mathbf{L}_{i\alpha}^n = -\frac{1}{|E_i|} (D_\alpha \phi_\alpha)^n + \mathbf{J}_{i\alpha}^n + \mathbf{R}_\alpha.$$

Величина  $\hat{\mathbf{f}}(\delta_{i\alpha}^n, \delta_{\sigma_l(i),\alpha}^n)$  в левой части схемы соответствует противопоточной аппроксимации оператора  $D$  с первым порядком точности и определяется как

$$\hat{\mathbf{f}}(\delta_{i\alpha}^n, \delta_{\sigma_l(i),\alpha}^n) = \frac{1}{2}(\delta_{i\alpha}^n + \delta_{\sigma_l(i),\alpha}^n) - \frac{1}{2} \text{sign}(\xi_{\alpha nl}) \cdot (\delta_{\sigma_l(i),\alpha}^n - \delta_{i\alpha}^n).$$

Здесь  $\xi_{\alpha nl}$  - проекция вектора  $\boldsymbol{\xi}_\alpha$  на единичную нормаль к стороне  $l$  ячейки  $E_i$ . В правой части схемы оператор  $D$ , действующий на функцию распределения на нижнем слое, аппроксимируется в виде суммы потоков через стороны ячейки:

$$(D_\alpha \phi_\alpha)^n = \sum_l \Phi_{i\alpha l}^n, \quad \Phi_{i\alpha l}^n = \int_{A_{il}} \xi_{\alpha nl} \phi(t^n, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_\alpha) dl. \quad (2.5.37)$$

Нахождение потоков  $\Phi_{i\alpha l}^n$  требует определения значений функции распределения на сторонах ячейки по известным средним значениям  $\phi_{i\alpha}^n$  с высоким порядком аппроксимации. Данные значения находятся путем построения в каждой пространственной ячейке  $E_i$  и всех значений  $\boldsymbol{\xi}_\alpha$  из скоростной сетки реконструкционного многочлена. Данный многочлен строится в локальной системе координат  $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y})$ , получаемой из физической системы координат  $x, y$  линейным преобразованием, и записывается в виде

$$\mathbf{p}_{i\alpha}(\hat{x}, \hat{y}) = \phi_{i\alpha}^n + \sum_{k=1}^K \mathbf{a}_k e_k(\hat{x}, \hat{y}), \quad (2.5.38)$$

где  $\{e_k\}$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , - базисные функции. Коэффициенты многочлена выражаются с помощью метода наименьших квадратов через значения функции распределения в так называемом шаблоне реконструкции, который

строится путем рекурсивного добавления к ячейке  $E_i$  всех ее непосредственных соседей.

Далее вычисляются средние значения по сторонам ячейки  $\phi_{i\alpha}^{(l)}$  по формуле

$$\phi_{i\alpha}^{(l)} = \phi_{i\alpha}^n + \psi \cdot (\mathbf{p}_{i\alpha}^{(l)} - \phi_{i\alpha}^n), \quad (2.5.39)$$

где  $\mathbf{p}_{i\alpha}^{(l)}$  – средние значения реконструкционного многочлена (2.5.38) для стороны  $l$ . Величина  $\psi$  является так называемым ограничителем наклонов, используемым для подавления паразитных осцилляций в областях быстрого изменения решения [180, 181]. При этом схема первого порядка соответствует выбору  $\psi \equiv 0$ , в то время как  $\psi \equiv 1$  приводит к линейной (не ТВД) схеме высокого порядка аппроксимации по пространству. В общем случае ограничитель наклонов зависит от значений решения в ячейке  $E_i$  и ее непосредственных соседях. В настоящей работе используется способ вычисления  $\psi$ , основанный на [189].

Величина  $\Phi_{i\alpha l}$  в общем случае находится по формуле

$$\Phi_{i\alpha l} = \frac{1}{2} \xi_{\alpha n l} \left( (1 + \text{sign}(\xi_{\alpha n l}) \phi_{i\alpha}^{(l)} + (1 - \text{sign}(\xi_{\alpha n l}) \phi_{\sigma_l(i)\alpha}^{(l_1)}) |A_{il}|, \quad (2.5.40)$$

где  $l_1$  – номер стороны ячейки  $\sigma_l(i)$ , прилегающей к стороне  $l$  ячейки  $i$ . В случае, когда для стороны  $l$  не существует соседней ячейки и  $\xi_{\alpha n l} < 0$ , для граничного условия диффузного отражения принимается  $\Phi_{i\alpha l} = 0$ . Для зеркального отражения молекул значение функции распределения в определении  $\Phi_{i\alpha l}$  находится параболической интерполяцией по  $\xi$ .

Вычисление модельного интеграла столкновений в правой части схемы (2.5.35), (2.5.36) требует знания скорости газа и теплового потока, которые определяются как интегралы от функции распределения по молекулярной скорости. Условия (1.3.5) для двухмерного линеаризованного уравнения

имеют вид:

$$\int \xi_z f_w(h^{(S)} - h) d\xi = 0, \quad \int \xi_z \xi^2 f_w(h^{(S)} - h) d\xi = -\frac{4}{3}q. \quad (2.5.41)$$

В разностной схеме макропараметры газа находятся с помощью перехода в (2.5.41) от функций  $h$ ,  $h^{(S)}$  к их интегралам  $\phi$ ,  $\phi^{(S)}$  и замены интегралов по молекулярной скорости составной квадратурной формулой с весами  $\omega_\alpha$ . Получаем систему линейных уравнений для  $w$ ,  $q$  (индексы  $i$  и  $n$  опущены для простоты):

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (2.5.42)$$

где коэффициенты  $a_{ij}$ ,  $b_i$  определяются по формулам

$$\begin{aligned} a_{11} &= \sum_{\alpha} g(\zeta_{\alpha}) \omega_{\alpha}, & a_{12} &= \frac{4}{15} \sum_{\alpha} (\zeta_{\alpha}^2 - 1) g(\zeta_{\alpha}) \omega_{\alpha}, \\ a_{21} &= \sum_{\alpha} \left( \zeta_{\alpha}^2 + \frac{3}{2} \right) g(\zeta_{\alpha}) \omega_{\alpha}, & a_{22} &= \frac{4}{3} + \frac{2}{15} \sum_{\alpha} \zeta_{\alpha}^2 (2\zeta_{\alpha}^2 + 1) g(\zeta_{\alpha}) \omega_{\alpha}, \\ b_1 &= \sum_{\alpha} g(\zeta_{\alpha}) (\phi_1)_{\alpha} \omega_{\alpha}, & b_2 &= \sum_{\alpha} g(\zeta_{\alpha}) \left[ \left( \zeta_{\alpha}^2 + \frac{3}{2} \right) \phi_1 + \phi_2 \right]_{\alpha} \omega_{\alpha}. \end{aligned}$$

При этом коэффициенты  $a_{ij}$  матрицы в левой части (2.5.42) не зависят от пространственной сетки.

Прямое решение линейной системы из  $N_{tot}$  уравнений (2.5.36) является медленной операцией. Поэтому производится приближенная факторизация разреженной матрицы системы на основе подхода, предложенного в работах [184, 190]. В результате число операций в численном решении системы для значений на верхнем слое линейно пропорционально числу пространственных ячеек.

В качестве критерия сходимости к стационарному режиму использовалось требование малости невязки в законе сохранения импульса

$$R = \max_i |R_i| \leq 10^{-4}, \quad R_i = \sum_{\alpha} (L_{i\alpha})_1 g(\zeta_{\alpha}) \omega_{\alpha}, \quad (2.5.43)$$

где оператор  $(L_{i\alpha})_1$  – первая компонента векторной величины  $L_{i\alpha}$ , определенной в (2.5.36).

Величина шага по времени  $\Delta t$  вычислялась по формуле

$$\Delta t = C \min_i d_i / \xi_0,$$

где  $C$  - число Куранта,  $d_i$  - характерный линейный размер ячейки  $E_i$ . В расчетах обычно принималось  $C = 10 \dots 25$ .

В заключение отметим, что описанный алгоритм решения плоских задач применим и к кинетическому уравнению с нелинейным приближенным интегралом столкновений.

## 3 Программные комплексы

### 3.1 Краткое описание разработанных программных комплексов

На основе описанных в предыдущей главе численных методов решения кинетического уравнения были разработаны программные комплексы “Несветай-2Д” , “Несветай-3Д” .

Пакет программ “Несветай-2Д” предназначен для решения плоских задач. Его основными особенностями являются

- использование расчетных сеток из треугольников и четырехугольников в физическом пространстве
- структурированная одноблочная скоростная сетка для интегрирования в пространстве скоростей
- одноуровневая модель параллельных вычислений на основе MPI [191]

На пакет программ получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017616495 от 07.06.2017.

Пакет программ “Несветай-3Д” предназначен для решения осесимметричных и трехмерных задач; при этом решение плоских задач может быть получено с помощью использования пространственной сетки специального

вида. Его основными особенностями являются

- использование произвольных сеток как в физическом, так и в скоростном пространствах, включая многоблочные гексаэдральные сетки и неструктурированные сетки типа тетра-призм.
- поддержка одноуровневой MPI и двухуровневой OpenMP + MPI моделей параллельных вычислений

Пакет состоит из 20000 строк кода на языке Фортран 2003 с элементами объектно - ориентированного программирования (ООП). На пакет получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017616295 от 06.06.2017.

Одним из основных результатов настоящей работы является создание пакета “Несветай-3Д” . В рамках данной диссертации пакет “Несветай-2Д” используется для вспомогательных расчетов при анализе течений в длинных каналах. Поэтому основное внимание в описании уделяется пакету программ “Несветай-3Д” .

Вычислительное ядро “Несветай-3Д” используется в пакете программ “FlowModellium” для расчета гиперзвуковых течений воздуха [120,154], что позволило дополнительно верифицировать программную реализацию базовых блоков дискретизации оператора переноса на задачах гиперзвуковой аэродинамики.

## **3.2 Двухуровневая модель параллельных вычислений**

Один из ключевых элементов программного комплекса “Несветай-3Д” – алгоритм реализации параллельных вычислений. В комплексе реализова-

на двухуровневая модель параллельных вычислений OpenMP + MPI с целью максимально эффективного использования современных суперЭВМ, состоящих из вычислительных узлов с многоядерными процессорами Intel Xeon (12 и более ядер на процессор, до 56 гиперпотокков на узел в системе РСК Торнадо) и сопроцессорами Intel Xeon Phi (61...72 физических ядер, 244...284 гиперпотокка на узел в системе РСК ПетаСтрим [119]). Многоуровневая модель параллельных вычислений активно развивается в последние годы в приложении к газодинамическим расчетам [110, 192, 193].

Каждый из двух уровней параллельной реализации основан на декомпозиции расчетной сетки.

### 3.2.1 Верхний уровень

На верхнем уровне используется технология MPI обмена данными между узлами суперЭВМ. При распределении вычислений между узлами суперЭВМ возможны два основных подхода к декомпозиции 6-мерной расчетной сетки.

В первом подходе используется декомпозиция расчетной сетки в скоростном пространстве. По-видимому, впервые данная идея использовалась для решения точного уравнения Больцмана с помощью явной разностной схемы в работе [194]. В рамках настоящей работы каждому процессору ставится в соответствие набор точек скоростного пространства, для которого строится решение кинетического уравнения с помощью неявного алгоритма. Для каждого процессора находятся вклады в интегральные суммы для вычисления макроскопических величин и плотности отраженных молекул в граничном условии. Далее на одном из процессоров эти значения складываются, и производится рассылка новых значений макропараметров на

каждый из процессоров.

В целом, расчет одного временного шага данного алгоритма состоит из следующих этапов:

1. На каждом процессоре вычисляется своя часть интегральных сумм для аппроксимации граничных условий на поверхности тел.
2. С помощью команды `MPI_AllReduce` интегральные суммы складываются на мастер-процессоре, вычисляются и рассылаются по всем процессорам значения плотности отраженных молекул в граничных ячейках сетки.
3. Для каждого узла скоростной сетки кинетическое уравнение решается с помощью неявной схемы, что включает в себя процедуру реконструкции, нахождения численных потоков и расчет модельного интеграла столкновений. Вычисляются вклады в интегральные суммы для нахождения макроскопических величин и вектора невязки (отклонения решения от стационарного режима).
4. С помощью команды `MPI_AllReduce` интегральные суммы для вычисления макроскопических величин и вектора невязки складываются на мастер-процессоре и результат рассылается по всем процессорам.
5. Вызов процедуры коррекции макропараметров с повторяющимся вызовом команды `MPI_AllReduce`.
6. Проверяется выполнение условия сходимости к стационарному режиму.

Второй подход является традиционным для вычислительной аэродинамики и основан на использовании декомпозиции сетки в физическом пространстве. При таком подходе каждому MPI-процессу соответствует один

```

    chunk_size = flow_ptr%mesh%element_chunk
!$OMP parallel do schedule(dynamic,chunk_size) private(icell,Stencil_ptr)
  do icell=1,mesh_ptr%NelementReconstruction
    Stencil_ptr => mesh_ptr%cellstencils(icell)
    Call AtomicReconstruction(flow_ptr,Stencil_ptr)
  enddo
!$OMP end parallel do

```

Рисунок 3.1 – Реализация OpenMP в “Несветай-3Д” .

блок сетки. Как правило, количество ячеек в каждом блоке должно быть близким; допускается дисбаланс в 1-3%. Данный подход использовался автором при разработке разностных схем решения уравнений Эйлера сжимаемого газа [122, 129].

Расчет одного временного шага с помощью параллельного многоблочного алгоритма на основе протокола MPI существенно отличается от одноблочного алгоритма и состоит из следующих этапов [134, 140]:

1. На каждом процессоре вычисляются интегральные суммы для аппроксимации граничного условия и находятся значения плотности отраженных молекул в граничных ячейках сетки.
2. Проводится обмен значениями функции распределения в фиктивных ячейках между блоками; данный этап требуется только для схемы высокого порядка.
3. Для каждой ячейки с помощью процедуры реконструкции находятся значения функции распределения  $f_{ial}^n$ .
4. Проводится обмен значениями функции распределения в гранях, принадлежащих двум блокам сетки.
5. Для каждой грани находятся численные потоки.
6. Кинетическое уравнение решается с помощью неявной схемы и вычисляется вектор невязки.

7. В каждой ячейке вычисляются макроскопические параметры газа, и проверяется выполнение условия сходимости к стационарному режиму.



Рисунок 3.2 – Схема OpenMP + MPI модели для MPI-разбиения по физическому пространству

### 3.2.2 Нижний уровень

На нижнем уровне организаций параллельных вычислений всегда используется разбиение сетки в физическом пространстве на блоки и использование технологии OpenMP. Разбиение строится с помощью вызова стандартных библиотек Metis [195, 196] на этапе инициализации счета. Так



Рисунок 3.3 – Схема OpenMP + MPI модели для MPI-разбиения по скорости

как скорость счета слабо зависит от качества разбиения, предпочтение отдавалось собственному коду, основанному на [196], несмотря на несколько худшую балансировку разбиения.

Продвижение на шаг по времени состоит из следующих шагов:

- Расчет значений на гранях  $f^\pm$  ( $i_{cell} = 1, \dots, N_{cell}$ )
- Вычисление потоков схемы ( $i_{face} = 1, \dots, N_{face}$ )
- Вычисление модельного интеграла столкновений ( $i_{cell} = 1, \dots, N_{cell}$ )
- Нахождение приращений решения по времени  $\Delta \mathbf{f}_i$  и обновление значений  $\mathbf{f}_i$

Для шагов (1) – (3) достаточно использовать простые циклы OMP с динамической балансировкой, см. рис. 3.1. Однако параллельная многопоточная реализация метода LU-SGS требует специальных усилий. В целом, каждая нить работает для своей части пространственной сетки; при этом для “фиктивных” ячеек используется приближение Якоби:

$$\Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{R}_i / d_i \quad (3.2.1)$$

При условии использования сеток адекватного качества скорость сходимости к стационарному решению не ухудшается.

Таким образом, реализация OpenMP + MPI подхода позволяет использовать на узле суперЭВМ произвольную комбинация MPI процессов и OpenMP нитей. Например, при расчете на системе Петастрим [119], установленной в СПбПУ им. Петра Великого, при использовании 256 узлов возможны следующие комбинации числа MPI процессов и OpenMP нитей:

- одноуровневая MPI модель: 61440 MPI процессов (по числу логических процессоров)
- двухуровневая OpenMP + MPI модель: 256 MPI процессов (по числу узлов системы); каждый процесс запускает 240 OpenMP нитей.

### 3.2.3 Сравнение вариантов организации вычислений

В [134, 140] для одноуровневой модели (чистый MPI) показано, что использование разбиения в пространстве скоростей может приводить к потере масштабируемости на большом числе ядер из-за использования коллективных операций при вычислении интегральных сумм. Помимо этого, существуют ограничения на размер пространственной сетки, поскольку вся структура связности хранится на каждом ядре и должна уместиться в опе-

ративной памяти. Использование двухуровневой модели позволяет обойти эти проблемы. Более того, расчеты показывают, что на современных многоядерных процессорах Intel Xeon (12-18 физических ядер) гибридная версия считает примерно в 1.5 раза быстрее версии кода с использованием только MPI.

На рис. 3.2,3.3 схематично представлены оба варианта организации параллельных вычислений для двухуровневой модели. С учетом опыта использования одноуровневой MPI-модели, можно сделать следующие выводы:

- MPI-разбиение по пространству не имеет ограничений на размер задачи, в целом лучше масштабируется и более универсальное (подходит для уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений).
- MPI-разбиение по скорости проще; использование OpenMP + MPI подхода практически нивелирует возможные проблемы с масштабируемостью на больших системах.

В дальнейшем при проведении расчетов основным будет являться вариант MPI-разбиения в пространстве скоростей как более удобный с практической точки зрения.

### 3.3 Описание основного пакета программ

#### “Несветай-3Д”

Общая структура программного комплекса “Несветай-3Д” представлена на рис. 3.4 и состоит из вычислительного ядра (базовой библиотеки), непосредственно кинетического решателя и препроцессоров сетки. Весь пакет написан на языке Fortran 2003 с элементами объектно-ориентированного

программирования. В приводимых в работе расчетах используются шестимерные расчетные сетки с числом ячеек до нескольких миллиардов, что требует использования многопроцессорных ЭВМ. Параллельная версия комплекса протестирована на суперкомпьютерах Университета Крэнфилда (Великобритания), МСЦ РАН, НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, СПбГТУ Петра Великого и МФТИ.

### 3.3.1 Вычислительное ядро

Вычислительное ядро программного комплекса представляет собой набор модулей, реализующих базовые операции, необходимые для проведения расчетов. Ядро реализует процедуры чтения пространственных сеток в форматах Neutral и StarCD и построение информации о связности сетки (соседи граней, ячейке и вершин). Для аппроксимации оператора переноса используются алгоритмы реконструкции скалярных функций методом наименьших квадратов на произвольной сетке (до 5 порядка аппроксимации включительно) и алгоритмы нелинейного ограничения решения типа Total Variation Diminishing (TVD). Для проведения параллельных вычислений с помощью MPI [191] реализовано создание дополнительных структур данных и алгоритмы параллельного ввода-вывода решения в файл перезапуска на основе процедур MPI I/O. Помимо этого, в ядро входят процедуры вывода пространственных и поверхностных данных в формате Tecplot.

Остановимся на особенностях представления данных в пакете. Неструктурированная расчетная сетка в физическом пространстве определяется списком координат узлов сетки, списком элементов и списком внешних граней. Общее количество узлов, элементов и граней равняется  $N_{vert}$ ,  $N_{space}$  и  $N_{face}$ , соответственно. В пакете допускаются элементы четырех типов:

гексаэдры, тетраэдры, призмы и пирамиды. Внешние грани этих элементов являются треугольниками или четырехугольниками. Отметим, что в общем случае четырехугольные грани могут быть неплоскими. Каждая грань задается списком вершин. Для элементов для удобства работы хранятся как список вершин, так и список граней. Топология сетки ставит в соответствие сеточным элементам (элементам и граням) набор составляющих их узлов (вершин) сетки. Обратная топология для каждого узла сетки хранит содержащиеся его элементы, что позволяет организовать быстрый доступ к соседним узлам выбранного узла и ко всем элементам, содержащим узел.

Для удобства работы представление данных в ядре реализовано с помощью структур (классов) языка Fortran 2003 с инкапсуляцией данных функций и процедур обработки. Основные структуры перечислены в таблице 3.1. Организация структур такова, что во время расчета программе доступны графы связности вершина-ячейка, вершина-грань, грань-ячейка, и ячейка-ячейка. Данная информация требуется для построения шаблона разностной схемы и при выводе данных в формате Tecplot.

### **3.3.2 Препроцессор пространственной сетки**

В случае использования MPI-декомпозиции в физическом пространстве (см. рис. 3.2) существует несколько способов программной реализации вычислений. Наиболее универсальным с точки зрения организации вычислений является подход, в котором разбиение сетки на блоки выполняется во время инициализации счета без использования предварительного разбиения. Однако он является исключительно сложным в программной реализации и излишне перегружает основной код программы.

Структура	Описание	Связи
VertexType	Вершина (узел)	Указатель на список присоединенных ячеек
FaceType	Грань	Указатели на вершины и прилегающие ячейки
ElementType	Ячейка	Указатели на вершины, грани и соседи
BoundaryFaceListType	Граничная поверхность	список граней
VolumeMeshType	Сетка	Списки вершин, граней, ячеек и граничных поверхностей

Таблица 3.1 – Описание основных структур (классов) вычислительного ядра

В настоящей работе выбран более простой и удобный подход, при котором подготовка сетки осуществляется до проведения расчетов. Для этих целей автором написана отдельная программа – препроцессор пространственной сетки. Расчетная сетка всегда трактуется как неструктурированная со сквозной нумерацией вершин, граней и ячеек. Работа с сеткой состоит из трех шагов. На первом шаге препроцессор читает сетку из файла средствами ядра пакета, готовит так называемый граф связности сетки и сохраняет его в отдельном файле. Далее этот граф передается на вход внешней программе Metis [195], которая производит разбиение графа на заданное число блоков и приписывает каждой ячейке номер MPI-процесса, которому она будет принадлежать.

На заключительном, третьем шаге, используя это разбиение, препроцессор распределяет ячейки сетки между процессорами, проводит перенумерацию всех элементов сетки (вершин, граней и ядер), обеспечивает необ-



Рисунок 3.4 – Структура программного комплекса “Несветай-3Д” .

ходимое для проведения расчетов перекрытие между блоками и создает списки ячеек для обмена данными между всеми процессорами. Вся необходимая информация по каждому блоку записывается в отдельный файл.

При инициализации счета каждый MPI-процесс читает с диска свою часть сетки и локальные списки номеров ячеек из буферных слоев, данными из которых необходимо обмениваться с другими MPI-процессами. Благодаря такой организации программы параллельная и последовательная версии решателя практически совпадают, что очень удобно для разработки и модернизации исходного кода.

### 3.3.3 Препроцессор скоростной сетки

В случае использования MPI-декомпозиции в скоростном пространстве (см. рис. 3.3) необходимо распределить узлы скоростной сетки между MPI-процессами. Напомним, что в текущей версии пакета “Несветай-3Д” используется сквозная нумерация ячеек скоростной сетки. Сама сетка может строиться во внешних программах, таких как Ansys ICEM CFD или Fluent Gambit, и записываться в форматах Neutral или StarCD. Наиболее простым способом подготовки сетки для MPI-вычислений является простое механическое разбиение на равные блоки по индексу сетки. Однако такое разбиение не позволяет с достаточной простотой реализовать важное граничное условие зеркального отражения.

Для решения проблемы работы с граничными условиями зеркального отражения от плоскостей симметрии, в программном комплексе реализован следующий алгоритм. Сначала во внешнем пакете строится скоростная сетка для четверти или половины скоростного пространства. Далее, с помощью препроцессора производится отражение узлов сетки для покрытия всей области интегрирования по скорости. При этом производится специальная перенумерация узлов так, чтобы каждый MPI-процесс имел все необходимые для реализации граничного условия зеркального отражения скоростные узлы.

### 3.3.4 Кинетический решатель

Кинетический решатель является надстройкой над ядром и реализует разностную схему решения кинетического уравнения (2.2.4) на произвольной неструктурированной сетке в шестимерном фазовом пространстве. С

точки зрения программной реализации, для решателя создана структура “Flow\_Case\_Setup\_Type”, которая хранит в себе класс “сетка” и все необходимые данные для метода решения.

Основные расчетные величины (макроскопические параметры и функция распределения) задаются в центрах ячеек пространственной сетки. Данные представляются в виде блочных векторов размерности  $N_{\text{space}}$  по  $M$  элементов в блоке, где  $N$  - число элементов и  $M$  – число величин, заданных в элементе. Например, поля физических переменных представляются в виде блочного вектора с размером блока, равным 8: плотность, три компоненты скорости, температура и три компоненты вектора потока тепла. Для функции распределения длина блока равна числу узлов скоростной сетки  $N_{\xi}$ .

Помимо значений макроскопических величин и функции распределения в центрах ячеек пространственной сетки, кинетический решатель хранит в оперативной памяти значения функции распределения на гранях сетки (по два значения на грань) и правую часть  $\mathbf{R}_i$ . Заметим, что для стационарных течений возможен экономичный способ организации расчетов, при котором значения функции распределения на гранях не сохраняются в памяти ЭВМ.

В скоростном пространстве расчетная сетка задается списком узлов и весами квадратурной формулы. Могут использоваться различные типы сеток:

- гексаэдральная одноблочная сетка в декартовой системе координат
- сетка в цилиндрической системе координат для моделирования течений в круглых трубах
- произвольная неструктурированная сетка, состоящая в общем виде

из тетраэдров, пирамид и призм.

В программной реализации разностной схемы алгоритм реконструкции применяется в каждой ячейке сразу для всего вектора  $\mathbf{f}$ ; результат записывается в массив значений  $\mathbf{f}^+$ ,  $\mathbf{f}^-$  размера  $N_{face}$ . Далее в одномерном цикле по списку граней находится численный поток через каждую грань  $i_{face}$ . Окончательно вклад в правую часть схемы  $\mathbf{R}_i^n$  находится с учетом ориентации грани относительно ячейки.

### 3.3.5 Организация расчетов

Рассмотрим общую последовательность организации расчетов с помощью комплекса “Несветай-3Д” для различных классов течений.

Первым шагом является подготовка пространственной расчетной сетки с граничными условиями и скоростной расчетной сетки с учетом условий зеркального отражения. Как правило, для построения сеток используются пакеты Ansys ICEM CFD и Fluent Gambit. Сетки выводятся в формате StarCD 3.2 либо Gambit Neutral. После этого производится подготовка обеих сеток для проведения параллельных вычислений с помощью процессоров пакета “Несветай-3Д” .

Далее требуется указать в конфигурационных файлах программы список граничных условий (тип и необходимые данные), выбор пространственной дискретизации, физической модели (БГК или S-модель) и типа решаемой задачи. В настоящее время в пакете “Несветай-3Д” реализована поддержка следующего класса задач: внешняя сверх- и гиперзвуковая аэродинамика; внутренние стационарные течения в микроканалах; нестационарные течения в каналах и в задачах испарения. В зависимости от типа задачи выбирается неявный решатель метода LU-SGS либо явная схема Рунге-Кутты.

### 3.4 Описание пакета “Несветай-2Д”

Пакет “Несветай-2Д” предназначен для численного моделирования плоских стационарных течений одноатомного разреженного газа на основе решения кинетического уравнения с интегралами столкновений БГК и Е.М. Шахова с помощью численного метода (2.5.35). Программа использует неявный метод решения высокого порядка аппроксимации и реализует одноуровневую модель параллельных вычислений на основе MPI-декомпозиции в пространстве скоростей. Выходные данные могут быть визуализированы в различных программах визуализации, включая Grapher и TecPlot. Основной областью применения данной программы для ЭВМ является анализ течений разреженного газа через микроканалы, например [128, 197, 198].

# 4 Течения в микроканалах

## 4.1 Введение

Исследование течений газа в микроканалах, микросоплах и других микроустройствах важно для многих приложений [7, 9, 156, 164, 199, 200]. К настоящему времени достаточно полно разработаны методы расчета течений в трубах и каналах бесконечной длины и простого поперечного сечения на основе линеаризованных кинетических моделей. Однако наибольший интерес представляет анализ нелинейной задачи о течении газа в канале конечной длины с учетом входного и выходного резервуаров. С точки зрения вычислительной физики, такая постановка задачи является наиболее сложной. Метод прямого статистического моделирования (ПСМ) позволяет строить решение задачи для относительно коротких труб и больших перепадов давления [156, 201], но становится очень затратным с увеличением относительной длины трубы либо с уменьшением разницы давлений в резервуарах. Что касается попыток применения общих (прямых) методов расчета течений в длинных капиллярах переменного сечения, то они нам неизвестны.

С другой стороны известна упрощенная постановка задачи, когда влиянием течений газа в резервуарах пренебрегают, а ограничиваются постанов-

кой граничных условий на торцах трубы: условием испарения-конденсации во входном сечении трубы и условием полного поглощения частиц в выходном ее сечении [55, 173, 202, 203]. Наконец для расчета расхода газа через длинную трубу предложена простая приближенная методика [8, 204], основанная на гипотезе плоских поперечных сечений и сводящая всякую нелинейную задачу к последовательности линейных. Данная методика предполагает, что концевыми эффектами можно пренебречь, и справедлива, таким образом, только для очень длинных труб. Степень достоверности приближений, лежащих в основе постановок задач в работах [8, 55, 173, 202, 203], до сих пор не рассматривалась. Во многих случаях важно уметь рассчитывать структуру струи, истекающей в вакуум. Методы исследования [8, 55, 173, 202, 203] не позволяют это сделать.

В данной главе рассматривается применение разработанных автором прямых методов численного решения кинетического уравнения к задачам течения разреженного газа через микроканалы произвольного сечения и длины. Цели проводимых расчетов состояли в построении прямого численного решения задачи об истечении разреженного газа через канал в полной постановке, исследовании влияния концевых эффектов и поперечного сечения на структуру течения и расход газа и сравнении расхода массы с результатами метода ПСМ.

Сформулируем общую постановку задачи течения разреженного газа из резервуара 1 в резервуар 2 через трубу длины  $L$ . В трубе газ течет слева направо от плоского входного сечения к плоскому выходному сечению. Давление в резервуарах 1, 2 обозначим  $p_1, p_2$ , температуры полагаем равными  $T_1 = T_2$ . Боковые стенки резервуаров и трубы поддерживаются при постоянной температуре  $T_1 = T_2 = T_w$ , на них происходит полная акко-

	Длина	Сечение	Причина течения	Модель
1.	$L/a = \infty$	произвольное	малый градиент $p, T$ вдоль оси	(1.6.25)
2.	$10 \leq L/a \leq 50$	круглое	малый перепад $p$	(1.6.21)
3.	$1 \leq L/a \leq 50$	круглое	истечение в вакуум	(1.5.13)
4.	$1 \leq L/a \leq 50$	коническое	истечение в вакуум	(1.5.13)
5.	$1 \leq L/a \leq 50$	составное круглое	истечение в вакуум	(1.5.13)
6.	$L/a = 10$	прямоугольное		(1.5.13)

Таблица 4.1 – Список расчетных точек для моделирования течений газа в трубе

модация импульса и энергии падающих молекул и диффузное отражение их с равновесной функцией распределения  $f_w$  при той же температуре и с плотностью  $n_w$ , определяемой условием непротекания.

Решение задачи зависит от следующих параметров: отношения давлений  $p_2/p_1$  покоящегося газа в резервуарах, параметра разреженности  $\delta$ , определенного по значениям макроскопических величин в резервуаре высокого давления и характерному размеру входного сечения трубы  $a$ , относительной длины  $L/a$ , формы поперечного сечения и закона вязкости.

В дальнейшем всегда принималось  $\mu = \sqrt{T}$ , что соответствует твердым сферам.

Основной расчетной величиной является безразмерный расход массы  $\dot{M}$  через входное сечение трубы:

$$\dot{M} = \int_A \rho u_n dS, \quad (4.1.1)$$

где  $u_n$  - нормальная компонента скорости газа. Отметим, что величина  $\dot{M}$  не меняется вдоль трубы. При анализе результатов удобно использовать два коэффициента, представляющих собой нормированные расходы массы.

Первый коэффициент  $Q$  определяется по формуле [157, 203]:

$$Q = \dot{M} / \dot{M}_0^{\text{отв}}, \quad \dot{M}_0^{\text{отв}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} |A|. \quad (4.1.2)$$

Здесь величина  $\dot{M}_0^{\text{отв}}$  – расход газа при свободно-молекулярном истечении в вакуум через отверстие, форма которого соответствует входному сечению трубы,  $|A|$  – площадь входного сечения трубы. Введение второго редуцированного расхода массы вызвано необходимостью сравнивать результаты счета со случаем бесконечно длинной трубы. Данный расход определяется как:

$$M_p = \frac{2}{|A|} \frac{1}{K_p} \dot{M}, \quad K_p = \frac{p_1 - p_2}{L}. \quad (4.1.3)$$

Здесь величину  $K_p$  можно интерпретировать как некоторый средний градиент давления вдоль трубы.

В таблице 4.1 приведен список расчетных режимов для данной главы, которые представляют собой продвижение от самого простого случая течения в бесконечной трубе под действием малого постоянного градиента давления либо температуры к истечению газа в вакуум через длинную трубу переменного сечения.

## 4.2 Аналитические решения для предельных случаев

### 4.2.1 Свободномолекулярное течение в круглой трубе

Решение задачи может быть построено с помощью интегрального уравнения Клаузинга [205]. В литературе приводится несколько решений этого

уравнения, см. например [3, 9, 164]. В размерных переменных расход массы дается формулой:

$$\dot{M}_\infty = \pi R^2 \frac{p_1 - p_2}{\sqrt{2\pi(k/m)T_0}} W. \quad (4.2.4)$$

где  $W$  – так называемый коэффициент Клаузинга. В безразмерных переменных получаем:

$$\dot{M}_\infty = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} (p_1 - p_2) W, \quad Q_\infty = (p_1 - p_2) W. \quad (4.2.5)$$

$L/R$	1	10	20	50
$W$	0.672	0.191	0.109	0.0485

Таблица 4.2 – Значения коэффициента Клаузинга  $W$  для различных значений относительной длины круглой трубы [206, 207].

Значения коэффициент Клаузинга приведены в таблице 4.2. Так, для  $L/R = 1$  получаем  $Q_\infty = 0.336$  для  $p_1/p_2 = 2$  и  $Q_\infty = 0.672$  для  $p_2 = 0$ . Формула (4.2.5) позволяет оценивать точность счета для свободно-молекулярного режима. Отметим, что расчет течения в свободномолекулярном режиме представляет определенную сложность для схем сквозного счета, которые не выделяют явным образом разрывы функции распределения.

## 4.2.2 Метод плоских сечений

Подчеркнем одну особенность течения в длинных трубах и каналах, допускающую упрощение задачи и построение приближенных методов ее решения и приближенных формул типа тех, что приведены в [8]. В рамках этого приближения вычислим распределение плотности вдоль трубы [135].

Для очень длинных труб можно пользоваться приближением плоских сечений, т.е. в каждом сечении  $x$ , достаточно удаленном от концов трубы, течение можно рассматривать как течение Пуазейля в бесконечно длинной трубе, обусловленное локальным градиентом давления и параметром разреженности. При этом давление, плотность и температура поперек трубы не изменяются. Полный поток массы через сечение трубы пропорционален градиенту плотности или давления (при изотермическом течении) и зависит от параметра разреженности. Условие постоянства полного потока массы (уравнение неразрывности) определяет распределение плотности вдоль трубы на интервале  $(x_1, x_2)$ , где справедливо приближение плоских сечений. Сечения  $(x_1, x_2)$  достаточно удалены от концов трубы, значения  $(x_1, x_2)$  заранее неизвестны.

Основное уравнение для определения плотности имеет вид

$$\dot{M} = \frac{dn}{dx} V(\delta_w(x)) = \text{const}(\delta_{10}) \quad (4.2.6)$$

Здесь  $V$  -приведенный объемный расход газа через сечение трубы в течении Пуазейля, соответствующем заданному сечению трубы и единичному градиенту давления (плотности). В отличие от массового расхода  $\dot{M}$ , постоянного вдоль трубы, величина  $V$  зависит от  $x$ . Зависимость эта проявляется неявно, через параметр разреженности  $\delta_w(x)$ . В изотермическом случае выражение для параметра разреженности принимает наиболее простой вид

$$\delta_w = \delta_1 n_w = \delta_1 n = \delta \quad (4.2.7)$$

Поскольку плотность пропорциональна параметру разреженности  $\delta$ , то удобно именно этот параметр рассматривать как искомую функцию. От-

сюда имеем

$$\frac{1}{\delta_{10}} V(\delta) d\delta = \dot{M} dx \quad (4.2.8)$$

В дальнейшем предполагаем, что зависимость  $V(\delta)$  известна в диапазоне  $0 < \delta < \delta_1$  из расчета задачи о течении Пуазейля в любом плоском сечении  $x = \text{const}$ . Построение данного решения будет рассмотрено ниже в разделе 4.3.1.

Имея в виду, что  $\dot{M}$  не зависит от  $x$  и интегрируя уравнение (4.2.8) сначала в пределах от  $x_1$  до  $x$ , а затем в пределах  $(x_1, x_2)$ , находим зависимость  $n_w(x)$  в виде обратной функции

$$\frac{\int_{\delta_1}^{\delta} V(\delta) d\delta}{\int_{\delta_1}^{\delta_2} V(\delta) d\delta} = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}, \quad n = \frac{\delta}{\delta_{10}} \quad (4.2.9)$$

Выражение для расхода газа принимает вид

$$\dot{M} = \frac{\delta_2 - \delta_1}{x_2 - x_1} \frac{1}{\delta_2 - \delta_1} \int_{\delta_1}^{\delta_2} V(\delta) d\delta$$

С целью сопоставления с результатами [8] введем приведенный расход на участке  $(x_1, x_2)$

$$G = \frac{x_2 - x_1}{p_2 - p_1} \dot{M} = \frac{1}{p_2 - p_1} \int_{p_1}^{p_2} V(\delta) dp = \frac{1}{\delta_2 - \delta_1} \int_{\delta_1}^{\delta_2} V(\delta) d\delta$$

По теореме Лагранжа о среднем значении интеграла выражение для  $G$  может быть представлено в простом виде  $G = V(\delta_*)$ , где  $\delta_*$  - некоторое промежуточное значение параметра разреженности  $\delta$  из интервала  $(\delta_1, \delta_2)$ . Как было отмечено в [8], это промежуточное значение близко к среднеарифметическому, так что в большинстве случаев с хорошей точностью можно положить

$$G = V\left(\frac{\delta_1 + \delta_2}{2}\right) \quad (4.2.10)$$

Если пренебречь концевыми эффектами в формулах для расхода, т.е. положить значения давления, плотности и параметра разреженности на границах интервалов  $x_1 = 0$ ,  $x_2 = L$  равными значениям в резервуарах вдалеке от входа и выхода в трубу, то приходим к результату [8]

$$G = \frac{1}{\delta_1} \int_0^{\delta_1} V(\delta) d\delta \quad (4.2.11)$$

Если же пренебречь концевыми эффектами в формуле (4.2.9) для распределения плотности, то имеем

$$x = L \left( \int_{\delta_{10}}^{\delta} V(\delta) d\delta \right) \left( \int_{\delta_{10}}^0 V(\delta) d\delta \right)^{-1} \quad (4.2.12)$$

Пренебрежение концевыми эффектами в некоторых случаях возможно. Однако необходимо установить путем сравнительных расчетов, когда это допустимо и к каким ошибкам это приводит.

Метод плоских сечений применим и для случая трубы переменного радиуса  $r(x)$  [8, 204]. Ограничимся случаем течения, вызванного исключительно перепадом давлений между резервуарами. Тогда следующее приближенное уравнение связывает расход массы  $M_p$  с продольным градиентом давления в трубе [204]:

$$M_p = -\frac{L}{p_1} \left( \frac{r(x)}{R_1} \right)^3 G_p(\delta(x)) \frac{dp(x)}{dx}, \quad \delta(x) = \delta_1 \frac{p(x)r(x)}{p_1 R_1}. \quad (4.2.13)$$

Здесь величина нормированного расхода  $M_p$  определена в формуле (4.1.3),  $G_p(\delta)$  – нормированный расход для трубы бесконечной длины. Уравнение (4.2.13) решается численно с помощью метода второго порядка точности продвижением от левого резервуара к правому. Неизвестное значение  $M_p$  находится из условия равенства вычисленного значения давления на выходе из трубы  $x = L$  значению давления в правом резервуаре  $p_2$ .

## 4.3 Течение в трубе бесконечной длины

### 4.3.1 Постановка задачи

Рассмотрим задачу о медленном стационарном течении одноатомного разреженного газа в канале произвольного сечения  $A$  под действием заданного постоянного градиента давления или температуры. Считаем, что длина канала много больше характерного линейного размера сечения. Нас интересует течение газа в окрестности середины канала. Введем декартовую систему координат  $(x, y, z)$ , где ось  $Oz$  совпадает с осью канала. Предполагаем градиенты плотности и температуры малыми. Тогда решение задачи в окрестности середины канала  $z = 0$  будет описываться кинетическим уравнением (1.6.25), в котором  $K_p, K_T$  - постоянные значения градиентов давления и температуры вдоль оси трубы (в данном случае оси  $oz$ ).

Отметим, что в данном разделе мы рассматриваем несколько более общую постановку задачи, при которой допускаем, что  $T_1 \neq T_2$ .

Численный метод решения задачи для произвольной формы сечения канала описан в разделе 2.5. Для расчетов используется программный комплекс “Несветаи-2Д” .

Введем нормированные расходы массы и потока тепла через поперечное сечение канала, которые зависят от величин  $\varepsilon_1 \equiv K_p, \varepsilon_2 \equiv K_T$  :

$$W(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{2}{|A|} \int_A w dx dy, \quad Q(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{2}{|A|} \int_A q dx dy, \quad (4.3.14)$$

где  $|A|$  – площадь поперечного сечения. Используя линейность задачи, можно представить  $W, Q$  в виде разложения по градиентам давления и

температуры:

$$W(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \varepsilon_1 W_P - \varepsilon_2 W_T, \quad Q(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \varepsilon_1 Q_P - \varepsilon_2 Q_T. \quad (4.3.15)$$

Одной из основных целей проведения расчетов является нахождение коэффициентов  $W_P \geq 0$  и  $W_T \geq 0$ , представляющих собой расход массы вследствие наличия градиента давления и градиента температуры, соответственно. Из формулы (4.3.14) следует, что

$$W_P = W(1, 0), \quad W_T = -W(0, 1).$$

Отсюда значение  $W_P$  находится решением задачи о течении Пуазейля, которая соответствует выбору

$$\varepsilon_1 = 1, \quad \varepsilon_2 = 0,$$

в то время как для нахождения  $W_T$  следует решать задачу о термокрипе

$$\varepsilon_1 = 0, \quad \varepsilon_2 = 1.$$

Величину  $W_T$  можно получить из решения задачи о течение Пуазейля, используя соотношение Онзагера [84]:

$$W_T = 2Q_P. \quad (4.3.16)$$

Заметим, что в формуле (4.3.16) учтена несколько отличная нормировка потока тепла по сравнению с [84]. Сравнение результатов прямого расчета  $W_T$  через решение задачи о термокрипе и с использованием (4.3.16) позволяет косвенно оценивать точность счета.

### 4.3.2 Результаты расчетов

Во всех расчетах пространственная сетка состояла из четырехугольных ячеек вблизи поверхности канала и треугольных ячеек внутри канала.

Интегрирование по молекулярной скорости велось по конечной области  $-4 \leq \xi_x, \xi_y \leq 4$ . Для малых и умеренных значений параметра разреженности  $0 \leq \delta \leq 1$  (больших чисел Кнудсена) использовалось  $N_\xi = 80$  ячеек по каждой компоненте  $\xi$ . Для учета особенности функции распределение шаг сетки менялся от  $\Delta\xi = 0.001$  вблизи начала координат до  $\Delta\xi = 0.5$  для больших значений вектора молекулярной скорости. Для диапазона  $1 \leq \delta \leq 100$  использовалась гораздо более грубая сетка с  $N_\xi = 34$  и постоянным значением  $\Delta\xi \approx 0.25$ .

$\delta$	[208]	[84]		Метод (2.5.36)		
	$W_P$	$W_P$	$W_T$	$W_P$	$W_T$	$2Q_P$
0				1.5023	0.7482	0.7502
0.01	1.4763	1.4781	0.7223	1.4765	0.7188	0.7207
0.02		1.4617	0.7022	1.4611	0.6998	0.7016
0.05		1.4330	0.6627	1.4329	0.6609	0.6626
0.1	1.4039	1.4086	0.6206	1.4085	0.6189	0.6205
0.2	1.3816	1.3891	0.5667	1.3893	0.5653	0.5668
0.5	1.3866	1.3996	0.4780	1.3998	0.4767	0.4780
1	1.4582	1.4748	0.3962	1.4731	0.3947	0.3946
2	1.6575	1.6772	0.3022	1.6757	0.3020	0.3020
5	2.3481	2.3646	0.1759	2.3619	0.1759	0.1759
10	3.5633	3.5752	0.1018	3.5674	0.1019	0.1023
20	6.0411	6.0484	0.05463	6.0207	0.0547	0.0549
50	13.5269			13.5071	0.0228	0.0229
100	26.0214			25.9241	0.0115	0.0116

Таблица 4.3 – Сравнение с другими авторами для круглой трубы

## Тестирование численного алгоритма

В первой серии расчетов с целью проверки численного метода и его программной реализации решение задачи строится для канала круглого сечения. Используя симметрию течения, решение строится в пространственной области, имеющей форму четверти круга; при этом для сторон области, совпадающих с координатными осями, ставится граничное условие зеркального отражения. Для  $\delta < 50$  использовалась сетка с 1081 пространственными ячейками, для  $\delta = 50, 100$  сетка состояла из 7742 ячеек. Величина  $W_T$  рассчитывалась как напрямую ( $K_P = 0, K_T = 1$ ), так и косвенно с помощью соотношений Онзагера (4.3.16). Для свободномолекулярного режима  $\delta = 0$  расход газа вычисляется аналитически и равен

$$W = W_\infty \approx 1.5045.$$

Для коэффициента  $W_T$  в свободно-молекулярном случае можно получить  $W_T = \frac{1}{2}W_P$ , см. например [84]. Для  $\delta > 0$  гладкость решения позволяет использовать специальные методы повышенной точности и подробные сетки. Так, в работе [208] для изотермического течения (течения Пуайзеля) кинетическое уравнение решалось в интегральной форме с применением квадратурных формул высокого порядка точности и использованием точного решения уравнений сплошной среды; получены значения  $W_P$  в диапазоне  $0 < \delta \leq 500$ . В [84] численное решение строилось для  $0 \leq \delta \leq 20$  с помощью конечно-разностной схемы первого порядка на очень подробной сетке. Приведенные в данных работах результаты позволяют проверить правильность реализации численного алгоритма, используемого в настоящей работе.

Результаты расчетов течения в круглой трубе по методу (2.5.36) пред-

$\delta$	$N_{tot} = 330$	$N_{tot} = 1081$	$N_{tot} = 3947$	[208]
0.0	1.530318	1.517538	1.510286	1.5045
0.3	1.393437	1.385310	1.380652	1.3762
0.5	1.400897	1.394048	1.390139	1.3866
1	1.465376	1.461514	1.459472	1.4582
10	3.166507	3.313548	3.417102	3.5633
20	4.704936	5.152908	5.503968	6.0411
50.	7.762911	9.238882	10.679545	13.5269
100	10.631086	13.490859	15.710244	26.0214
200	13.585523	18.227347	21.734972	51.0254

Таблица 4.4 – Расчет коэффициента  $W_p$  по схеме первого порядка.

ставлены в таблице 4.3. Видно, что имеет место хорошее согласие как с результатами [208] для  $W_p$ , так и вычислениями работы [84] для обоих коэффициентов (в диапазоне  $0 \leq \delta \leq 20$ ). Далее, хорошо согласуются между собой прямой (4.3.14) и непрямой (4.3.16) способы вычисления величины  $W_T$ . Далее по тексту все результаты соответствуют течению Пуайзеля; величины  $W_p$ ,  $W_T$  находятся по формулам (4.3.14), (4.3.16).

Для течения Пуазейля в работе [125] было проведено более детальное исследование сходимости численного метода в зависимости от разрешения сетки. В таблицах 4.4,4.5 приводятся результаты счета коэффициента  $W_p$  по методам первого и второго порядка точности по пространству и данные [208]. Видно, что схема первого порядка дает в целом приемлемые результаты для  $\delta \leq 1$ , однако, в дальнейшем с ростом  $\delta$  значения параметра разреженности точность счета быстро ухудшается. Представленные результаты показывают, что метод второго порядка обеспечивает прием-

$\delta$	$N_{tot} = 330$	$N_{tot} = 1081$	$N_{tot} = 3947$	[208]
0.0	1.501842	1.502524	1.502724	1.5045
0.3	1.374541	1.375689	1.376060	1.3762
0.5	1.384777	1.386098	1.386460	1.3866
1	1.455880	1.457605	1.458087	1.4582
10	3.533018	3.554309	3.560475	3.5633
20	5.9404	6.012289	6.032977	6.0411
50.	12.9646	13.367275	13.475604	13.5269
100	23.936042	25.410952	25.821233	26.0214
200	43.584960	48.673164	50.219904	51.0254

Таблица 4.5 – Расчет коэффициента  $W_p$  по схеме второго порядка.

лему точность счета в широком диапазоне значений параметра разреженности  $\delta$  и успешно конкурирует с узкоспециализированными методами, основанными на решении кинетического уравнения в цилиндрической системе координат. При этом метод первого порядка, применявшийся во многих имеющихся по теме публикациях, не обладает такими свойствами. Для  $\delta \leq 1$  для получения удовлетворительной точности достаточно использовать относительно грубую пространственную сетку с числом ячеек  $N_{tot} = 838$ . Отметим, что из таблицы 4.5 следует, что результаты счета на двух подробных сетках могут быть использованы для определения верхней границы величины численной ошибки.

Для больших значений  $\delta$  функция распределения является достаточно гладкой и численная ошибка в основном определяется точностью дискретизации в физическом пространстве. Можно добиться дальнейшего увеличения точности счета с помощью экстраполяции Ричардсона [209]. Пусть

$\delta$	20	50	100	200
Ref. [208]	6.0411	13.5269	26.0214	51.0254
$W_p^{\text{экстра}}$	6.0397	13.5077	25.9485	50.7638
$W_p$ для сетки $N_{tot} = 3947$	6.0330	13.4756	25.8212	50.2199
Estimate of $p$	2.17	2.28	2.23	2.08

Таблица 4.6 – Применение экстраполяции Ричардсона к вычислению коэффициента  $W_p$ .

$W_p^{(1)}, W_p^{(2)}, W_p^{(3)}$  – значения расхода массы на трех последовательно сгущающихся сетках с числом ячеек  $N_{tot}^{(1)}, N_{tot}^{(2)}, N_{tot}^{(3)}$ . Предполагаем, что точное значение расхода связано с вычисленным на конкретной сетке значением по формуле

$$W_p^{\text{точное}} = W_p^{(k)} + C \cdot h_k^p + o(h_k^p), \quad C = \text{const}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (4.3.17)$$

где  $h_k = 1/\sqrt{N_{tot}^{(k)}}$  – характерный размер шага сетки. Порядок сходимости  $p$  и значение константы  $C$  могут быть оценены с помощью (4.3.17), так что новое, более точное, значение  $W_p$  будет определяться по формуле

$$Q^{\text{экстра}} = Q^{(3)} + C \cdot h_3^p. \quad (4.3.18)$$

При условии достаточно хорошего разрешения сетки, выражение (4.3.18) должно аппроксимировать расход массы с третьим порядком точности. Результаты вычислений, приведенных в таблице 4.6, демонстрируют значительное снижение ошибки счета после применения формулы Ричардсона.

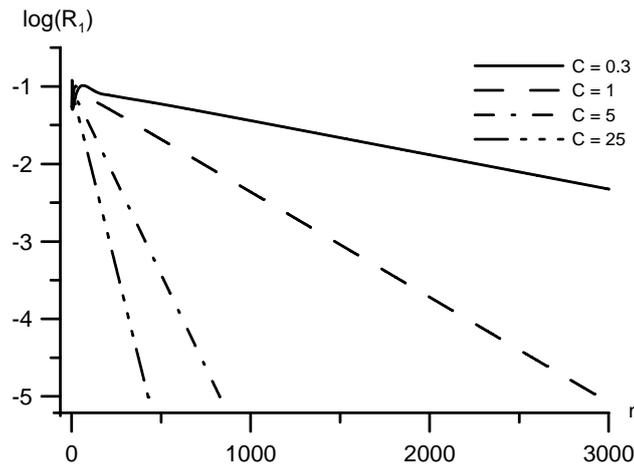
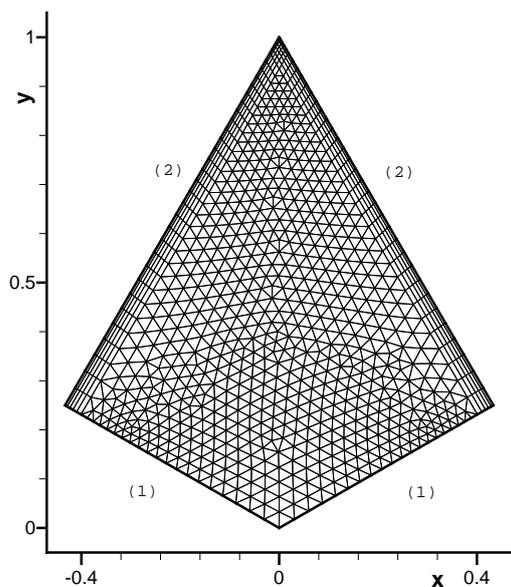


Рисунок 4.1 – Поведение невязки в зависимости от величины числа Куранта

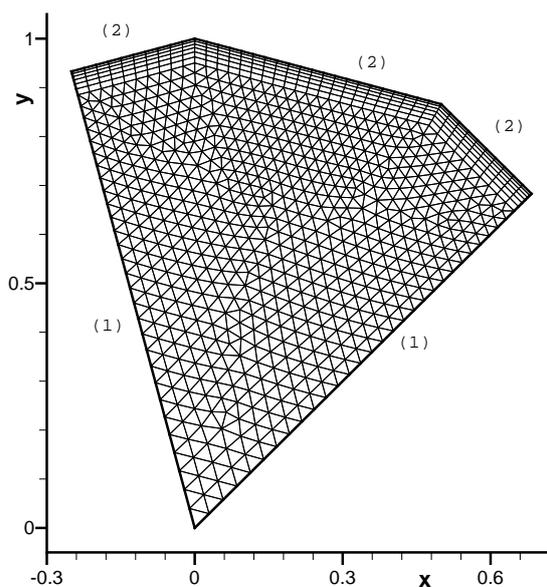
### Решение задачи для произвольной формы сечения

Во второй серии расчетов для  $\delta = 10$  для треугольного канала ( $N = 3$ ) изучалась скорость сходимости получаемого решения к стационарному состоянию. Расчеты проводились на неструктурированной сетке, состоявшей из 1517 ячеек. В качестве начального условия использовались результаты счета для  $\delta = 1$ . Для  $C = 0.3, 1, 5$  и  $25$  была построена зависимость невязки  $R$ , определенной в (2.5.43), от числа шагов по времени  $n$ . На рис. 4.1 представлено изменение величины  $\log R$  в диапазоне для всех использованных чисел Куранта  $C$ . Видно, что использование неявной схемы приводит к существенному (в разы) ускорению сходимости к стационарному режиму. Основным выигрыш по сравнению с явной схемой достигается при  $C = 5 \dots 25$ ; дальнейшее увеличение числа Куранта не приносит существенного ускорения сходимости.

Основная серия расчетов относилась к течению в канале с формой сечения в виде правильного вписанного многоугольника с числом сторон  $N$ . Рассматривались случаи правильного треугольника  $N = 3$ , четырехуголь-



(а) Число сторон  $N = 3$



(б)  $N = 12$

Рисунок 4.2 – Расчетные сетки для канала со сложной формой сечения.

ника  $N = 4$ , шестиугольника  $N = 6$  и двенадцатиугольника  $N = 12$ . Как и для круглой трубы, использование граничного условия зеркального отражения позволило строить решение в пространственной области, представляющей собой лишь часть сечения канала. Так, на рис. 4.2 представлены вид расчетной области и относительно грубая пространственная сетка, применявшаяся для  $N = 3$  и  $N = 12$ ). Границы области, на которых выставлялось граничное условие зеркального отражения, отмечены цифрой "1"; диффузное отражение ставилось на участках, обозначенных цифрой "2". Наиболее подробные пространственные сетки соответствовали случаю  $\delta \geq 50$  и состояли из 6416 ( $N = 3$ ), 4900 ( $N = 4$ ), 6250 ( $N = 6$ ) и 11586 ( $N = 12$ ) ячеек, соответственно. При этом размер ячейки вблизи границы канала составлял  $\approx 2 \times 10^{-3}$ . Сетка в пространстве молекулярных скоростей строилась таким же образом, как и для круглой трубы.

В таблицах 4.7, 4.8 приведены результаты счета коэффициентов  $W_P$ ,  $W_T$

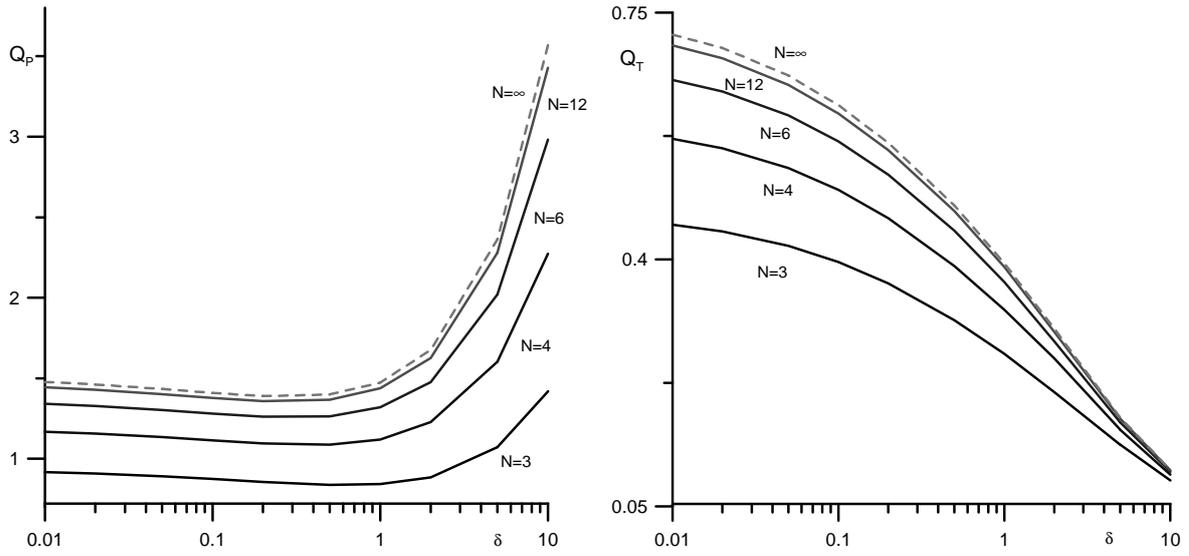


Рисунок 4.3 – Зависимость коэффициентов  $W_P \equiv Q_P$ ,  $W_T \equiv Q_T$  от параметра  $\delta$  для всех случаев.

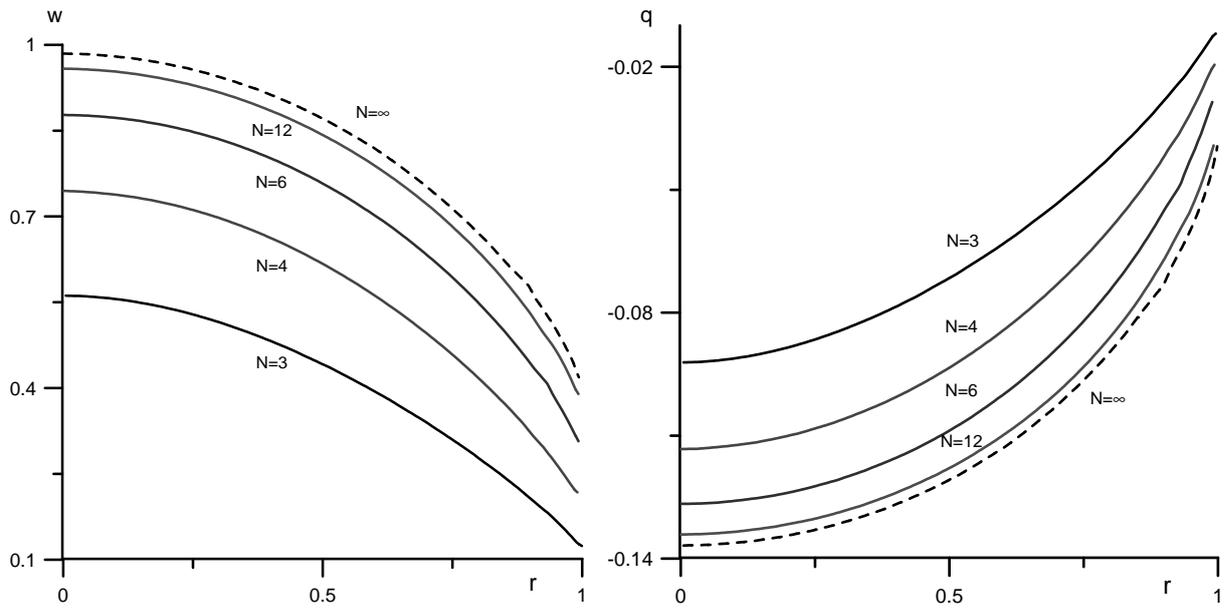
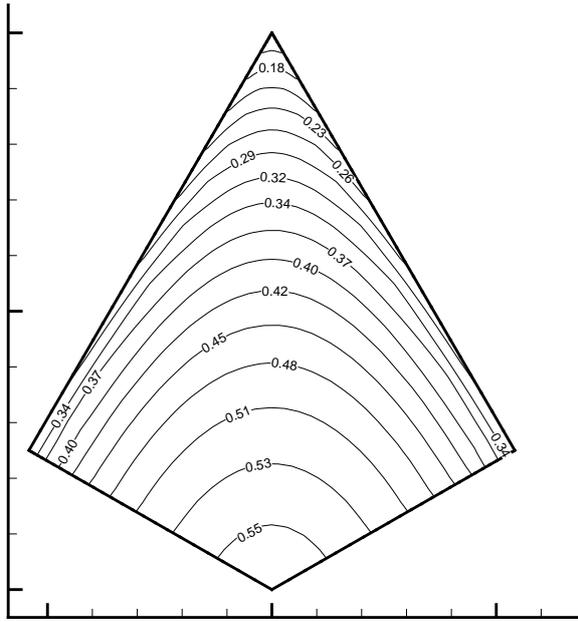
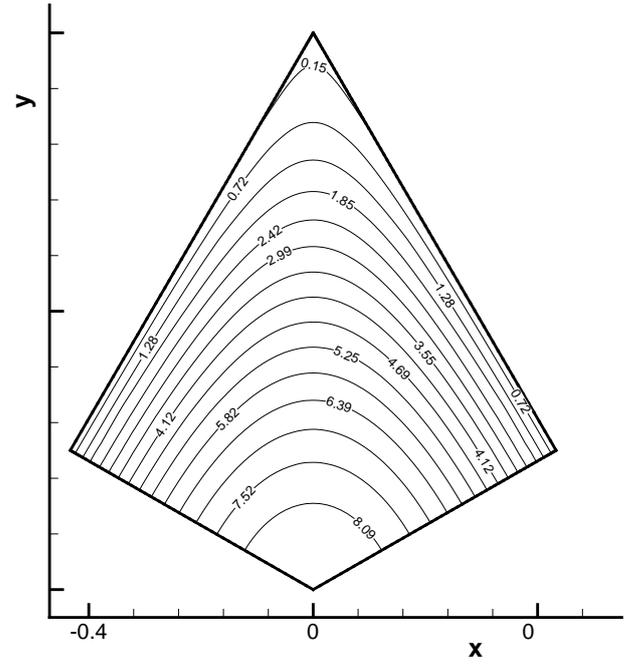


Рисунок 4.4 – Распределение скорости газа  $w$  и потока тепла  $q$  вдоль радиуса в направлении от центра сечения канала к его вершине

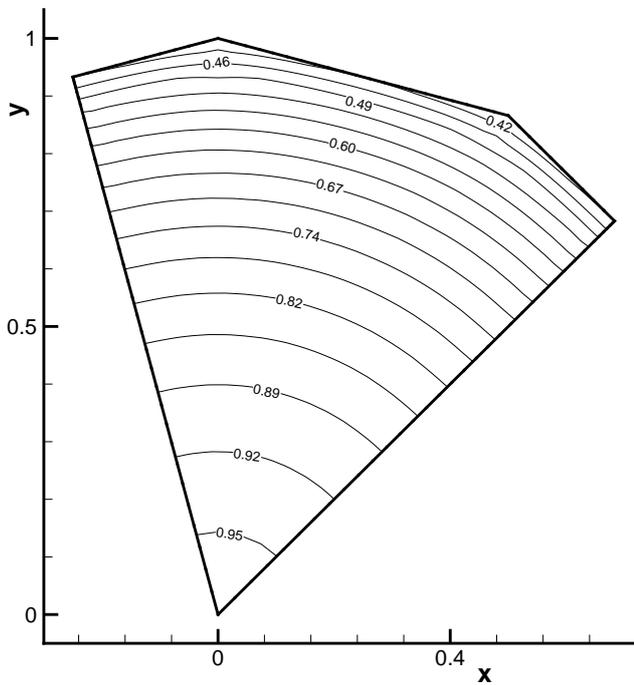


(a)  $\delta = 1$

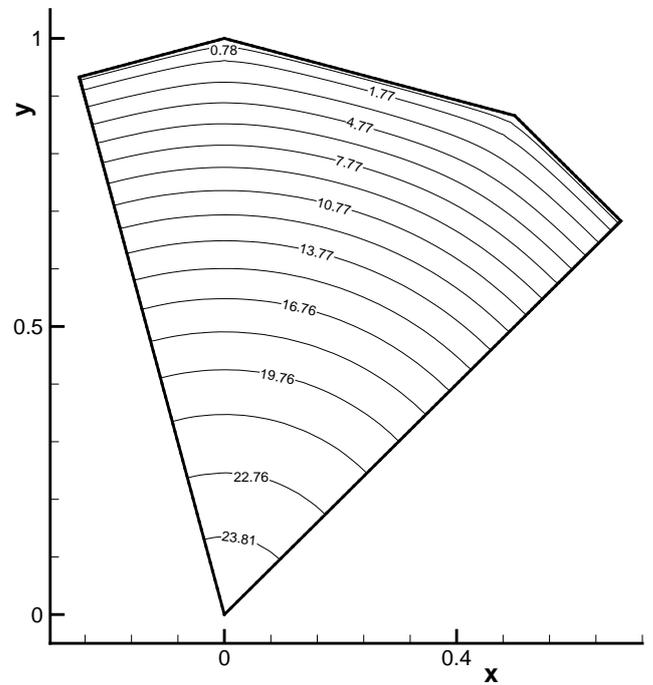


(б)  $\delta = 100$

Рисунок 4.5 – Линии уровня скорости для треугольного профиля сечения.

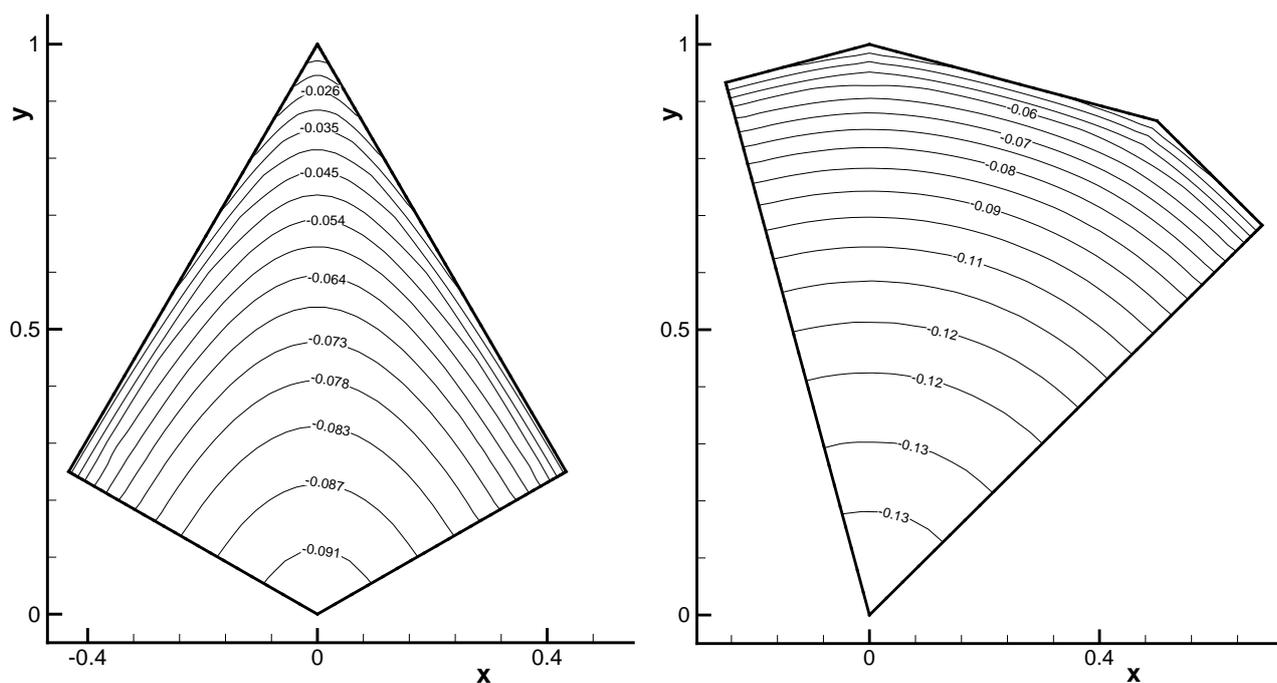


(a)  $\delta = 1$



(б)  $\delta = 100$

Рисунок 4.6 – Линии уровня скорости для двенадцатиугольного профиля сечения.



(а) Число сторон  $N = 3$

(б) Число сторон  $N = 12$

Рисунок 4.7 – Распределение потока тепла по сечению канала для  $\delta = 1$ .

для всех случаев. рис. 4.3 иллюстрирует полученные результаты графически. Видно, что оба коэффициента монотонно возрастают при увеличении числа сторон  $N$ ; при этом имеет место квадратичная сходимость по  $N$  к предельному решению, соответствующему круглой трубе. Интересно, что для  $\delta \geq 20$  величина потока массы, обусловленная крипом, убывает как  $1/\delta$  (линейно пропорционально числу Кнудсена).

На рис. 4.4 представлено распределение скорости газа  $w$  (4.4a) и потока тепла  $q$  (4.4б) вдоль радиуса в направлении от центра сечения канала к его вершине для разных  $N$  и  $\delta = 1$ . Хорошо видна быстрая сходимость к течению в круглой трубе с ростом  $N$ . В то же время для  $N = 3, 4$  скорость газа и поток тепла (в абсолютном выражении) заметно меньше, чем в случае круглой трубы.

На рис. 4.5, 4.6 приведены линии уровня скорости для треугольного и

$\delta$	$N = 3$	$N = 4$	$N = 6$	$N = 12$	$N = \infty$
0	0.9287	1.1855	1.3631	1.4683	1.5023
0.01	0.9163	1.1676	1.3412	1.4434	1.4765
0.02	0.9080	1.1564	1.3278	1.4286	1.4611
0.05	0.8914	1.1349	1.3028	1.4012	1.4329
0.1	0.8745	1.1146	1.2803	1.3773	1.4085
0.2	0.8557	1.0951	1.2610	1.3579	1.3893
0.5	0.8373	1.0872	1.2633	1.3667	1.3998
1	0.8424	1.1194	1.3193	1.4377	1.4731
2	0.8843	1.2282	1.4762	1.6258	1.6757
5	1.0715	1.6026	2.0198	2.2793	2.3619
10	1.4183	2.2724	2.9805	3.4267	3.5674
20	2.1388	3.6457	4.9399	5.76835	6.0207
50	4.3631	7.8432	10.8780	12.8617	13.5071
100	8.0606	14.8270	20.7791	24.7058	25.9241

Таблица 4.7 –  $W_P$  для различных сечений.

двенадцатиугольного профилей сечения; при этом значения параметра разреженности  $\delta = 1$  (а) и  $\delta = 100$  (б). Рис. 4.7 иллюстрирует распределение потока тепла по сечению канала для  $\delta = 1$  и  $N = 3$  (4.7а) и  $N = 12$  (4.7б). Видно, что вблизи центра сечения численное решение близко к радиальному. Профиль скорости имеет ярко выраженный максимум в центре канала, и падает к поверхности канала. Поведение потока тепла  $q$  качественно совпадает с поведением  $w$  с единственным отличием, что в центре канала имеет место минимум.

$\delta$	$N = 3$	$N = 4$	$N = 6$	$N = 12$	$N = \infty$
0	0.4630	0.5912	0.6796	0.7320	0.7482
0.01	0.4493	0.5711	0.6546	0.7036	0.7188
0.02	0.4398	0.5577	0.6381	0.6853	0.6998
0.05	0.4195	0.5297	0.6043	0.6476	0.6609
0.1	0.3965	0.4987	0.5674	0.6069	0.6189
0.2	0.3660	0.4584	0.5200	0.5549	0.5653
0.5	0.3140	0.3908	0.4409	0.4687	0.4767
1	0.2664	0.3287	0.3682	0.3894	0.3947
2	0.2120	0.2599	0.2841	0.2976	0.3020
5	0.1375	0.1588	0.1691	0.1745	0.1759
10	0.0870	0.0954	0.0992	0.1013	0.1019
20	0.0500	0.0526	0.0537	0.0544	0.0547
50	0.0219	0.0224	0.0226	0.0227	0.0228
100	0.0112	0.0114	0.0114	0.0115	0.0115

Таблица 4.8 –  $W_T$  для разных сечений.

### 4.3.3 Выводы

Разработанный численный метод решения двухмерного уравнения (1.6.25) и программный комплекс “Несветай-2Д” позволяют строить решение задачи для бесконечного канала с поперечным сечением произвольной формы и во всем диапазоне изменения числа Кнудсена с высокой точностью. Приведены результаты счета расхода газа для каналов с сечением в виде правильного многоугольника в широком диапазоне изменения степени разреженности течения. Показано, что решение задачи сходится к предельному

случаю круглой трубы квадратично по числу сторон сечения. При этом для треугольной и четырехугольной форм сечения имеет место существенное отличие расхода массы газа и потока тепла от случая круглой трубы.

## 4.4 Линеаризованная задача для трубы конечной длины

### 4.4.1 Постановка задачи

В данном разделе детально рассматривается истечение разреженного газа из камеры высокого давления в камеру низкого давления через круглую трубу конечной длины для случая малого перепада давления на основе численного решения линеаризованного кинетического уравнения (1.6.21) с помощью программного комплекса “Несветай-3Д”. Решение задачи зависит от параметра разреженности  $\delta$  и отношения длины трубы к ее радиусу  $L/R$ . Расчеты проводились для трех значений относительной длины  $L/R = 10, 20, 50$  и диапазона значений параметра разреженности  $0 \leq \delta \leq 50$ . Соответствующие значения числа Кнудсена  $0.018 \leq \text{Kn} \leq \infty$ . Результаты основаны на работе автора [136]. Для вычислений использовался компьютер “Ломоносов” НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова. Как правило, одиночный расчет запускался на 128...256 ядрах (32–64 процессора) в зависимости от разрешения сетки, относительной длины трубы  $L/R$  и значения параметра разреженности  $\delta$ .

$\delta$	$L/R = 10$	$L/R = 20$	$L/R = 50$	$L/R = \infty$	Ref. [210]
0.	1.078	1.231	1.353	1.505	1.505
0.01	1.079	1.229	1.350	1.476	1.478
0.1	1.086	1.224	1.338	1.408	1.409
0.2	1.097	1.223	1.339	1.389	1.389
0.5	1.142	1.257	1.338	1.400	1.400
1.	1.232	1.341	1.416	1.476	1.475
5.	2.059	2.197	2.289	2.364	2.365
10.	3.144	3.340	3.450	3.575	3.575
20.	5.338	5.659	5.871	6.048	6.048
30.	7.529	7.981	8.280	8.537	
50.	11.88	12.61	13.09	13.53	

Таблица 4.9 – Рассчитанные значения коэффициента  $M_p$ .

#### 4.4.2 Вычисление расхода массы

Для анализа результатов удобнее использовать нормированный расход массы  $M_p \geq 0$ , определяемый через  $\dot{M}$  по формуле (4.1.3) Использование величины  $M_p$  позволяет сравнивать расход массы для разных относительных длин канала  $L/R$  и оценивать сходимость к предельному решению  $L/R \rightarrow \infty$  - коэффициенту  $W_p$  из формулы (4.3.15), которое рассматривалось в предыдущем разделе.

В таблице 4.9 приведены основные результаты данного раздела – вычисленные значения коэффициента  $M_p$  для заданных значений длины канала и параметра разреженности. Также включены значения предельного решения, соответствующего течению Пуазейля ( $L/R = \infty$ ) из работы [210] для

$\delta \leq 20$ , так и результаты автора для полного диапазона изменения  $\delta$ . Соответствующие кривые приведены на рисунке 4.8. Видно, что при  $L/R \geq 20$  около  $\delta = 0.2$  имеет место характерный (Кнудсеновский) минимум. Однако он довольно слабо выражен даже в предельном случае бесконечной трубы  $L/R = \infty$ . Из рисунка 4.8 очевидно, что кривые зависимости  $M_p$  от  $\delta$  не совпадают для различных конечных значений  $L/R$  во всем диапазоне изменения  $\delta$ .

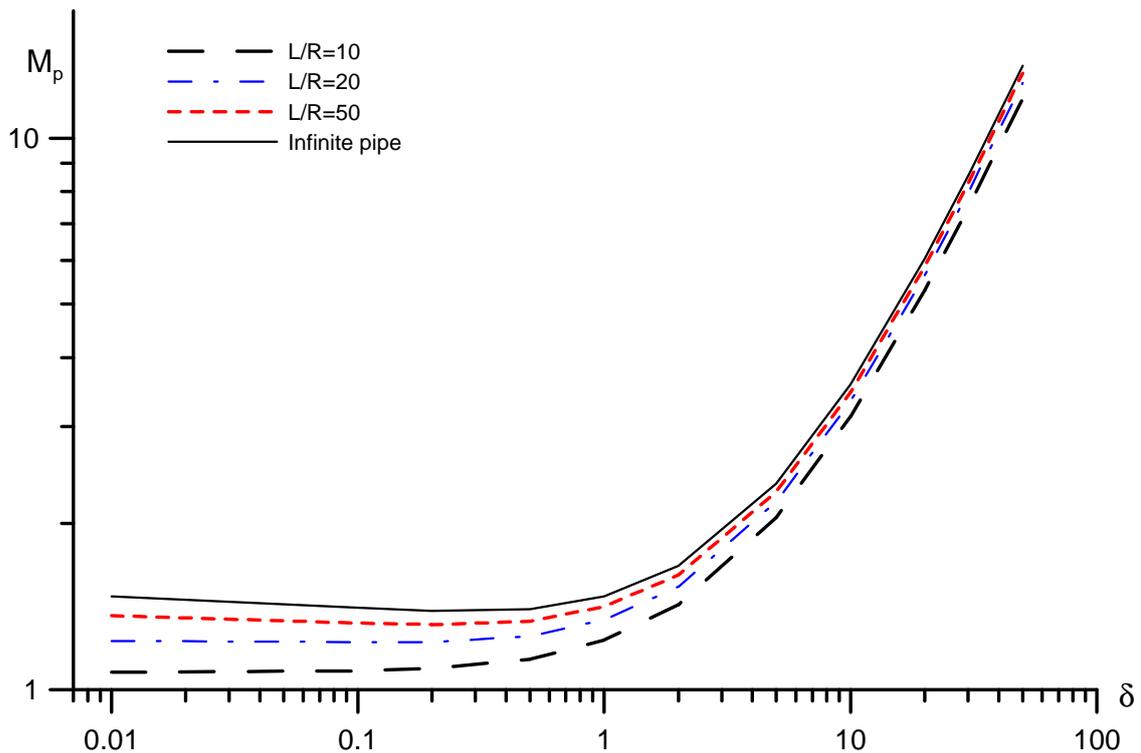


Рисунок 4.8 – Зависимость коэффициента  $M_p$  от  $\delta$  для относительной длины канала  $L/R = 10, 20, 50$  и  $\infty$ .

В работах [168, 169] было показано, что для достаточно большой относительной длины  $L/R$  течение внутри канала (вдали от его концов) приближается к асимптотическому решению. Более того, это происходит не только для больших значений параметра разреженности  $\delta \gg 1$ , но и для переходного и разреженного режимов течения при выполнении следующе-

го критерия

$$(L/R)\delta \geq 10. \quad (4.4.19)$$

Для демонстрации и проверки выполнения данного утверждения в настоящей работе, введем расход массы, нормированный на значение градиента давления в центре канала вблизи оси [168, 169]:

$$W_p = -\frac{1}{d\hat{p}/dz}\dot{M}. \quad (4.4.20)$$

Следует отметить, что для трубы конечной длины значение градиента давления  $d\hat{p}/dz$  в среднем сечении отличается от величины  $\Delta p/L$  из-за концевых эффектов и поэтому должно находиться с помощью численного расчета. На рисунке 4.9 приведены кривые зависимости  $W_p$  от  $\delta$  для различных значений  $L/R$ . Соответствующие числовые значения приведены в таблице 4.10. Видно, что теперь кривые для разных значений  $L/R$  сходятся к одной асимптоте при выполнении условия  $(L/R)\delta \geq 10$ . Это и означает, что расход массы становится линейно пропорциональным градиенту давления в центральной части канала. При этом отклонение от решения уравнения (1.6.25), описывающего течения газа в бесконечной трубе, меньше 1% и сравнимо с точностью численного решения задачи.

Таким образом, в случае течения, вызванного малым перепадом давления, величина  $W_p$  описывает характеристики течения гораздо лучше, чем более распространенный коэффициент  $M_p$ . Данное наблюдение находится в хорошем согласии как с [168, 169], так и с недавними расчетами автора для течений в плоском канале [131, 198]. Однако, коэффициент  $M_p$  более удобен в случае, если требуется найти само значение расхода массы через входное сечение.

В таблице 4.11 приведено сравнение расхода, вычисленного с помощью интегральных соотношений Клаузинга (см. ур. 4.2.5) и результатов прямого

$\delta$	$L/R = 10$	$L/R = 20,$	$L/R = 50$	$L/R = \infty$
0.	1.349	1.413	1.442	1.505
0.01	1.349	1.410	1.437	1.476
0.1	1.349	1.390	1.396	1.408
0.2	1.354	1.381	1.396	1.389
0.5	1.386	1.395	1.396	1.400
1.	1.468	1.470	1.470	1.477
5.	2.356	2.356	2.356	2.364
10.	3.563	3.562	3.562	3.575
20.	6.022	6.022	6.022	6.048
30.	8.491	8.491	8.491	8.537
50.	13.43	13.43	13.43	13.53

Таблица 4.10 – Расчитанные значения коэффициента  $W_p$ .

трехмерного расчета автора. Видно отличное согласие результатов, которое иллюстрирует высокую точность счета и для  $\delta \ll 1$ .

В приложениях иногда можно рассматривать следующее приближенное выражение для расхода массы в режиме сплошной среды  $\delta \gg 1$ :

$$M_p = \frac{\delta}{4} \frac{L}{L + \Delta L}, \quad (4.4.21)$$

где параметр  $\Delta L$  предполагается не зависящим от длины трубы. Обсуждение выбора численного значения  $\Delta L$  может быть найдено в разделе 5 обзорной статьи [164]. Верхняя граница значений  $\Delta L$  из решения уравнений Навье-Стокса равна [211]

$$\Delta L^{up} = 3.47\pi/8 \approx 1.36$$

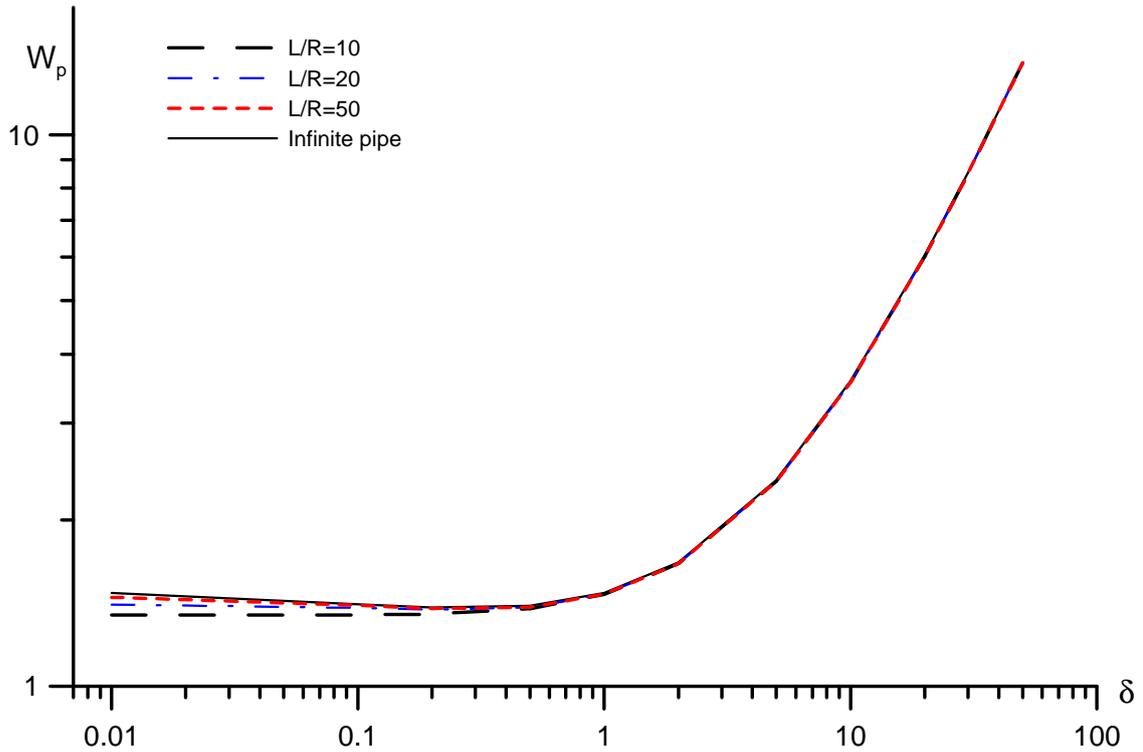


Рисунок 4.9 – Зависимость коэффициента  $W_p$  от  $\delta$  для относительной длины канала  $L/R = 10, 20, 50$  и  $\infty$ .

В работе [164] предлагается использовать значение  $\Delta L^* = 3\pi/8 \approx 1.18$  для произвольной длины трубы при условии  $\delta \gg 1$ , так, чтобы получающееся выражение было применимо и для течения через круглое отверстие ( $L/R = 0$ ). Числовые данные, приведенные в таблицах 4.9, 4.10, позволяют вычислить значение  $\Delta L$  по формуле:

$$\Delta L = L(W_p/M_p - 1). \quad (4.4.22)$$

Результаты применения формулы (4.4.22) приведены в таблице 4.12. Видно, что величина  $\Delta L$  практически не зависит от длины трубы при  $\delta > 5$ , и слабо меняется при изменении  $\delta$ . Само значение  $\Delta L$  находится между  $\Delta L^*$  и  $\Delta L^{up}$  и приблизительно совпадает с арифметическим средним.

$L/R$	10	20	50
Расчет	1.078	1.231	1.353
Форула Клаузинга [205–207]	1.078	1.234	1.368

Таблица 4.11 – Сравнение расхода массы для свободномолекулярного режима.

$\delta$	$L/R = 10$	$L/R = 20,$	$L/R = 50$
5.	1.44	1.44	1.45
10.	1.33	1.33	1.33
20.	1.28	1.28	1.28
30.	1.28	1.28	1.28
50.	1.30	1.30	1.30

Таблица 4.12 – Значение параметра  $\Delta L$ , вычисленное по данным таблиц 4.9,4.10 с использованием формулы (4.4.22).

### 4.4.3 Картина течения

Для целей визуализации полей макроскопических переменных удобно ввести нормированные значения по формулам

$$u' = \frac{L}{|\Delta p|} u_z, \quad p' = \frac{2p}{|\Delta p|} \quad (4.4.23)$$

Так как число рассчитанных режимов течения довольно велико, в анализе результатов ограничимся двумя значениями относительной длины  $L/R = 10, 50$  и двумя значениями параметра разреженности  $\delta = 1, 50$ . На рис. 4.10, 4.11 показаны линии уровня  $z$ -компоненты скорости в плоскости  $z - r$ . Размеры резервуаров на рисунках соответствуют размерам расчет-

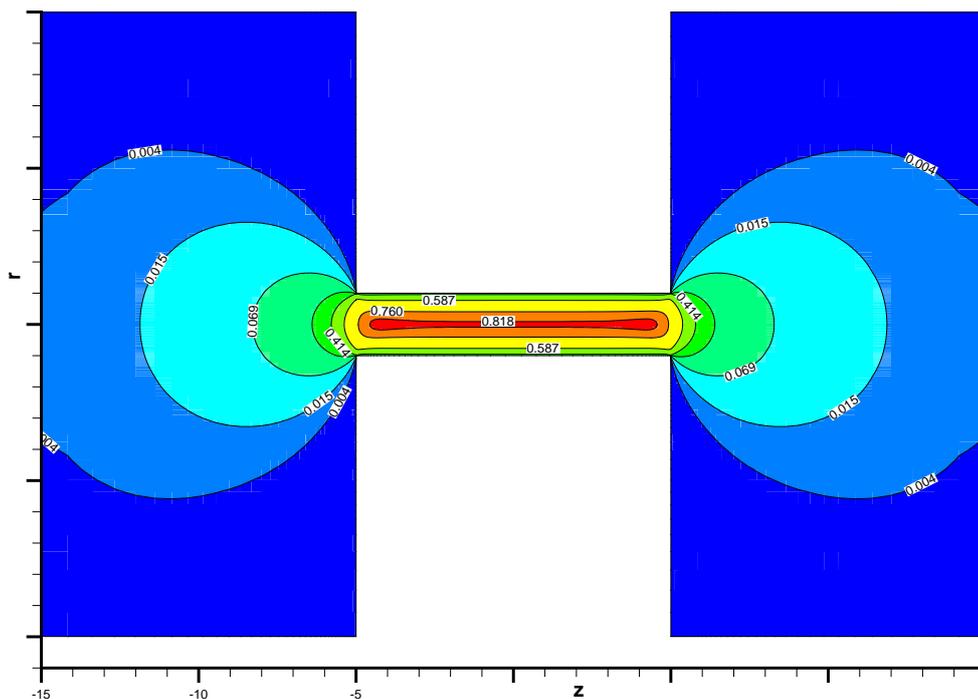
ной области в физических переменных. При анализе полей скорости можно сделать два вывода. Во-первых, картина течения является радиально-симметричной и симметричной по отношению к срединному сечению  $z = 0$  несмотря на то, что используемая трехмерная пространственная сетка несимметрична. Данное свойство численного решения говорит о высокой точности расчетов. Во-вторых, приведенные поля показывают важное свойство решения, а именно его квази-одномерную структуру внутри трубы вдали от концов: поле скорости зависит только от радиальной координаты  $r^2 = x^2 + y^2$  и не зависит от продольной координаты  $z$ .

Дальнейшая иллюстрация картины течения приводится на рисунках 4.12, 4.13, на которых показаны осевые распределения давления и  $z$ -компоненты скорости для тех же значений  $L/R$  и  $\delta$ . Сплошные кривые относятся к линейному распределению давления в трубе, соединяющему значения на бесконечности в резервуарах. Видно, что вдали от концов трубы профиль  $p$  действительно линейный. Однако для  $L/R = 10$  производная давления вдоль трубы, используемая при нахождении коэффициента  $W_p$  в формуле (4.10), заметно отличается от среднего значения  $\Delta p/L$ , однако с увеличением длины канала различие уменьшается. В целом, поведение  $p$  и  $u'$  качественно совпадает со случаем плоского канала, приведенным в [132, 212].

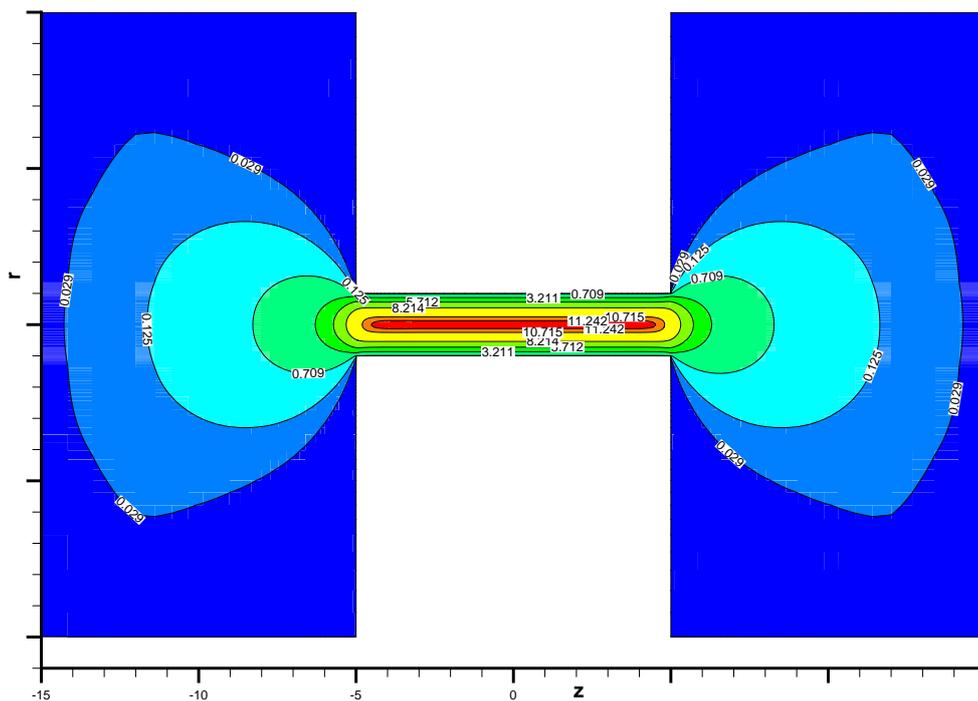
Рассмотрим сравнение кинетического решения с решением уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости для течения Пуайзеля в круглой трубе, которое дается формулой

$$u_z(r) = -\frac{\delta \Delta p}{4L}(1 - r^2), \quad r^2 = x^2 + y^2. \quad (4.4.24)$$

На рис. 4.14 представлено радиальное распределение  $u'$  внутри трубы на срединной плоскости  $z = 0$  и вблизи правого конца  $z = L/2$  для  $\delta = 50$ . Как и ожидалось, для срединной плоскости кинетическое решение при-

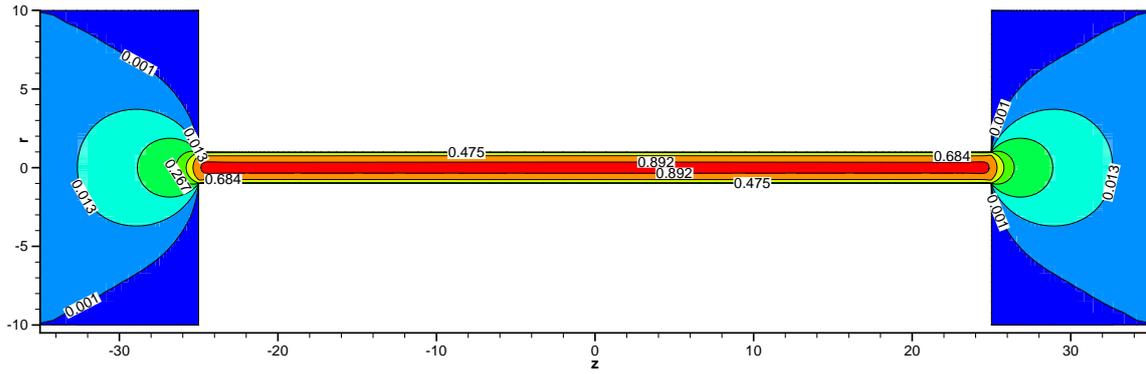


(a)  $\delta = 1$

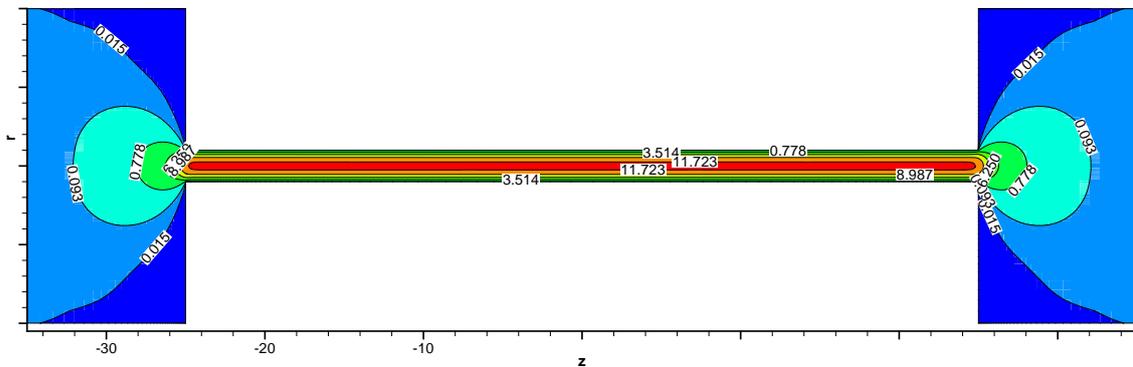


(б)  $\delta = 50$

Рисунок 4.10 – Поле скорости  $u'$  для относительной длины трубы  $L/R = 10$ .



(а)  $\delta = 1$



(б)  $\delta = 50$

Рисунок 4.11 – Поле скорости  $u'$  для относительной длины трубы  $L/R = 50$ .

ближается к решению уравнений Навье-Стокса с увеличением длины трубы. Остающееся небольшое различие может быть устранено использованием граничного условия скольжения. Однако вблизи конца трубы различия между двумя решениями заметны для обоих значений  $L/R$ .

Отклонение температуры газа от температуры поверхности трубы очень мало, так что течение может считаться изотермическим.

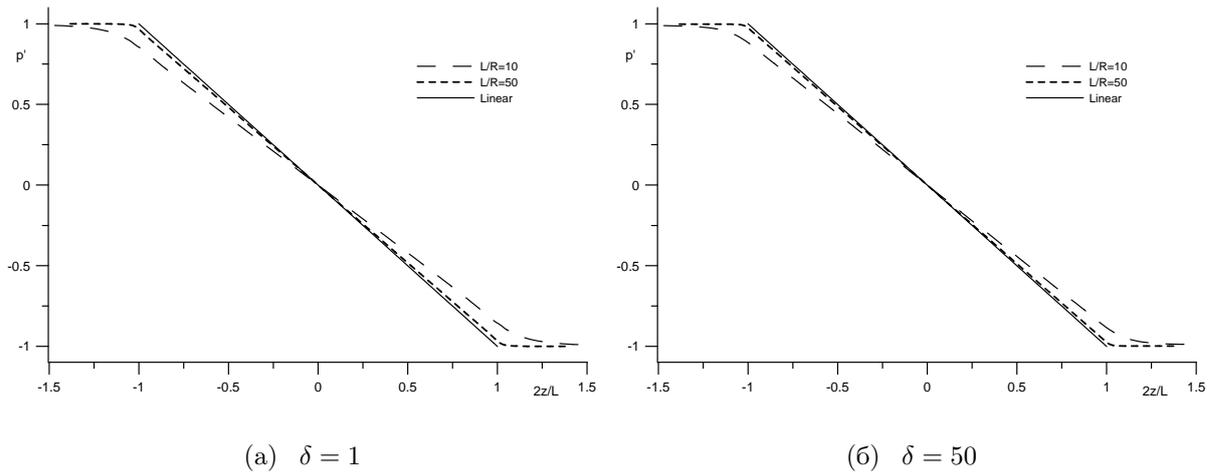


Рисунок 4.12 – Осевые распределения давления  $p'$ .

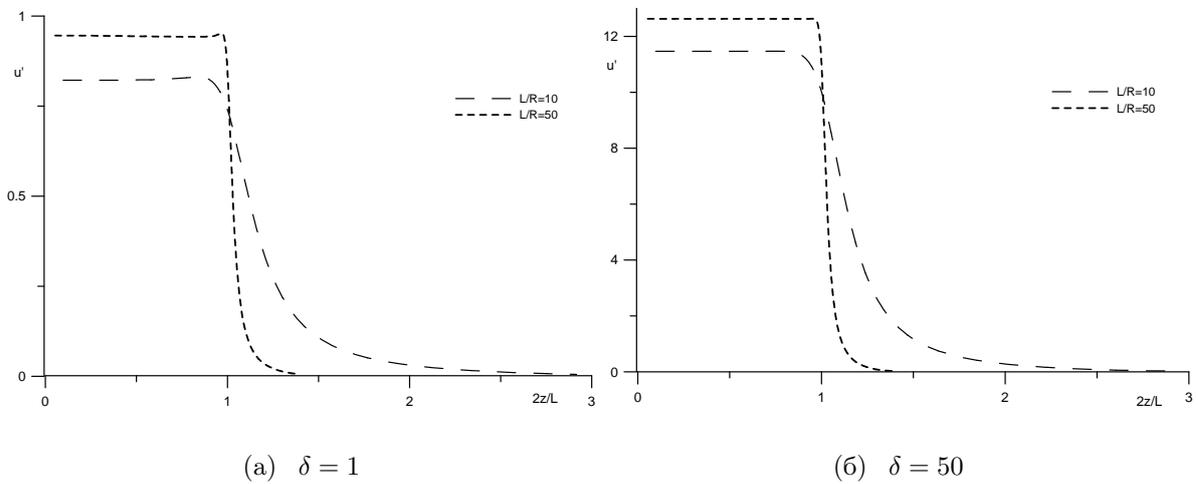


Рисунок 4.13 – Осевые распределения продольной скорости  $u'$ .

#### 4.4.4 Стратегия вычислений

В заключение раздела рассмотрим вопрос организации вычислений и контроля точности счета.

Для заданного значения  $L/R$  процедура построения численного решения организована следующим образом. Сначала решение строится для  $\delta = 1$  на выбранной расчетной сетке. После этого происходит продвижение по  $\delta$  с использованием решения для предыдущего значения параметра разре-

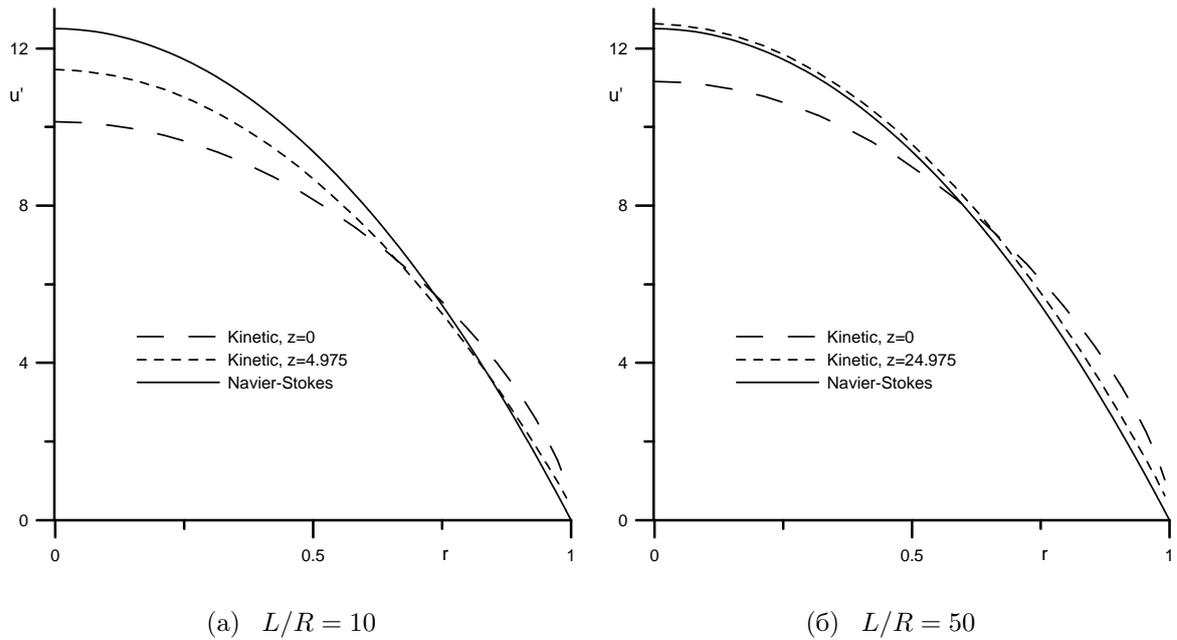


Рисунок 4.14 – Сравнение кинетического решения с решением уравнений Навье-Стокса (4.4.24).

женности в качестве начального приближения. Другими словами, функция распределения для  $\delta = 1$  используется как начальное приближение для расчета с  $\delta = 5$ , который в свою очередь подставляется в виде начального приближения для  $\delta = 10$ , и так далее. Продвижение в область малых  $\delta < 1$  происходит аналогичным образом. Наиболее трудоемкий для расчета вариант  $L/R = 50$ ,  $\delta = 50$  потребовал около  $2 \times 10^4$  шагов по времени и 4 дней вычислений на 256 ядрах.

Особое внимание уделялось точности вычислений, которая при использовании выбранной ГВД схемы второго порядка аппроксимации определяется разрешением расчетной сетки и размерами резервуаров в физическом пространстве. Построение решения 6-мерной задачи для трех длин трубы  $L/R$  и нескольких значений параметра разреженности  $\delta$  требует огромного объема вычислений. Вследствие этого провести детальное исследование сходимости решения в 6-мерном пространстве  $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$  не представляется

возможным. Вместо этого было проведено фиксированное количество тестовых расчетов для отобранных режимов течения, и с их помощью были определены требуемые параметры сетки и размеры расчетной области, которые были потом использованы для остальных расчетов.

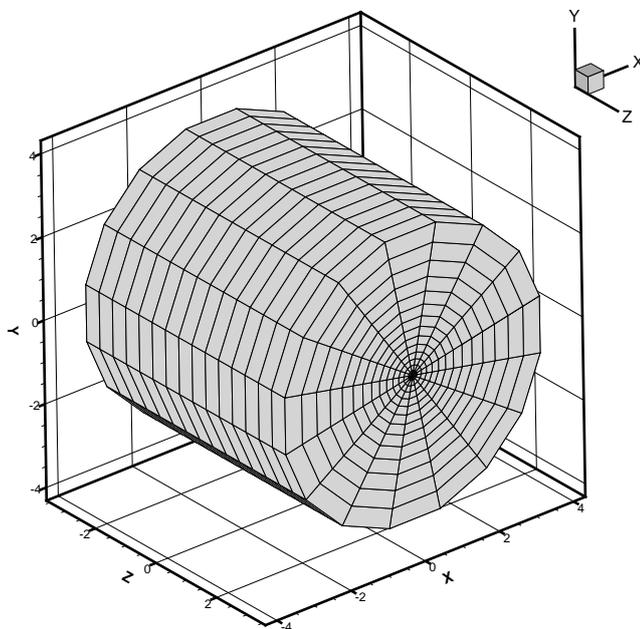


Рисунок 4.15 – Расчетная сетка в скоростном пространстве, содержащая 15 ячеек в радиальном направлении и 16 ячеек по углу и по координате  $z$ .

Скоростная сетка строилась в цилиндрической системе координат и состояла из 15 ячеек в радиальном направлении и 16 ячеек по углу и по координате  $z$ , см. рисунок 4.15. В радиальном направлении использовалось сгущение к оси системы координат. Размер расчетной области принимался равным  $\xi_r \leq 3.5$ ;  $-3.5 \leq \xi_z \leq 3.5$ . Данное разрешение скоростной сетки полагалось достаточным для получения высокоточных результатов, так как оно позволяет аккуратно рассчитывать свободномолекулярный режим, см. таблицу 4.11.

Определение параметров расчетной сетки в физической области начина-

ется с оценки требуемого размера резервуаров. Использование резервуаров небольшого размера позволяет снизить вычислительную стоимость расчета, однако может приводить к занижению значений расхода массы, особенно для коротких труб и/или малых значений параметра разреженности  $\delta \gg 1$ . Для определения требуемого размера резервуаров были проведены несколько расчетов для  $L/R = 10$  с использованием относительно грубого разрешения поперечного сечения трубы и размером резервуаров от  $5 \times 5$  до  $20 \times 20$ . На рисунке 4.16 показана одна из используемых в тестах гексаэдральных сеток с размером резервуаров 10 единиц в длину и 10 единиц в радиусе; количество ячеек в этой сетке равнялось 150 тысячам, так что общее число узлов в 6-мерной сетке примерно  $\approx 0.6 \times 10^9$ . Отметим, что пространственная сетка довольно сильно сгущается к поверхности трубы и ее концам.

$\delta$	Коэф. $M_p$ , фор. (4.1.3)			Коэф. $W_p$ , фор. (4.4.20)		
	$5 \times 5$	$10 \times 10$	$20 \times 20$	$5 \times 5$	$10 \times 10$	$20 \times 20$
0	1.076	1.077	1.077	1.347	1.347	1.347
1	1.225	1.230	1.230	1.464	1.464	1.464
10	3.102	3.120	3.132	3.541	3.541	3.541
50	11.47	11.79	11.86	13.32	13.32	13.32

Таблица 4.13 – Влияние размера резервуаров длина  $\times$  радиуса на вычисление расхода массы на грубой пространственной сетке и  $L/R = 10$ .

В таблице 4.13 приведены результаты исследования влияния размера резервуаров на расход массы для  $L/R = 10$ . Видно, что для  $\delta \leq 10$  достаточно использовать резервуары небольшого размера, в то время как для

$\delta > 10$  в идеальном случае необходимо проводить расчеты для резервуара размером  $20 \times 20$  единиц. Интересно заметить, что коэффициент  $W_p$  практически не зависит от размера резервуара. Такое же поведение численного решения наблюдалось для плоского канала в [198].

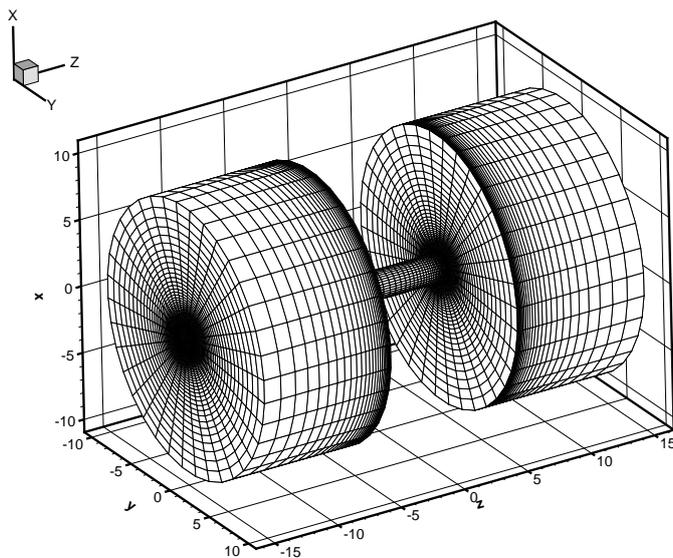
В целях уменьшения времени счета все основные результаты для  $\delta \geq 20$  получены с использованием размера резервуаров  $10 \times 10$ . При этом разрешение основной пространственной сетки было выше, с общим числом узлов  $\approx 5 \times 10^5$ . Данная сетка иллюстрируется на рисунке 4.17. Так как влияние размера резервуаров на точность счета снижается с ростом  $L/R$ , для  $L/R = 20$ , 50 тестовые расчеты не проводились, а размер резервуаров принимался равным  $10 \times 10$ . Пространственные сетки для данных длин трубы получались из сетки для  $L/R = 10$  добавлением узлов в продольном направлении в трубе.

Для нахождения безразмерного потока массы  $\dot{M}$ , определенного в формуле (4.1.1) использовалась следующая формула:

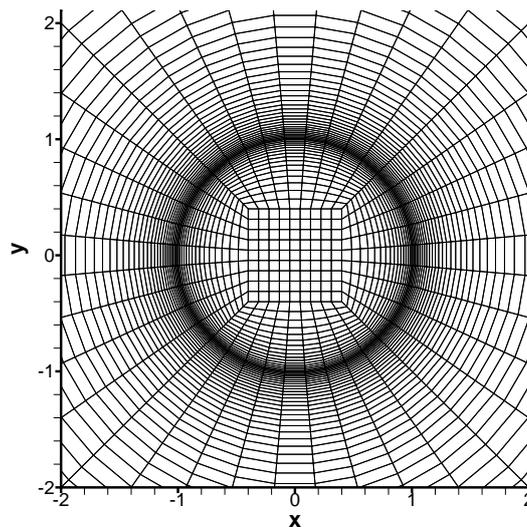
$$M = \frac{2}{A_h} \sum_{kface} u_z(x_{kface}, y_{kface}, 0) s_{kface}, \quad A_h = \sum_{kface} s_{kface}, \quad (4.4.25)$$

где  $kface$  – номер грани, лежащей в выбранной плоскости сечения трубы,  $s_{kface}$  – ее площадь,  $w(x_{kface}, y_{kface}, 0)$  – значение скорости газа в центре грани. Величина  $A_h$  в знаменателе аппроксимирует площадь поперечного сечения. На использованных сетках  $A_h = 3.138$ , что приблизительно на 0.1% меньше точного значения  $A = \pi$ .

В расчетах как на грубых тестовых, так и на подробных основных сетках в физическом пространстве отклонение расхода массы  $\dot{M}$  от постоянного значения не превышало 0.5% для  $\delta \leq 10$  и 0.1% для  $\delta > 10$ . Используя приведенные выше тестовые расчеты можно заключить, что коэффициент  $M_p$  находится с точностью 1% для  $\delta \leq 20$  и 2% для  $\delta > 20$ . Для величины



(а) Трехмерный вид



(б) Сетка в плоскости поперечного сечения

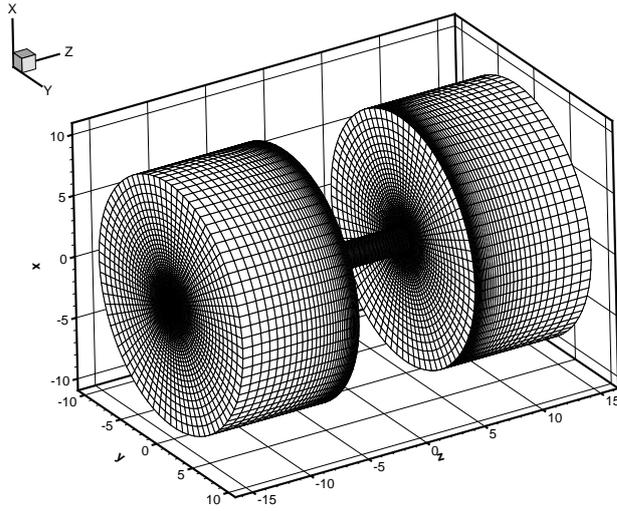
Рисунок 4.16 – Грубая тестовая пространственная сетка с резервуарами  $10 \times 10$  единиц.

$W_p$  точность счета составляет 1% для всех значений параметра разреженности  $\delta$ .

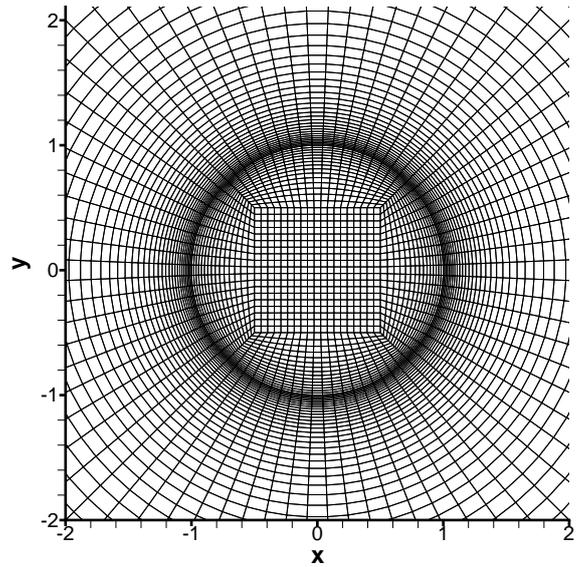
В таблице 4.14 приведено сравнение результатов счета для  $L/R = 20$  ранней работы автора [132] и основного анализа течения работы [136]. Видно хорошее согласие результатов для  $\delta \leq 1$ , однако с увеличением параметра разреженности расчеты [136] являются более точными. Разница объясняется улучшениями численного алгоритма и расчетной сетки.

#### 4.4.5 Выводы

Построено решение задачи истечения разреженного газа через круглую трубу конечной длины при малом перепаде давлений между резервуарами. Численный анализ задачи включает в себя исследование влияния раз-



(а) Трехмерный вид



(б) Сетка в плоскости поперечного сечения

Рисунок 4.17 – Подробная пространственная сетка с резервуарами  $10 \times 10$  единиц.

меров расчетной области и разрешения сетки. Впервые решение построено для большого конечного значения длины трубы и диапазона чисел Кнудсена. Полученные результаты позволяют количественно оценить границы применимости асимптотического решения для бесконечно-длинной трубы, и могут быть использованы для приближенных оценок расхода в случае нелинейной задачи, см. также [146].

$\delta$	$M_p$		$W_p$	
	Ref. [132]	[136]	Ref. [132]	[136]
0.	1.236	1.231	1.416	1.413
0.1	1.218	1.224	1.387	1.390
1.0	1.315	1.341	1.455	1.470
10.	3.229	3.340	3.519	3.562
20.	5.382	5.659	5.873	6.022

Таблица 4.14 – Сравнение значений  $M_p$ , полученных в работах автора [132, 136] для  $L/R = 20$ .

## 4.5 Истечение газа через круглую трубу постоянного радиуса

### 4.5.1 Постановка задачи

В данном разделе рассматривается задача о стационарном истечении разреженного газа через длинную цилиндрическую трубу кругового поперечного сечения при постоянной температуре стенок трубы и большом перепаде давлений между резервуарами. При этом основным является случай истечения в вакуум  $p_2 = 0$ . Решение задачи описывается кинетическим уравнением с полным (нелинеаризованным) интегралом столкновений (1.5.13). Задача решается численно с помощью неявного метода второго порядка точности, реализованного в пакете “Несвета́й-3Д”. Решение зависит от трех величин: относительной длины трубы  $L/R$ , параметра разреженности  $\delta_1$ , определенного по плотности и давлению газа в резервуаре

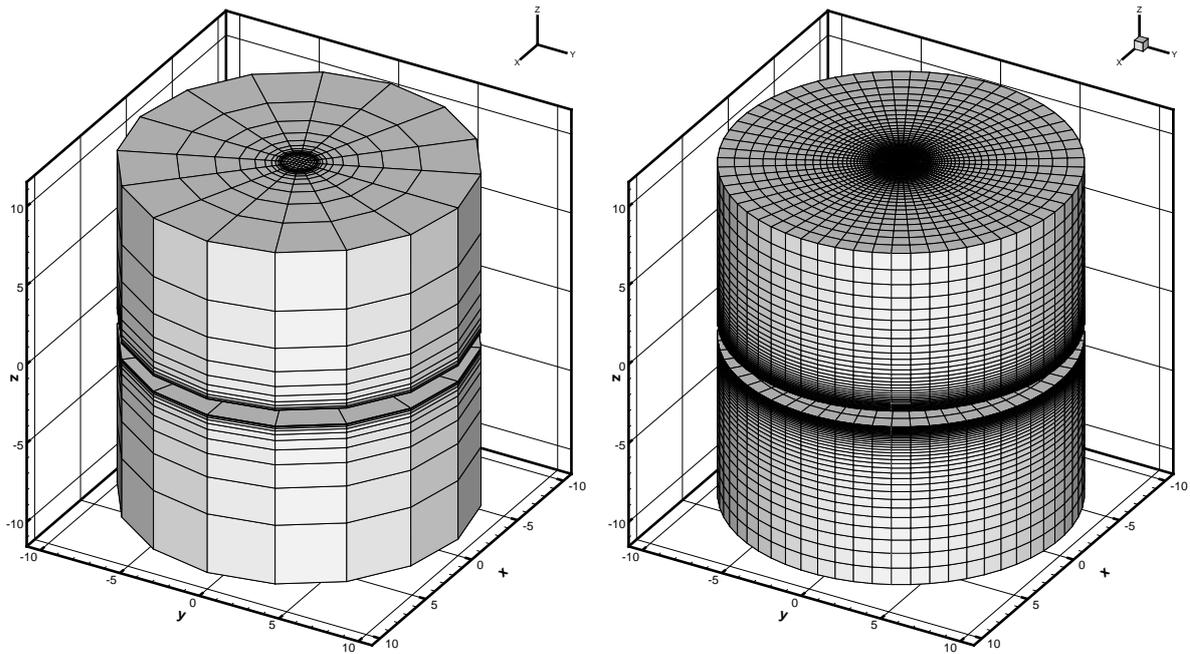
1, радиусу трубы  $R$  и отношения давлений  $p_1/p_2$ .

## 4.5.2 Тестирование численного метода и параллельного кода

В данном разделе рассмотрим задачи верификации и валидации расчетов, а также тестирование численного алгоритма в приложении к задаче истечения газа через трубу под действием большого перепада давлений.

Сначала рассматривается так называемая стандартная тестовая задача из работы [156], которая соответствует истечению через короткую трубу  $L/R = 1$ . В работе [140] построено численное решение на последовательности из трех вложенных пространственных сеток 5.6, 41 & 350 гексаэдров для полной расчетной области в физическом пространстве. Детали этих сеток представлены на рисунках 4.18, 4.19. В пространстве скоростей для малых  $\delta$  использовалась сетка из  $25 \times 16 \times 32$  узлов, в то время как для больших значений  $\delta$  было достаточно использовать более грубую сетку из  $15 \times 16 \times 16$  узлов. Детали скоростных сеток приведены на рисунках 4.20. Отметим, что из формулы Клаузинга получаем  $Q_\infty = 0.336$  для  $p_1/p_2 = 2$  и  $Q_\infty = 0.672$  для  $p_2 = 0$ , см. (4.2.5).

Первая серия расчетов проводилась для конечного отношения давлений  $p_1/p_2 = 2$ . Основной целью расчетов являлось сравнение трех методов аппроксимации по пространству: (i) схемы первого порядка; (ii) метода наименьших квадратов TVD3D, определяемого формулой (2.3.12); (iii) локально-одномерной реконструкции TVD1D, определенной по формуле (2.3.13). Так как для одноатомного газа решение методом ПСМ может считаться эквивалентным решению уравнения Больцмана с точным ин-



(а) 5600 гексаэдров

(б) 350000 гексаэдров

Рисунок 4.18 – Пространственные сетки для тестирования сходимости численного метода в случае  $L/R = 1$ .

тегралом столкновений, для оценки точности счета используются результаты [157].

Результаты расчетов приведены в таблице 4.15 для значений параметра разреженности  $\delta_1 = 0, 0.1, 1, 10$  and  $100$ . Из представленных результатов следует, что метод TVD1D является наиболее точным для построения решения данной задачи во всех режимах течения. Для  $\delta_1 = 100$  расчет комплексом “Несветай-3Д” дает более высокое значение расхода массы по сравнению с ПСМ решением, однако различие находится в рамках ошибки счета, заявленной в работе [157]. Для  $\delta_1 = 1$  различие в результатах составляет порядка 3%, что объясняется использованием кинетического уравнения с приближенным интегралом столкновений. В целом, вторая пространственная сетка из 40761 ячеек обеспечивает удовлетворительную

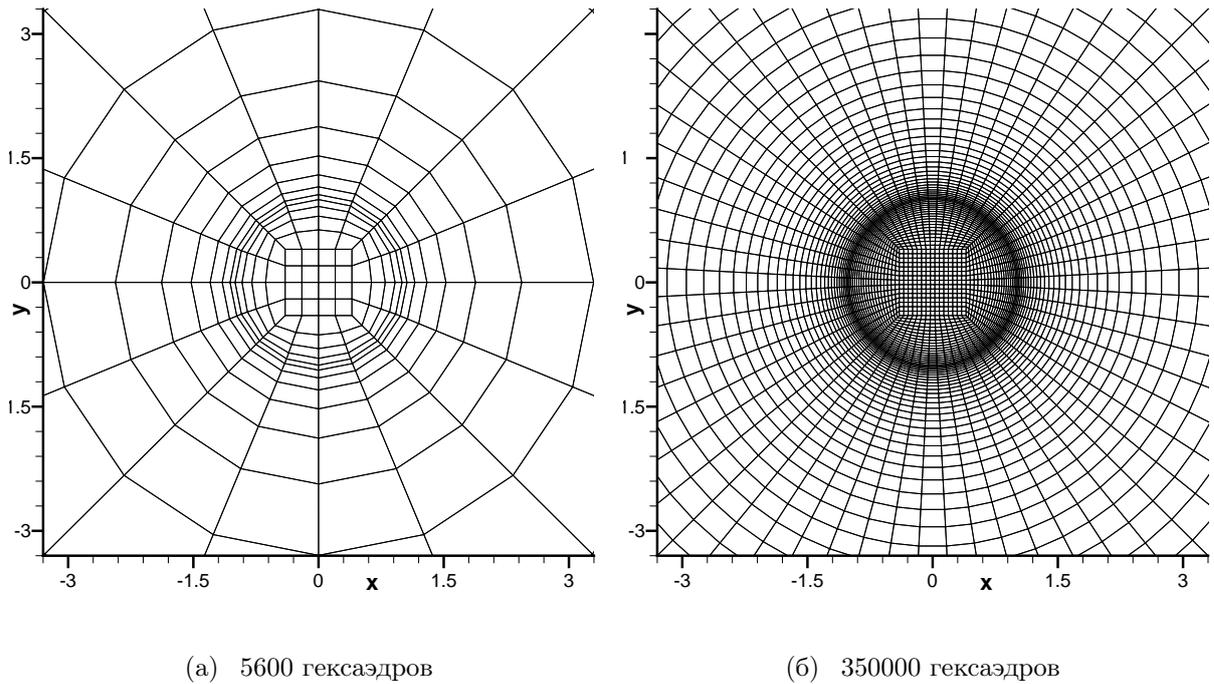
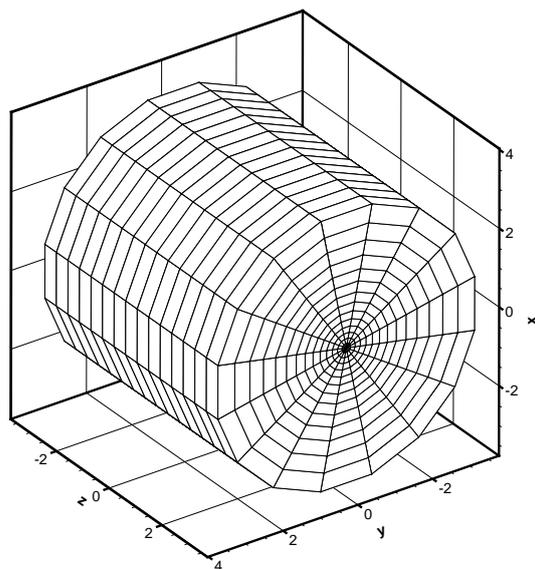


Рисунок 4.19 – Поперечные сечения сеток, представленных на рисунке 4.18.

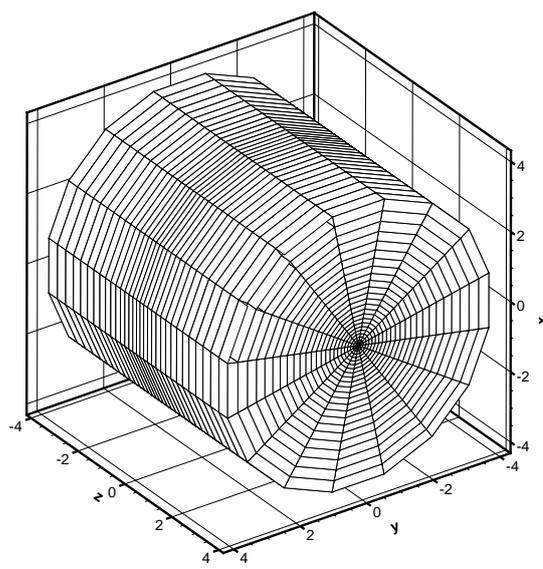
точность счета во всем диапазоне значений параметра разреженности. Использование наиболее грубой сетки дает приемлемую точность счета для  $\delta_1 \leq 1$ , но приводит к значительным ошибкам до 7% при  $\delta_1 \geq 10$ . Однако построение решения задачи на такой сетке занимает всего лишь три часа на 16 ядрах даже для наиболее сложного режима  $\delta_1 = 100$ .

Точность счета при использовании способа TVD3D в целом сравнимо с TVD1D для  $\delta_1 \leq 1$ . Однако с приближением к режиму сплошной среды этот способ начинает проигрывать в точности. При этом обе схемы второго порядка точнее простого метода 1 порядка аппроксимации. Так как вычислительная стоимость всех трех методов сравнима, использование схемы первого порядка не рекомендуется.

Во второй серии расчетов рассматривалось истечение в вакуум. Расчеты проводились с помощью локально-одномерной реконструкции TVD1D,



(а)  $15 \times 16 \times 16$  узлов



(б)  $25 \times 16 \times 32$  узлов

Рисунок 4.20 – Скоростные сетки для тестирования сходимости численного метода в случае  $L/R = 1$ .

определенной по формуле (2.3.13). В таблице 4.16 и на рисунке 4.21 представлено сравнение с расчетами по методу DSMC [201], решением точного уравнения Больцмана с помощью пакета UFS [138], экспериментальными данными [213] для случая короткой трубы  $L/R = 1$ . Для решения точного уравнения Больцмана использовалась серия вложенных сеток из 4.8, 32 & 245 кубиков для четверти расчетной области. Видно хорошее согласие во всем диапазоне чисел Кнудсена. Для кода “Несветай-3Д” получен порядок сходимости 1.6, близкий ко второму.

Вторая серия расчетов относится к случаю трубы умеренной относительной длины  $L/a = 10$ , для которой получено расхождение с методом DMSC не более 1%. Соответствующие кривые представлены на рисунке 4.21. Таким образом, точность моделирования на основе решения модельного уравнения растет с ростом отношения длины трубы к ее радиусу  $L/R$ .

$\delta_1$	1-ый			TVD3D			TVD1D			ПСМ
	(i)	(ii)	(iii)	(i)	(ii)	(iii)	(i)	(ii)	(iii)	
0.	0.327	0.333	0.335	0.333	0.335	0.336	0.335	0.336	0.336	0.336
0.1	0.334	0.340	0.343	0.342	0.344	0.344	0.344	0.345	0.345	0.343
1.	0.383	0.401	0.410	0.407	0.417	0.420	0.412	0.419	0.421	0.405
10.	0.626	0.734	0.802	0.800	0.855	0.873	0.832	0.871	0.876	0.866
100.	0.912	1.093	1.187	1.134	1.233	1.285	1.220	1.292	1.303	1.29

Таблица 4.15 – Сходимость по сетке нормированного расхода  $Q$  (4.1.2) для  $p_1/p_2 = 2$  и  $L/R = 1$ ; (i), (ii), (iii) относятся к серии пространственных сеток, состоящих из 5600, 40761 и 349905 гексаэдров; результаты метода ПСМ взяты из [157].

Рисунок 4.22 иллюстрирует важность использования в расчетах большого шага по времени и неявной схемы на примере решения задачи для  $\delta = 1$  и  $L/R = 1$ . Выигрыш составляет до 100 раз.

На рисунке 4.23 приведены кривые, иллюстрирующие масштабируемость параллельного кода на системах с общей памятью. Решается задача на грубой 6-мерной сетке из  $\approx 545$  миллионов узлов. При использовании полностью неявной ТВД схемы получено ускорение

- $\approx 16$  раз на узле с двумя процессорами Xeon E5-2697v2 (в сумме  $2 \times 12 = 24$  физических ядра)
- $\approx 96$  раз на 244 гиперпотоках на ускорителе Intel Xeon Phi 5110p (61 четырехпоточный вычислительный модуль, всего 244 гиперпотоков)

Данные результаты показывают хорошую параллельную эффективность кода “Несветай-3Д” в режиме использования OpenMP подхода.

$\delta_1$	$\text{Kn}_1$	точное УБ			S-модель			ПСМ	Эксп.
		(i)	(ii)	(iii)	(i)	(ii)	(iii)		
0.	$\infty$	0.690	0.679	0.674	0.666	0.670	0.672		
0.1	9.03	0.700	0.689	0.683	0.678	0.683	0.684	0.680	0.675
1.	0.90	0.767	0.762	0.756	0.758	0.766	0.768	0.754	0.743
10.	0.090	1.007	1.048	1.058	1.035	1.061	1.066	1.062	1.06
100.	0.009	1.211	1.322	1.358	1.290	1.351	1.367	1.358	1.33
	200.				1.343	1.406	1.425	1.412	
	500.				1.375	1.454	1.474	1.449	

Таблица 4.16 – Сходимость по сетке нормированного расхода  $Q$  (4.1.2) при истечении в вакуум через короткую трубу  $L/R = 1$ ; (i), (ii), (iii) относятся к серии пространственных сеток; ПСМ - [201], точное УБ - [138], экспериментальные данные - [213].

На рис. 4.24 представлены результаты сравнения одноуровневых MPI подходов для обоих способов дискретизации по пространству. Видно, что масштабируемость MPI-версии на основе декомпозиции сетки в физическом пространстве значительно лучше, чем версии, основанной на разбиении сетки в скоростном пространстве. При использовании 32 процессоров (ядер) одноблочная схема примерно на 20% быстрее многоблочной, но с ростом числа используемых процессоров многоблочный метод становится быстрее за счет лучшей масштабируемости. Анализ, проведенный в [131] для двухмерной версии неявного одноблочного метода, показывает, что для хорошей масштабируемости алгоритма требуется использование грубой пространственной сетки и подробной - скоростной. Так, в [132] по-

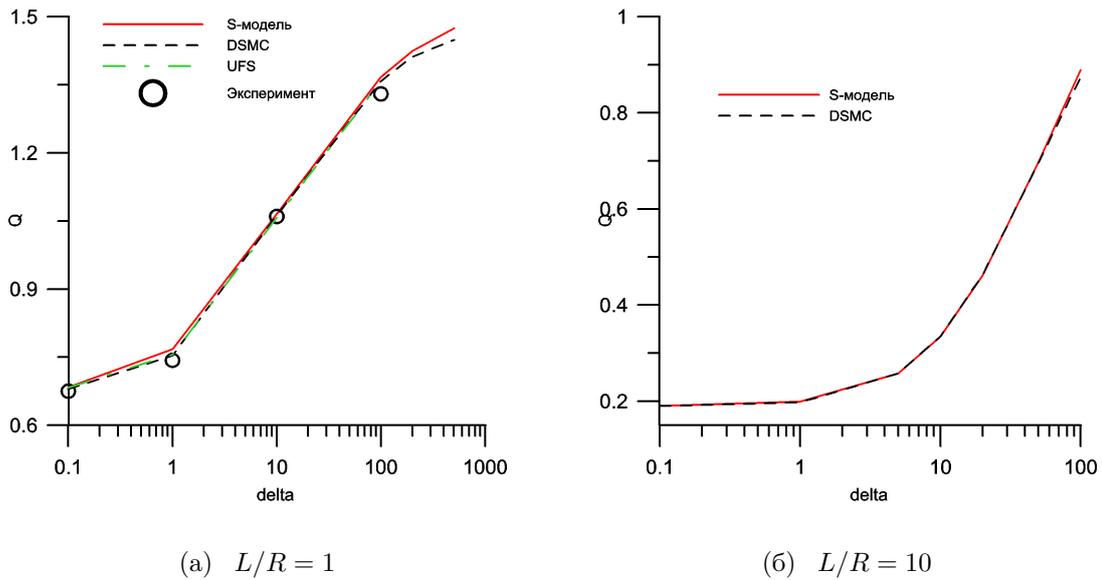


Рисунок 4.21 – Сравнение значений расхода массы при истечении в вакуум.

казана хорошая масштабируемость трехмерной схемы при расчете на пространственных сетках из  $\approx 5.5 \times 10^4$  ячеек. Однако для широкого класса задач условие использования относительно грубой пространственной сетки как правило невыполнимо. При этом использование одинарной точности представления данных практически не улучшает масштабируемость MPI-версии, основанной на разбиении скоростной сетки.

Таким образом, одноуровневая организация вычислений с разбиением только скоростной сетки может приводить к потере масштабируемости на большом числе ядер и налагает существенные ограничения на размер пространственной сетки, связанные с необходимостью хранить всю структуру пространственной сетки на каждом ядре. Данные недостатки становятся более важными при переходе к использованию современных процессоров с 10-18 физическими ядрами и моделированию обтекания тел сложной пространственной формы.

В качестве иллюстрации возможностей OpenMP + MPI параллельно-

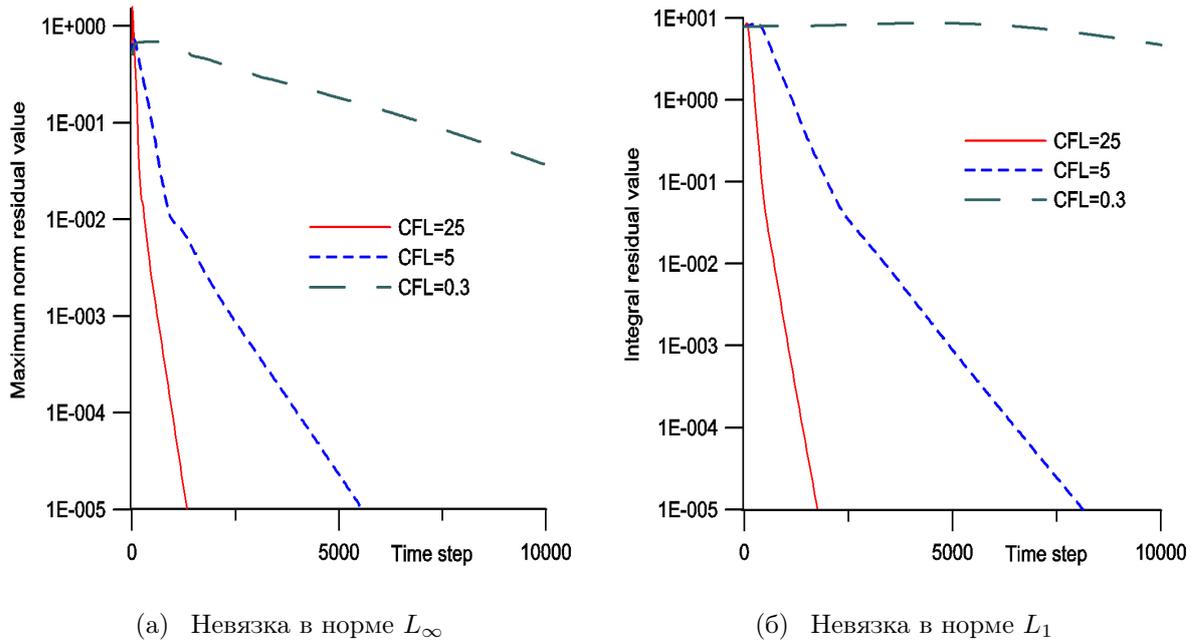
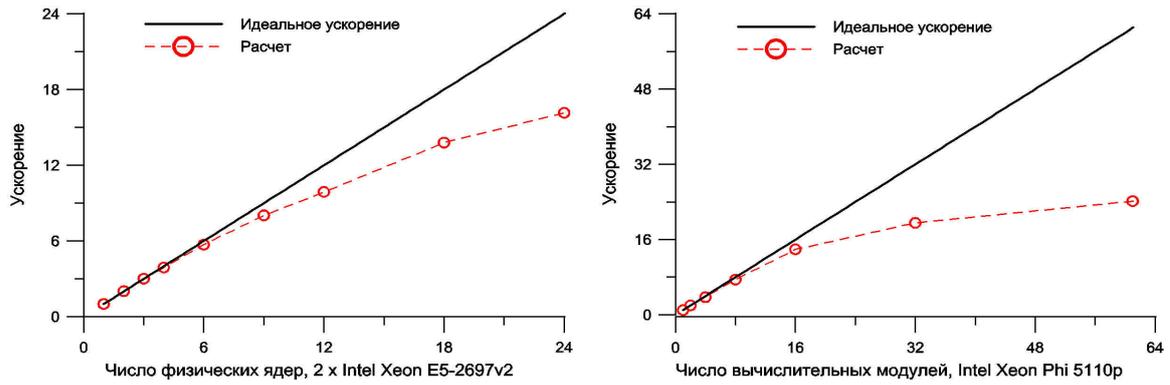


Рисунок 4.22 – Поведение невязки как функции числа шагов по времени в зависимости от числа Куранта в расчете.

го алгоритма был проведен ряд тестовых расчетов. Вычисления проводились на кластере лаборатории Математического моделирования нелинейных процессов в газовых средах Московского физико-технического института. Каждый узел кластера состоит из двух 12-ядерных процессоров Intel Xeon E5-2697v2 (Ivy Bridge), работающих на частоте 2.7 ГГц. Операционная система кластера - CentOS. Узлы кластера объединены в вычислительную сеть на основе сетевых карт и коммутатора InfiniBand FDR 4X с переподпиской один к двум.

В тестовых расчетах отношение давлений в резервуарах принималось равным двум; параметр разреженности  $\delta = 1$ . Расчетная сетка состояла из  $N_{\text{space}} = 52715$  пространственных ячеек и  $N_\xi = 10857$  скоростных ячеек; общее число ячеек в сетке было равно  $\approx 574$  млн узлов. Сравнение двух подходов к разбиению на блоки (см. [195, 196]) показало слабую зависимость скорости счета от качества разбиения. Поэтому предпочтение отда-

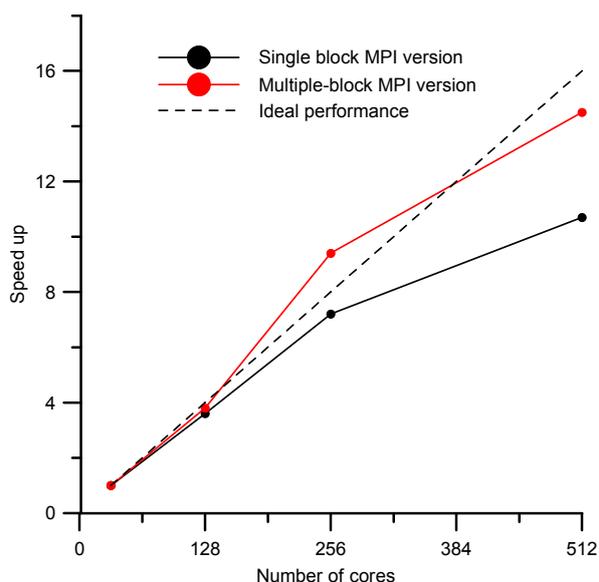


(а) Двухпроцессорный сервер на основе Intel Xeon E5-2697v2 (б) Однопроцессорный сервер на основе ускорителя Intel Xeon Phi 5110p

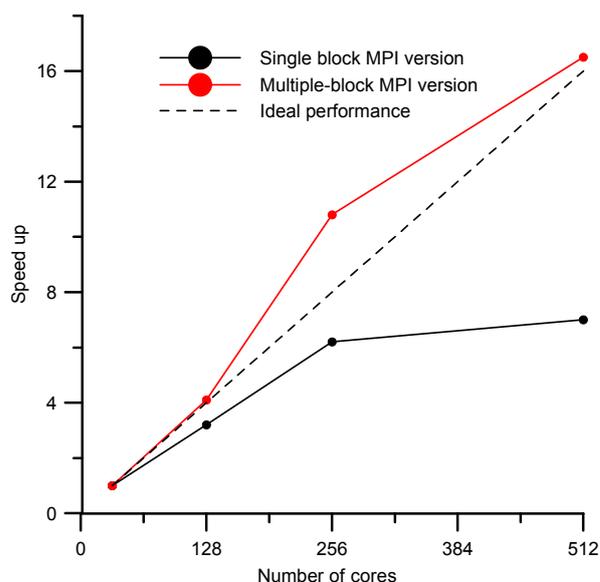
Рисунок 4.23 – Масштабируемость параллельного кода на системах с общей памятью

валось собственному коду, основанному на результатах из [196], несмотря на несколько худшее качество разбиения. Для данных параметров задачи были проведены расчеты для разных комбинаций числа MPI-процессов и OpenMP-нитей. В качестве начального приближения для всех расчетов использовалась функция Максвелла с макропараметрами сошедшегося решения.

На рис. 4.25 приведена зависимость времени расчета одного шага метода от выбора числа MPI-процессов на узел с ростом числа используемых узлов и достигаемое при этом ускорение счета. Приведены данные для 6-24 узлов кластера, что соответствует диапазону числа ядер 144-576. Видно, что на небольшом числе ядер MPI расчет идет несколько быстрее гибридных вычислений OpenMP + MPI, однако с ростом числа используемых ядер ситуация меняется на противоположную. Гибридный расчет с использованием двухуровневой модели параллельных вычислений сохраняет практически идеальную масштабируемость вплоть до 24 узлов кластера. При этом время счета шага составляет 0.7 сек для OpenMP + MPI версии против 1.9



(a) Схема TVD3D (2.3.12)



(б) Схема TVD1D (2.3.13)

Рисунок 4.24 – Сравнение MPI декомпозиции по скорости (кривая single-block) и MPI декомпозиции по физическому пространству (кривая multiple-block).

сек для MPI-кода.

Таким образом, на современных многоядерных процессорах Intel Xeon гибридная OpenMP + MPI версия считает примерно в 2 раза быстрее версии кода с использованием только MPI. Отметим, что с ростом значения параметра разреженности  $\delta$  преимущество гибридного двухуровневого подхода увеличивается, так как вычисление макроскопических величин в (2.3.17) требует большего числа итераций.

### 4.5.3 Основные результаты

Были проведены расчеты истечения разреженного газа в вакуум ( $p_2 = 0$ ) для значений относительной длины трубы  $L/R = 1, 10, 20$  и  $50$ . Расчетная сетка в физическом пространстве состояла из  $6 \times 10^4 \dots 3 \times 10^5$  гексаэд-

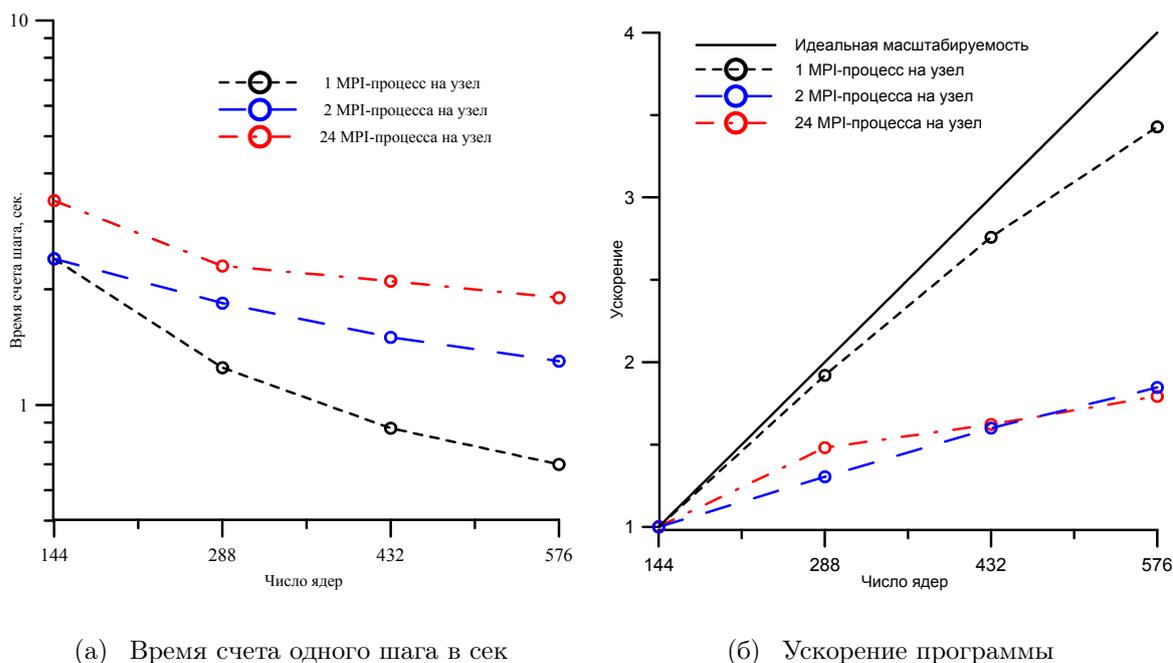


Рисунок 4.25 – Тестирование OpenMP + MPI модели: время счета одного шага и ускорение программы в зависимости от числа ядер и количества процессов MPI на узле.

ральных ячеек в зависимости от режима течения и длины трубы. Пример расчетной сетки со сгущением к поверхности трубы и ее выходным сечениям приведен на рисунках 4.26, 4.27. Скоростная сетка состояла из  $15 \times 16 \times 16$  ячеек в большинстве случаев; для  $\delta_1 \ll 1$  использовалось более подробное разрешение по молекулярной скорости.

Вычисления проводились на системах “Ломоносов” НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова и МФТИ-60 МФТИ, с использованием до 128 ядер. Наиболее сложный для расчета вариант  $L/R = 50$ ,  $\delta_1 = 100$  потребовал около 5 дней счета на 64 ядрах. Для  $L/R = 1$  требуемое время счета составляло примерно 24 часа для  $\delta_1 = 100$  и два часа для  $\delta_1 \leq 1$  при использовании 128 ядер.

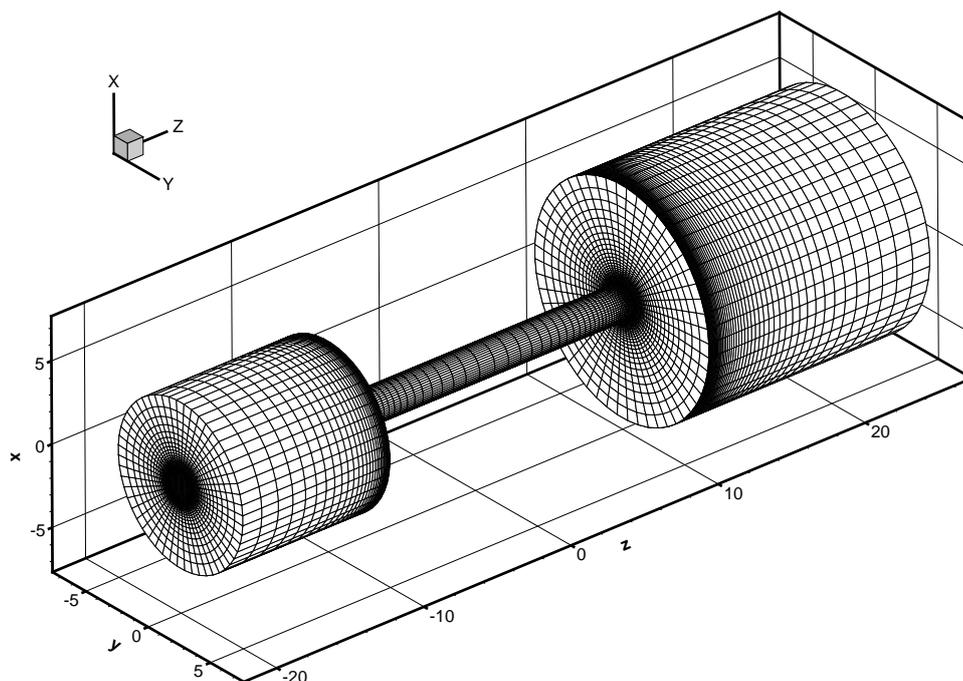


Рисунок 4.26 – Расчетная сетка для случая  $L/R = 20$ ;  $2.8 \times 10^5$  гексаэдров.

### Расчет расхода массы

В таблице 4.17 приведены результаты расчета коэффициента  $Q$ , определенного в формуле (4.1.2)) с помощью кода “Несветай-3Д”. Для  $L/R = 1, 10$  также приведены значения, полученные методом ПСМ [201]. Соответствующие кривые для расчета по S-модели приведены на рисунке 4.28. В целом имеет место хорошее согласие между результатами счета по кинетической модели и методом ПСМ. В большинстве случаев различия не превышают 1%, что находится в пределах точности счета. Особенный интерес представляет поведение величины  $Q$  в свободномолекулярном случае  $\delta_1 = 0$  как функции  $L/R$ . Из таблицы 4.17 видно, что значение  $Q$  падает обратно пропорционально длине трубы, так что величина  $Q \cdot L/R$  приближается к постоянному значению. Данный результат находится в хорошем согласии с работой [203], в которой расчет проводился для трубы без ре-

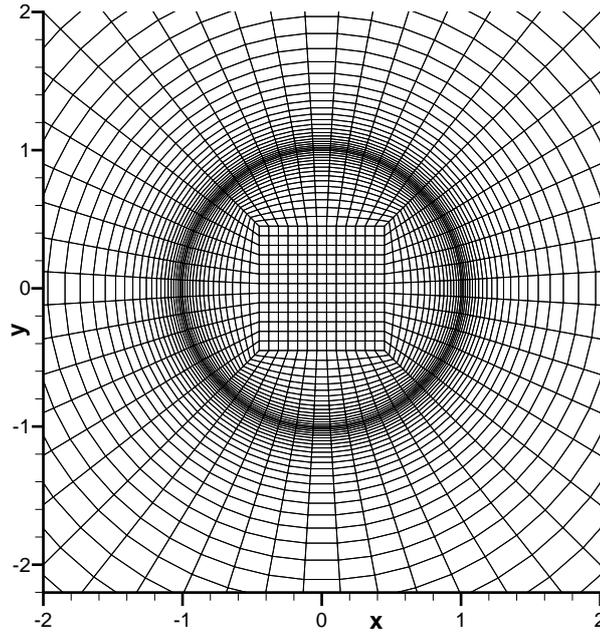


Рисунок 4.27 – Детали пространственной сетки, изображенной на рис.

4.16, в плоскости поперечного сечения правого резервуара.

зервуаров, вместо которых использовались граничные условия испарения-конденсации.

Другой подход к сравнению данных по расходу газа для различных  $L/R$  состоит в использовании нормировки по среднему градиенту давления, см. формулу (4.1.3). Можно ожидать, что при  $L/R \rightarrow \infty$  значения  $M_p$  будут приближаться к решению задачи Пуайзеля для течения разреженного газа в бесконечно длинной круглой трубе, вызванному постоянным градиентом давления. При этом в линеаризованном решении параметр разреженности является константой (обозначим ее  $\delta_{1d}$ ), в то время как в нелинейной задаче он меняется от  $\delta_1$  в левом резервуаре до  $\delta_2 = 0$  в правом. Возникает вопрос о том, какое значение параметра разреженности использовать для сравнения значений расхода массы. Очевидный выбор  $\delta_{1d} = \delta_1$  не приводит к разумным результатам. Вместо этого следует использовать решение

$\delta_1$	$L/R = 1$		$L/R = 10$		$L/R = 20$	$L/R = 50$
	ПСМ	S-модель	ПСМ	S-модель	S-модель	S-модель
0	0.672	0.670	0.192	0.187	0.108	0.047
0.1	0.680	0.681	0.190	0.190	0.107	0.046
1	0.754	0.758	0.198	0.199	0.110	0.047
5	0.948	0.949	0.258	0.258	0.144	0.060
10	1.062	1.058	0.335	0.335	0.187	0.079
20	1.168	1.161	0.463	0.462	0.272	0.119
50	1.287	1.281	0.696	0.697	0.469	0.228
100	1.358	1.355	0.874	0.888	0.667	0.379

Таблица 4.17 – Приведенный расход массы  $Q$  как функция параметра разреженности  $\delta_1$  и относительной длины  $L/R$ .

Результаты счета по методу ПСМ взяты из работы [201].

задачи Пуайзеля для параметра разреженности, соответствующего арифметическому среднему  $\delta_{1d} = \frac{1}{2}(\delta_1 + \delta_2) = \frac{1}{2}\delta_1$ .

В таблице 4.18 приведены вычисленные значения расхода массы для трубы конечной длины  $L/R = 10, 20, 50$  и асимптотическое решение  $L/R = \infty$ . На рисунке 4.29 приведены соответствующие кривые зависимости  $M_p$  от параметра разреженности  $\delta_1$ . Видно, что с ростом значения  $L/R$  кривая расхода приближается к асимптотическому решению для умеренных и больших значений параметра разреженности (малых чисел Кнудсена) При этом при  $\delta_1 \ll 1$  и  $\delta_1 \gg 1$  сходимость очень медленная. Кнудсеновский минимум слабо выражен для  $L/R = 20, 50$  и не существует для более коротких труб, что находится в хорошем согласии с результатами [201, 203].

Крайняя правая колонка таблицы 4.18 содержит значения  $M_p$ , получен-

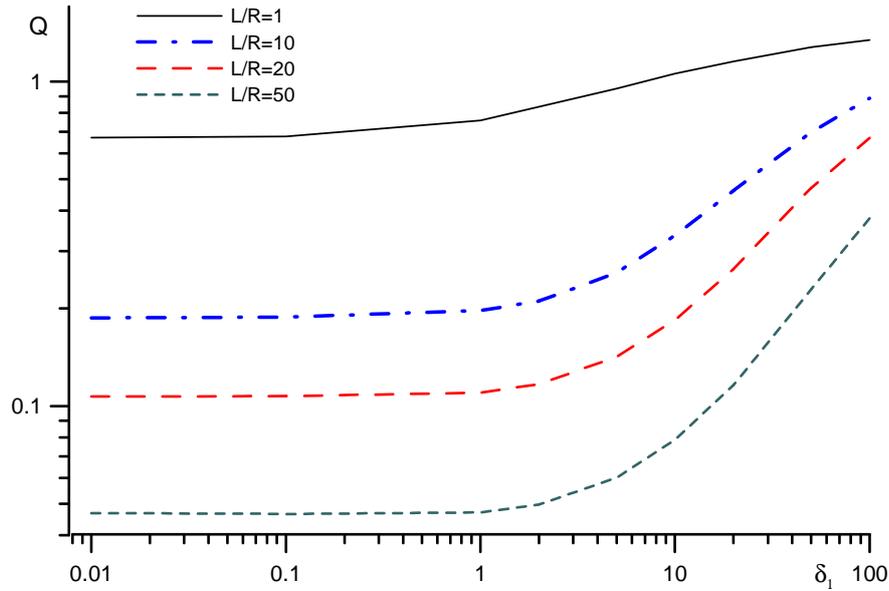


Рисунок 4.28 – Зависимость коэффициента  $Q$  от  $\delta_1$  для различных  $L/R$ .

ные с помощью метода плоских сечений [8]. Эти значения немного выше решения Пуайзеля и поэтому сильнее отличаются от результатов прямого расчета для трубы конечной длины. По всей видимости, для рассматриваемой задачи использование простого решения задачи Пуайзеля является более предпочтительным, чем применение довольно сложной процедуры метода плоских сечений [8].

Как показано в [169], трубу длиной  $L = 10$  уже можно считать достаточно длинной. Результаты расчетов прямым методом [133] подтверждают этот вывод. В то же время в [201] трубы такой длины названы короткими. Различие в определениях обусловлено отсутствием указания на степень разреженности среды. Известно, что для сплошносредного режима течения  $\text{Kn} \ll 1$  ( $\delta_{10} \gg 1$ ) аналитическое решение уравнений Навье-Стокса для течения Пуайзеля применимо [214] только если средняя скорость течения (в размерных переменных)

$$U_{av} \sim \frac{a^2 \Delta p}{\mu L} \ll c$$

где  $c$  – скорость звука. После некоторые преобразований данное условие

$\delta_1$	$\delta_{1d}$	$L/R = 10$	$L/R = 20$	$L/R = 50$	$L/R = \infty$	Ref. [8]
0.	0.	1.058	1.227	1.352	1.506	
0.1	0.05	1.060	1.223	1.327	1.433	1.436
1.	0.5	1.111	1.255	1.343	1.400	1.406
5	2.5	1.453	1.632	1.721	1.785	
10.	5	1.904	2.130	2.268	2.364	2.372
20	10	2.620	3.090	3.338	3.574	3.587
50.	25.	3.960	5.327	6.519	7.291	
100	50	5.046	7.576	10.84	13.52	13.54

Таблица 4.18 – Приведенный расход массы  $M_p$  как функция  $\delta_1$  и  $L/R$ .

можно записать в виде

$$\frac{\Delta p/p_1}{\text{Kn} \cdot L} \ll 1. \quad (4.5.26)$$

Условие (4.5.26) близко к условию, выражаемому уравнением (6) статьи [8], но выводится из более общих и более простых соображений. Таким образом, труба одной и той же длины может быть длинной или короткой в зависимости от  $\text{Kn}$ : трубу будем называть длинной, если  $\text{Kn} \cdot L \gg 1$  (или  $\delta_1/L \ll 1$ ).

## Поле течения

На рисунке 4.30 приведено распределение плотности газа и числа Маха вдоль оси трубы для  $L/R = 10$  и  $\delta_1 = 0, 1, 10$ . Видно, что в свободно-молекулярном случае кривая плотности практически линейная, при этом ее наклон отличен от  $-n_1/L$ . С ростом  $\delta_1$  кривая плотности значительно отходит от линейного распределения. Наибольшее отклонение наблюдается

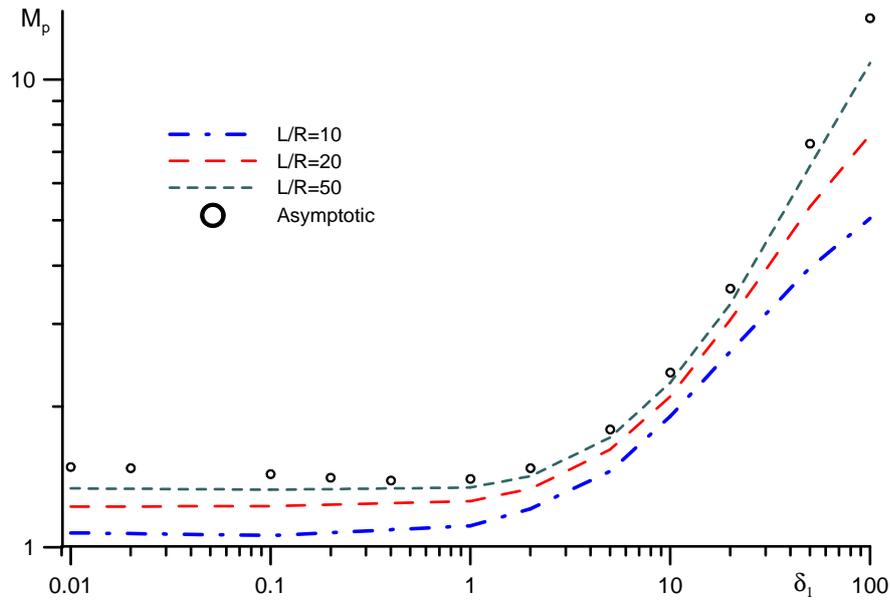


Рисунок 4.29 – Зависимость коэффициента  $M_p$  от  $\delta_1$  для различных значений  $L/R$  и сравнение с асимптотическим решением  $L/R = \infty$ .

вблизи концов трубы. Течение газа очень медленное внутри трубы вплоть до окрестности выходного сечения, после чего оно разгоняется до сверхзвуковых скоростей. Заметим, что распределение числа Маха слабо зависит от параметра разреженности, по крайней мере, при  $\delta_1 \leq 10$ .

На рис. 4.31 показано сравнение аксиальных распределений плотности, полученных прямым решением задачи и по методу плоских сечений (4.2.11). Результаты для  $\delta_1 = 1, 100$  и  $L/R = 10, 50$  взяты из работы [148]. Видно, что для  $\delta_1 = 1$  имеется в целом хорошее согласие между результатами для  $L/R = 50$ , за исключением небольших окрестностей около входа и выхода. С ростом значения параметра разреженности кривые плотности, полученные по разным методам, начинают заметно расходиться даже для  $L/a = 50$ . Таким образом, прямой расчет подтверждает утверждение о зависимости применимости приближенной формулы (4.2.11) не только от относительной длины трубы, но и от параметра разреженности  $\delta_1$ .

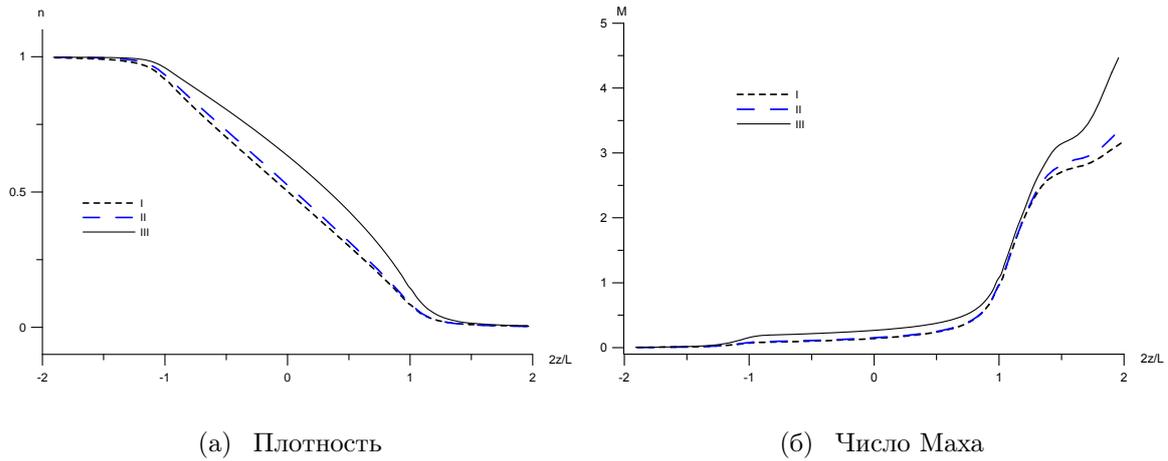


Рисунок 4.30 – Распределение плотности газа вдоль оси трубы для  $L/R = 10$ . Кривые I, II, III относятся к  $\delta_1 = 0, 1$  и  $10$ .

На рисунке 4.32 представлены линии уровня плотности, температуры и числа Маха во всей области течения для  $\delta_1 = 1$  и  $L/R = 10$ . Хорошо видно, что в центральной части трубы плотность постоянна в каждом сечении. Около выхода из трубы картина течения существенно нелинейная и сверхзвуковая. Отметим, что разработанный численный метод и пакет программ “Несветай-3Д” позволяют строить течение в области низких плотностей с сохранением симметрии течения даже на грубой сетке. С увеличением длины трубы картина течения сохраняет такой же вид, однако концевые эффекты становятся меньше.

### Влияние концевых эффектов (присутствия резервуаров)

В заключение раздела рассмотрим влияние концевых эффектов. В связи с этим выполнены следующие расчеты: 1) прямым методом решена задача с граничными условиями испарения-конденсации на торцах трубы, т.е. в постановке работ [173, 202, 203]; 2) та же задача решена методом плоских сечений по методике [8]; 3) выполнено сравнение результатов между собой

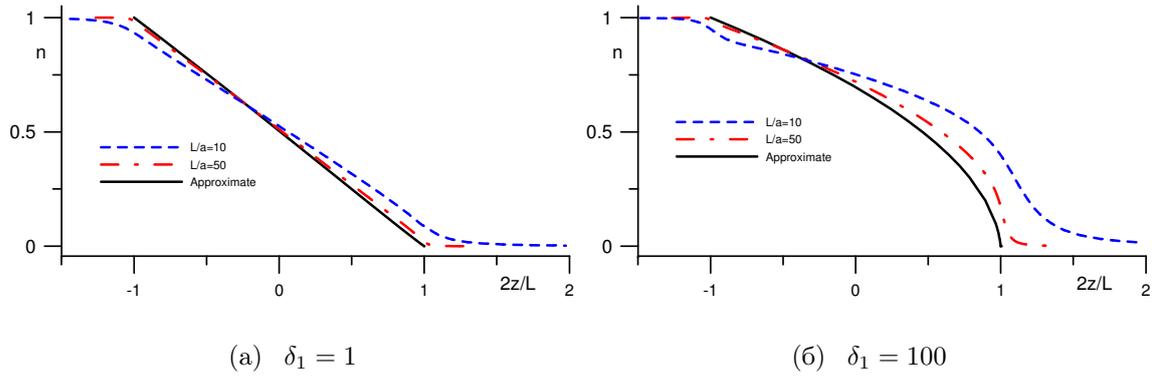
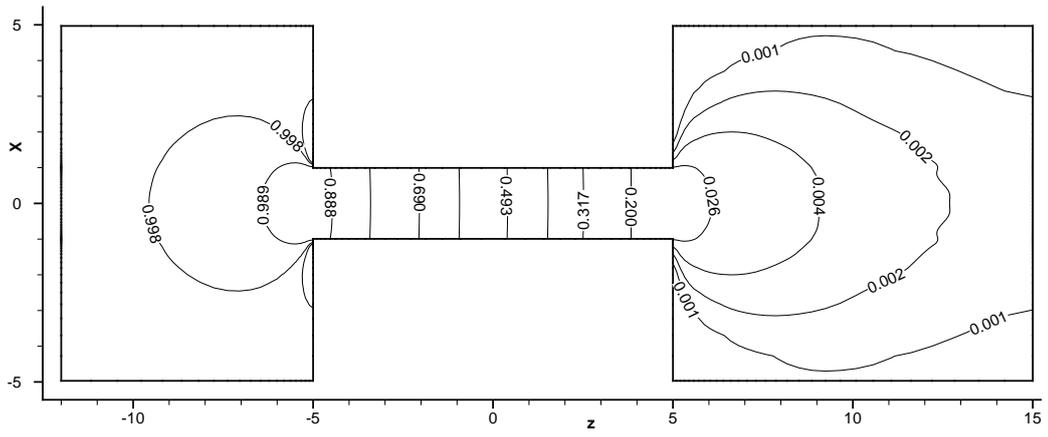


Рисунок 4.31 – Сравнение прямого численного решения кинетического уравнения с профилем плотности, полученным методом плоских сечений (формула (4.2.12)).

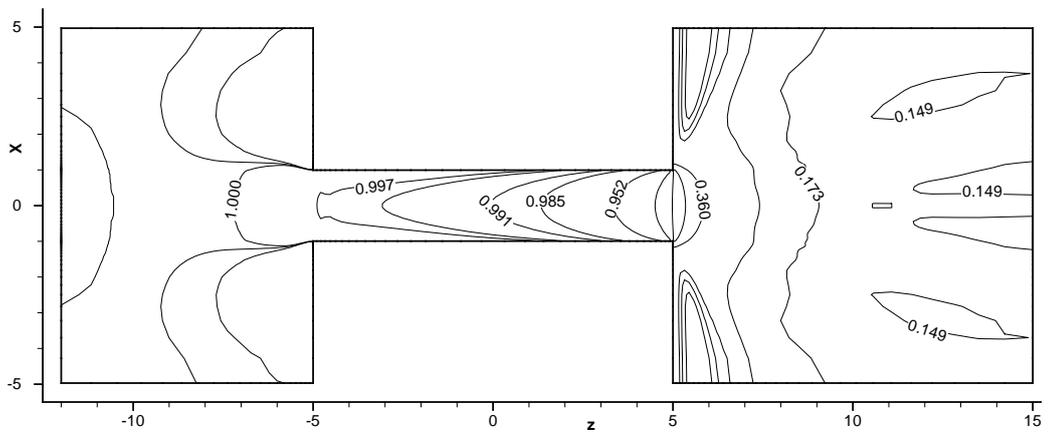
и с результатами [8]. Наконец методом [133] построено численное решение задачи в предположении, что можно пренебречь течением в резервуаре высокого давления и принять таким образом условия испарения-конденсации во входном сечении трубы, в то время как в вакуумной камере течение газа принимается во внимание.

Расчетные сетки для полной конфигурации с обоими резервуарами совпадали с использовавшимися в работе [133]. Для упрощенных конфигураций (без одного или обоих резервуаров) расчетная сетка по пространству внутри трубы отличалась от [133]: использовалось более сильное сгущение к концам трубы, учитывающее градиенты решения в данных областях. Общее количество пространственных ячеек для конфигурации без резервуаров варьировалось от 95 тысяч для  $L = 10$  до 190 тысяч для  $L = 50$ . Точность расхода вычисления расхода массы на использовавшихся сетках - 1 – 2 процента в зависимости от  $\delta_{10}$  и  $L$ . Расчеты проводились на компьютере “Чебышёв” с использованием 64-128 процессорных ядер.

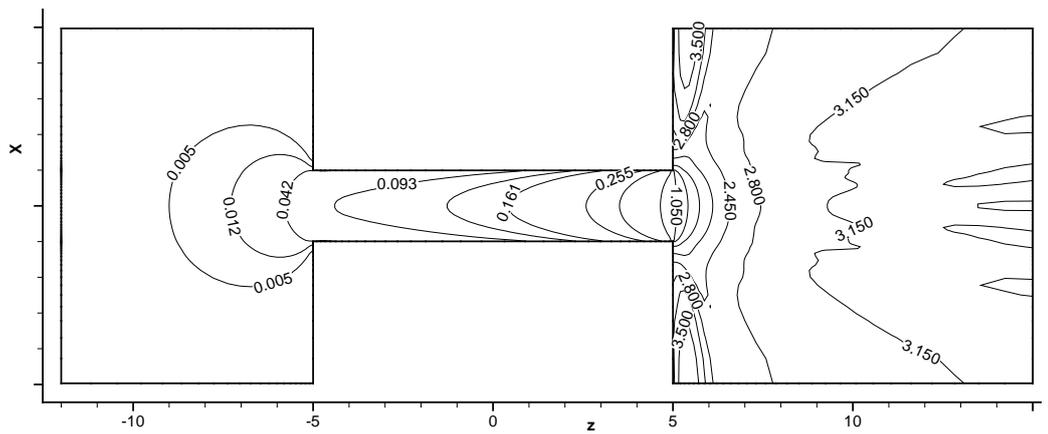
Характер движения зависит от безразмерной длины канала  $L$  и от параметра разреженности газа  $\delta_{10}$ . Были выполнены расчеты для длин  $L =$



(а) Числовая плотность



(б) Температура



(в) Число Маха

Рисунок 4.32 – Линии уровня макроскопических величин для  $\delta_1 = 1$  и  $L/R = 10$ .

10; 20; 50 при различных значениях  $\delta_{10}$ . Как показано в [169], трубу длины  $L/R = 10$  уже можно считать достаточно длинной. Результаты расчетов прямым методом [133] подтверждают этот вывод. В то же время в [201] трубы такой длины названы короткими. Различие в определениях обусловлено отсутствием указания на степень разреженности среды.

$\delta_{10}$	(1)		(2)	(3)	(4)	[8]
	[201]	[133]				
0	0.192	0.190	0.190	0.190	0.190	
0.1	0.190	0.190	0.190	0.190	0.190	0.255
1	0.198	0.199	0.200	0.193	0.194	0.249
5	0.258	0.258	0.260	0.230	0.231	0.317
10	0.335	0.335	0.337	0.274	0.274	0.420
20	0.463	0.462	0.464	0.341	0.339	0.636
50	0.696	0.697	0.699	0.451	0.451	1.295
100	0.874	0.888	0.889	0.535	0.534	2.399

Таблица 4.19 – Сравнение различных способов вычисления расхода  $\dot{M}$  для  $L = 10$ . (1) - полная конфигурация, (2) только с левым резервуаром (3) только с правым (4) без резервуаров

В табл. 4.19 для  $L = 10$  представлено сравнение различных способов вычисления величины  $Q$ . При этом (1) соответствует полной конфигурации (геометрии) задачи, включающей оба резервуара, (2),(3) - конфигурация только с левым или правым резервуаром; (4) – без резервуаров, что отвечает постановке задачи, использовавшейся в статьях [8, 55, 173, 202, 203]. В табл. 4.20 приведены данные для  $L = 20, 50$  с использованием только полной (1) и неполной (4) конфигураций. Отдельной колонкой в обеих табл.

$\delta_{10}$	$L = 20$			$L = 50$		
	(1), [133]	(4)	[8]	(1), [133]	(4)	[8]
0	0.108	0.109		0.047	0.048	
0.1	0.107	0.108	0.127	0.046	0.047	0.051
1	0.110	0.109	0.125	0.047	0.047	0.050
5	0.144	0.133	0.159	0.060	0.059	0.063
10	0.187	0.166	0.210	0.079	0.076	0.084
20	0.272	0.221	0.318	0.119	0.109	0.127
50	0.469	0.334	0.647	0.228	0.189	0.259
100	0.667	0.431	1.200	0.379	0.286	0.480

Таблица 4.20 – Сравнение различных способов вычисления расхода  $\dot{M}$  для  $L = 20, 50$ .

4.19, 4.20 даны значения  $Q$ , полученные методом [8]. Рис. 4.33 иллюстрирует полученные результаты графически; приведена зависимость нормированного расхода массы  $M_p = L\dot{M}/(p_{10} - p_{20}) \equiv L\dot{M}$ .

Следует отметить, что значения  $Q$  для конфигурации (1) в основном соответствуют [133], с небольшими изменениями в пределах 1% для предельных режимов  $\delta_{10} \ll 1$  и  $\delta_{10} \gg 1$ . Для простоты, все значения расхода для полной конфигурации обозначаются ссылкой на [133].

Отклонение результатов, полученных различными упрощенными методами, от эталонного результата [133], зависит как от длины трубы и геометрии задачи, так и от параметра разреженности. Как и ожидалось, различие в результатах снижается с ростом  $L$  и с уменьшением  $\delta_{10}$ . При  $\delta_{10}/L \ll 1$  использование любой из неполных конфигураций задачи обеспечивает достаточно высокую точность счета расхода массы. При увеличении  $\delta_{10}$  при-

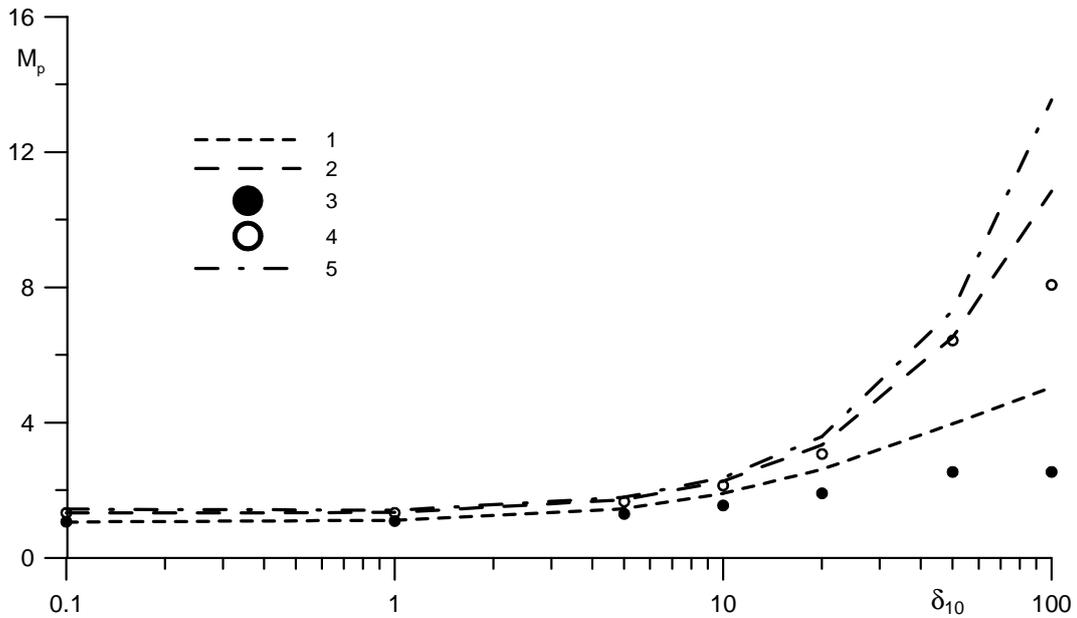


Рисунок 4.33 – Расход массы газа через сечение трубы в зависимости от  $\delta_{10}$  и длины трубы  $L$ : 1,2 -  $L = 10, 50$  и конфигурация (1); 3,4 -  $L = 10, 50$  и конфигурация (4); 5 - приближенное решение [8].

емлемый результат обеспечивает только одна из неполных конфигураций, а именно конфигурация (2). Таким образом, включение в геометрию задачи входного резервуара высокого давления – необходимое условие получения правильного расхода массы. Заметим, что с ростом  $\delta_{10}$  течение газа вблизи выхода из трубы становится сверхзвуковым, и таким образом влияние резервуара 2 на картину течения вверх по потоку уменьшается. Приближенная формула для вычисления расхода из работы [8] оказывается приемлемой не просто для достаточно длинных труб, но и для достаточно разреженного газа. Иными словами, при  $Kn \ll 1$  (т.е.  $\delta_{10} \gg 1$ ) должно выполняться условие (3.1). В противном случае нарушается условие медленного течения, близости к термодинамическому равновесию в системе газ-поверхность и справедливости линейного приближения в каждом сече-

нии  $x = \text{const}$ .

#### 4.5.4 Выводы

Построено численное решение задачи об истечении разреженного газа через круглую трубу в вакуум. Численный метод и комплекс программ верифицированы путем сравнения результатов счета с методом ПСМ и экспериментальными данными. Проведено сравнение с методом плоских сечений и представлено условие на параметры задачи, при которых трубу можно считать достаточно длинной для применения данного метода. Изучено влияние наличия-отсутствия резервуаров на величину расхода массы. Показано, что течение становится сверхзвуковым вблизи выхода из трубы.

### 4.6 Истечение газа в вакуум через коническую трубу

#### 4.6.1 Постановка задачи

Рассмотрим истечение разреженного газа через коническую трубу длины  $L$ , соединяющую два бесконечно больших резервуара с одноатомным газом. Радиусы входного и выходного сечения трубы обозначим через  $R_1$ ,  $R_2$ , соответственно. Как и в предыдущих разделах, давление и температуру газа в резервуаре 1 обозначим через  $p_1$ ,  $T_1$ , в то время как в правом резервуаре давление газа  $p_2$  считаем настолько малым, что можно положить  $p_2 = 0$ . На поверхности трубы принимаем условие полной тепловой аккомодации к температуре  $T_1$ .

Решение задачи зависит от параметра разреженности  $\delta_1$ , относительной длины  $L/R_1$  и отношения радиусов выходного и входного сечений  $R_2/R_1$ . Расчеты проводились для длин трубы  $L/R_1 = 1, 5, 10, 20, 50$  и отношений радиусов сечений  $R_2/R_1 = 1, 1.1, 2, 5$  и  $10$ . Во всех случаях в безразмерных переменных  $R_2/L \leq 1$ . Параметр разреженности, вычисленный по радиусу входного сечения и параметрам газа в левом резервуаре, менялся в пределах  $0 \leq \delta_1 \leq 100$ , что соответствует режимам течения от свободно-молекулярного до почти сплошносредного.

## 4.6.2 Результаты

### Расход массы

В таблицах 4.21 – 4.25 приведены значения величины  $Q$  в зависимости от трех параметров задачи:  $\delta_1$ ,  $L/R_1$ ,  $R_2/R_1$ . Для случая сечения постоянного радиуса ( $R_2 = R_1$ ) также приводятся результаты метода ПСМ из работы [201] и предыдущие расчеты автора [133, 135], выполненные на более подробной пространственной сетке. Видно хорошее согласие результатов для  $R_2/R_1 = 1$ ; имеющиеся отличия находятся в пределах точности счета и/или точности моделирования течений разреженного газа на основе кинетического уравнения с приближенным интегралом столкновений.

В целом, расход массы растет с увеличением радиуса выходного сечения  $R_2$ . Для небольших отклонений  $R_2$  от  $R_1$  можно использовать следующую простую формулу пересчета

$$Q(R_2/R_1 = 1.1, \delta_1) \approx 1.15 \cdot Q(R_2/R_1 = 1, \delta_1), \quad (4.6.27)$$

согласно которой имеет место линейная зависимость изменения расхода от  $\delta R = R_2/R_1 - 1$ . Однако для  $R_2/R_1 \geq 2$  отклонение значений расхода

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 1$			1.1	2
	[201]	[133]			
0.	0.672	0.670	0.671	0.742	0.976
0.1	0.680	0.681	0.683	0.757	0.996
1.	0.754	0.758	0.766	0.851	1.123
5.	0.948	0.949	0.953	1.055	1.352
10.	1.062	1.058	1.061	1.175	1.438
20.	1.168	1.161	1.164	1.280	1.489
30.			1.220	1.332	1.507
50.	1.287	1.281	1.282	1.390	1.518
100	1.358	1.355	1.352	1.448	1.522

Таблица 4.21 – Редуцированный расход массы  $Q$  для  $L/R_1 = 1$  и различных значений  $R_2/R_1$ .

от случая круглой трубы становится нелинейным и не может описываться фиксированным множителем. Увеличение расхода объясняется тем, что расширяющаяся труба имеет меньшее сопротивление течению по сравнению с круглой трубой фиксированного радиуса. При этом верхняя граница роста расхода задается решением задачи об истечении газа через круглое отверстие.

### Сравнение с методом плоских сечений

Найденные прямым численным расчетом значения расхода массы можно использовать для оценки применимости приближенного метода решения задачи, предложенного в работах [8, 204]. Для трубы постоянного радиуса

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 1$		1.1	2	5
	[201]				
0.	0.311	0.309	0.350	0.644	0.958
0.1	0.312	0.313	0.354	0.655	0.976
1.	0.334	0.339	0.386	0.734	1.098
5.	0.436	0.439	0.505	0.973	1.338
10.	0.543	0.544	0.615	1.133	1.437
20.	0.695	0.693	0.774	1.290	1.496
30.		0.792	0.874	1.358	1.522
50.	0.917	0.916	0.992	1.417	1.537
100	1.068	1.071	1.127	1.464	1.545

Таблица 4.22 – Редуцированный расход массы  $Q$  для  $L/R_1 = 5$  и различных значений  $R_2/R_1$ .

данная работа была проделана в [133,135,148], где было показано, что применимость приближенного метода ограничена условием  $\delta_1(R_1/L) \ll 1$ . Для нахождения решения с помощью данного метода, необходимо в уравнении (4.2.12) задать

$$r(x) = R_1 + (R_2 - R_1)\frac{x}{L}.$$

В таблицах 4.26,4.27 приведено сравнение между прямым численным решением задачи и результатом использования формулы (4.2.13) для  $L/R_1 = 10, 20$  и  $50$ . Видно, что даже для наиболее благоприятного для применения формулы (4.2.13) случая длинной трубы  $L/R_1 = 50$  почти постоянного радиуса ( $R_2/R_1 = 1.1$ ) имеются существенные расхождения в результатах. Другими словами, для рассматриваемых значений длины трубы приближенный метод [204] в случае конической геометрии существенно менее

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 1$			1.1	2	5	10
	[201]	[133, 135]					
0.	0.192	0.190	0.190	0.216	0.436	0.833	0.977
0.1	0.190	0.190	0.191	0.217	0.441	0.845	1.000
1.	0.198	0.199	0.201	0.230	0.483	0.957	1.121
5.	0.258	0.258	0.261	0.302	0.657	1.212	1.359
10.	0.335	0.335	0.335	0.390	0.839	1.347	1.445
20.	0.463	0.462	0.462	0.537	1.076	1.445	1.502
30.			0.559	0.649	1.202	1.481	1.527
50.	0.696	0.697	0.697	0.804	1.329	1.504	1.540
100	0.874	0.888	0.889	1.010	1.432	1.533	1.547

Таблица 4.23 – Редуцированный расход массы  $Q$  для  $L/R_1 = 10$  и различных значений  $R_2/R_1$ .

точен, чем для случая трубы постоянного радиуса. Выполнение условия  $\delta_1(R_1/L) \ll 1$  уже не гарантирует точность результатов.

Потеря точности приближенного метода плоских сечений можно объяснить существенно более сложной картиной течения в конической трубе по сравнению с трубой постоянного радиуса. Для любого сечения трубы вектор скорости газа в общем случае не параллелен оси  $oz$ , как имеет место быть в случае постоянного радиуса. Даже для  $L/R_1 = 50$  течение в окрестности середины трубы слишком сложное для аппроксимации его линейризованным решением. Однако из таблицы следует, что точность метода (4.2.13) в целом улучшается с увеличением длины  $L/R_1$ , так что можно ожидать, что для  $L/R_1 \gg 1$  и не очень больших величин параметра разреженности его применение будет обеспечивать удовлетворительную точ-

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 1$		1.1	2	5	10
	[133, 135]					
0.	0.108	0.108	0.124	0.264	0.611	0.859
0.1	0.107	0.108	0.123	0.265	0.620	0.876
1.	0.110	0.111	0.127	0.281	0.692	0.987
5.	0.144	0.143	0.166	0.385	0.932	1.234
10.	0.187	0.188	0.220	0.517	1.132	1.365
20.	0.272	0.272	0.320	0.743	1.315	1.453
30.		0.347	0.408	0.907	1.388	1.486
50.	0.469	0.469	0.550	1.110	1.450	1.512
100	0.667	0.667	0.773	1.317	1.498	1.530

Таблица 4.24 – Редуцированный расход массы  $Q$  для  $L/R_1 = 20$  и различных значений  $R_2/R_1$ .

ность для расхода массы.

### Поле течения

Рассмотрим сначала случай трубы умеренной длины  $L/R_1 = 10$ . На рисунках 4.34, 4.35 показаны осевые распределения макроскопических величин для  $\delta_1 = 1$  (разреженный режим) и  $\delta_1 = 100$  (переходной/сплошнородный режим) для разных вариантов значений  $R_2/R_1$ . Видно, что наличие переменного сечения сильно влияет на распределение основных величин, в большей степени для случая  $\delta_1 = 100$ . Уже при  $R_2/R_1 = 2$  распределение давления существенно отклоняется от линейного даже для  $\delta_1 = 1$ . Температура газа отходит от единичного значения не только на выходе из трубы, но

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 1$		1.1	2	5	10
	[133, 135]					
0.	0.047	0.047	0.054	0.121	0.331	0.568
0.1	0.046	0.047	0.054	0.121	0.334	0.576
1.	0.047	0.047	0.055	0.124	0.355	0.638
5.	0.060	0.060	0.071	0.169	0.497	0.871
10.	0.079	0.080	0.094	0.233	0.673	1.080
20.	0.119	0.120	0.141	0.360	0.944	1.281
30.		0.158	0.187	0.477	1.110	1.363
50.	0.228	0.230	0.273	0.674	1.275	1.431
100	0.379	0.378	0.447	0.990	1.408	1.484

Таблица 4.25 – Редуцированный расход массы  $Q$  для  $L/R_1 = 50$  и различных значений  $R_2/R_1$ .

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 1.1$				$R_2/R_1 = 2$			
	$L/R_1 = 10$	20	50	(4.2.13)	$L/R_1 = 10$	20	50	(4.2.13)
0.	1.217	1.393	1.533	1.734	2.446	2.974	3.424	4.013
0.1	1.226	1.390	1.521	1.659	2.477	2.985	3.406	3.823
1.	1.295	1.431	1.537	1.637	2.712	3.174	3.501	3.801
10.	2.196	2.475	2.654	2.804	4.715	5.837	6.575	7.110
100	5.698	8.723	12.62	16.31	8.086	14.85	27.88	45.49

Таблица 4.26 – Сравнение значений расхода  $M_p$ , найденных прямым численным расчетом и по приближенной формуле (4.2.13) для  $R_2/R_1 = 1.1, 2$ .

$\delta_1$	$R_2/R_1 = 5$				$R_2/R_1 = 10$			
	$L/R_1 = 10$	20	50	(4.2.13)	$L/R_1 = 10$	20	50	(4.2.13)
0.	4.789	6.890	9.331	12.547	5.54	9.69	16.01	27.42
0.1	4.789	6.998	9.380	11.916	5.64	9.88	16.24	26.02
1.	5.402	7.798	10.02	11.912	6.35	11.14	17.99	26.03
10.	7.601	12.78	19.00	23.646	8.18	15.40	30.45	52.30
100	8.650	16.90	39.72	159.19	8.73	17.26	41.88	355.09

Таблица 4.27 – Сравнение значений расхода  $M_p$ , найденных прямым численным расчетом и по приближенной формуле (4.2.13) для  $R_2/R_1 = 5, 10$ .

и вдоль всей ее длины. Расширение и ускорение газа наиболее заметны для  $R_2/R_1 \gg 1$ ,  $\delta_1 \gg 1$  и сопровождаются большими падениями температуры вдоль всей трубы. Так, для  $R_2/R_1$  кривые зависимости осевых распределений плотности и давления от координаты вдоль трубы почти совпадают для разреженного течения, но сильно расходятся для переходного режима.

На рисунках 4.36, 4.37 представлены радиальные распределения температуры для нескольких сечений вдоль трубы:  $z = 0.025$  (вблизи входного сечения), 2.61 (приблизительно 25% длины), 5 (серединое сечение) and 7.37 (приблизительно 75% длины). Выходное сечение не включено для удобства презентации результатов. Видно, что для трубы постоянного радиуса изменение температуры по радиальному направлению довольно невелико для обоих значений параметра разреженности, так что температура газа близка к температуре поверхности трубы. Условие постоянства температуры является одним из ключевых для построения приближенного решения метода плоских сечений. Однако в случае конической трубы температура

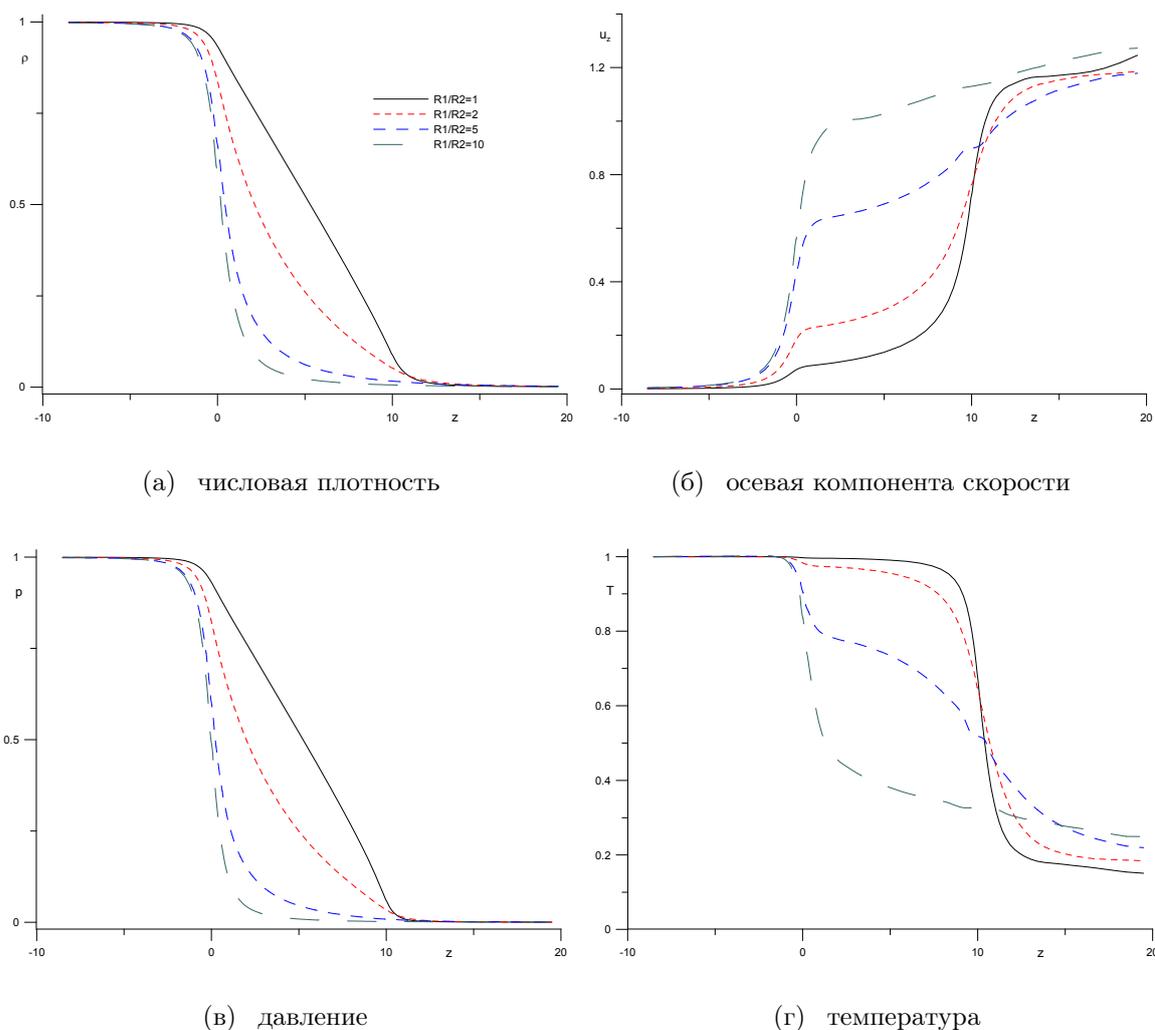


Рисунок 4.34 – Распределение макроскопических величин вдоль оси конической трубы для  $\delta_1 = 1$  и  $L/R_1 = 10$ .

очень значительно отходит от постоянного значения, что особенно очевидно для  $\delta_1 = 100$ .

На рисунках 4.38, 4.39 представлены осевые распределения для случая наиболее длинной трубы  $L/R_1 = 50$ . Видно, что картина течения качественно совпадает с результатами для  $L/R_1 = 10$ ; присутствует явно выраженное влияние переменного радиуса сечения. Однако отличия от случая трубы постоянного радиуса уменьшились. Для случая  $\delta_1 = 100$  после скачка температуры вблизи входного сечения следует ее заметный рост, вы-

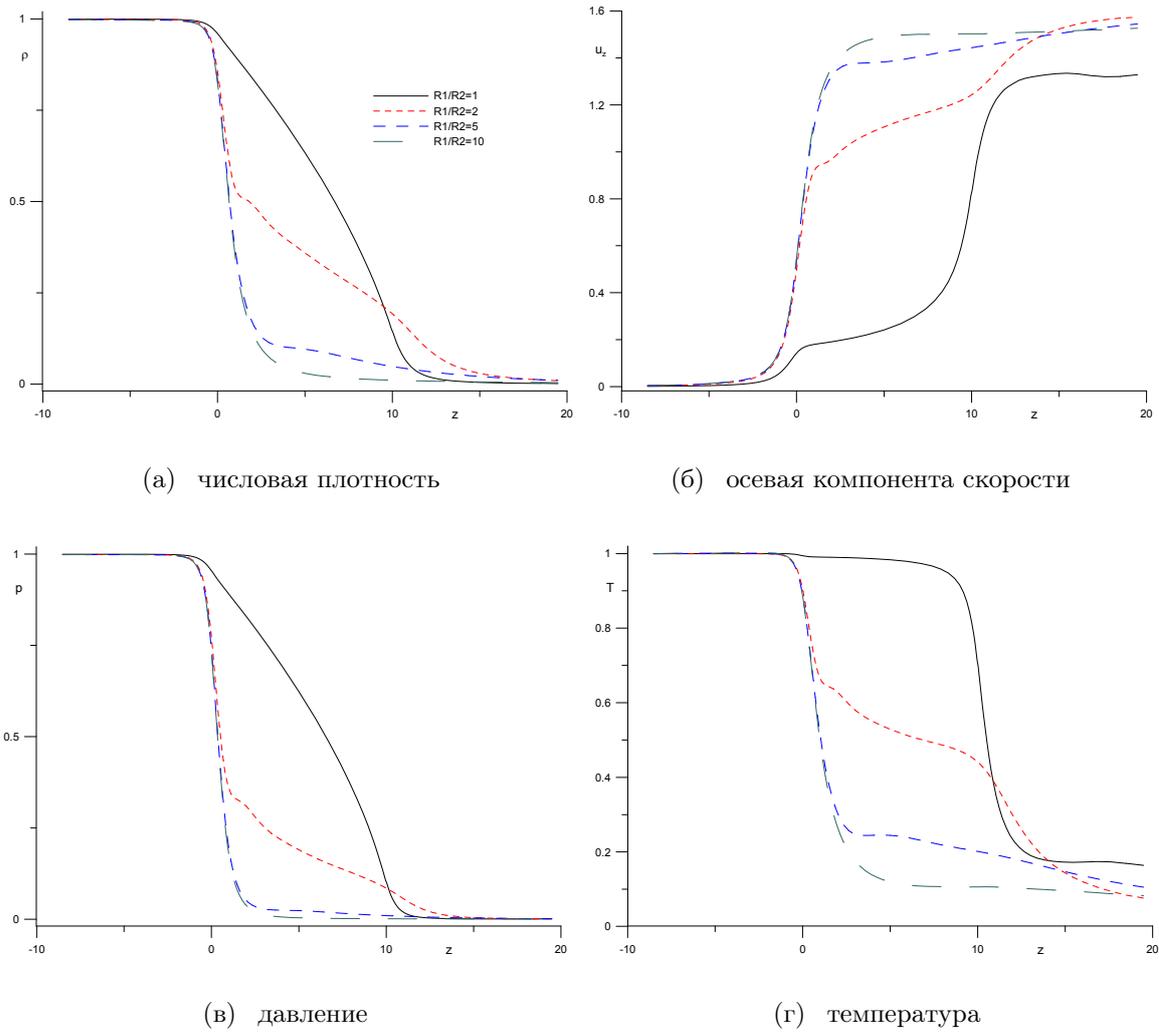


Рисунок 4.35 – Распределение макроскопических величин вдоль оси конической трубы для  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 10$ .

званный нагревом от поверхности трубы. Данный эффект не наблюдается для  $L/R_1 = 10$  вследствие недостаточной длины трубы.

### 4.6.3 Выводы

Построено решение задачи об истечении разреженного газа в вакуум через коническую трубу для большего диапазона значений длины, отношения радиусов входного и выходного сечений и параметра разреженности.

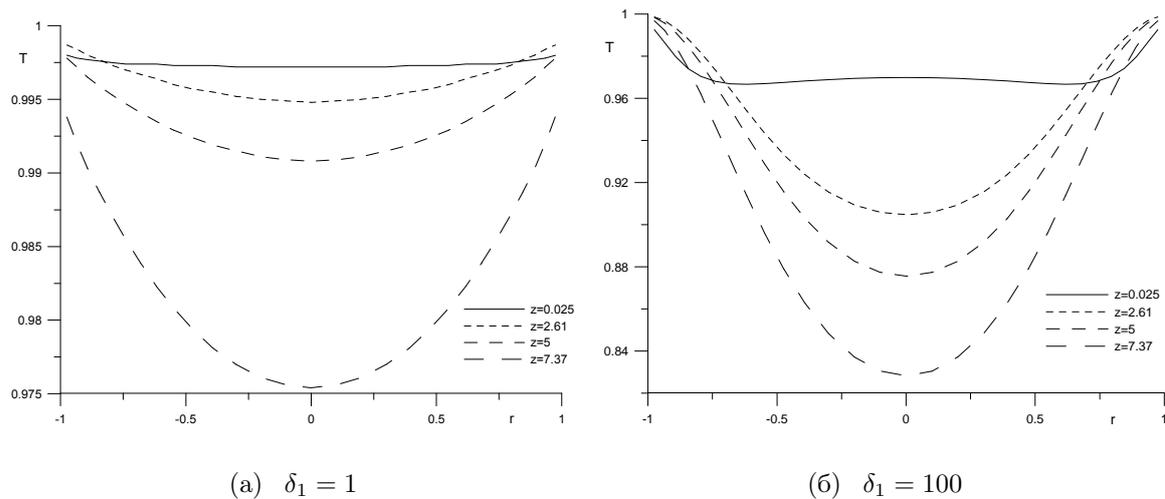


Рисунок 4.36 – Радиальное распределение температуры газа для различных сечений трубы постоянного радиуса для  $L/R_1 = 10$ .

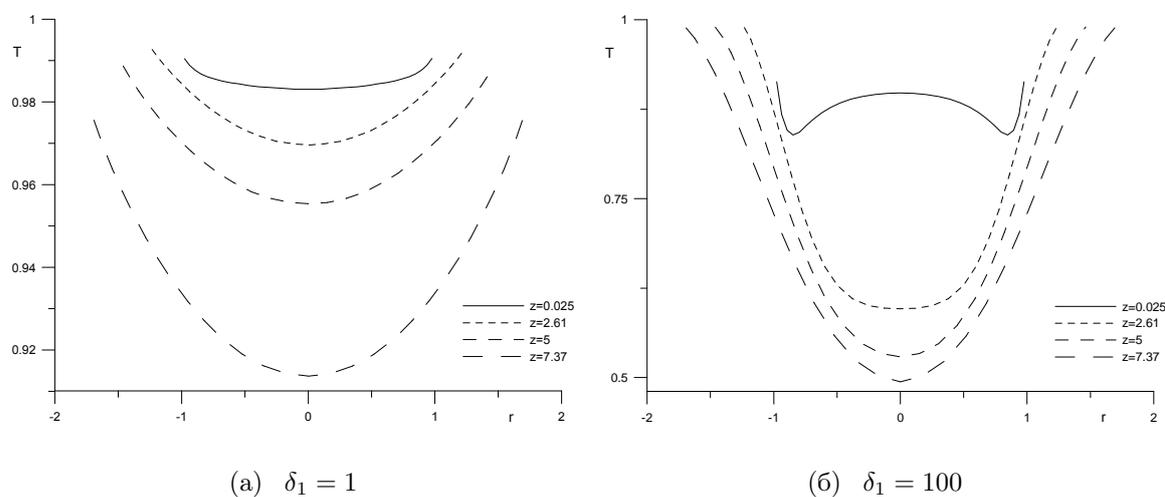


Рисунок 4.37 – Радиальное распределение температуры газа для различных сечений конической трубы для  $L/R_1 = 10$ ,  $R_2/R_1 = 2$ .

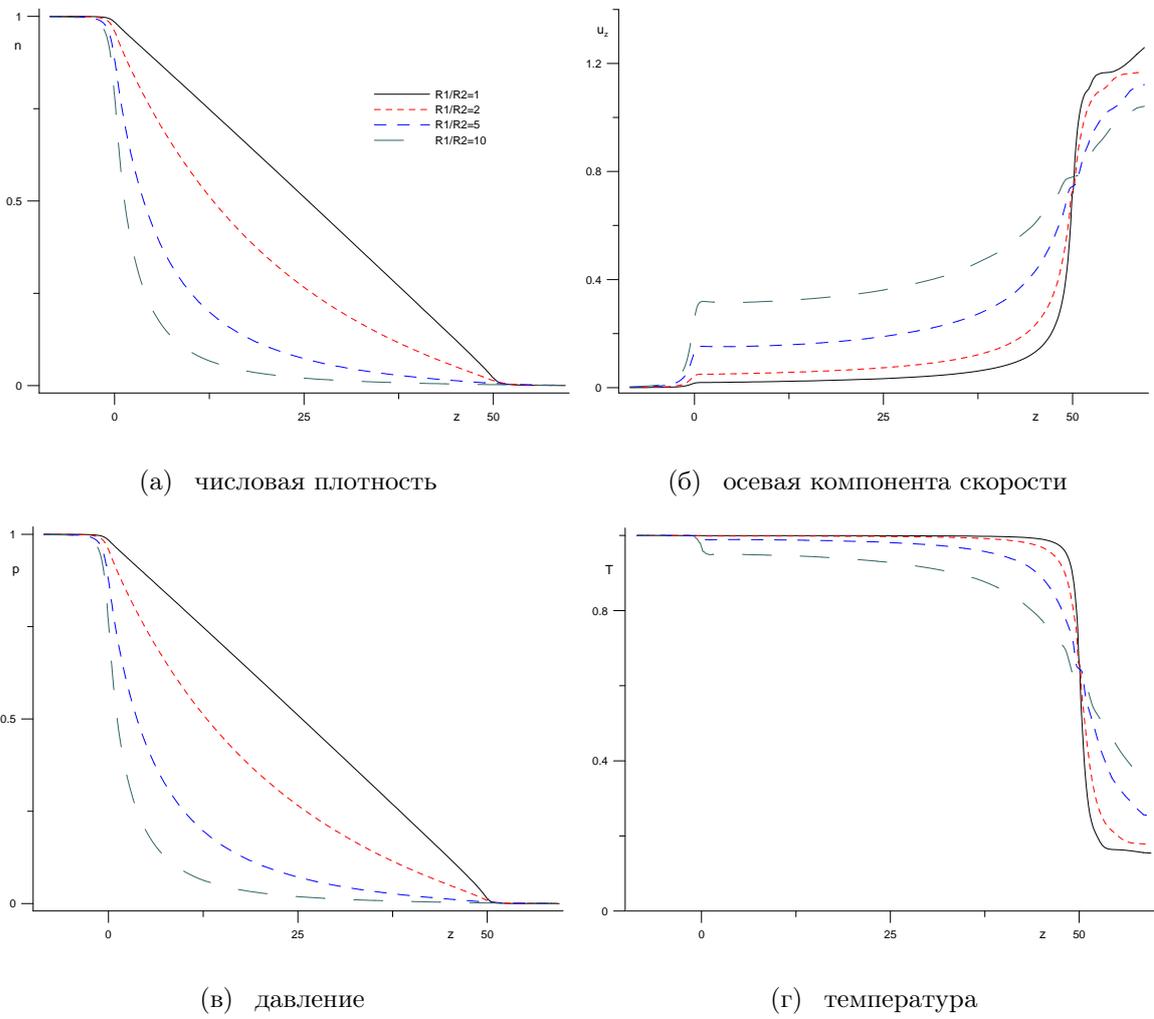


Рисунок 4.38 – Распределение макроскопических величин вдоль оси конической трубы для  $\delta_1 = 1$  и  $L/R_1 = 50$ .

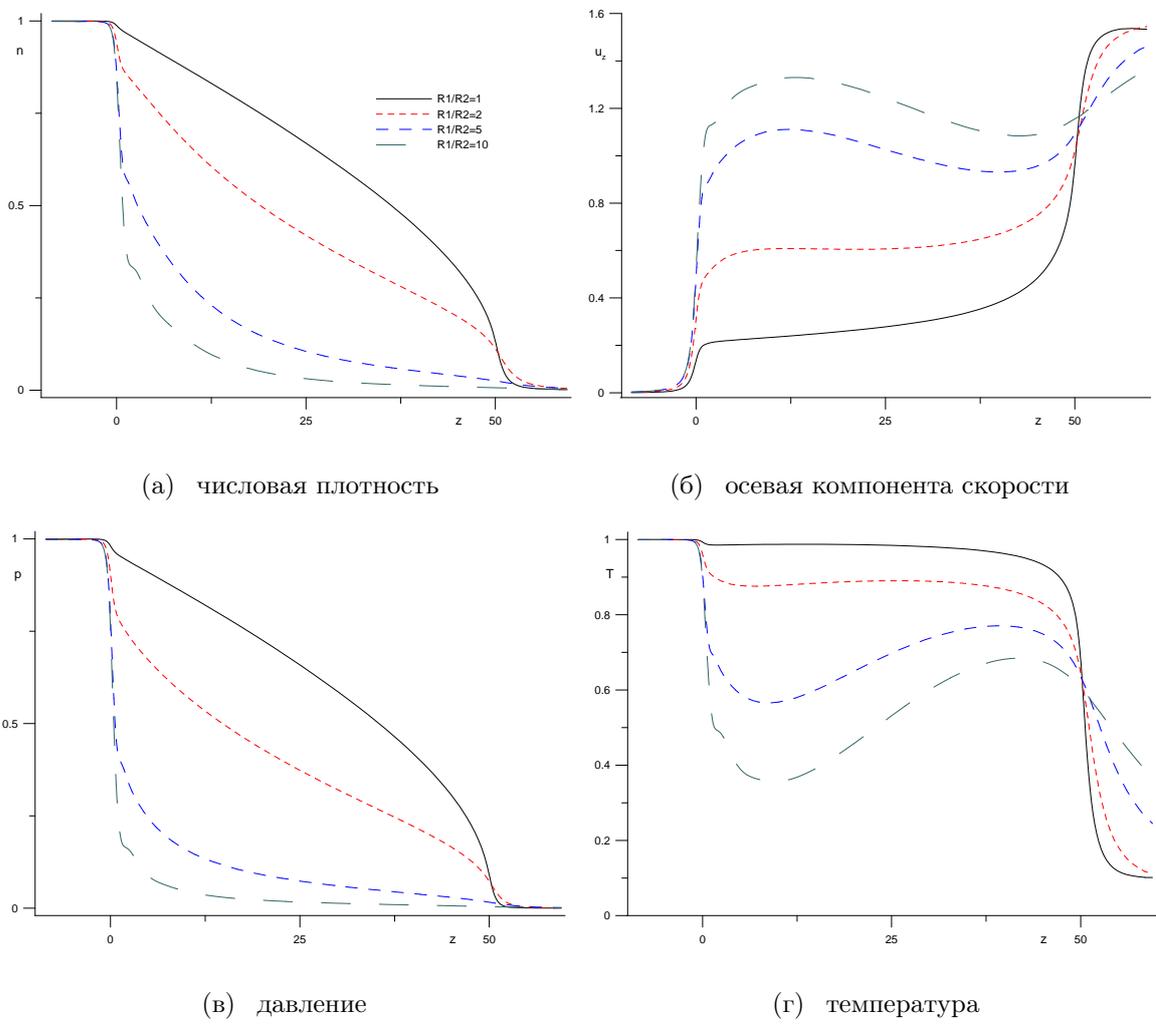


Рисунок 4.39 – Распределение макроскопических величин вдоль оси конической трубы для  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 50$ .

Проведено сравнение со случаем трубы постоянного радиуса. Показано, что коническая геометрия приводит к росту расхода газа и существенному усложнению картины течения. В результате этого приближенный метод плоских сечений нахождения расхода массы теряет свою точность.

## 4.7 Истечение газа в вакуум через составную трубу

### 4.7.1 Постановка задачи

В данном разделе рассматривается истечение разреженного газа через составную трубу длины  $L$ , состоящую из двух цилиндрических секций длины  $L/2$  и радиусов  $R_1$  и  $R_2$ . При этом входное сечение трубы совпадает с входом в секцию радиуса  $R_1$ , а выходное - с выходом из секции радиуса  $R_2$ . Остальные параметры задачи такие же, как в случае истечения газа в вакуум через круглую трубу постоянного радиуса. Основной расчетной характеристикой является приведенный расход массы  $Q$ , определенный в формуле (4.1.2).

Решение задачи при этом зависит от параметра разреженности, отношения длины трубы к радиусу входного сечения  $L/R_1$  и отношения радиусов секций  $R_2/R_1$ .

### 4.7.2 Детали вычислений

Вычисления проводились для двух значений относительной длины  $L/R_1 = 1, 10$  и двух вариантов отношения радиусов секций:  $R_2/R_1 = 0.5$  (сужаю-

щаяся конфигурация) and  $R_2/R_1 = 2$  (расширяющаяся конфигурация). Параметр разреженности менялся в диапазоне  $0 \leq \delta_1 \leq 100$ . Тестовые расчеты показали, что для выбранных параметрах геометрии достаточно выбрать размер резервуара 1 равным  $10 \times 10$ . Размер резервуара 2 менее важен, так как течение в нем - сверхзвуковое.

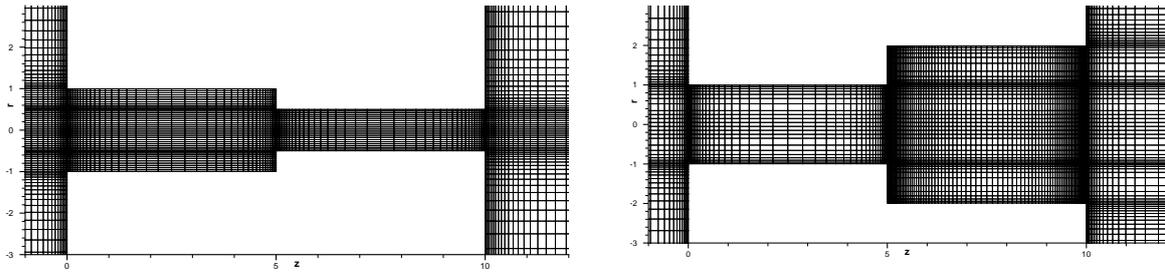
Топология расчетной сетки в поперечном сечении трубы совпадает с использовавшейся для круглой трубы: сетка O-типа с квадратным патчем из  $7 \times 7$  ячеек в центре. Для разрешения градиентов поля течения применялось сгущение пространственной сетки к поверхности канала и концам секций трубы. Как правило, размер ячейки по нормали к граничным сечениям секций равнялся  $h_{i,o} = 0.03$ , в то время как по нормали к поверхности  $0.03 \dots 0.04$  в зависимости от радиуса секции. Тестовые расчеты сходимости численного метода для течения в круглой трубе, проведенные в [140] (см. также предыдущий раздел) показывают, что данные параметры сгущения сетки достаточны для обеспечения точности вычисления расхода массы 2%.

На рис. 4.40 показаны сечения расчетной сетки в физическом пространстве для обоих типов конфигураций и  $L/R_1 = 10$ . При этом резервуары показаны частично. Отметим, что разрешение сетки в правой части расширяющейся трубы более подробное для разрешения формирующейся сложной структуры течения.

В расчетах контролировалось выполнение условия постоянства расхода массы в каждом сечении трубы. Во всех приводимых расчетах выполнялось условие

$$\max_i \frac{|Q_i - Q_1|}{|Q_1|} \leq 5 \times 10^{-3},$$

где  $i$  - номер сечения. Дальнейшее увеличение точности возможно путем



(а) Сужающаяся конфигурация

(б) Расширяющаяся конфигурация

Рисунок 4.40 – Сечение расчетной сетки плоскостью симметрии для

$$L/R_1 = 10.$$

осреднения значения расхода массы по всем сечениям. Данное среднее значение используется при анализе результатов ниже по тексту.

Все расчеты проводились на системе “Ломоносов” НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова с использованием до 128 ядер.

### 4.7.3 Результаты расчетов

#### Вычисление расхода массы

В таблице 4.28 приведены значения редуцированного расхода массы  $Q$  как функции параметра разреженности для  $L/R_1 = 1, 10$  и различных значений отношения радиусов секций. Случай  $R_1 = R_2$  соответствует круглой трубе постоянного радиуса, так что результаты счета взяты из работы [139]. Из приведенных данных следует, что значения расхода массы для составной трубы сильно отличаются от случая трубы постоянного радиуса. Для сужающейся конфигурации узкая секция увеличивает сопротивление течению газа, что приводит к уменьшению расхода. С другой стороны, для расширяющейся конфигурации вторая, более широкая, секция выступает в роли внешнего резервуара к первой (более узкой секции) и поэтому прак-

тически не увеличивает сопротивление потоку.

$\delta_1$	$L/R_1 = 1$			$L/R_1 = 10$		
	$R_2/R_1 = 1$	$R_2/R_1 = 0.5$	$R_2/R_1 = 2$	$R_2/R_1 = 1$	$R_2/R_1 = 0.5$	$R_2/R_1 = 2$
0.	0.672	0.166	0.799	0.190	0.044	0.291
0.1	0.683	0.168	0.815	0.191	0.045	0.295
1.	0.766	0.180	0.917	0.201	0.045	0.318
5.	0.953	0.213	1.122	0.261	0.052	0.416
10.	1.061	0.238	1.219	0.335	0.061	0.525
20.	1.164	0.265	1.299	0.462	0.080	0.684
30.	1.220	0.281	1.337	0.559	0.095	0.785
50.	1.282	0.299	1.379	0.697	0.123	0.909
100	1.352	0.320	1.423	0.889	0.169	1.060

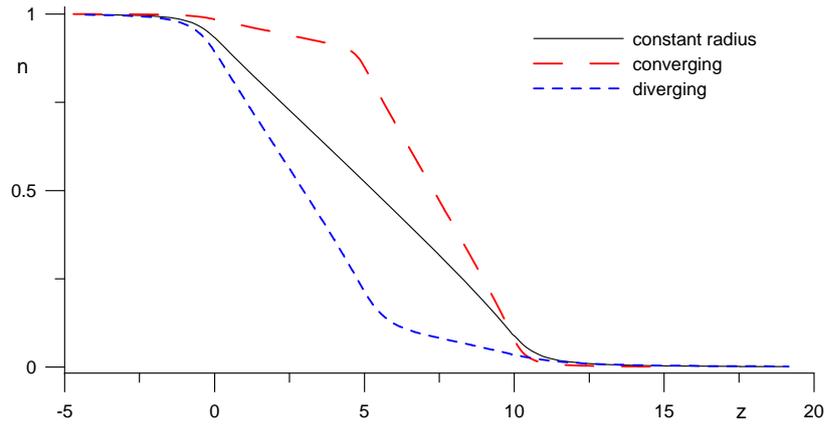
Таблица 4.28 – Значения коэффициента  $Q$  в зависимости от длины трубы  $L/R_1$ , отношения радиусов секций  $R_2/R_1$  и параметра разреженности  $\delta_1$ .

## Поле течения

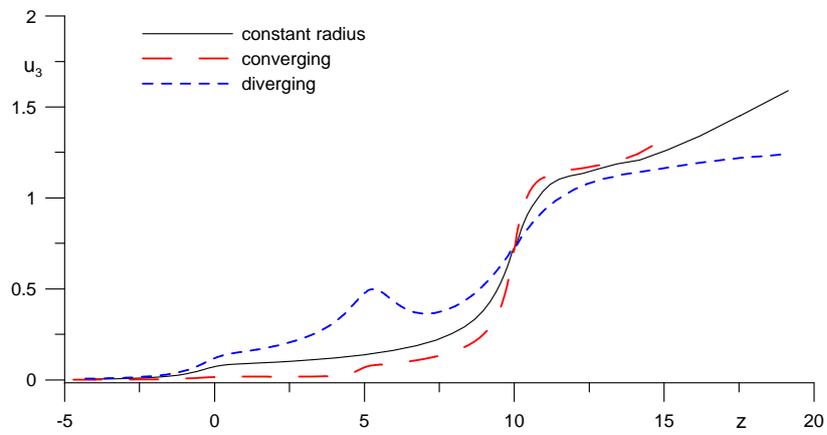
Наиболее интересным для анализа является случай более длинной трубы  $L/R_1 = 10$ . На рис. 4.41 представлены осевые распределения числовой плотности, осевой скорости и температуры для  $\delta_1 = 1$  и трех вариантов геометрии:  $R_2/R_1 = 0.5, 1, 2$ . Картина течения в трубе постоянного радиуса характеризуется почти линейным профилем плотности и давления между резервуарами за исключением областей около концов трубы; при этом температура практически постоянна. Для обоих вариантов составной

трубы поведение плотности качественно совпадает с круглой трубой и состоит из двух практически линейных частей в каждой из секций, которые соединяются в середине трубы  $z = L/2$ . При этом основное падение плотности и давления происходит в более узкой из двух секций. Более широкая секция трубы слабо влияет на профили плотности и давления и поэтому почти не увеличивает сопротивление. В отличие от плотности, профили скорости и температуры очень сильно зависят от геометрии трубы. В случае сходящейся геометрии профиль температуры остается постоянным на большей части трубы. При этом осевая скорость монотонно растет от входа в трубу к ее выходу, с небольшим скачком на стыке между секциями. В случае расширяющейся геометрии профили скорости и температуры немонотонны, с заметными возмущениями на небольшом расстоянии от стыка вниз по течению. Такое поведение течения объясняется тем, что расширяющийся поток сталкивается с поверхностью второй секции и отражается обратно, что будет лучше видно на линиях уровня.

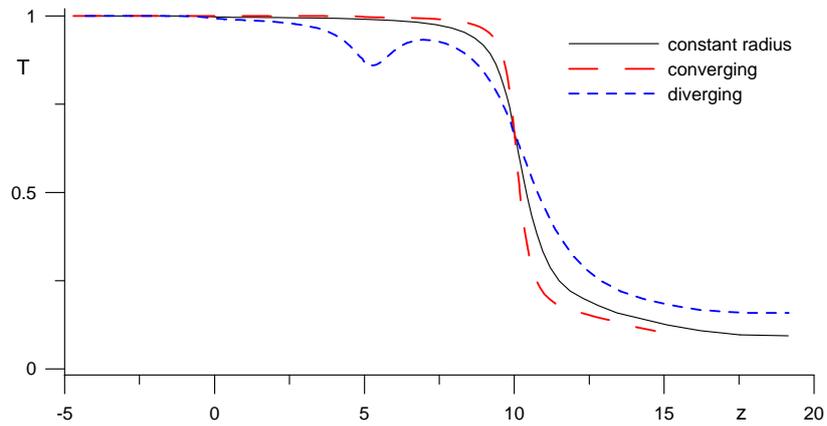
На рис. 4.42 представлены распределения тех же величин, что и на 4.41, но для большего значения параметра разреженности  $\delta_1 = 100$ . На профилях числовой плотности и температуры появились заметные немонотонности вблизи входного сечения трубы постоянного радиуса ( $R_2 = R_1$ ); сами распределения стали существенно нелинейными. Для составной трубы влияние параметра  $\delta$  проявляется гораздо заметнее. В случае сужающейся трубы профили плотности и температуры в первой половине трубы  $z < L/2$  близки к постоянным значениям, соответствующим примыкающему резервуару. Интересно отметить, что падение плотности в широкой части трубы для больших значений  $\delta_1$  заметно меньше по амплитуде, чем для  $\delta_1 = 1$ . Отклонение температуры от единичного значения находится в пределах 2%. На стыке секций  $z = L/2$  видны заметные скачки всех



(а) Числовая плотность

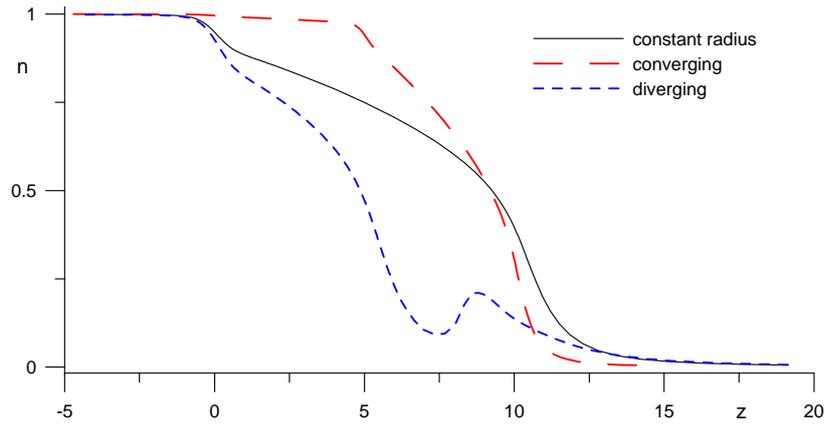


(б) Осевая скорость

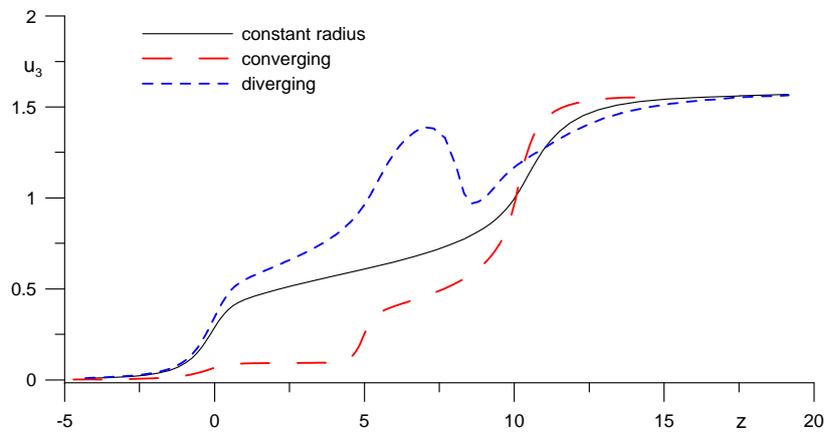


(в) Температура

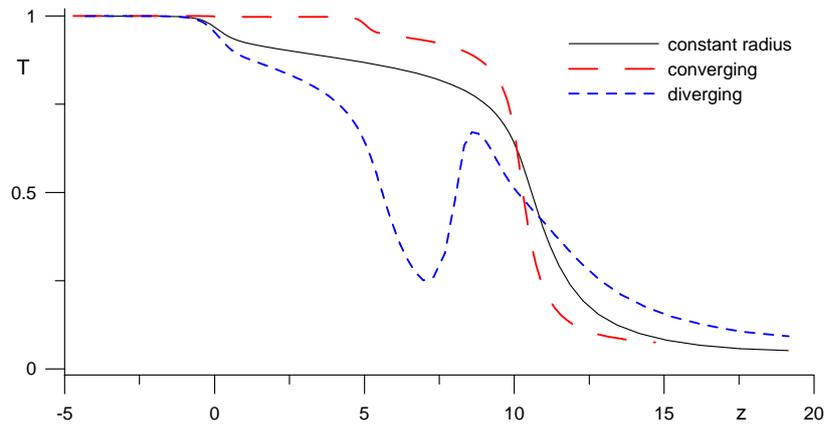
Рисунок 4.41 – Осевые распределения макроскопических параметров в составной трубе для  $\delta_1 = 1$  и  $L/R_1 = 10$ .



(а) Числовая плотность



(б) Осевая скорость



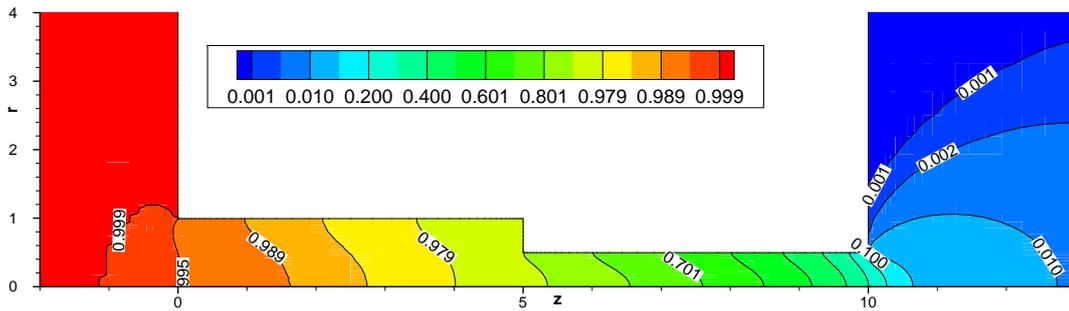
(в) Температура

Рисунок 4.42 – Осевые распределения макроскопических параметров в составной трубе для  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 10$ .

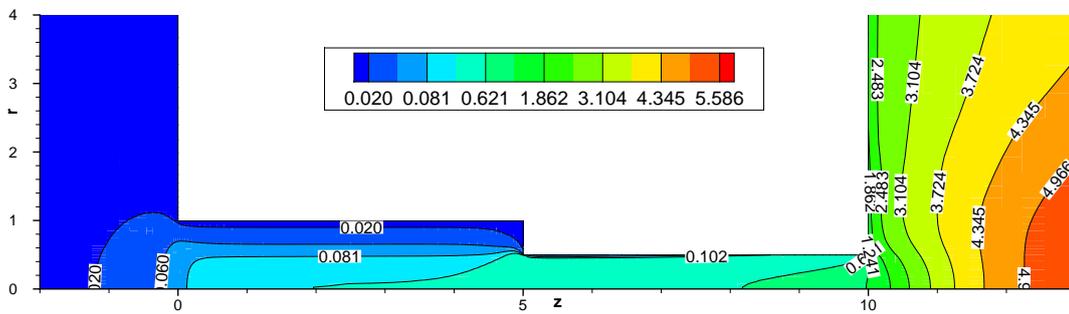
представленных макроскопических величин, после чего осевые распределения становятся качественно похожими на случай круглой трубы. Для расширяющейся трубы отличия от трубы постоянного сечения еще более заметны. В профилях всех макроскопических переменных наблюдаются очень заметные немонотонности примерно посередине правой секции, которые возникают вследствие отражения от стенок правой (более широкой) секции.

На рис. 4.43 – 4.46 представлены линии уровня числовой плотности, числа Маха, а также линии тока для  $\delta_1 = 1, 100$  и обеих составных конфигураций трубы. Показана только половина поля течения в плоскости симметрии, радиальная координата определена как  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Поле плотности внутри трубы находится в хорошем согласии с осевыми распределениями. Для  $\delta_1 = 1$  плотность линейно меняется в продольном направлении внутри каждой из секций при практически нулевом градиенте в радиальном направлении за исключением небольшой области вокруг стыкового сечения в сужающейся трубе. Течение является дозвуковым для обеих конфигураций; зоны возвратного течения отсутствуют. При увеличении значения параметра разреженности до  $\delta_1 = 100$ , картина течения в сужающейся трубе изменяется незначительно. Можно сделать вывод, что для сужающейся конфигурации первая, более широкая, часть трубы играет роль продолжения резервуара высокого давления. Наибольший интерес представляет сужающаяся конфигурация. В правой секции формируется сложная структура течения, состоящая из области быстрого расширения газа вблизи угла геометрии, после которой следует отражение от поверхности трубы. Вблизи положения локального экстремума всех величин  $z = 7$  локальное число Маха достигает значения  $M = 3$ , и в дальнейшем падает при приближении к выходному сечению. Вблизи угла возникает большая зона возвратного

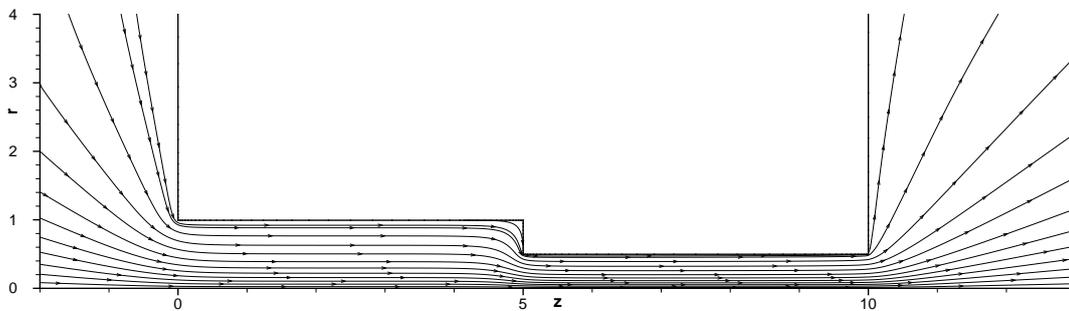




(а) Числовая плотность

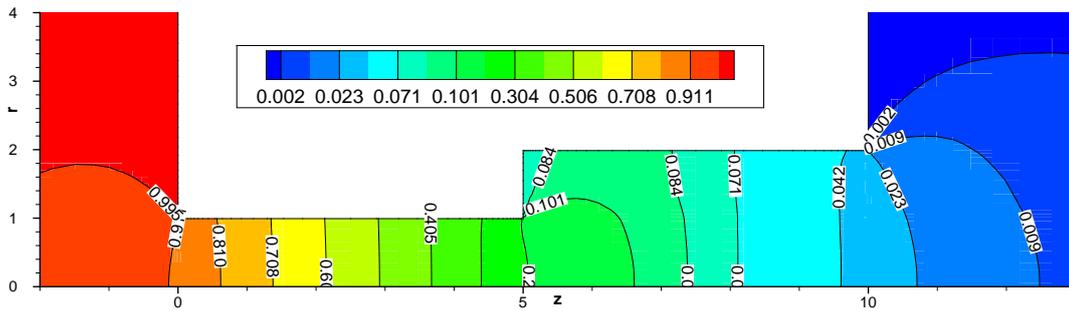


(б) Число Маха

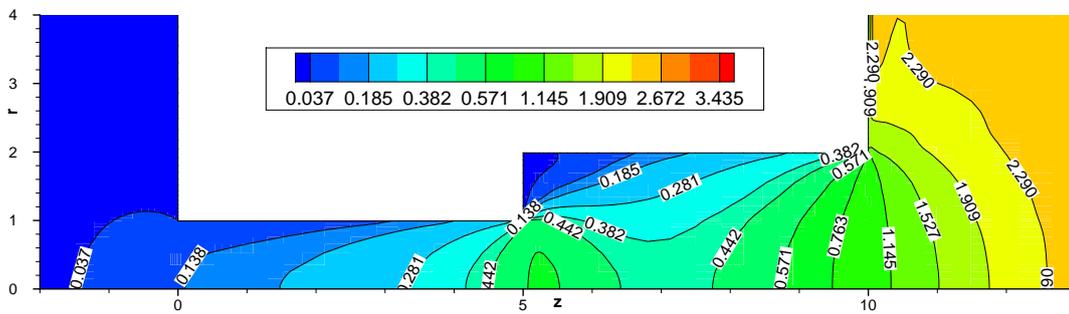


(в) Линии тока

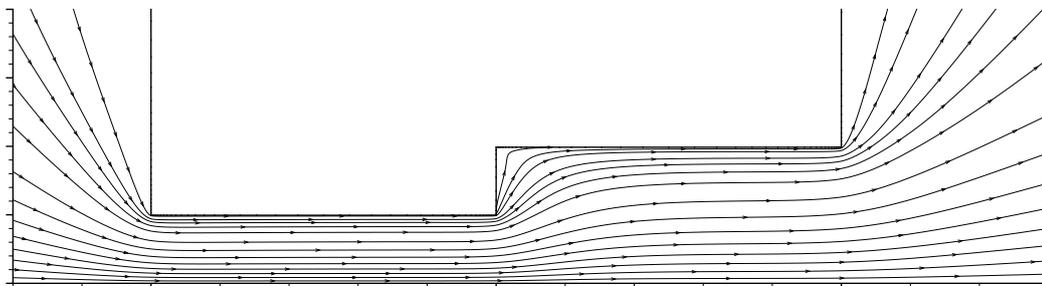
Рисунок 4.44 – Линии уровня числовой плотности и числа Маха и линии тока газа для течения в сужающейся составной круглой трубе при  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 10$ .



(а) Числовая плотность

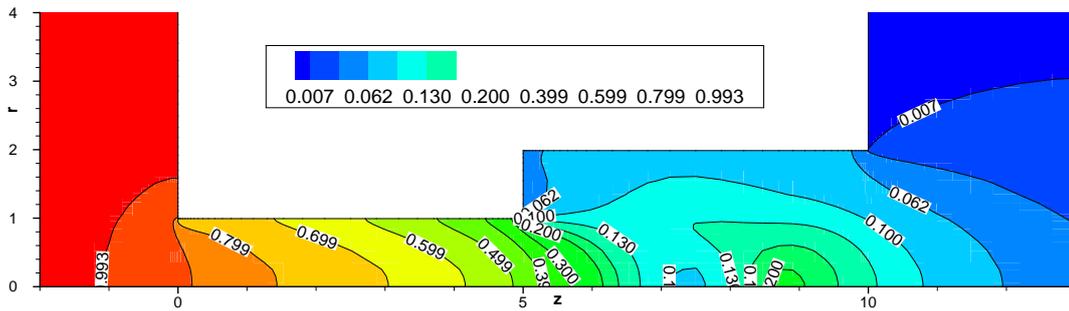


(б) Число Маха

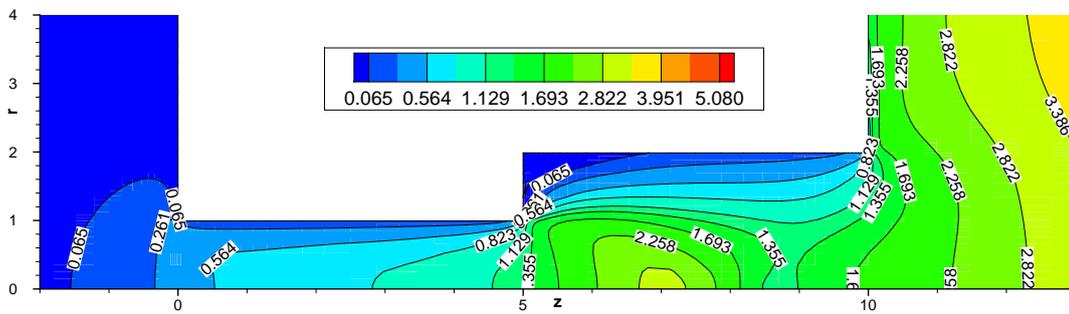


(в) Линии тока

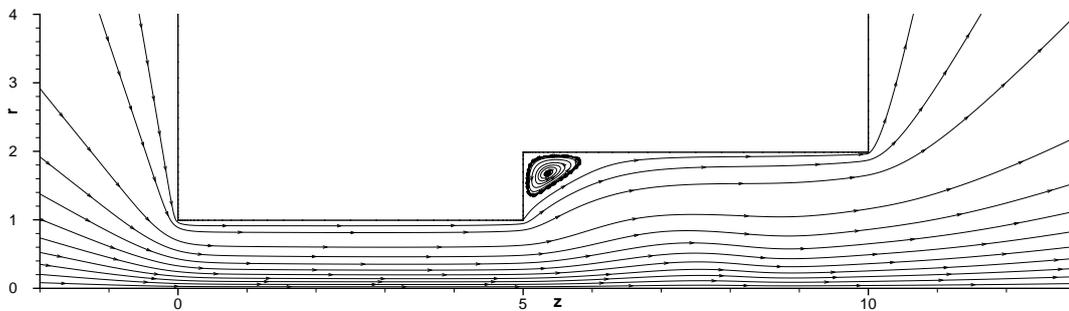
Рисунок 4.45 – Линии уровня числовой плотности и числа Маха и линии тока газа для течения в расширяющейся составной круглой трубе при  $\delta_1 = 1$  и  $L/R_1 = 10$ .



(а) Числовая плотность

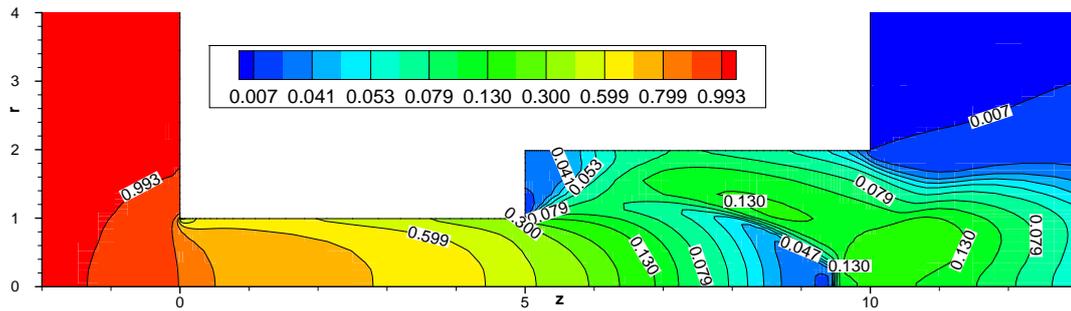


(б) Число Маха

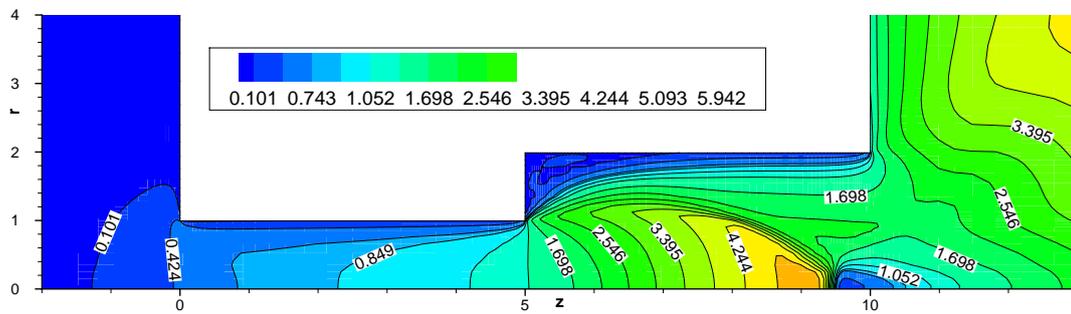


(в) Линии тока

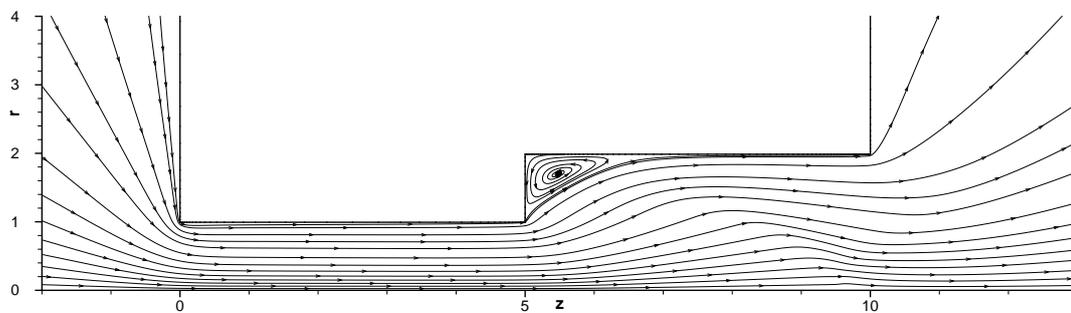
Рисунок 4.46 – Линии уровня числовой плотности и числа Маха и линии тока газа для течения в расширяющейся составной круглой трубе при  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 10$ .



(а) Числовая плотность

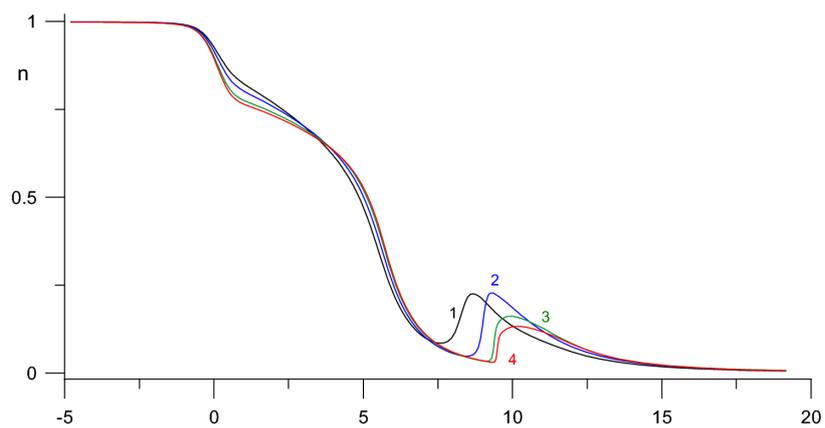


(б) Число Маха

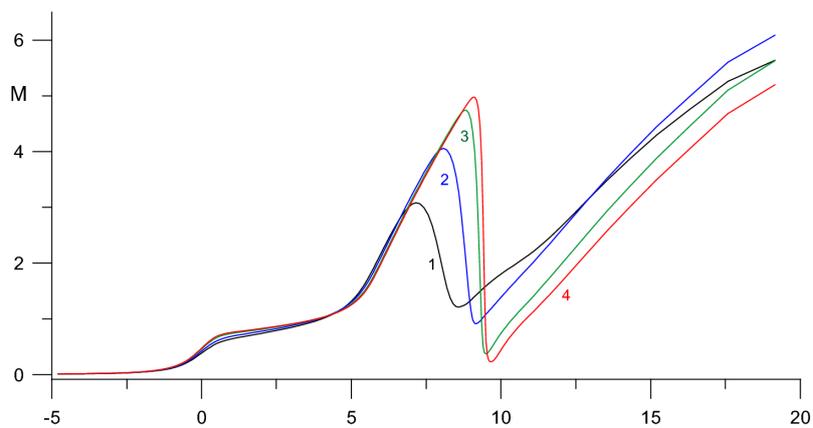


(в) Линии тока

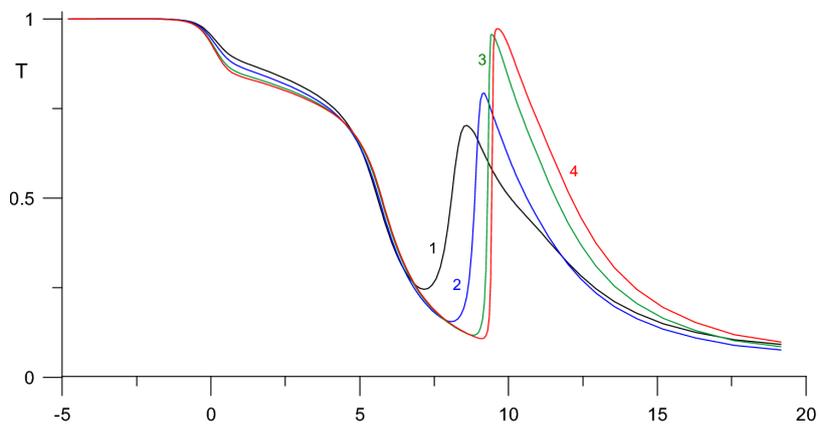
Рисунок 4.47 – Линии уровня числовой плотности и числа Маха и линии тока газа для течения в сужающейся составной круглой трубе при  $\delta_1 = 1000$  и  $L/R_1 = 10$ .



(а) Числовая плотность



(б) Число Маха



(в) Температура

Рисунок 4.48 – Осевые распределения макроскопических величин в сужающейся трубе для  $L/R_1 = 10$ . Кривые 1,2,3,4 соответствуют  $\delta_1 = 100, 200, 500$  и  $1000$ .

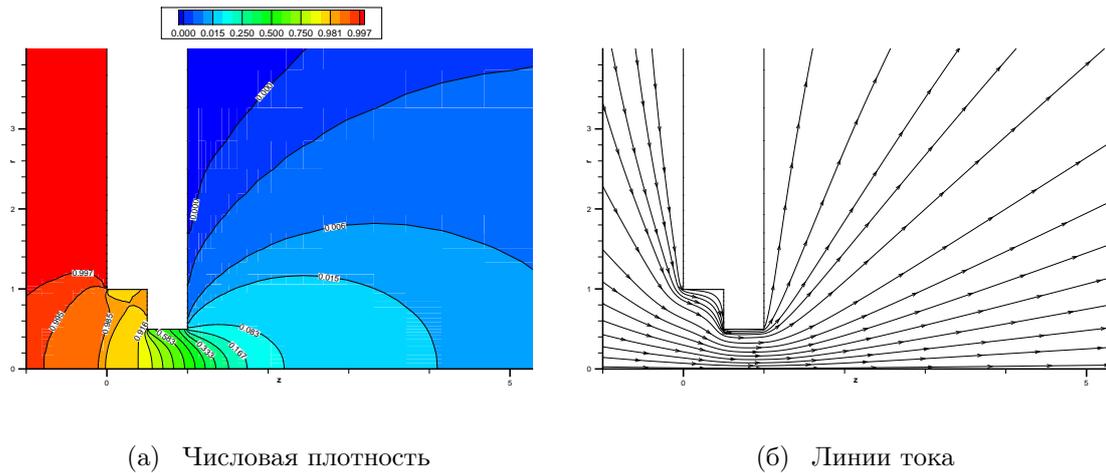


Рисунок 4.49 – Линии уровня числовой плотности и числа Маха и линии тока газа для течения в сужающейся составной круглой трубе при  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 1$ .

течения.

При дальнейшем увеличении значения параметра разреженности во второй секции трубы возникает диск Маха. Как известно, при расширении газа в вакуум такая структура течения не формируется [85, 201, 215], так как она возникает только при наличии противодействия [157, 216, 217]. Однако в данной задаче в правой секции трубы всегда есть газ, и соответственно противодействие, поэтому можно ожидать возникновения диска Маха с приближением к режиму сплошной среды. Формирование числа Маха иллюстрирует рис. 4.48, на котором показаны осевые распределения числовой плотности, температуры и числа Маха для  $\delta_1 = 100, 200, 500$  и  $1000$ . На рис. 4.47 приведены детали поля течения для наибольшего рассчитанного значения  $\delta_1 = 1000$ . Хорошо видно, что в начале второй секции газ расширяется и ускоряется так, что формируется картина течения, напоминающая течение от сверхзвукового источника [218, 219]. В зоне расширения газа каждая из макроскопических величин ложится на свою универсаль-

ную кривую, которая слабо зависит от значения  $\delta_1$ . Одновременно в поле течения возникает веер разрежения Прандтля-Майера, который отражается от поверхности трубы вниз по потоку. С ростом значения  $\delta_1$  течение замедляется и формируется структура ударной волны; положение диска Маха стабилизируется.

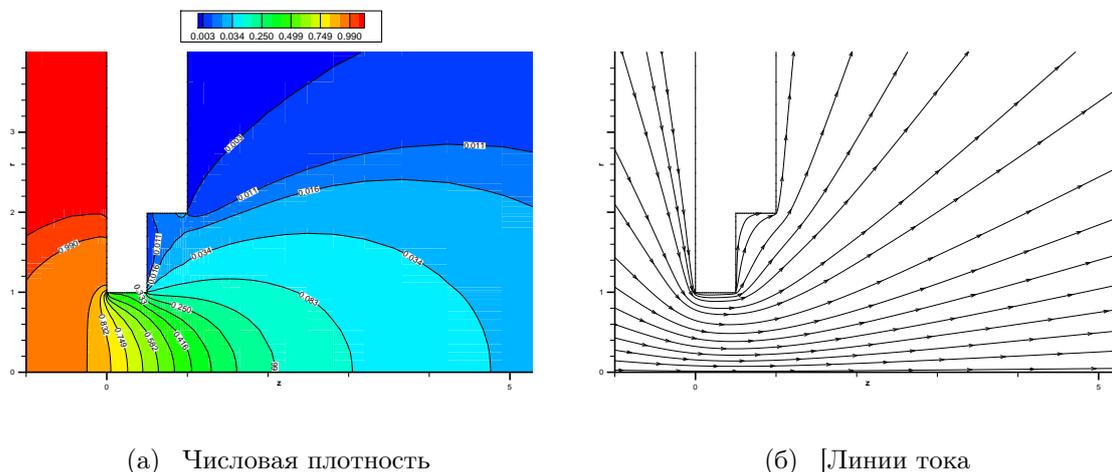


Рисунок 4.50 – Линии уровня числовой плотности и числа Маха и линии тока газа для течения в расширяющейся составной трубе при  $\delta_1 = 100$  и  $L/R_1 = 1$ .

В заключение, на рис. 4.49, 4.50 приведена картина течения для короткой трубы  $L/R_1 = 1$ . Структура течения в целом проще, чем для более длинной трубы  $L/R_1 = 10$ . Так, в течении не возникают диск Маха или зона возвратного течения, по крайней мере до  $\delta_1 \leq 100$ . Однако для сужающейся трубы видны две области течения Прандтля-Майера, вторая из которых расположена на выходе из трубы.

#### 4.7.4 Выводы

Построено решение задачи об истечении разреженного газа в вакуум через составную круглую трубу. Проведено сравнение с расчетами для случая

постоянного радиуса сечения. Показано сильное влияние геометрии трубы на расход газа. Поле течения для случая расширяющейся геометрии является существенно нелинейным и включает в себя зоны быстрого расширения потока, отражения от поверхности трубы и возвратного течения. Для достаточно больших значений параметра разреженности и длины трубы во второй секции возникает диск Маха.

## 4.8 Истечение газа в вакуум через трубу прямоугольного сечения

### 4.8.1 Постановка задачи

Рассмотрим стационарное течение одноатомного разреженного газа из резервуара 1 в резервуар 2 через трубу длины  $L$  и переменного прямоугольного поперечного сечения в вакуум. Входное и выходное сечения трубы имеют вид квадрата со сторонами  $2a$ ,  $2b$ , соответственно. Введем декартову систему координат с осью  $Oz$ , расположенной по оси трубы. Начало координат  $z = 0$  выберем в центре входного сечения трубы. Резервуары 1, 2 занимают полупространства  $z < 0$  и  $z > L$  соответственно. Предполагается линейная зависимость сечения трубы от продольной координаты  $z$ . В безразмерной постановке в качестве масштаба длины выберем длину  $a$  короткого ребра поперечного сечения. После этого параметр разреженности  $\delta_1$  определяется обычным образом как

$$\delta_1 = \frac{ap_1}{\mu(T_0)\beta}, \quad \beta = \sqrt{2RT_0}$$

Решение задачи зависит от трех безразмерных параметров: относительной длины трубы  $L$ , отношения сторон выходного и входного сечений  $b/a$

и параметра разреженности газа  $\delta_1$ .

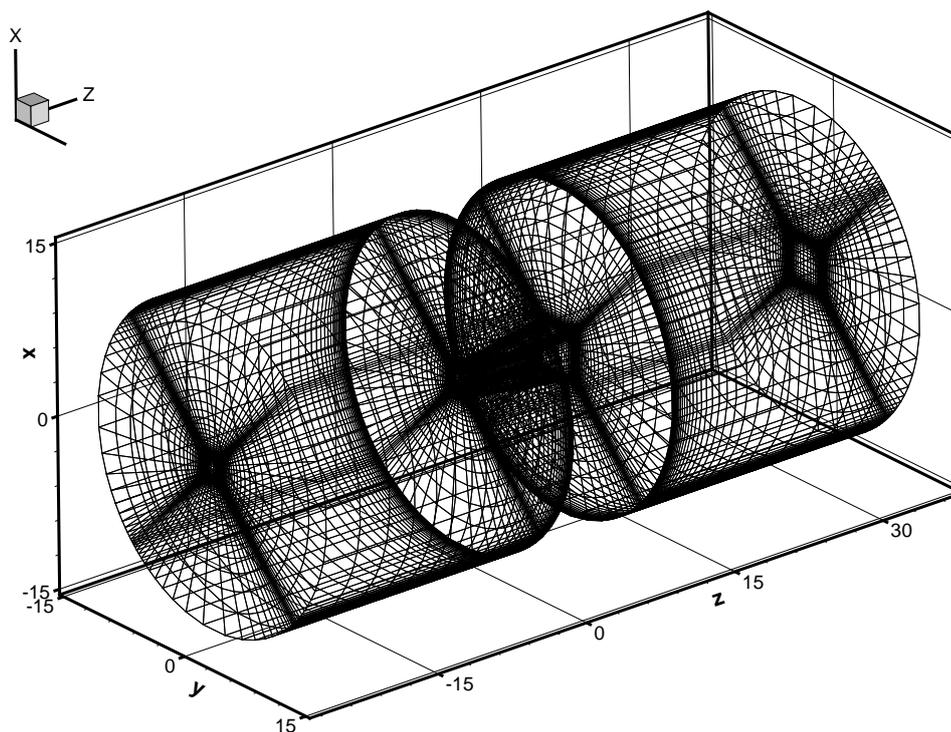


Рисунок 4.51 – Пространственная расчетная сетка для трубы прямоугольного сечения, состоящая из 209 тысяч гексаэдральных ячеек.

## 4.8.2 Результаты

Расчеты проводились для  $L/a = 10$  и двух отношений размеров входного и выходного сечений:  $b/a = 1$  и  $b/a = 2$ . Рис. 4.51 иллюстрирует размер и топологию расчетной области, а также общий вид пространственной сетки для  $b/a = 2$ . На рис. 4.52 представлено сечение сетки плоскостью симметрии  $y = 0$ . Пространственная расчетная сетка для  $b/a = 1$  имела идентичные параметры разбиения по направлениям. В расчетах использовались резервуары радиуса  $r_\infty = 10$  и длины  $z_\infty = 25$ . По длине канала сетка состояла из 35 ячеек со сгущением к торцам канала до  $\Delta z \approx 0.05$ . Поперечное

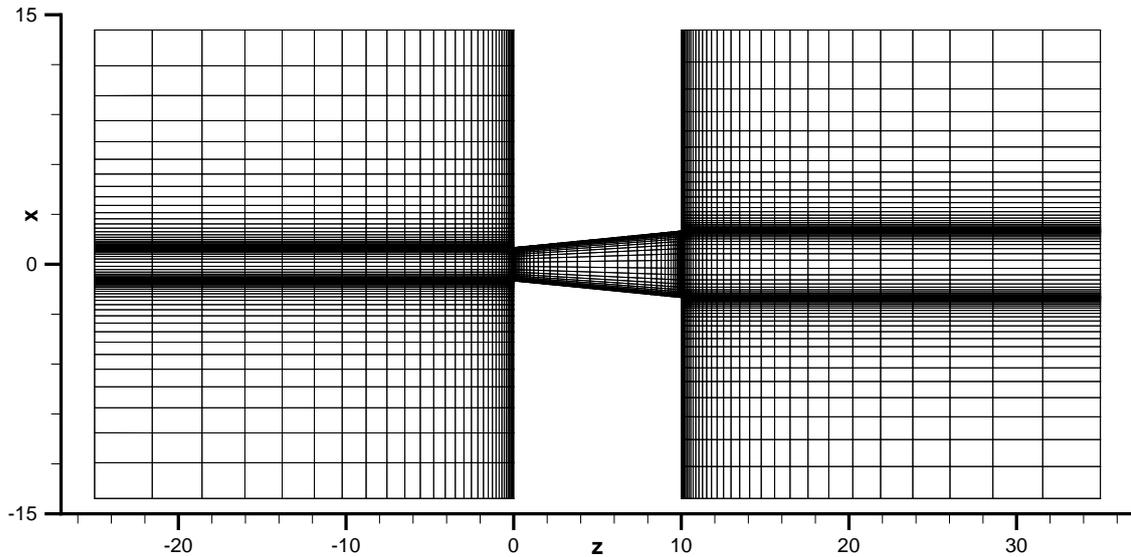


Рисунок 4.52 – Поперечное сечение сетки, показанной на рисунке 4.18.

$\delta_1$	Схема 1 порядка		Схема TVD3D (2.3.12)		Схема TVD1D (2.3.13)	
	$Q(0)$	$E_Q$	$Q(0)$	$E_Q$	$Q(0)$	$E_Q$
0	0.200	23%	0.203	0.4%	0.203	0.3%
1	0.213	23%	0.218	0.5%	0.219	0.3%
20	0.408	11%	0.495	0.1%	0.499	0.2%

Таблица 4.29 – Сравнение разностных схем при вычислении приведенного расхода массы  $Q$ .

сечение канала разбивалось на  $25 \times 25$  ячеек; размер ячейки по нормали к поверхности канала  $h \approx 0.03$ . Пространственная сетка в резервуарах содержала 30 ячеек по длине и 25 ячеек по радиусу при  $1 \leq r \leq r_\infty$ . Общее число пространственных ячеек равнялось 209 тысячам. Для интегрирования по молекулярной скорости использовалась неравномерная декартова сетка, состоящая из  $24^3$  узлов. Поскольку в резервуаре низкого давления температура падает до малых значений  $T \approx 0.09$ , использовалось сгущение скоростной сетки к началу координат, так что наименьший шаг сетки

$\delta$	Круглый		Квадратный	
	[201]	[133]	$b/a = 1$	$b/a = 2$
0	0.192	0.190	0.203	0.464
0.1	0.190	0.190	0.206	0.474
1	0.198	0.199	0.219	0.523
5	0.258	0.258	0.287	0.713
10	0.335	0.335	0.368	0.898
20	0.463	0.462	0.499	1.120
30			0.597	1.236

Таблица 4.30 – Сравнение приведенного расхода массы  $Q$  для разных каналов.

$\Delta\xi \approx 0.2$ .

Вычисления проводились на системе “Ломоносов” НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, с использованием 144 процессорных ядер (36 четырехядерных процессоров Intel Xeon).

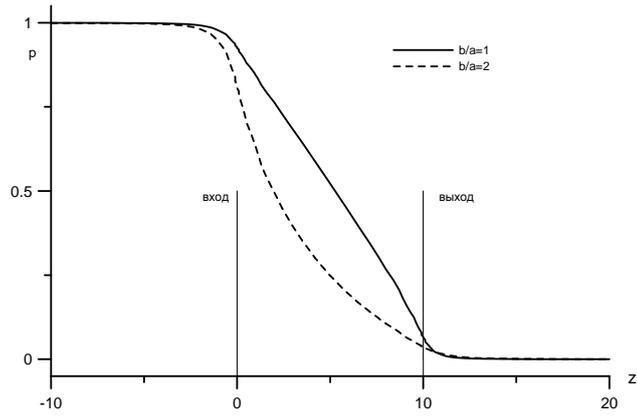
В первой серии расчетов проводилось сравнение точности методов дискретизации по пространству по расходу массы газа. В таблице 4.29 для канала постоянного сечения ( $b/a = 1$ ) представлены полученные значения расхода  $Q(0)$ , вычисленного в центральном сечении канала  $z = 0$  и максимальное отклонение  $E_Q$  (в процентах) его значения от постоянного вдоль канала. Заметим, что для точного решения  $E_Q \equiv 0$ . Видно, что схема первого порядка по пространству является наименее точной во всем диапазоне изменения параметра разреженности  $\delta_1$ . Хотя  $\delta_1 \leq 1$  полученное значение нормированного расхода  $Q(0)$  слабо отличается от результатов счета по схемам второго порядка, сильное изменение величины  $Q(z)$  вдоль канала

делает полученный результат ненадежным. При увеличении  $\delta_1$  отклонение расхода  $Q$  от константы уменьшается до 11%, однако численное значение  $Q(0)$  примерно на 20% меньше полученного по схемам (2.3.12), (2.3.13), что свидетельствует о низкой точности счета и для  $\delta_1 = 20$ . Можно ожидать, что при дальнейшем увеличении параметра разреженности точность счета по схеме первого порядка продолжит ухудшаться.

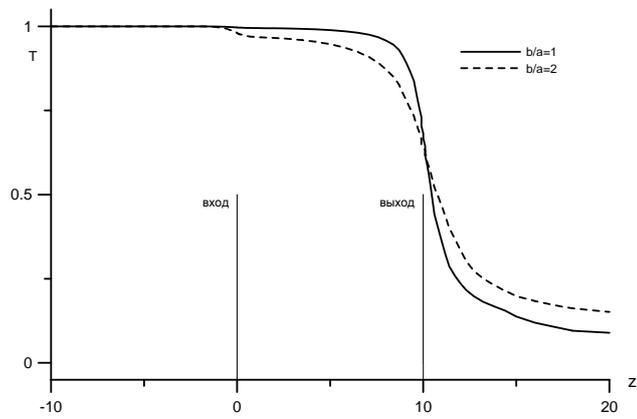
Результаты, полученные с применением схем второго порядка аппроксимации (2.3.12), (2.3.13), практически совпадают для  $\delta_1 \leq 1$ , в то время как для  $\delta_1$  счет по локально-одномерной схеме (2.3.13) дает несколько большее значение расхода газа, что свидетельствует о меньшей схемной вязкости. Отличие составляет примерно 1% и увеличивается с ростом  $\delta_1$ . Таким образом, для сильно разреженного режима течения обе схемы второго порядка эквивалентны, однако для переходного и около-континуального режимов метод (2.3.13) является предпочтительным. Данный вывод хорошо коррелирует с опытом проведения расчетов течения в длинной круглой трубе [133], где метод (2.3.13) оказался более точным для больших значений параметра разреженности.

Следует подчеркнуть, что различие в результатах между схемами второго порядка примерно в 10-20 раз меньше, чем разница между схемой первого порядка и любой из схем второго порядка. При этом использование локально-одномерного метода (2.3.13) приводит к уменьшению временных затрат на шаг по времени примерно на 25% процентов по сравнению с полностью трехмерным методом (2.3.13).

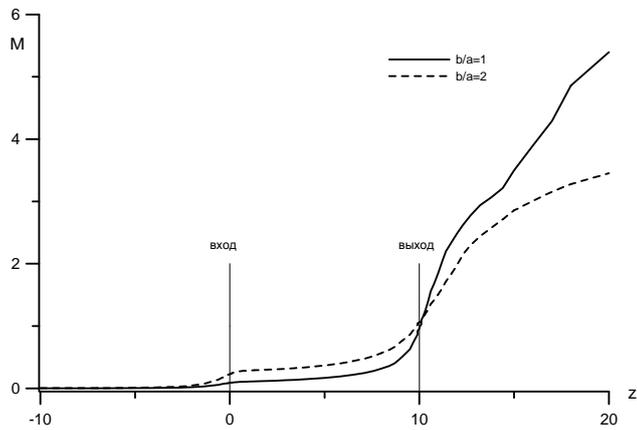
Во второй серии расчетов строилось решение задачи для  $b/a = 1, 2$  в диапазоне значений параметра разреженности  $0 \leq \delta_1 \leq 30$ . Полученные результаты приведены в таблице 4.29, в которой также представлены



(а) давление

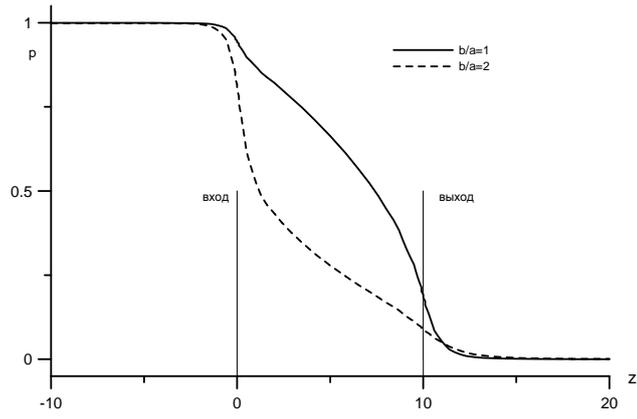


(б) температура

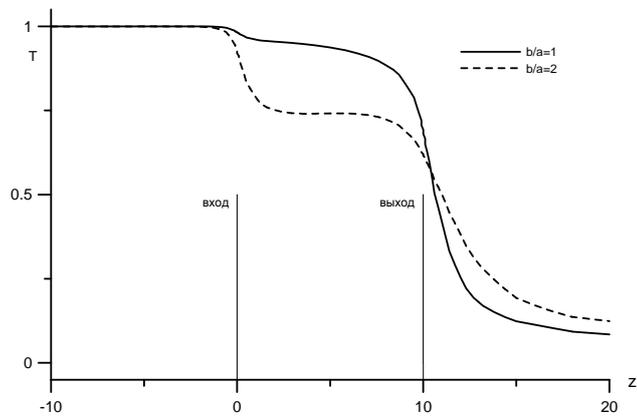


(в) число Маха

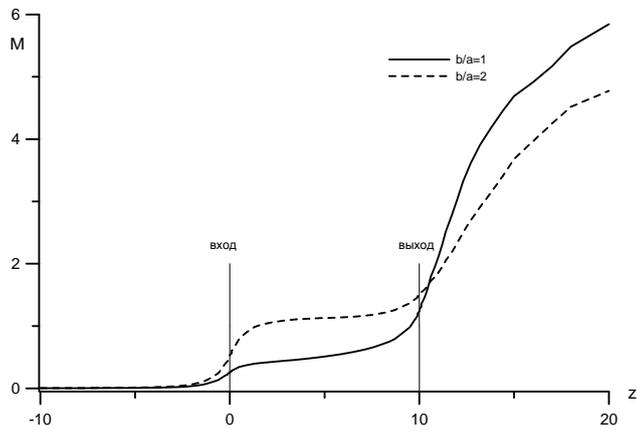
Рисунок 4.53 – Осевые распределения для  $\delta_1 = 1$  и  $b/a = 1$  (сплошная кривая),  $b/a = 2$  (штриховая кривая)



(а) давление



(б) температура



(в) число Маха

Рисунок 4.54 – Осевые распределения для  $\delta_1 = 30$  и  $b/a = 1$  (сплошная кривая),  $b/a = 2$  (штриховая кривая)

значения величины  $Q$  для круглого канала, полученные методом Монте-Карло [201] и решением кинетического уравнения [133]. Видно, что нормированный расход через квадратный канал постоянного сечения примерно на 10% больше, чем расход через круглую трубу радиуса  $a$ . Увеличение линейного размера выходного сечения до  $b/a = 2$  увеличивает расход примерно в два раза, что связано с тем, что расходящиеся стенки канала оказывают меньшее сопротивление течению газа. Можно ожидать, что дальнейшее увеличение площади выходного сечения будет приводить к еще большему росту расхода.

Рисунки 4.53 иллюстрируют влияние геометрии канала на распределение макроскопических величин вдоль оси  $x = y = 0$ . Представлены распределения давления, температуры и числа Маха вдоль оси трубы для  $\delta_1 = 1$  и  $b/a = 1$  (сплошная кривая) и  $b/a = 2$  (штриховая кривая). Видно, что переменность сечения канала оказывает значительное влияние на профили давления и числа Маха, в то время как профили температуры близки. Для  $b/a = 1$  распределения  $p$ ,  $T$  и  $M$  по оси качественно совпадают со случаем круглой трубы постоянного радиуса [133, 201]. Так, распределение давления является практически линейным за исключением небольших областей вблизи концов. Температура газа слабо отклоняется от значения в резервуаре повышенного давления и начинает падать вблизи от выходного сечения. Для  $b/a = 2$  поведение давления становится существенно нелинейным, в то время как температура отклоняется от единицы по всей длине канала. Значения числа Маха внутри канала, характеризующий разгон потока, тоже больше для трубы переменного сечения. На рис. 4.54 представлены те же величины, но для большего значения параметра разреженности  $\delta_1 = 30$ . Видно, что влияние формы сечения канала стало еще более заметным. Так, давление и температура резко падают внутри канала вблизи входного се-

чения, в то время как для канала постоянного сечения (как и для круглой трубы) график давления имеет выпуклую форму.

### 4.8.3 Заключение

В разделе рассмотрена задача о течении разреженного газа в трубе переменного квадратного сечения при истечении его из камеры высокого давления в вакуум. Продемонстрировано преимущество схем второго порядка аппроксимации по пространству над стандартным методом первого порядка. При этом для малых чисел Кнудсена более простая и быстрая локально-одномерная (структурированная) схема оказывается точнее полностью трехмерной универсальной аппроксимации. Показано, что переменность сечения канала приводит к увеличению расхода газа и качественному изменению распределения макроскопических величин вдоль оси канала.

# 5 Задачи внешней гиперзвуковой аэродинамики

## 5.1 Особенности моделирования гиперзвуковых течений

При гиперзвуковом обтекании космического аппарата на большой высоте определяющими являются эффекты разреженности и сильной неравновесности течения. Изучение аэродинамических характеристик аппаратов экспериментальным путем сопряжено со значительными техническими трудностями и имеет существенные ограничения по режимам обтекания. Для экономии времени и средств целесообразно основные аэротермодинамические характеристики изучать методами вычислительной физики. Традиционным подходом к моделированию гиперзвуковых течений разреженного газа является использование метода ПСМ. Так, в ИТПМ им. С.А. Христиановича СО РАН разработан программный комплекс SMILE [42] (Statistical Modeling in Low-Density Environment - статистическое моделирование в средах с низкой плотностью), использующийся в интересах различных косми-

ческих корпораций, например, РКК “Энергия” им. С.П. Королева. Однако у метода статистического моделирования есть и свои недостатки. Статическая природа метода делает его затратным в приложении к нестационарным задачам, для расчетов областей медленного течения в донной области за космическим аппаратом и для расчета пристеночных слоев.

Прямое численное решение кинетических уравнений с использованием разностных схем второго порядка аппроксимации является альтернативой ПСМ. Перспективность использования детерминистических подходов, основанных на решении кинетического уравнения Больцмана, подтверждается возросшим интересом к этому направлению в мире. Активная разработка методов и программного обеспечения решения кинетического уравнения Больцмана для задач аэродинамики спускаемых аппаратов ведется в ряде стран:

- КНР: пакет программ для решения кинетического уравнения Крука одноатомного газа на структурированных сетках [78, 89].
- CFDR Corporation, USA: пакет программ решения задач кинетической теории на основе уравнения Больцмана с точными и приближенными интегралами столкновений [86, 160]. Основной заказчик - Военно-воздушные силы США и NASA.
- Правительство Франции: пакет программ для решения кинетического уравнения Крука одноатомного газа на структурированных сетках [82].

Однако заметим, что в подавляющем числе имеющихся в литературе численных решения задач с числами Маха набегающего потока хотя бы не менее  $M_\infty = 5$  рассматриваются гиперзвуковые течения вокруг тел простой формы: пластины [171], цилиндра [62, 79], сферы [52, 81, 220, 221], кону-

са [222, 223]. Расчет обтекания при больших числах Маха и более сложных геометрий при помощи традиционных подходов сильно затруднен: необходимость использовать структурированную равномерную сетку в скоростном пространстве, например [78, 86, 88] приводит к неприемлемо большому росту числа расчетных узлов в скоростном пространстве, пропорциональному  $M_\infty^3$ .

Частично проблема быстрого роста числа узлов скоростной сетки решена в недавних работах [61, 82], в которых представлены методы решения кинетического уравнения на адаптивных скоростных сетках типа восьмиричного дерева, которые автоматически сгущаются в областях больших градиентов функции распределения в скоростном пространстве. Однако такие подходы значительно более сложные в программной реализации и требуют большого числа дополнительных шагов в методе решения. Более того, создание консервативной процедуры вычисления точного интеграла столкновений на такой сетке является очень сложной задачей. Программное обеспечение, реализующее данные методы решения кинетического уравнения, создано в рамках закрытых государственных программ правительств зарубежных стран и недоступно российским организациям.

Вторая трудность при использовании кинетических уравнений с приближенным интегралом столкновений состоит в недостаточной исследованности точности таких подходов для моделирования течений с большими числами Маха. Как известно, построение модельного интеграла столкновений нацелено на правильный выход на режим сплошной среды в пределе  $Kn \rightarrow 0$  ( $\delta \rightarrow \infty$ ). При этом реальная точность моделирования при  $Kn \approx 1$  как правило заранее не известна и может оцениваться путем сравнения с результатами, полученными по точному уравнению Больцмана или с по-

мощью метода ПСМ. Как правило, в существующих публикациях точность модельных уравнений оценивается на простых одномерных задачах, таких как структура ударной волны [48]. Для задачи о структуре ударной волны модельные уравнения удовлетворительно предсказывают часть характеристик, но дают заметную ошибку в других, например, в профиле температуры. Данное поведение в первую очередь вызвано тем, что частота столкновений в модельных уравнениях не зависит от скорости молекул и определяется только по макроскопическим величинам, в то время как в реальности более быстрые молекулы сталкиваются чаще. Однако заметим, что задача о структуре ударной волны не является репрезентативной для прикладных задач, таких как задачи внешней аэродинамики, для которых интерес в первую очередь представляют распределения силовых нагрузок и потока тепла по поверхности тела. За исключением работы [87], в которой авторы провели сравнение результатов, полученных по кинетическим моделям, с методом ПСМ для случая  $M_\infty = 10$ , детальных сравнений в литературе не представлено. В аэрокосмических приложениях необходимо иметь возможность корректно моделировать течения с числами Маха набегающего потока не менее  $M_\infty = 25$ .

Результаты данной главы основываются в первую очередь на работах автора [140, 143–145, 153]. Сначала предлагается новый простой способ построения расчетной сетки в пространстве скоростей, позволяющий проводить расчеты с числами Маха набегающего потока до  $M_\infty = 30$  без существенного роста числа расчетных узлов в скоростном пространстве. Применимость и эффективность нового алгоритма оценивается на задаче обтекания круглого цилиндра гиперзвуковым потоком разреженного газа. Влияние выбора скоростной сетки на точность численного решения оценивалось по расчету наиболее чувствительной величины - потока энергии

на поверхность. Приведенные результаты показывают очень слабую зависимость решения от скоростной сетки. Далее приводится сравнение с результатами решения задачи обтекания цилиндра радиуса 6 дюймов (15.24 см) с помощью DSMC кода MONACO [43], приведенными в работе [224]. Задача решается для одноатомного газа аргона и двухатомного газа азота. Приведенные результаты показывают хорошую точность вычислений коэффициентов давления и теплоотдачи. Таким образом, впервые показана хорошая точность S-модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, включая задачу определения теплообмена на поверхности, и о применимости выбранного подхода к построению скоростной сетки.

Для демонстрации применимости численного метода и комплекса программ к решению прикладных задач построена картина обтекания потоком воздуха воздушно-космического аппарата (ВКА) ЦАГИ и аппарата типичной сегментально-конической формы. Расчеты проводились для условий полета на высотах 90 и 100 км для скоростей потока  $U_\infty = 1500$  и  $7900$  м/с. Последнее значение в списке соответствует входу аппарата в атмосферу с первой космической скоростью (для воздуха  $M_\infty = 28$ ) и представляет наибольший интерес. На задаче обтекания ВКА для  $U_\infty = 1500$  проведено детальное сравнение с результатами кода SMILE [42], вычисления с помощью которого проводились Е.А. Бондарем, П.В. Ващенко и А.А. Шевыриным (ИТПМ им. С.А.Христиановича СО РАН) в рамках проекта РФФИ 15-07-02986.

## 5.2 Алгоритм построения скоростной сетки

Общий критерий выбора размера расчетной области в переменных  $\xi$  и размера ячейки дается формулой (2.2.1). Для построения расчетной сетки надо иметь оценку максимальной и минимальной температур в поле течения. Как правило, для задач внешнего обтекания тел в качестве оценки сверху можно брать температуру торможения, которая выражается следующей формулой

$$T_0 = 1 + \frac{1}{3}M_\infty^2.$$

В качестве оценки снизу, как правило, выбирается единичное значение, которое может уточняться после проведения расчетов. Тогда

$$|\xi| \approx \leq M(1 + \sqrt{3}) \approx 2.7M_\infty$$

и при использовании равномерной гексаэдральной сетки в пространстве скоростей количество расчетных узлов растет как

$$N_\xi \approx (5M_\infty)^3$$

Если для  $M_\infty = 10$  равномерная скоростная сетка будет состоять из  $125 \times 10^3$  узлов, то для  $M_\infty = 30$  получаем  $3 \times 10^6$  узлов. Для сравнения, типичная скоростная сетка для расчета течения в микроканале содержит  $N_\xi \approx 3 \cdot 10^4$  узлов. Следует отметить, что пространственная сетка для спускаемого аппарата сложной формы может содержать до  $N_{space} = 10^6$  ячеек. Учитывая, что общее число расчетных узлов дается формулой  $N_{space} \times N_\xi$ , получаем, что прямой расчет гиперзвуковых течений с использованием традиционных подходов к построению расчетной сетки невозможен.

В настоящей работе предлагается следующий простой метод построения неравномерной сетки в пространстве скоростей, подходящий для при-

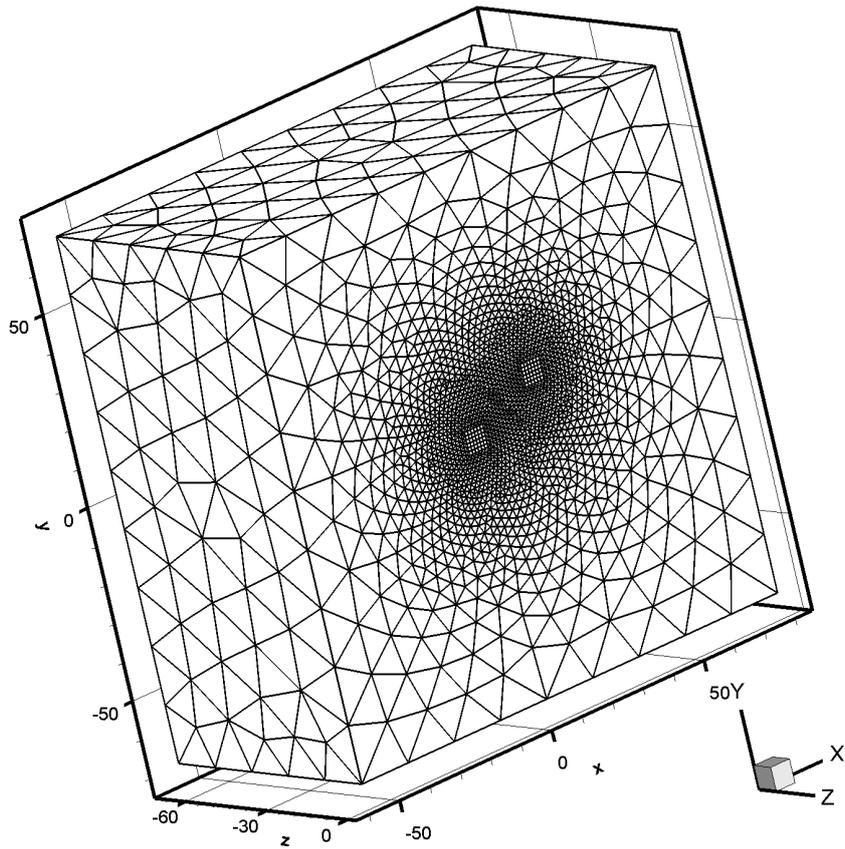


Рисунок 5.1 – Иллюстрация расчетной сетки в пространстве скоростей для  $M_\infty = 25$ ,  $\alpha = 25$ . Показана половина области.

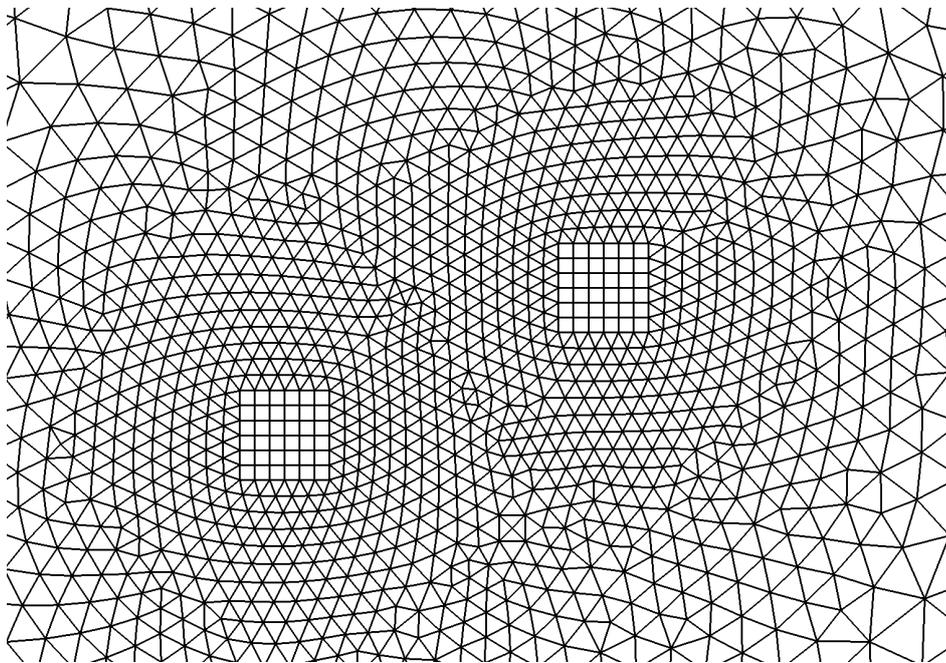


Рисунок 5.2 – Увеличение области сгущения рисунка 5.1.

кладных расчетов задач гиперзвукового обтекания при  $M_\infty \gg 1$ . Около  $\xi = U_\infty$  (набегающий поток) &  $\xi = 0$  (поверхность тела) вводятся кубические подобласти, в которых используется кубическая сетка с  $\Delta\xi = 0.5$  и  $\Delta\xi = 0.5\sqrt{T_w}$ , соответственно. В остальной части области используются тетраэдры, размер которых плавно растет до  $\approx 0.5\sqrt{T_0}$ . Вместо тетраэдров можно использовать кубическую сетку типа восьмеричного дерева. Сетка строится в любой стандартной программе построения сеток (Ansys ICEM CFD, Fluent Gambit). При этом расчетная сетка подходит и для задач обтекания тела под углом атаки. Как правило, сетка строится в четверти пространства с учетом плоскостей симметрии задачи, после чего препроцессор комплекса “Несветай-3Д” отражает ее в недостающие части области.

Применение предлагаемого алгоритма иллюстрируют рис. 5.1, 5.2, на которых представлена сетка для случая  $M_\infty = 25$  ( $U_\infty = 25$ ) и угла атаки  $\alpha = 25$ . Первая область сгущения сетки на рисунке соответствует  $\xi = 0$ , вторая - точке  $\xi = U_\infty$ . Число расчетных узлов равняется  $N_{vel} = 45258$ .

### 5.3 Расчет обтекания круглого цилиндра

Точность модельных уравнений и метода решения оценивается на плоской задаче гиперзвукового обтекания круглого цилиндра на адаптивной скоростной сетке. Постановка задачи достаточно стандартна и описана во множестве работ, например [79, 224]. Невозмущенный поток газа на бесконечности характеризуется плотностью  $n_\infty$ , температурой  $T_\infty$ , скоростью  $u_\infty$ . На поверхности цилиндра принимается условие диффузного отражения с полной тепловой аккомодацией отраженных молекул к температуре поверхности  $T_w$ . Решение задачи предполагается стационарным. В безраз-

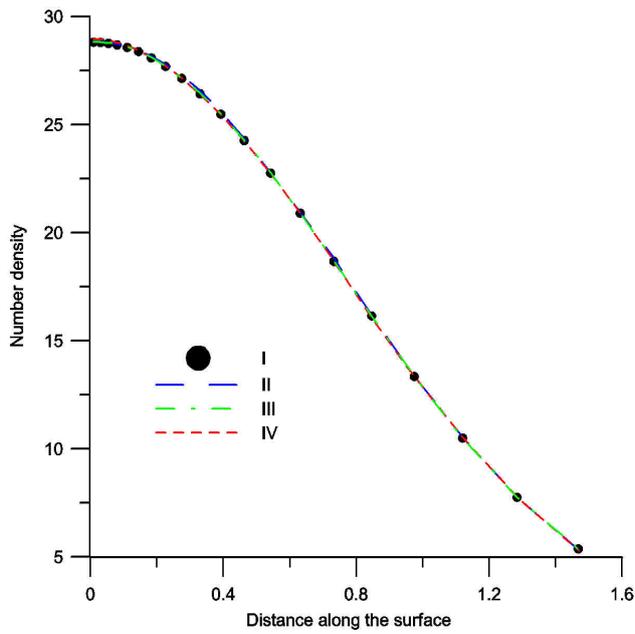
мерных переменных решение определяется числом Маха набегающего потока  $M_\infty$ , безразмерной температурой поверхности  $T_w$ , параметром разреженности, вычисленному по радиусу цилиндра, и параметром  $\omega$  в законе вязкости  $\mu = T^\omega$ .

### 5.3.1 Тестирование алгоритма построения скоростной сетки

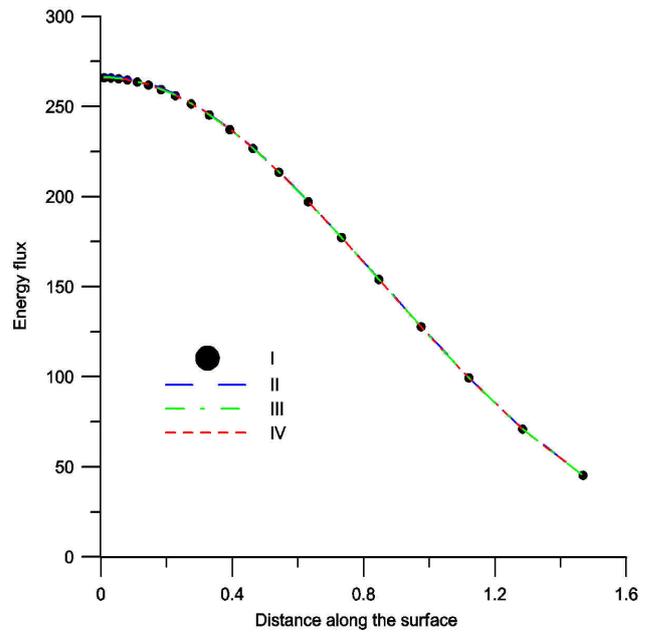
В данном разделе оценивается влияние выбора скоростной сетки на точность численного решения, в первую очередь на расчет наиболее чувствительной величины - потока энергии на поверхность. Расчеты проводились для числа Маха набегающего потока  $M = 10.95$ , температуры поверхности  $T_w = 3$  и двух значений параметра разреженности  $\delta = 1$  и  $\delta = 100$ .

Пространственная сетка получалась путем размножения плоской сетки из  $50 \times 20$  ячеек в плоскости симметрии  $x - y$  в направлении  $z$  три раза; размер первой ячейки у поверхности цилиндра  $h_n = 0.002$ . Общее число пространственных ячеек равнялось 2000. В пространстве скоростей были построены две равномерных подробных сетки и две неравномерных сетки со сгущением к  $\xi = 0$  и  $\xi = u_\infty$ . Грубая неравномерная сетка состоит из 48 тысяч ячеек, шаг сетки растет от 1 до  $\sqrt{T_0}$ . Средняя неравномерная сетка состоит из 163 тысяч ячеек; размер ячейки меняется от 0.5 около  $\xi_x = 0, U_\infty$  до  $0.5\sqrt{T_0}$ . Две равномерные сетки состояли из 137 тысяч ячеек  $\Delta\xi = 1$  и 1100 тысяч ячеек  $\Delta\xi = 0.5$ . Таким образом, использование грубой неравномерной сетки обеспечивает выигрыш по числу расчетных ячеек в 22 раза по сравнению с подробной равномерной сеткой.

На рис. 5.3,5.4 приведено распределение по поверхности цилиндра двух

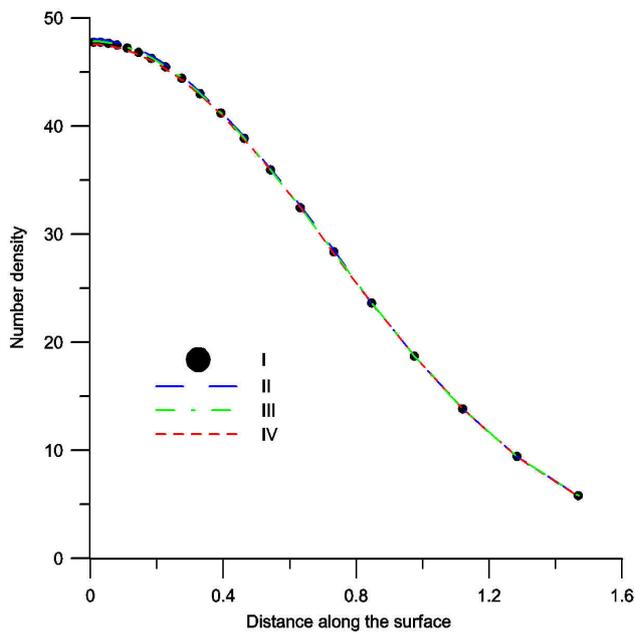


(а) Числовая плотность

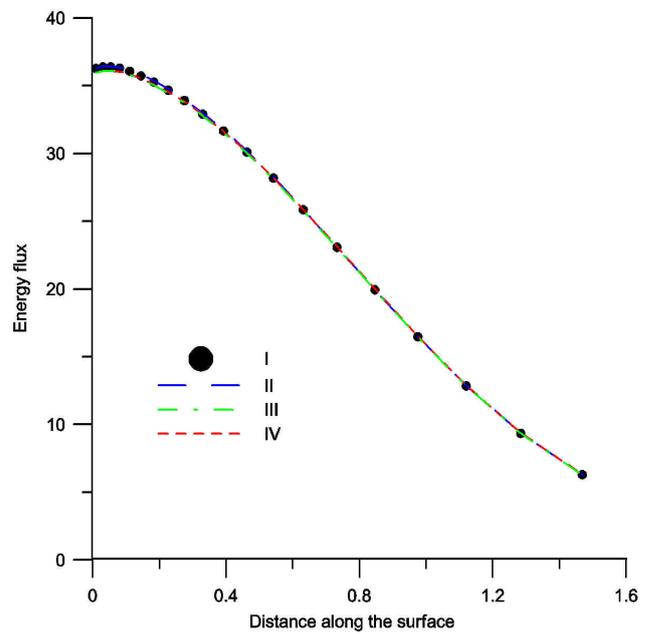


(б) Поток энергии

Рисунок 5.3 – Сравнение результатов счета на разных скоростных сетках для  $M = 10.95$ ,  $T_w = 3$  и  $\delta = 1$ .



(а) Числовая плотность



(б) Поток энергии

Рисунок 5.4 – Сравнение результатов счета на разных скоростных сетках для  $M = 10.95$ ,  $T_w = 3$  и  $\delta = 100$ .

наиболее чувствительных к точности счета величин - плотности и потока энергии. Кривые I, II, III, IV соответствуют расчетам на скоростных сетках с  $N_{vel} = 1100$  (подробная равномерная), 137 (раномерная), 164 (неравномерная) и 48 (грубая неравномерная) тысячами узлов. Приведенные результаты показывают очень слабую зависимость решения от скоростной сетки, что позволяет считать предложенный алгоритм построения скоростной сетки обоснованным.

### 5.3.2 Сравнение с методом ПСМ работы [224]

Рассматривается обтекание цилиндра радиуса 6 дюймов (15.24 см) потоками аргона и азота для чисел Маха  $M_\infty = 10, 25$  и широкого диапазона значений параметра разреженности  $1.6 \leq \delta \leq 200$ . Расчеты для  $\delta \approx 1$  позволяют оценить ошибку моделирования, совершаемую при замене точного интеграла столкновений приближенным, и являются новыми. Результаты для  $\delta \gg 1$  иллюстрируют точность численного метода и требуют хорошего разрешения пристеночного слоя. В качестве эталонного решения использовались расчеты с помощью DSMC кода MONACO [43], приведенные в работе [224].

В данной серии вычислений использовалась более подробная сетка в физическом пространстве, состоявшая из  $115 \times 40$  ячеек в плоскости x-y. Размер первой ячейки в пристеночном слое принимался  $h_n = 10^{-4}$ . Детали сетки иллюстрирует рис. 5.5. Тестовые расчеты показали, что дальнейшее сгущение пространственной сетки не меняет результатов счета. Скоростная сетка для всех расчетных вариантов состояла из 30-40 тысяч узлов. Расчеты проводились на кластере МФТИ с использованием 144 ядер. Решение задачи для  $\delta \approx 1$  требует 6 часов времени, для  $\delta = 40$  требуется 48

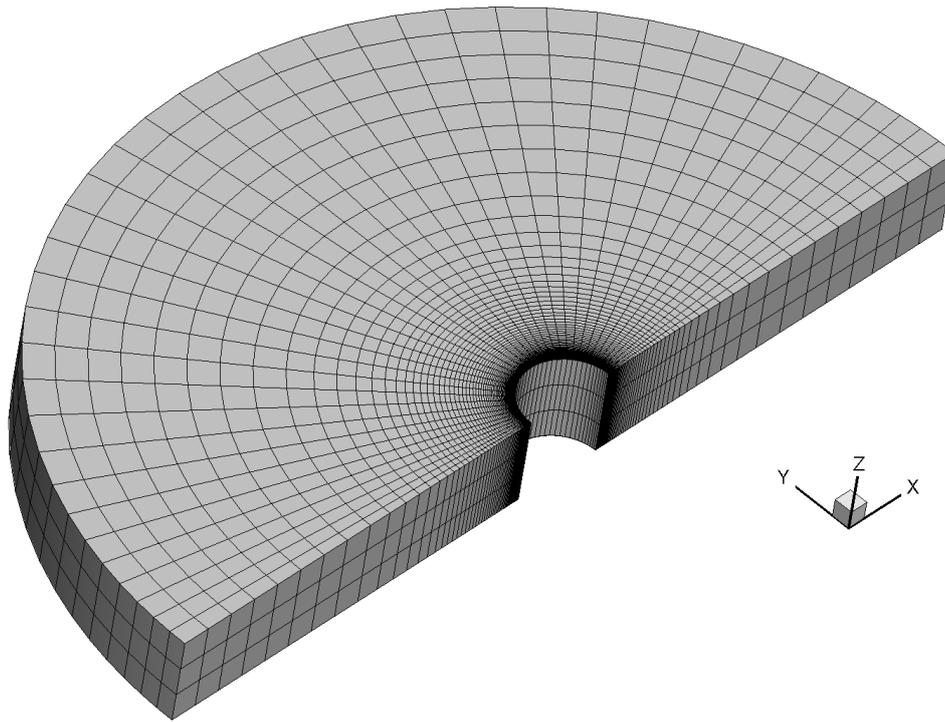


Рисунок 5.5 – Пространственная сетка для сравнений с работой [224]

часов.

Для сравнения решения кинетических уравнений и результата DSMC будем использовать коэффициенты давления, трения и теплоотдачи, определенные в (1.5.18).

$M_\infty$	$u_\infty$ , м/с	$T_w$ , К	$S_\infty$
10	2624	500	9.13
25	6585	1500	22.82

Таблица 5.1 – Скорость, температура и скоростное число для обтекания цилиндра потоком аргона

$\rho_\infty, \text{ кг/м}^3$	$1.127 \times 10^{-6}$	$5.636 \times 10^{-6}$	$2.818 \times 10^{-5}$	$1.408 \times 10^{-4}$
$\delta$	1.6	8	40	200
Kn	0.56	0.112	0.0225	0.0045

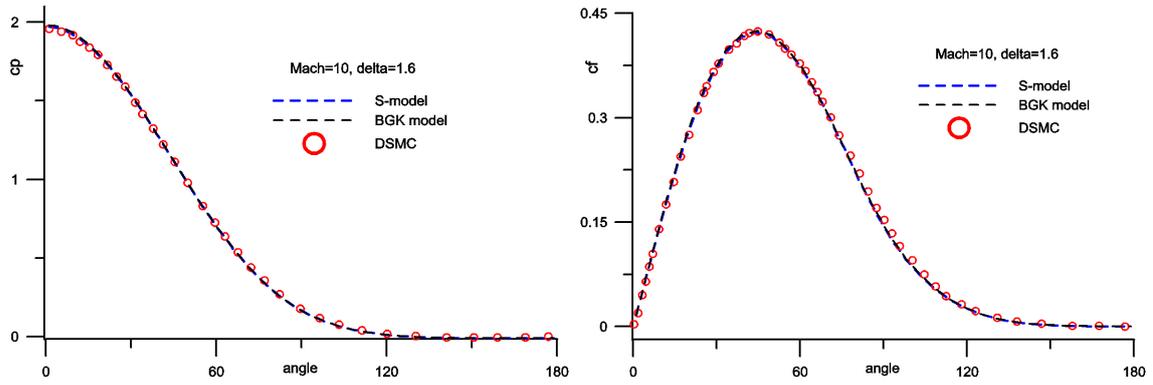
Таблица 5.2 – Плотность потока, параметр разреженности и число Кнудсена для обтекания цилиндра потоком аргона

### Обтекание потоком аргона

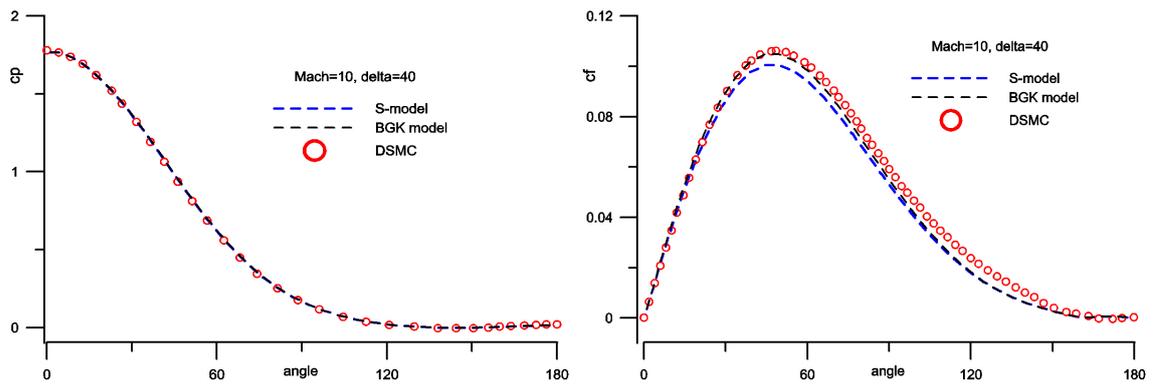
В первой серии расчетов моделировалось обтекание цилиндра аргоном (одноатомный газ). Для всех расчетных случаев размерная температура набегающего потока  $T_\infty = 200\text{К}$ , использовался безразмерный закон вязкости  $\mu = T^{0.734}$ . Остальные граничные условия задачи приведены в таблицах 5.1, 5.2.

На рис. 5.6 – 5.7 приведено распределение коэффициентов давления и трения по поверхности цилиндра, полученные численным решением моделей Крука и Шахова, и результаты работы [224]. Видно отличное согласие между результатами счета по S-модели и подходу ПСМ для всех представленных режимов обтекания. Модель БГК в целом не уступает S-модели при расчете коэффициента давления, но дает некоторую ошибку в коэффициенте трения для режима  $\delta = 40$ . Отметим, что обе кинетические модели дают несколько более высокое значение коэффициента  $c_p$  по сравнению с методом ПСМ для  $\delta = 1.6$ .

На рис. 5.8 представлено сравнение более сложной для расчета величины - коэффициента теплоотдачи  $c_h$ . Видно отличное согласие расчетов по методу DSMC и модельному уравнению Шахова для обоих значений  $\delta$ ; максимальное различие в передней точке торможения составляет не более



(a)  $\delta = 1.6$  ( $Kn \approx 0.56$ )

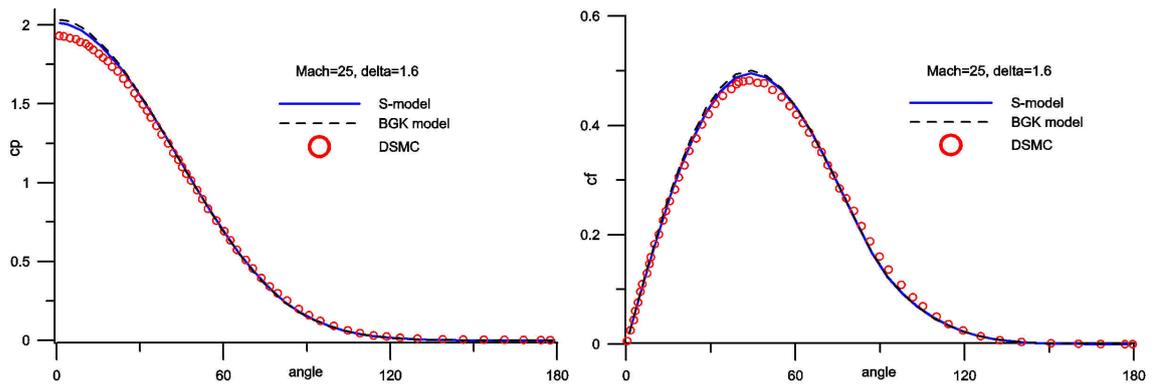


(б)  $\delta = 40$  ( $Kn \approx 0.0225$ )

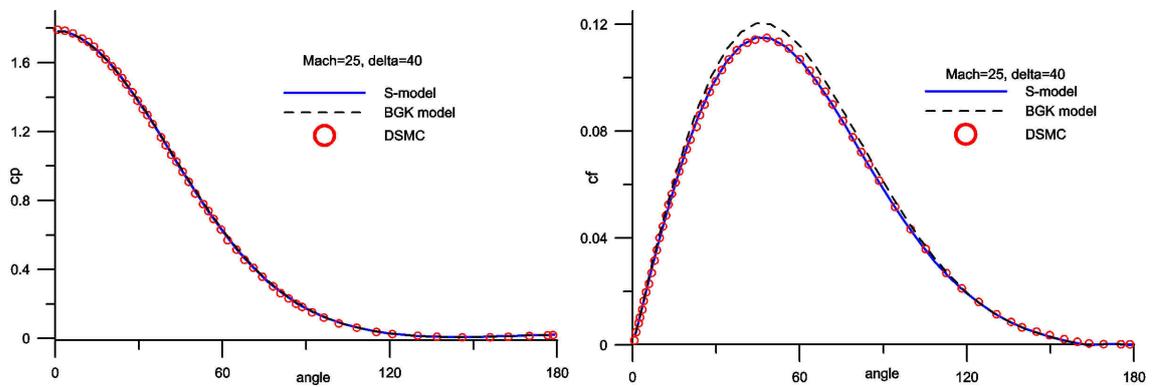
Рисунок 5.6 – Распределение коэффициентов давления  $c_p$  и трения  $c_f$  по поверхности цилиндра при обтекании аргоном для  $M_\infty = 10$ .

2% для  $\delta = 1.6$  и уменьшается с увеличением числа  $\delta$ , так как течение приближается к режиму сплошной среды. При этом использование более простой модели БГК дает существенную ошибку в коэффициенте теплопередачи, которая увеличивается с ростом значения  $\delta$ . Этот результат можно объяснить неправильным значением числа Прандтля в модели БГК. При этом отметим, что плохая точность расчета  $c_h$  имеет место не только для  $M_\infty = 25$ , но и для значительно меньшего значения  $M_\infty = 10$ .

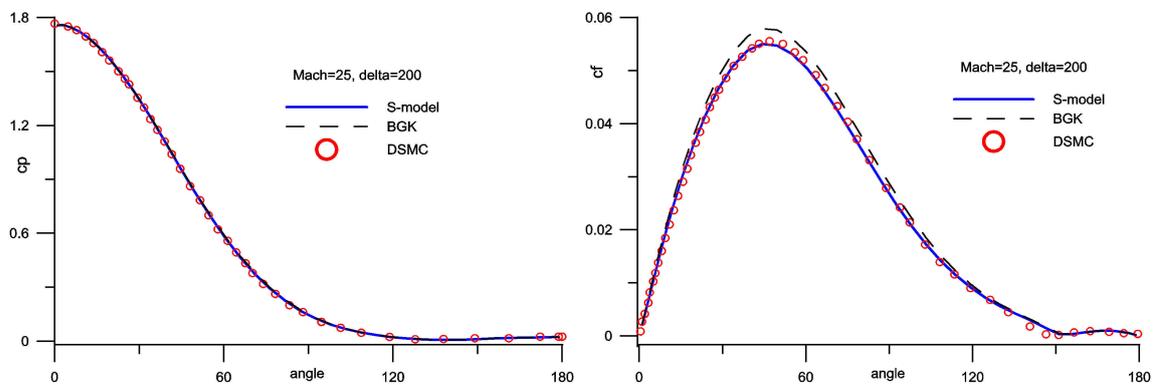
На рис. 5.9 приведено сравнение профилей температуры на линии тормо-



(a)  $\delta = 1.6$  ( $\text{Kn} \approx 0.56$ )



(б)  $\delta = 40$  ( $\text{Kn} \approx 0.0225$ )



(в)  $\delta = 200$  ( $\text{Kn} \approx 0.0045$ )

Рисунок 5.7 – Распределение коэффициентов давления  $c_p$  и трения  $c_f$  по поверхности цилиндра при обтекании аргоном для  $M_\infty = 25$ .

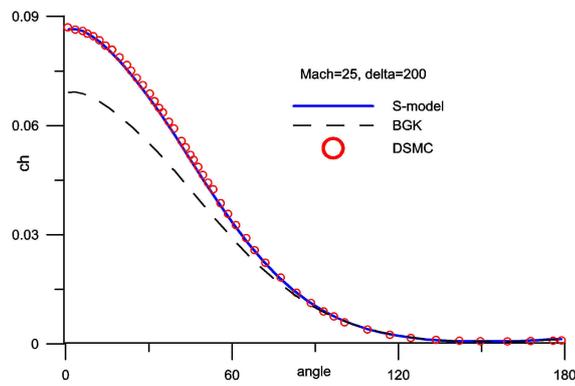
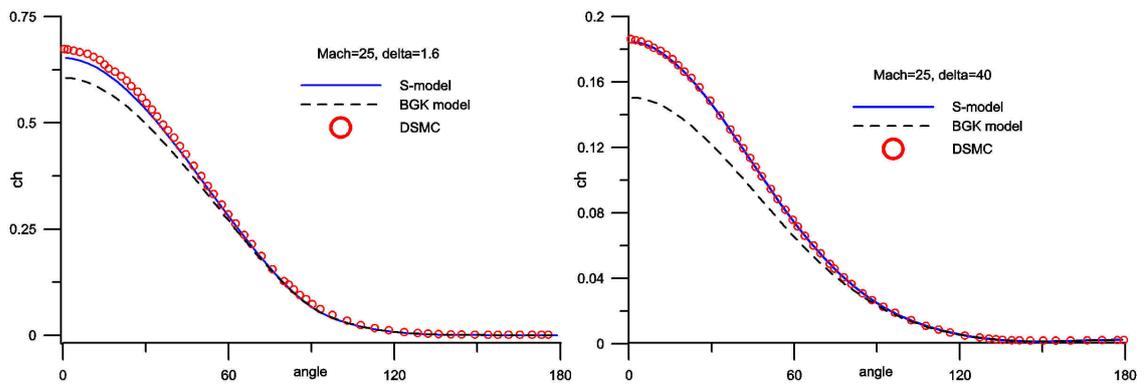
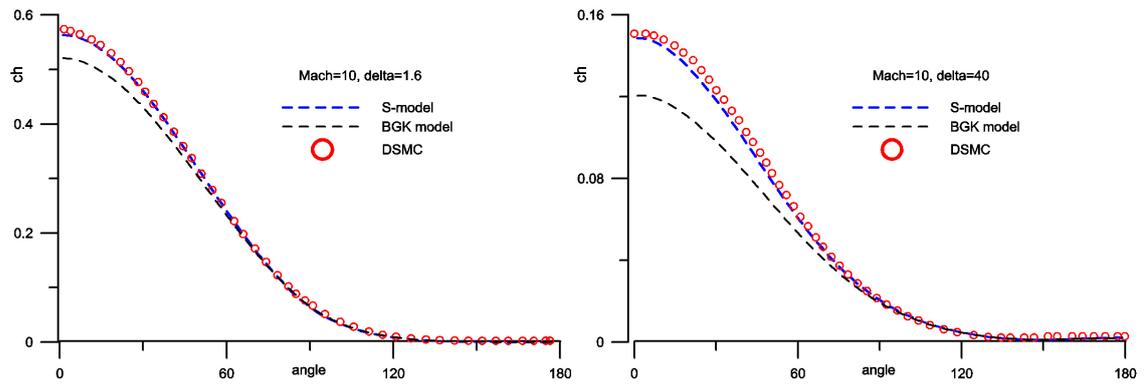
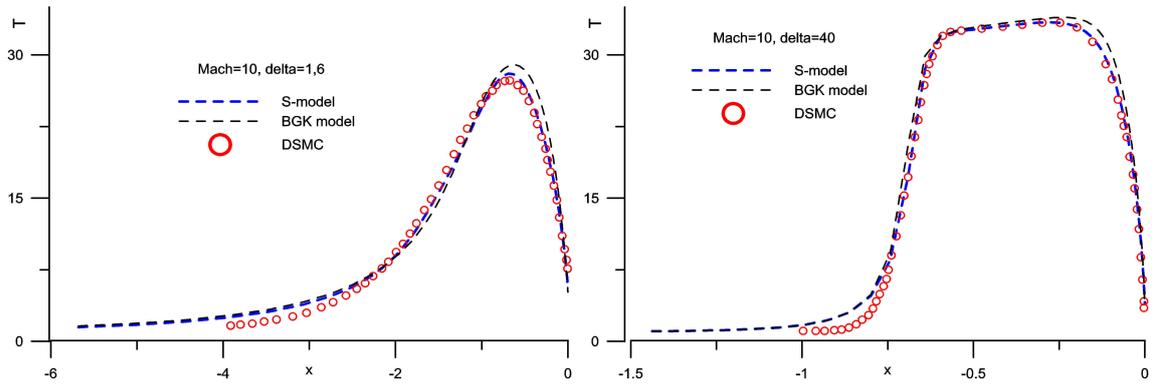
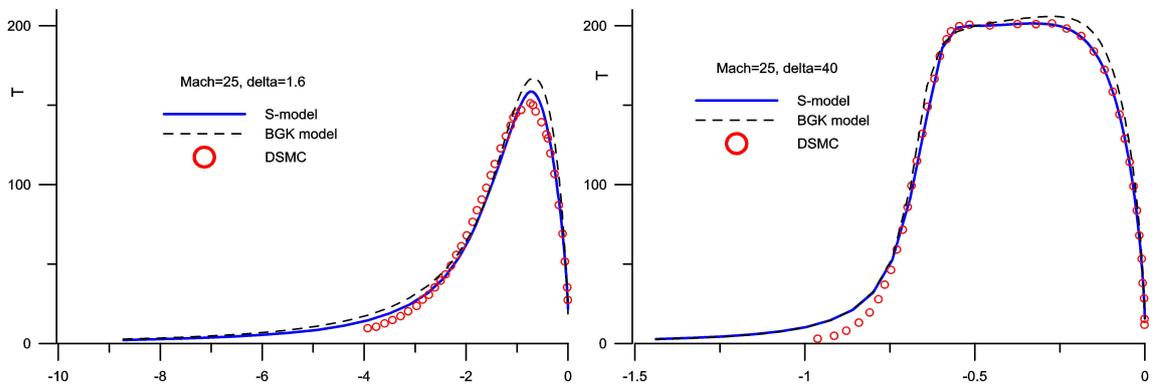


Рисунок 5.8 – Распределение коэффициента теплопередачи  $c_h$  по поверхности цилиндра при обтекании аргоном



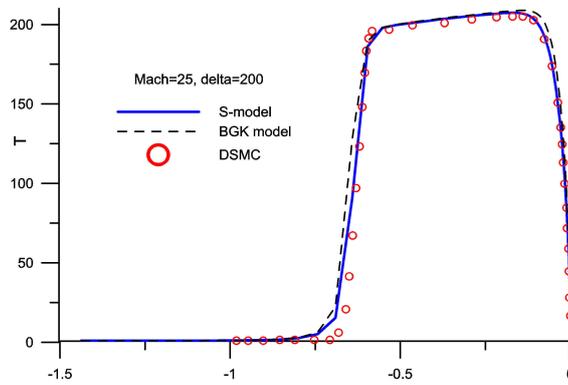
(a)  $M_\infty = 10, \delta = 1.6$  ( $Kn \approx 0.56$ )

(б)  $M_\infty = 10, \delta = 40$  ( $Kn \approx 0.0225$ )



(в)  $M_\infty = 25, \delta = 1.6$  ( $Kn \approx 0.56$ )

(г)  $M_\infty = 25, \delta = 40$  ( $Kn \approx 0.0225$ )



(д)  $M_\infty = 25, \delta = 200$  ( $Kn \approx 0.00455$ )

Рисунок 5.9 – Сравнение профилей температуры при обтекании цилиндра аргоном.

жения в поле течения. В целом, профиль температуры на линии торможения достаточно близок к расчету ПСМ, при этом расчет по кинетическим моделям дает более крутой профиль в районе его “хвоста”. Использование модели БГК приводит к довольно заметной ошибке в “ступеньке” профиля температуры за фронтом ударной волны при  $\delta = 40$ .

На рис. 5.10–5.13 представлены поля плотности, давления, температуры и числа Маха при обтекании цилиндра потоком аргона. В целом, видна характерная картина обтекания затупленного тела сверхзвуковым потоком газа. При увеличении значения параметра разреженности фронт ударной волны становится более ярко выраженным, в то время как за телом формируется область низкой плотности. Для рассматриваемых значений  $\delta$  возвратное течение за цилиндром не формируется.

$M_\infty$	$u_\infty$ , м/с	$T_w$ , К	$S_\infty$
10	2883	500	8.36
25	7208	1500	20.91

Таблица 5.3 – Скорость, температура и скоростное число для обтекания цилиндра потоком азота

$\rho_\infty$ , кг/м <sup>3</sup>	$7.900 \times 10^{-7}$	$1.974 \times 10^{-5}$	$9.872 \times 10^{-5}$
$\delta$	1.59	39.68	198.4
Kn	0.57	0.0227	0.00453

Таблица 5.4 – Плотность потока и параметр разреженности для обтекания цилиндра потоком азота

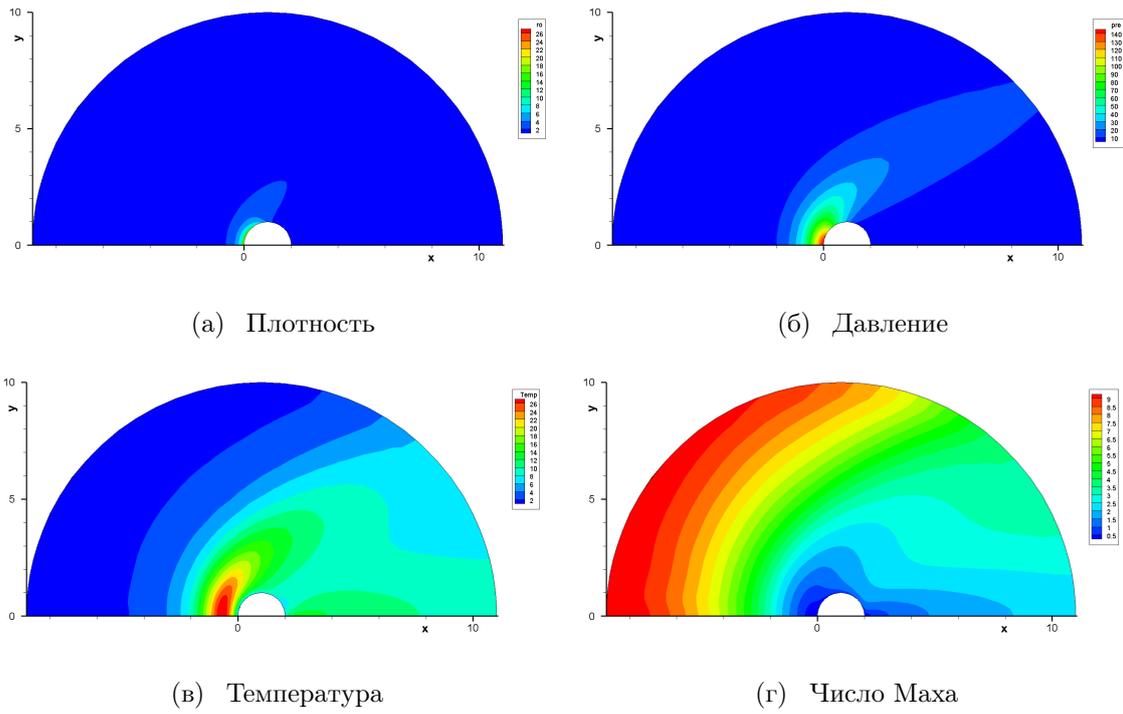


Рисунок 5.10 – Поле течения при обтекании аргоном для  $M_\infty = 10$  и  $\delta = 1.6$ .

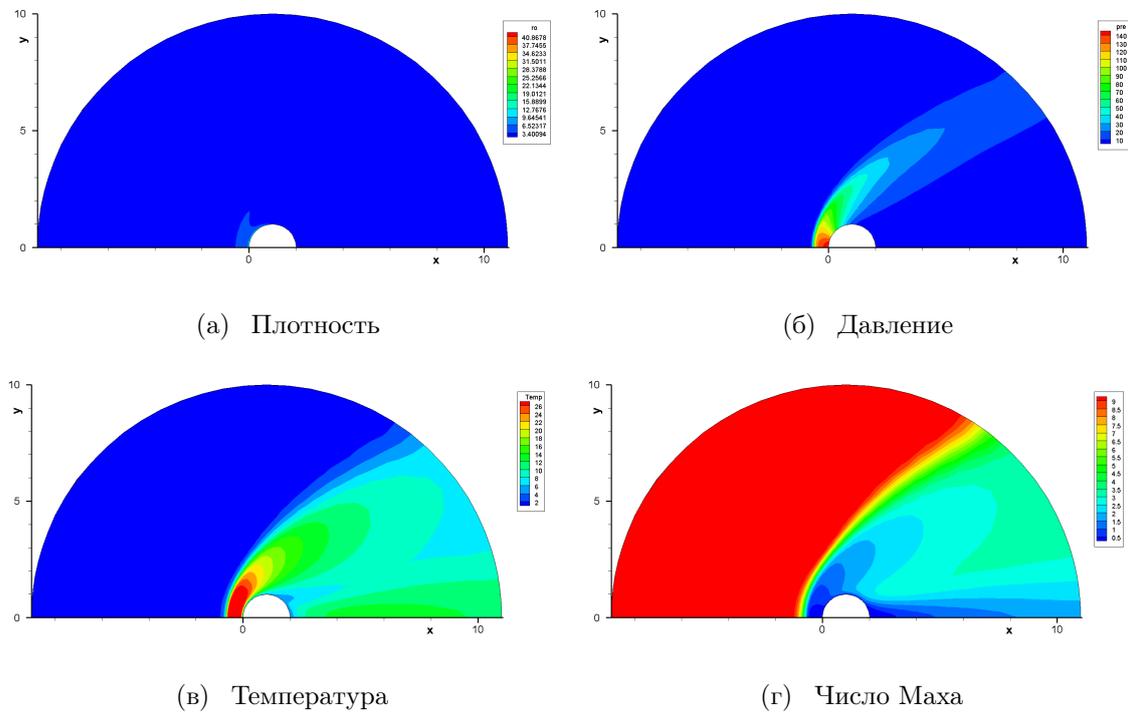


Рисунок 5.11 – Поле течения при обтекании аргоном для  $M_\infty = 10$  и  $\delta = 40$ .

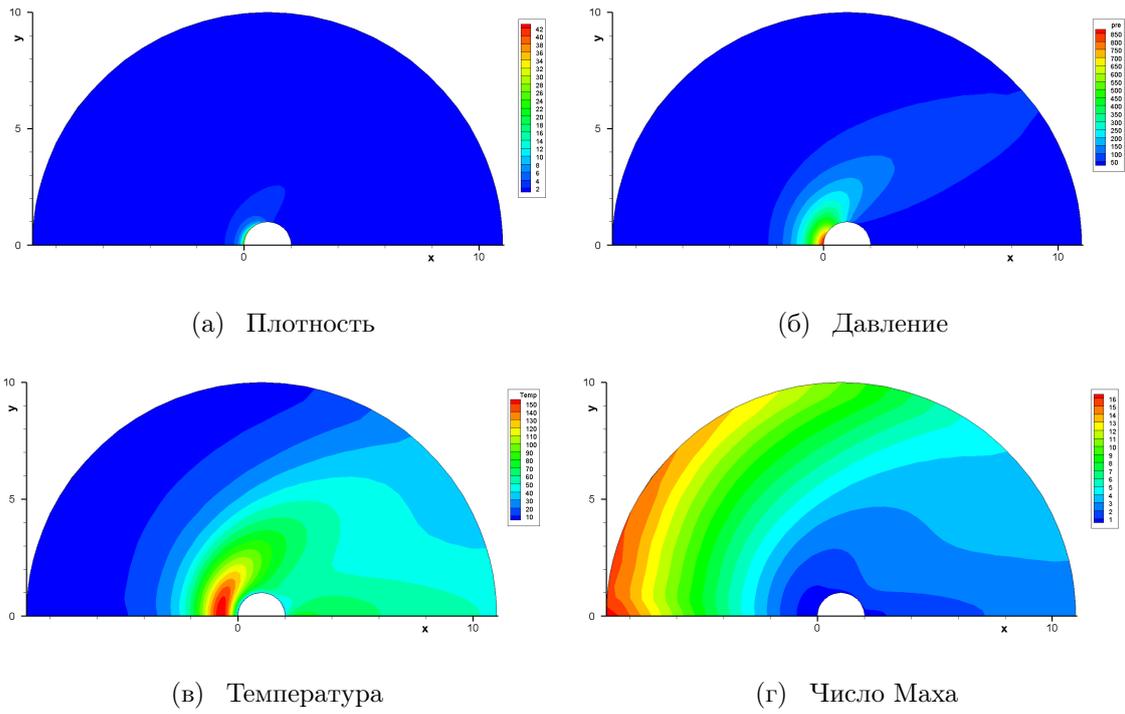


Рисунок 5.12 – Поле течения при обтекании аргоном для  $M_\infty = 25$  и  $\delta = 1.6$ .

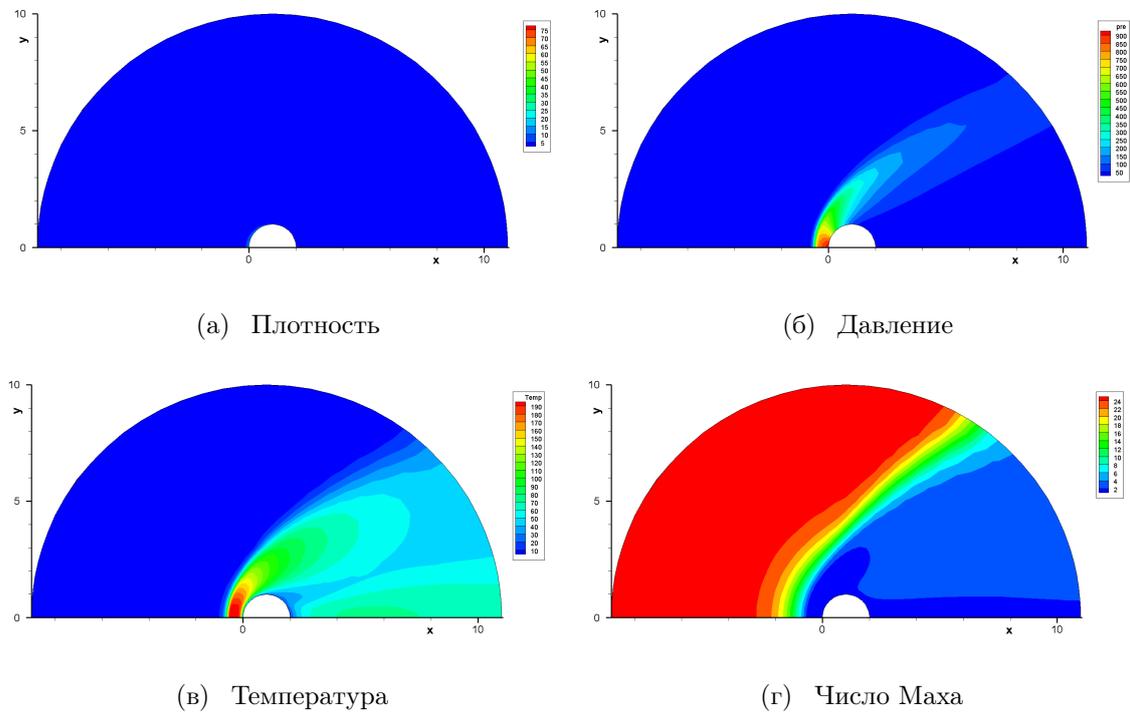
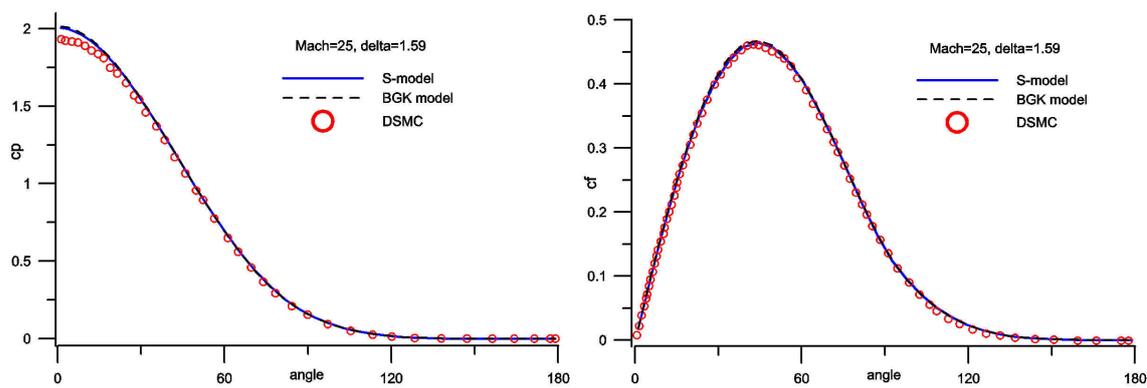
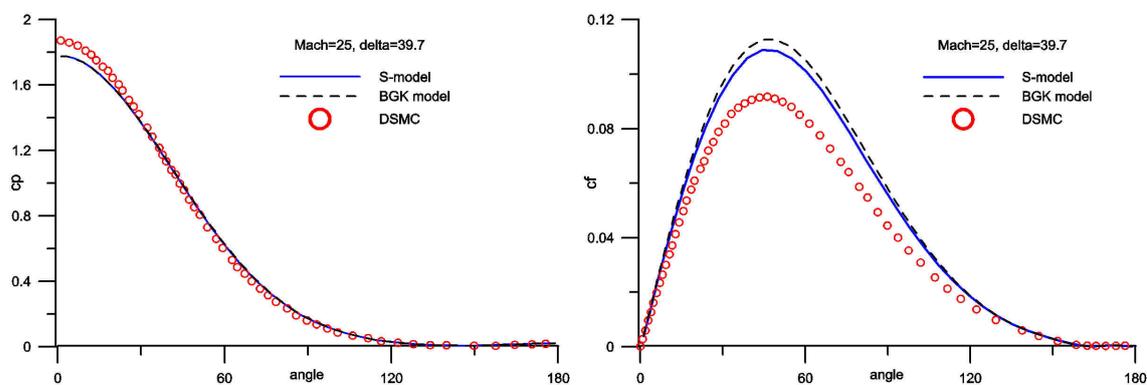


Рисунок 5.13 – Поле течения при обтекании аргоном для  $M_\infty = 25$  и  $\delta = 40$ .

## Обтекание потоком азота



(a)  $\delta = 1.59$  ( $Kn \approx 0.57$ )



(б)  $\delta = 39.68$  ( $Kn \approx 0.0227$ )

Рисунок 5.14 – Распределение коэффициентов давления  $c_p$  и трения  $c_f$  по поверхности цилиндра при обтекании азотом для  $M_\infty = 25$ .

Во второй серии расчетов моделировалось обтекание цилиндра двухатомным газом азотом с помощью модели БГК и S-моделей, то есть без учета внутренних степеней свободы. При этом для S-модели принималось  $Pr = 0.72$ , молярная масса газа бралась равной массе азота. Вычисления проводились для  $M_\infty = 25$ . Для всех расчетных случаев размерная температура набегающего потока  $T_\infty = 200\text{K}$ , использовался безразмерный закон вязкости  $\mu = T^{0.7}$ . Остальные граничные условия задачи приведены

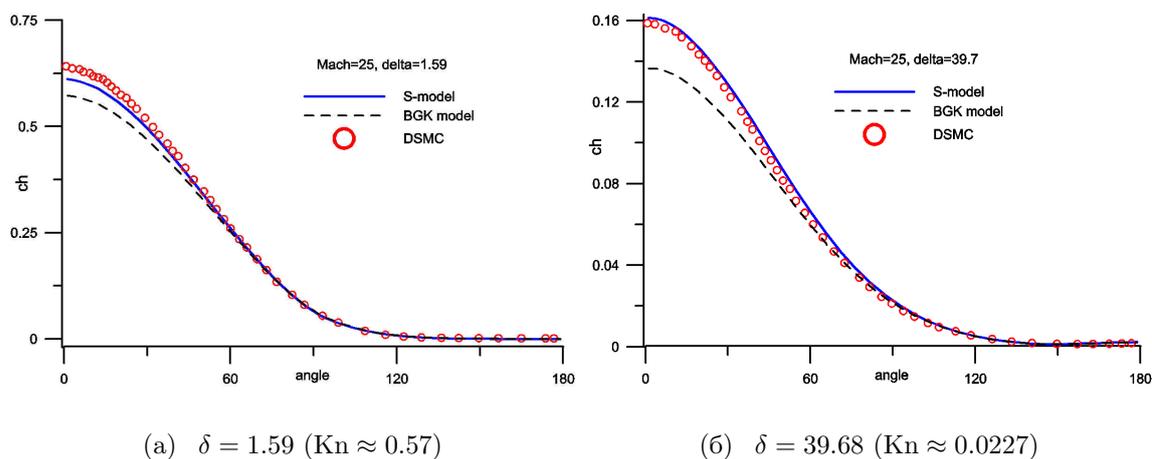


Рисунок 5.15 – Распределение коэффициента теплопередачи  $c_h$  по поверхности цилиндра при обтекании азотом для  $M_\infty = 25$ .

в таблицах 5.3,5.4.

На рис. 5.14 приведены результаты расчета аэродинамических коэффициентов  $c_p$ ,  $c_f$  для  $\delta = 1.59, 39.68$ . В целом, видно удовлетворительное согласие между расчетами с использованием модельных уравнений и методом ПСМ за исключением коэффициента трения  $c_f$  для  $\delta = 39.68$ . Однако, заметим, что для этого режима течения величина  $c_f$  невелика, так что трение не вносит существенного вклада в расчет сопротивления цилиндра. На рис. 5.15 представлено сравнение значений коэффициента  $c_h$ . Для S-модели видно удовлетворительное согласие для  $\delta = 1.59$  и отличное для  $\delta = 39.68$ , в то время как для модели БГК имеет место большое отличие.

Таким образом, для расчета коэффициентов  $c_p$ ,  $c_f$  и  $c_h$  неучет внутренних степеней свободы не оказывает существенного влияния на точность получаемых результатов. Особенно удивительным этот результат кажется для расчета теплопередачи на поверхности тела. Однако при выбранной низкой температуре поверхности  $T_w$  поток тепла, связанный с вращатель-

ными и колебательными степенями свободы, невелик, и по-видимому не вносит заметного вклада в общее значение.

При этом в поле течения различие между результатами расчетов по моделям одноатомного газа и расчетом ПСМ значительны. Так, профиль температуры на фронте ударной волны заметно отличается, что и ожидалось ввиду отличия значений показателя адиабаты.

### 5.3.3 Выводы

Таким образом, впервые показана хорошая точность  $S$ -модельного кинетического уравнения в задачах гиперзвукового обтекания затупленных тел, включая задачу определения теплообмена на поверхности, и о применимости выбранного подхода к построению скоростной сетки.

## 5.4 Расчет обтекания ВКА ЦАГИ

### 5.4.1 Постановка задачи

В данном разделе точность и надежность счета разработанного комплекса программ “Несвета-3Д” иллюстрируется на задаче обтекания воздушно-космического аппарата (ВКА) ЦАГИ. Модель ВКА имеет сложную форму и состоит из фюзеляжа с затупленным носом, двух крыльев, вертикального киля и щитка. Общая длина тела со щитком - 10 метров, см. рис. 5.16. Ранее, обтекание модели ВКА потоком воздуха в режиме сплошной среды рассматривалось в работе [225].

Конкретный режим обтекания модели ВКА задается выбором высоты полета  $H$ , угла атаки  $\alpha$ , скорости либо числа Маха набегающего потока и

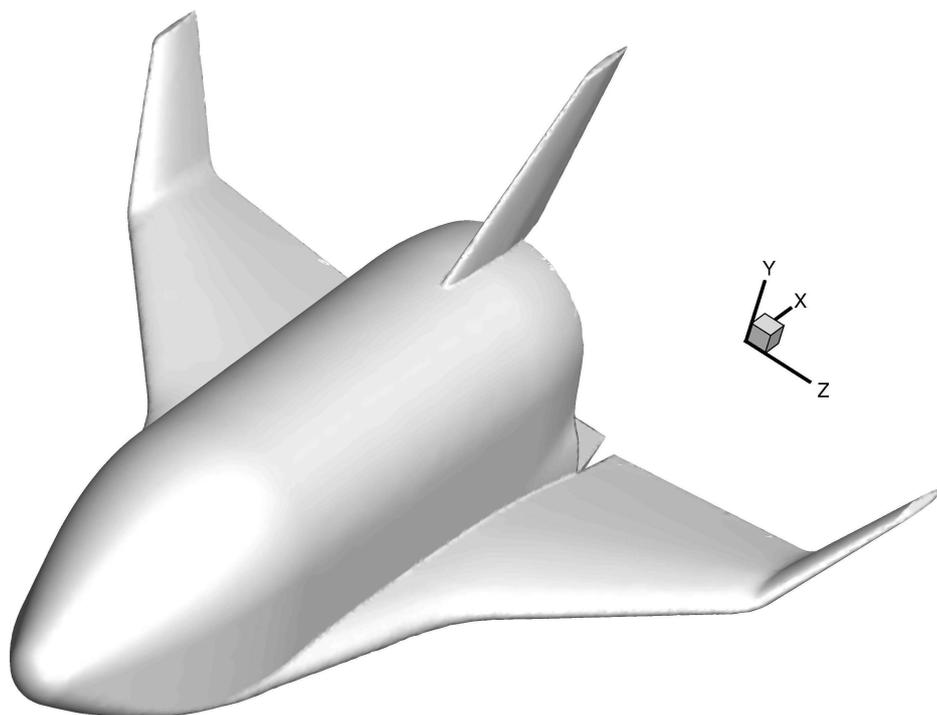


Рисунок 5.16 – Геометрия воздушно-космического аппарат (ВКА) ЦАГИ.

температуры поверхности. В настоящем разделе рассматриваются высоты полета от 90 до 100 км, углы атаки  $\alpha = 0 \dots 25$  и скорости потока от 1500 до 7900 км/ч (первая космическая скорость). Как правило, температура поверхности принималась равной  $T_w = 5T_\infty$ .

В дальнейшем в расчетах, в качестве масштаба длины принималось  $l_* = 1$  м, в качестве масштабов  $p_*$ ,  $T_*$  использовались значения давления  $p_\infty$  и температуры  $T_\infty$  в набегающем потоке.

#### 5.4.2 Построение расчетной сетки

Для проведения расчетов были построены две сетки в физическом пространстве с использованием пакета Ansys ICEM CFD. Первая сетка являлась гибридной неструктурированной со сгущением к носку тела и поверх-

ностям большой кривизны, см. рис. 5.17, 5.18. Вблизи поверхности вводился призматический слой толщиной 4 ячейки, высота каждой ячейки - 20 мм. Остальная часть расчетной области заполнялась тетраэдрами и пирамидами. Общее число пространственных ячеек равнялось  $N_{space} \approx 404 \times 10^3$ , из которых  $321 \times 10^3$  — тетраэдры,  $80 \times 10^3$  — призмы, остальные ячейки — пирамиды.

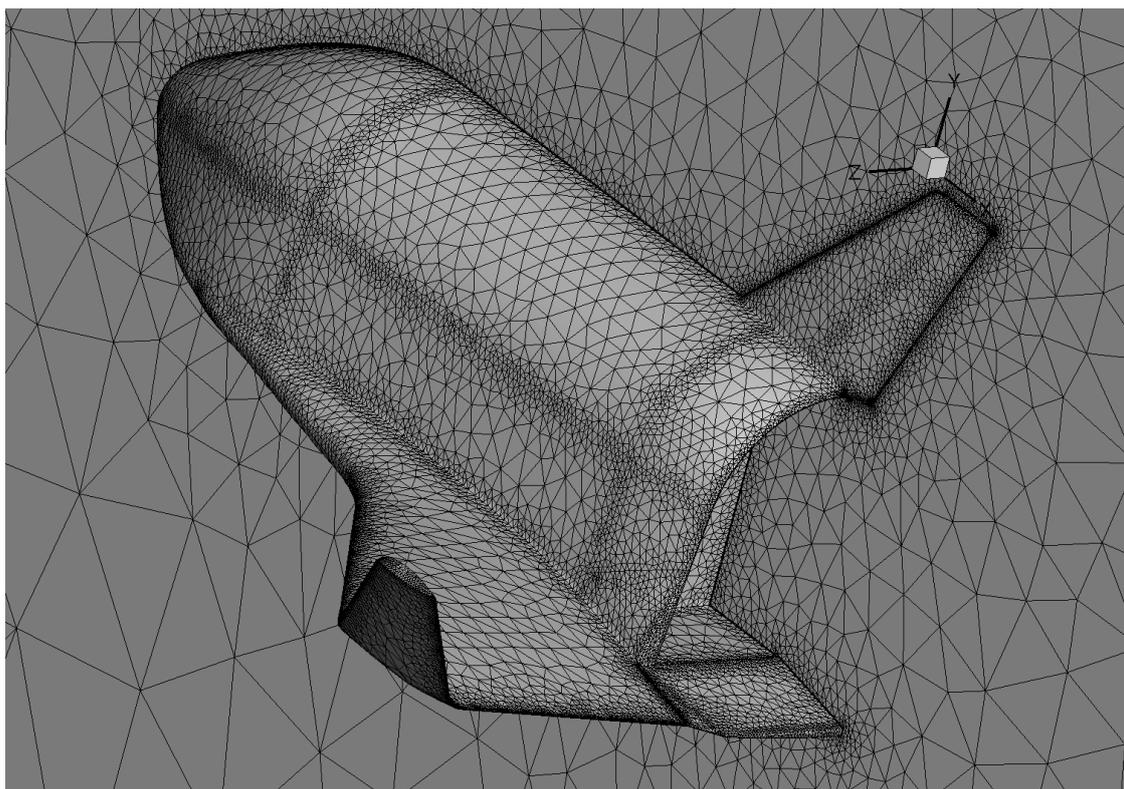


Рисунок 5.17 – Тетра-призматическая сетка для расчета обтекания ВКА, вид сзади.

Вторая сетка являлась многоблочной гексаэдральной и состояла из 453 тысяч ячеек. Для упрощения ее построения исходная геометрия была несколько упрощена в районе заднего щитка. Первоначальная версия топологии была создана А.А. Рыжовым и А.А. Савельевым (ЦАГИ им. проф. Н.Е. Жуковского) в 2013 году в рамках работы над “мегагрантом” в МФТИ, и в дальнейшем редактировалась автором. Было создано несколько версий

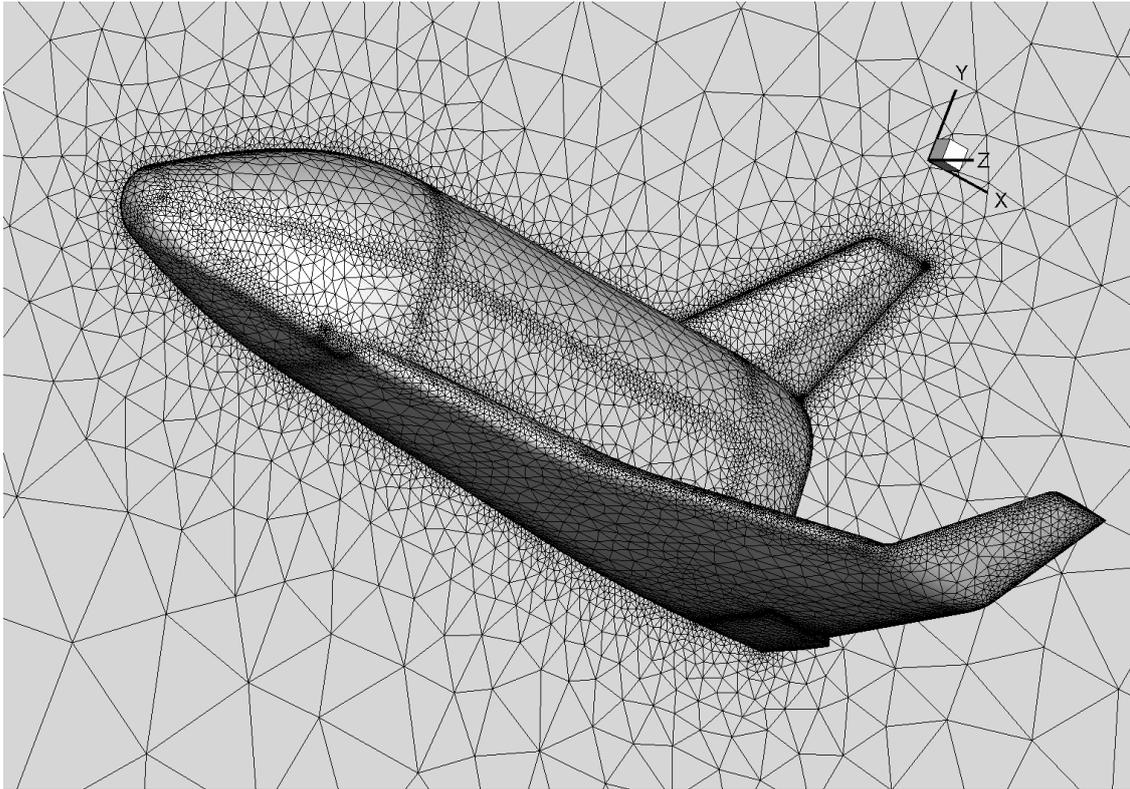


Рисунок 5.18 – Тетра-призматическая сетка для расчета обтекания ВКА, вид сбоку.

топологии различной сложности. В расчетах в основном использовалась версия, представленная на рис. 5.19, и состоящая из 159 блоков. Общее количество ячеек равнялось 454 тысячам. На рис. 5.20, 5.21 представлены различные ракурсы полученной гексаэдральной сетки.

Остановимся на сравнительном анализе пространственных сеток. Основным преимуществом неструктурированной сетки является относительная простота построения, возможность сгущать ячейки к острым краям геометрии, и хорошее качество ячеек. Основным минусом неструктурированной сетки является в целом большее число ячеек по сравнению с многоблочной гексаэдральной сеткой и невозможность хорошего разрешения фронта ударной волны, что может оказывать негативное влияние на точность расчета теплопередачи. В свою очередь, гексаэдральная сетка обеспечивает

отличную точность счета на фронте ударной волны перед ВКА, но при этом имеет большое количество ячеек плохого качества в районе законцовки крыла и щитка и очень сложна для построения.

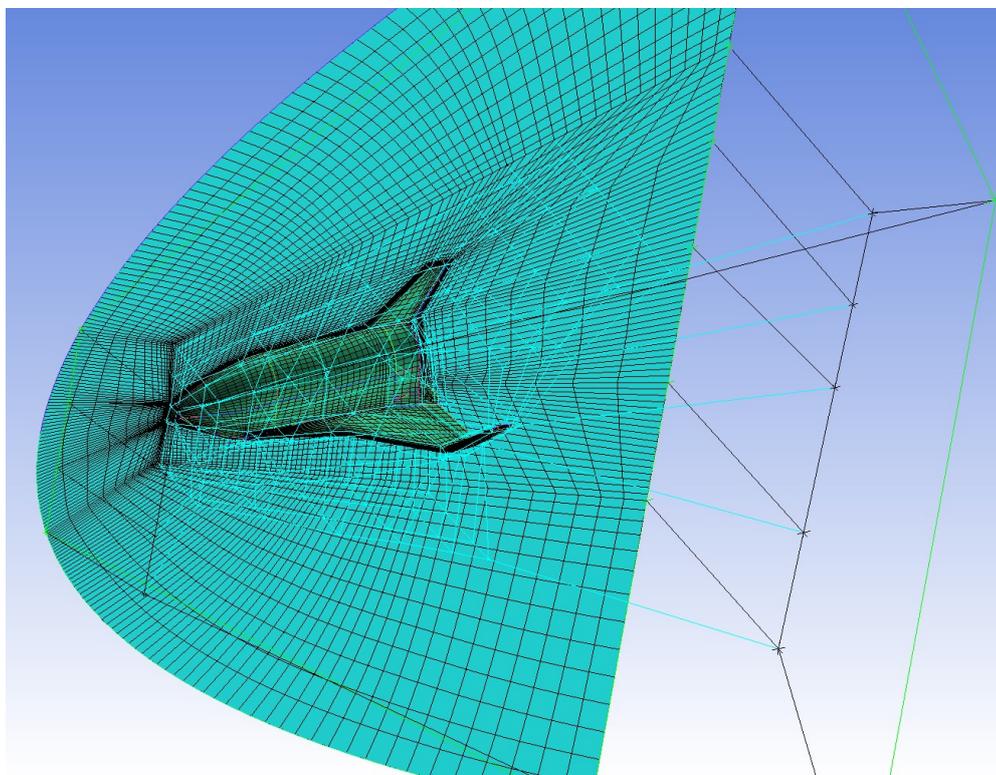


Рисунок 5.19 – Топология многоблочной гексаэдральной сетки при расчете обтекания ВКА.

Расчетная сетка в скоростном пространстве строилась аналогично случаю расчета обтекания цилиндра.

### 5.4.3 Сравнение с кодом SMILE

В первой серии расчетов проводилось сравнение с кодом SMILE [42], вычисления которым проводились Е.А. Бондарем, П.В. Ващенко и А.А. Шевыриным (ИТПМ им. С.А.Христиановича СО РАН) в рамках проекта РФФИ 15-07-02986 (руководитель проекта В.А. Титарев). Расчеты прово-

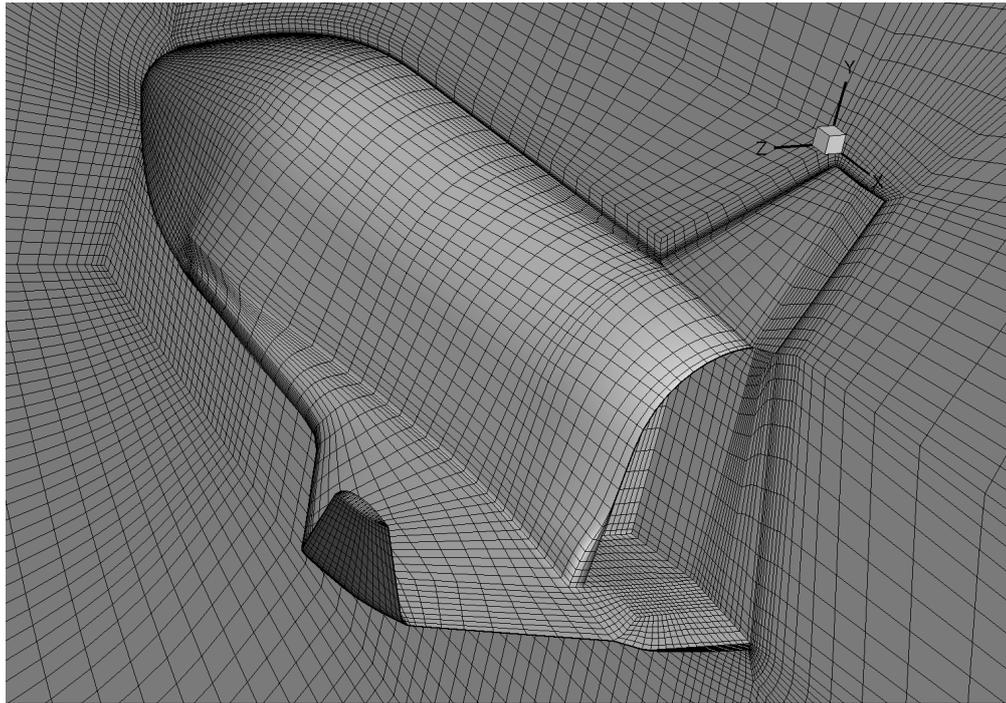


Рисунок 5.20 – Гексаэдральная сетка для задачи обтекания ВКА, вид сзади.

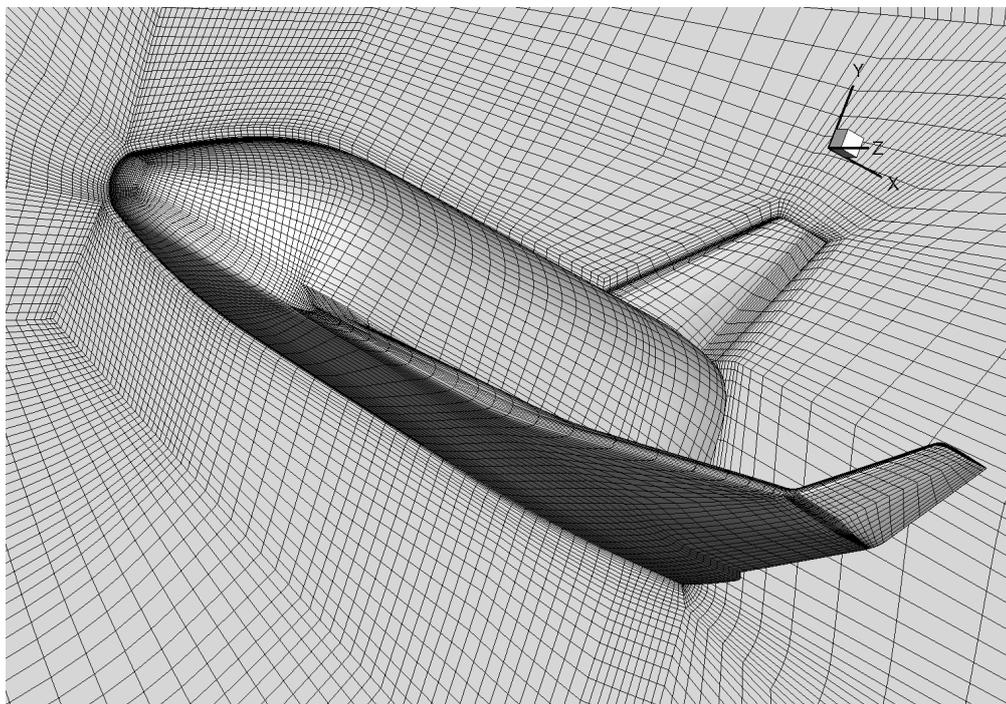
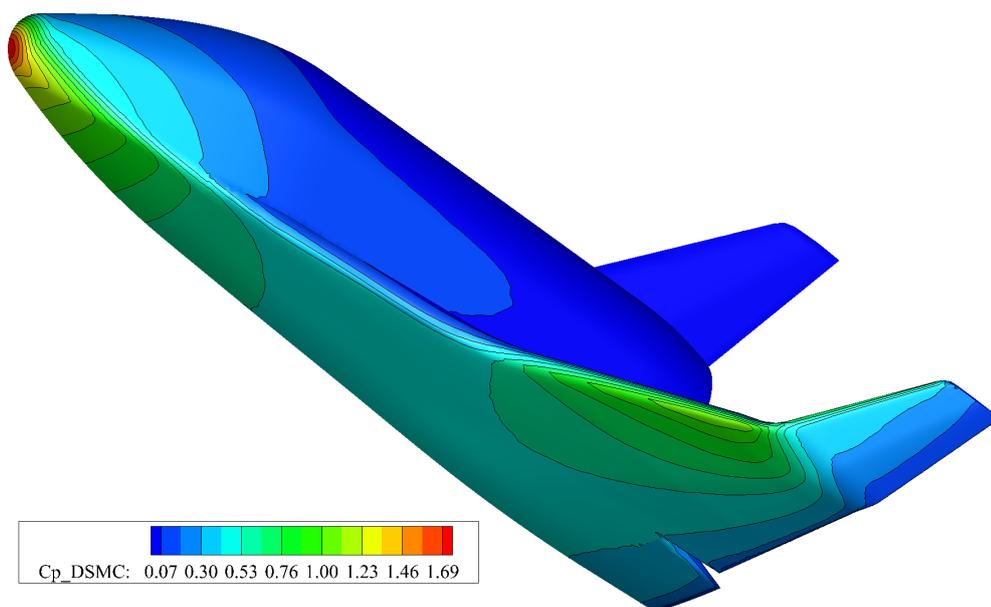


Рисунок 5.21 – Гексаэдральная сетка для задачи обтекания ВКА, вид сбоку.

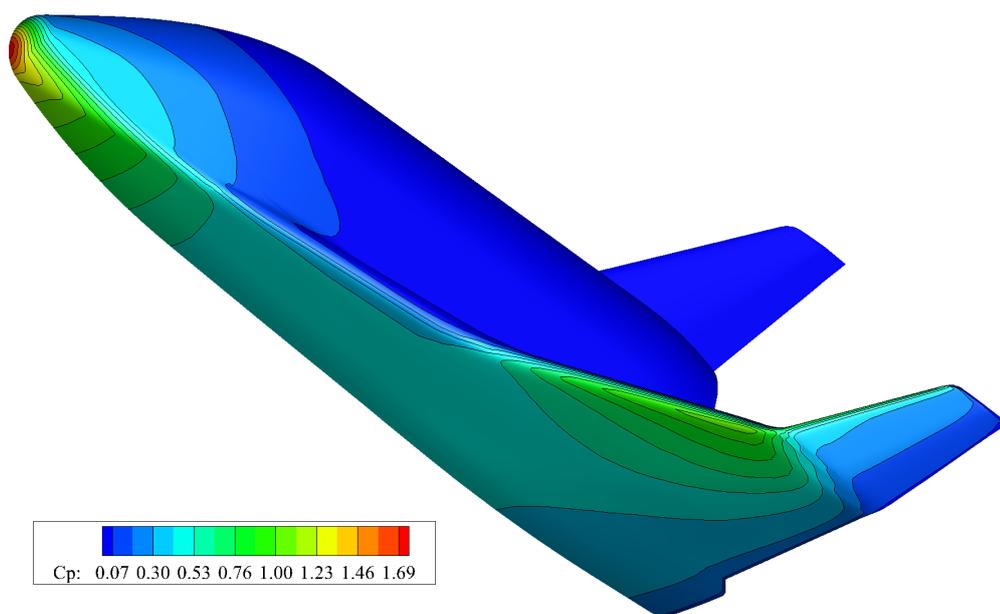
дились для высоты 90 км в рамках модели одноатомного газа, но для молярной массы  $28.8 \cdot 10^{-3}$  моль/кг· моль, соответствующей обтеканию воздухом. В расчетах ПСМ не учитывались внутренние степени свободы. Параметры набегающего потока: температура  $T = 186.87$  К, давление  $p = 0.1836$  Па, числа Маха набегающего потока  $M_\infty = 5, 10$  ( $u_\infty = 1496,2992$  м/с). Температура поверхности принималась равной  $T_w = 934.35$  К (холодная поверхность). Использовался безразмерный закон вязкости  $\mu = T^{0.734}$ . Значение параметра разреженности на метр длины  $\delta = 38/\text{м}$ .

Расчеты проводились для углов атаки 0 и 25 градусов. Рассмотрим результаты для угла атаки  $\alpha = 25$  как наиболее репрезентативного для реальных приложений.

На рис. 5.22 – 5.24 представлены результаты расчетов коэффициентов давления, трения и теплопередачи для  $M_\infty = 5$  и  $\alpha = 25$ . Видно хорошее согласие результатов для всех расчетных величин. Как и ожидалось, наибольший нагрев поверхности происходит на носке аппарата. Хвост аппарата находится в тени фюзеляжа, вследствие чего поток энергии на него значительно ниже. На рис. 5.25 – 5.27 представлены результаты расчетов для гиперзвукового режима  $M_\infty = 10$  и  $\alpha = 25$ . Видно отличное согласие результатов для коэффициента давления  $c_p$ . Для коэффициента трения  $c_f$  расчет ПСМ дает более высокие значения на передней кромке крыла. В то же время вблизи носка модели кинетическое решение является более гладким; в решении ПСМ заметен некоторый “шум” в распределении по поверхности. Для наиболее сложной в расчете величины, коэффициента теплопередачи  $c_h$ , наблюдается удовлетворительное согласие; при этом на носке модели расчет ПСМ дает несколько большие значения  $c_h$ , которые близки к решению задачи пакетом “Несветай-3Д” с помощью менее точной

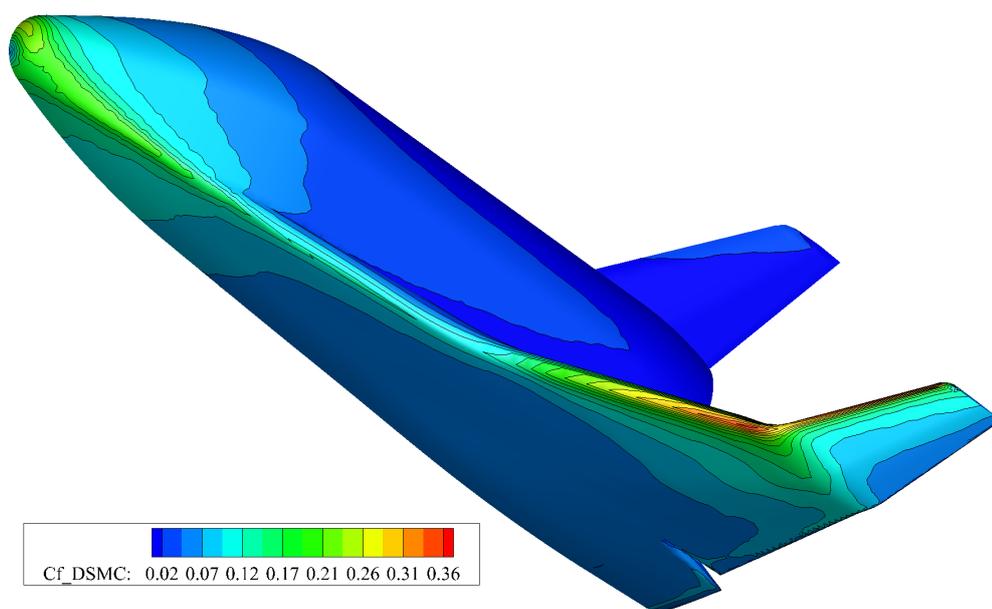


(a) расчет кодом SMILE [42]

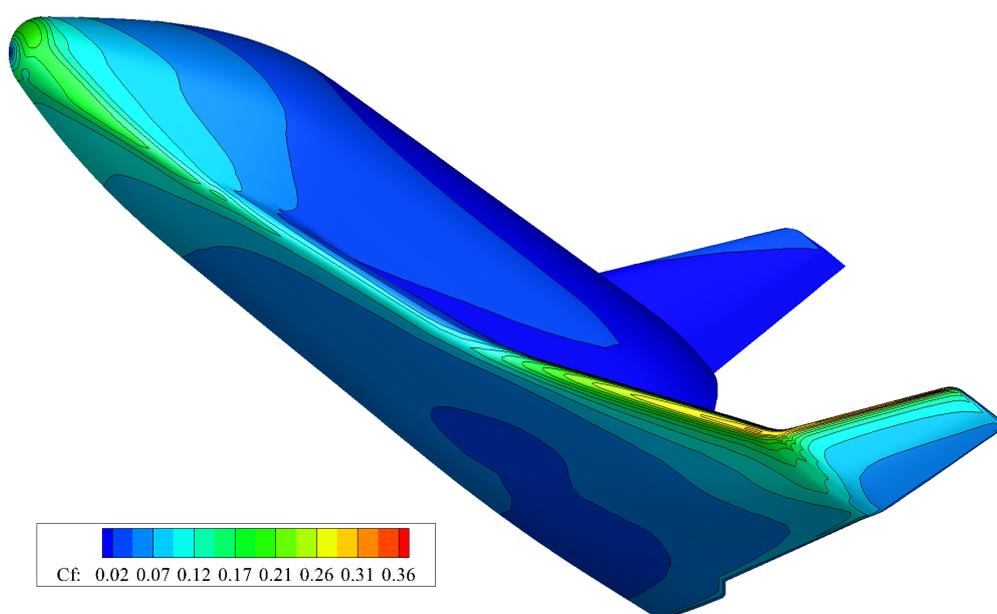


(б) расчет кодом "Несветаи-3Д"

Рисунок 5.22 – Коэффициент давления  $c_p$  для  $M_\infty = 5$ ,  $\alpha = 25^\circ$ ,  
 $T_w/T_\infty = 5$ ,  $\mu = T^{0.734}$

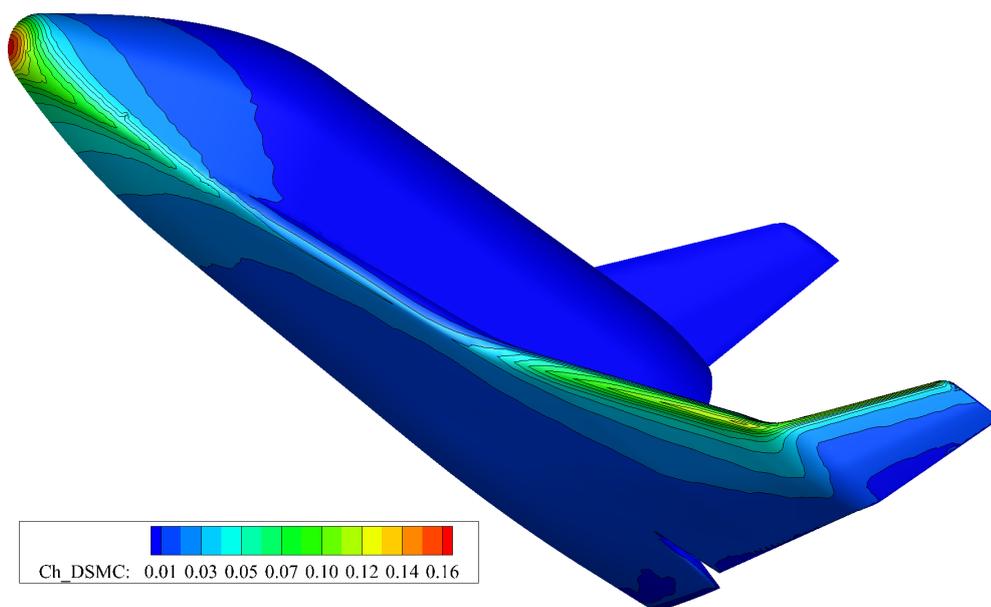


(a) расчет кодом SMILE [42]

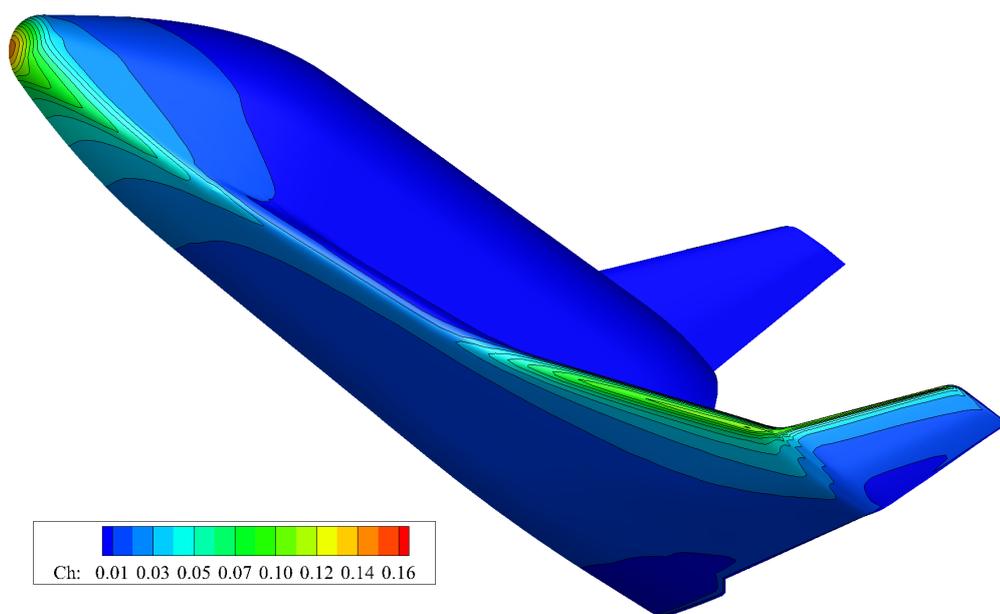


(б) расчет кодом “Несветаи-3Д”

Рисунок 5.23 – Коэффициент трения  $c_f$  для  $M_\infty = 5$ ,  $\alpha = 25$ ,  $T_w/T_\infty = 5$ ,  
 $\mu = T^{0.734}$ .



(а) расчет кодом SMILE



(б) расчет кодом “Несветай-3Д”

Рисунок 5.24 – Коэффициент теплопередачи  $c_h$  для  $M_\infty = 5$ ,  $\alpha = 25^\circ$ ,  
 $T_w/T_\infty = 5$ ,  $\mu = T^{0.734}$ .

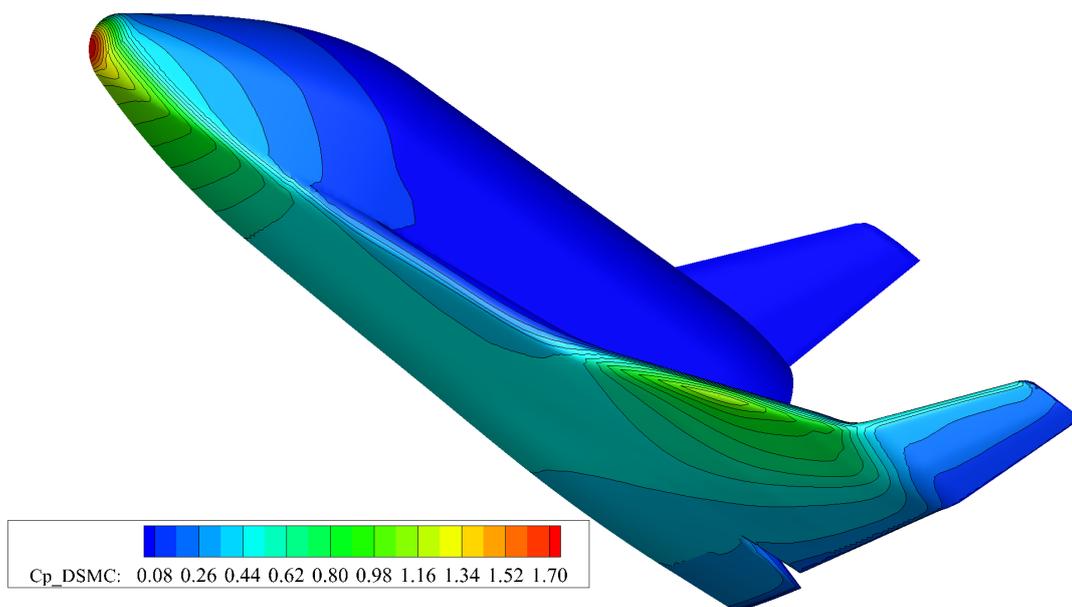
схемы первого порядка. В целом, получено удовлетворительное согласие для расчета по S-модели и методом ПСМ для задачи обтекания трехмерного тела сложной формы на используемой грубой расчетной сетке.

#### 5.4.4 Расчет входа в атмосферу с первой космической скоростью

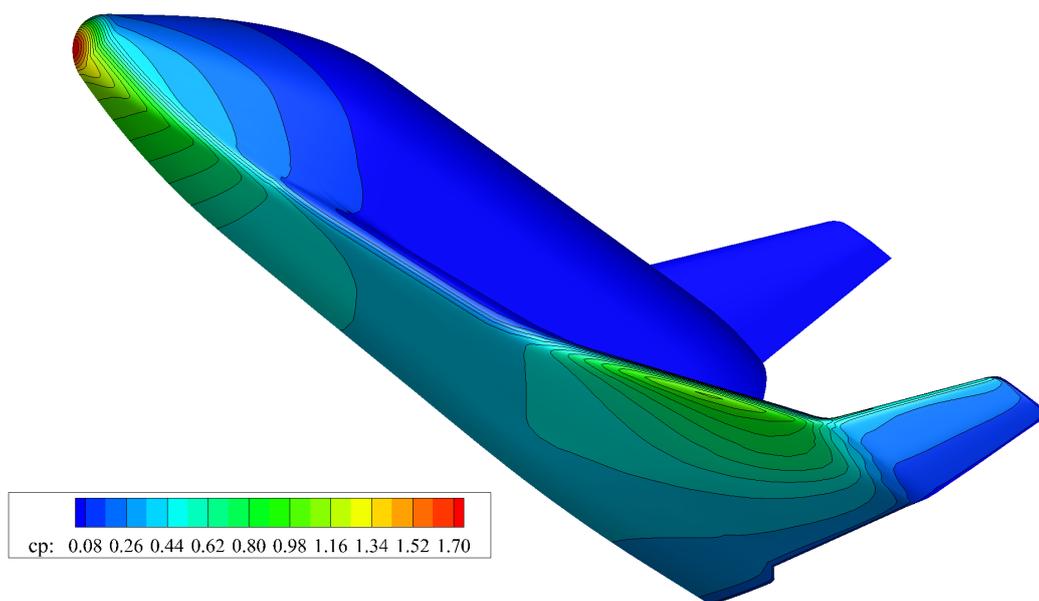
В качестве демонстрации возможностей пакета “Несветай-3Д” рассмотрим задачу расчета обтекания для высоты полета 100 км и скорости набегающего потока 7900 м/с, которая соответствует входу аппарата в атмосферу с первой космической скоростью (для воздуха  $M_\infty = 28$ ) и представляет наибольший интерес. Остальные параметры задачи  $\rho_\infty = 5.5507 \times 10^{-8}$  кг/м<sup>3</sup>,  $T_\infty = 196.6$  К, температура поверхности  $T_w = 983$ К. При переходе к безразмерным переменным и с учетом молярной массы воздуха  $28.8e-3$  моль/кг· моль, получаем безразмерное значение скорости потока  $S_\infty = 23.5$ ; при этом параметр разреженности на метр длины  $\delta/m = 0.71$ . Угол атаки принимался равным 25 градусам, что является наиболее репрезентативным для реальных приложений. В расчетах использовалась модель твердых сфер  $\mu = \sqrt{T}$ .

Расчетная сетка в скоростном пространстве состояла из 45 тысяч узлов, так что при расчете обтекания на гексаэдральной пространственной сетке для скорости потока  $U_\infty = 7900$  м/с общее число узлов в 6-мерной сетке равнялось 19,6 миллиардам.

На рис. 5.29–5.31 для обеих сеточных моделей приведены распределения коэффициентов давления, трения и теплоотдачи по поверхности аппарата. Как и ожидалось, наибольший нагрев происходит на носке аппарата и

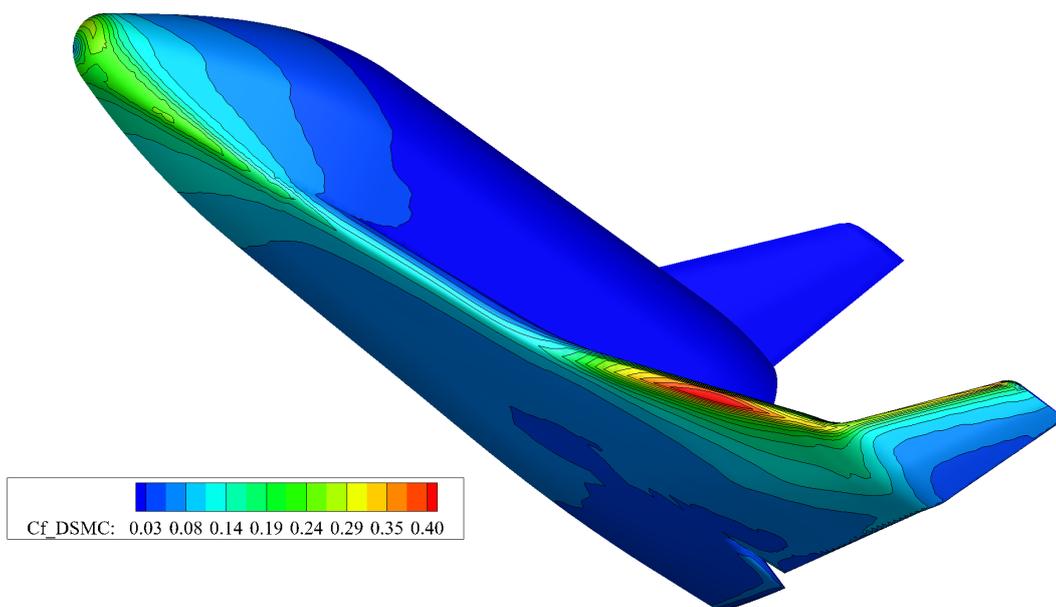


(a) расчет кодом SMILE [42]

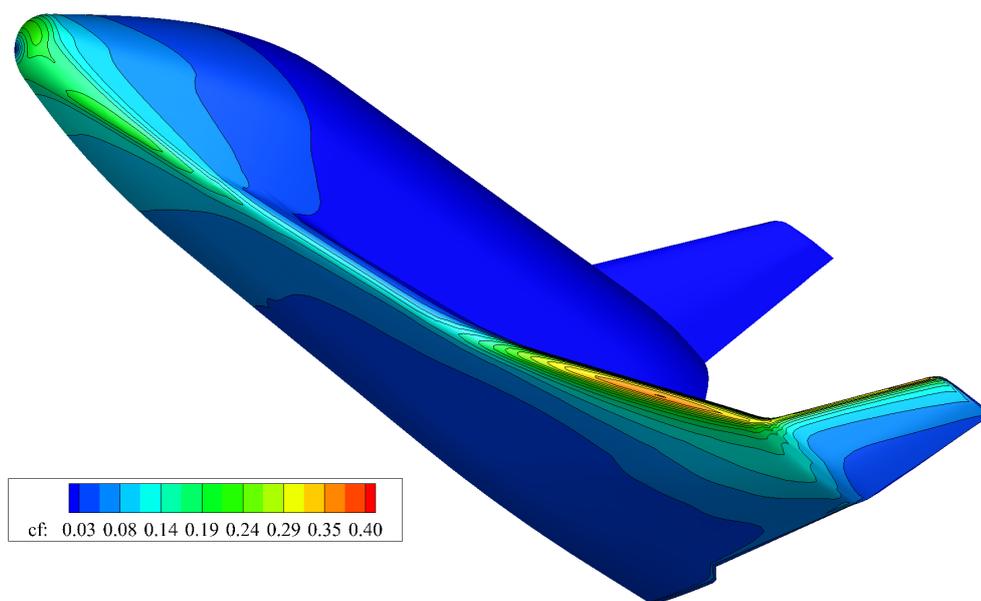


(б) расчет кодом "Несветай-3Д"

Рисунок 5.25 – Коэффициент давления  $c_p$  для  $M_\infty = 10$ ,  $\alpha = 25$ ,  
 $T_w/T_\infty = 5$ ,  $\mu = T^{0.734}$ .

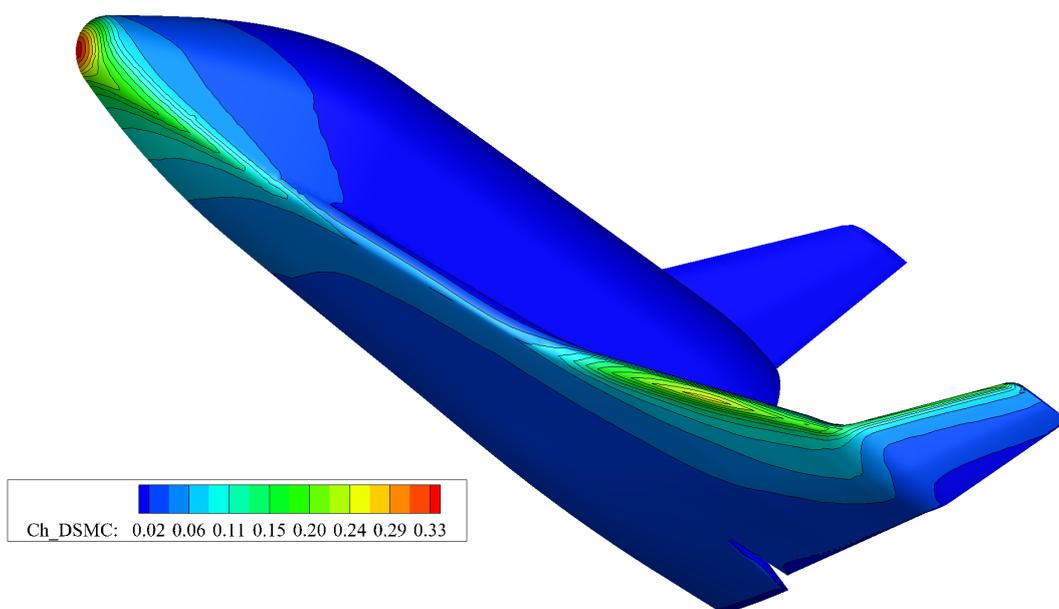


(a) расчет кодом SMILE [42]

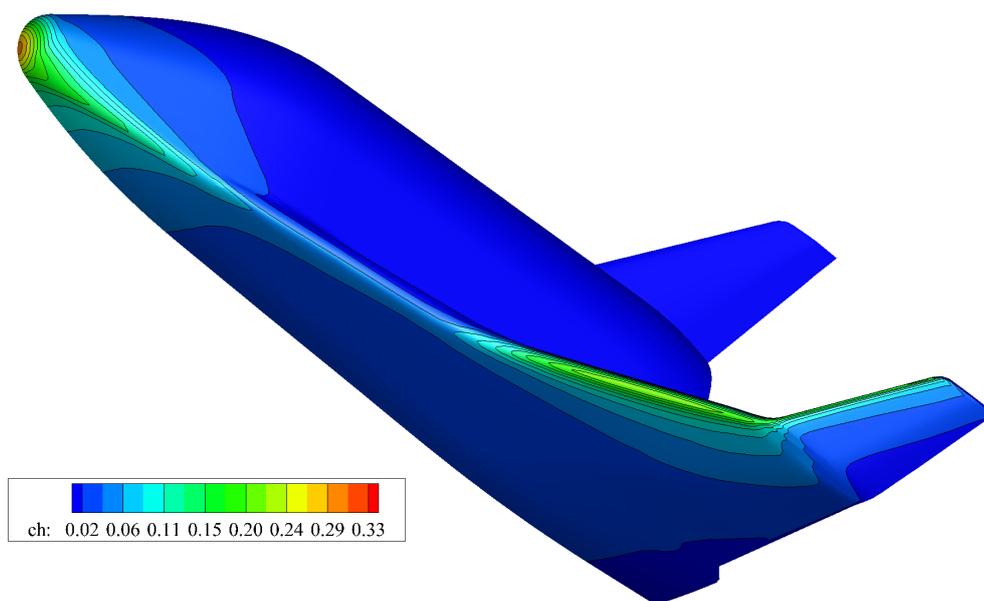


(б) расчет кодом “Несветаи-3Д”

Рисунок 5.26 – Коэффициент трения  $c_f$  для  $M_\infty = 10$ ,  $\alpha = 25$ ,  $T_w/T_\infty = 5$ ,  
 $\mu = T^{0.734}$ .

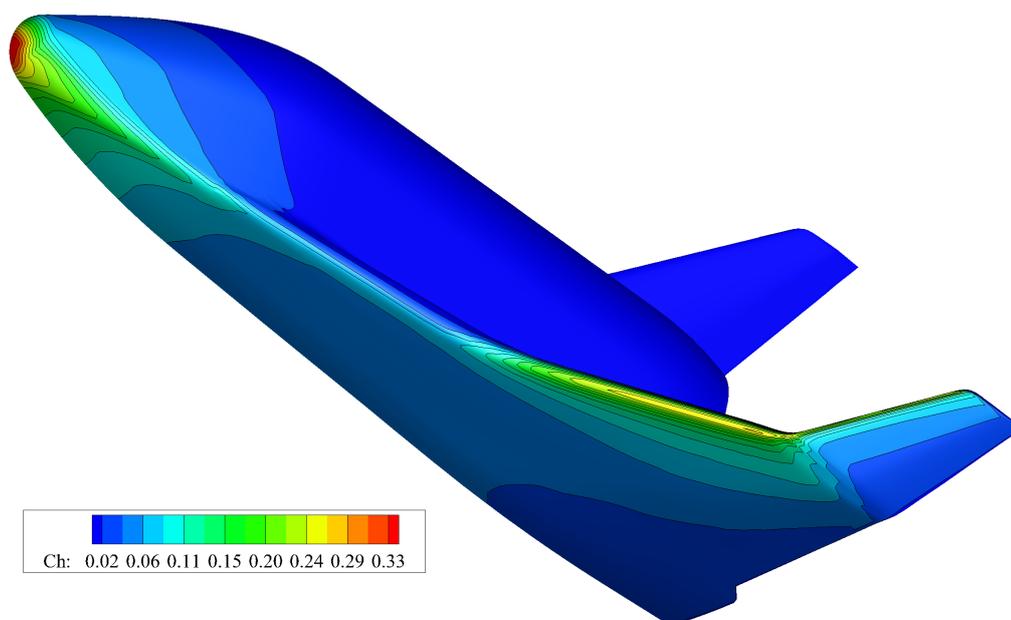


(a) расчет кодом SMILE



(б) расчет кодом "Несветай-3Д"

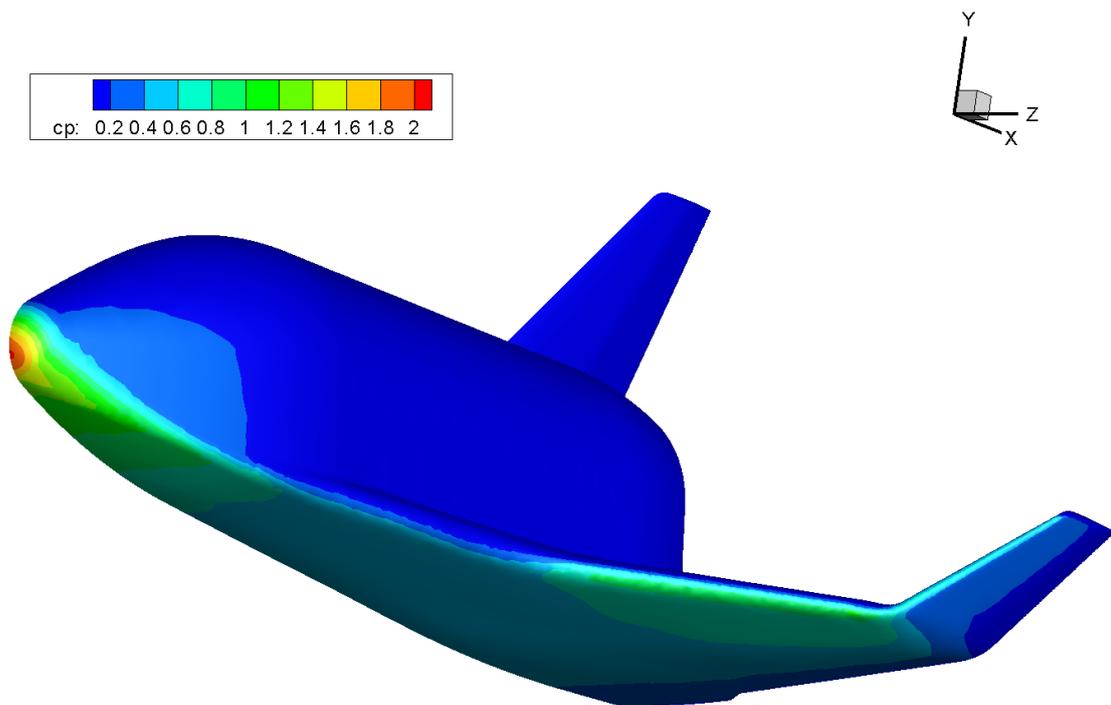
Рисунок 5.27 – Коэффициент теплопередачи  $c_h$  для  $M_\infty = 10$ ,  $\alpha = 25^\circ$ ,  
 $T_w/T_\infty = 5$ ,  $\mu = T^{0.734}$ .



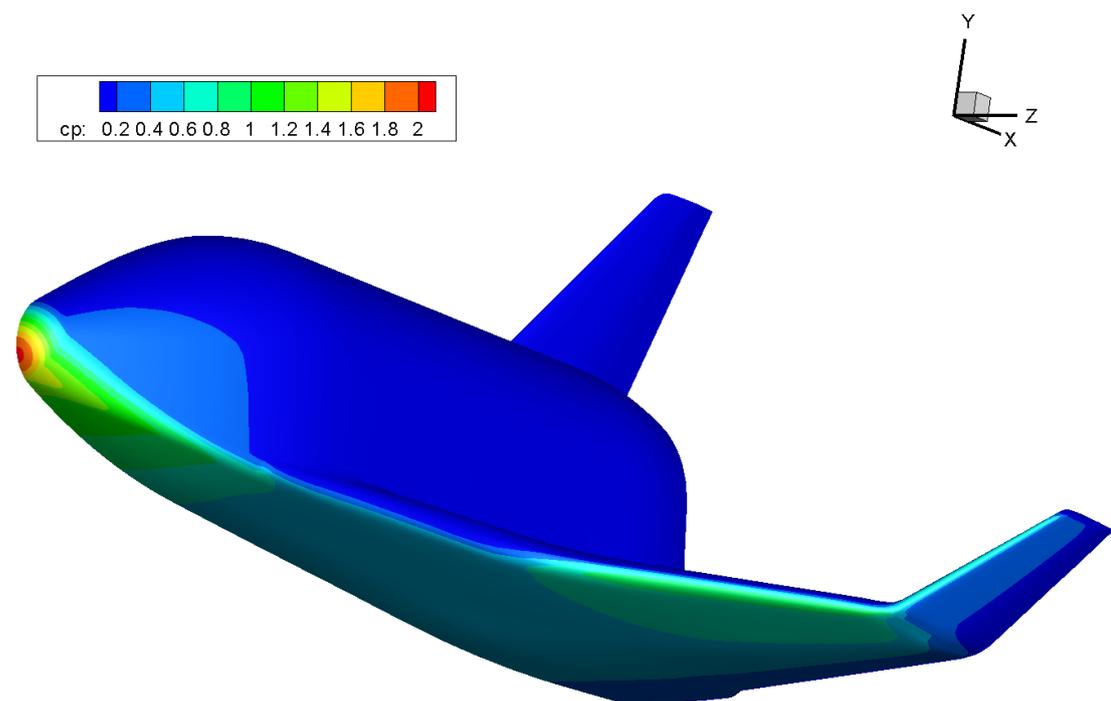
(a) расчет кодом “Несветай-3Д” с помощью схемы первого порядка точности

Рисунок 5.28 – Расчет коэффициент теплопередачи  $c_h$  для  $M_\infty = 10$ ,  
 $\alpha = 25$ .

на передней кромке крыльев. Хвост аппарата находится в тени фюзеляжа, вследствие чего поток энергии на него значительно ниже. Влияние типа сетки проявляется на распределении коэффициента трения, в то время как для коэффициента давления и теплопередачи использование тетра-призматической сетки дает достаточно аккуратные результаты. В целом, гексаэдральная сетка лучше подходит для проведения расчетов с большими числами Маха набегающего потока, однако ее построение требует достаточно больших трудозатрат (около недели) в виду сложности геометрии тела. Построение тетра-призматической сетки требует нескольких часов, так что такой тип сеток подходит для проведения оценочных расчетов. На рис. 5.32 представлены линии уровня давления и линии тока газа. Видна типичная картина обтекания с формирующейся головной ударной волной и зоной сильного падения давления и образования возвратного течения за телом.

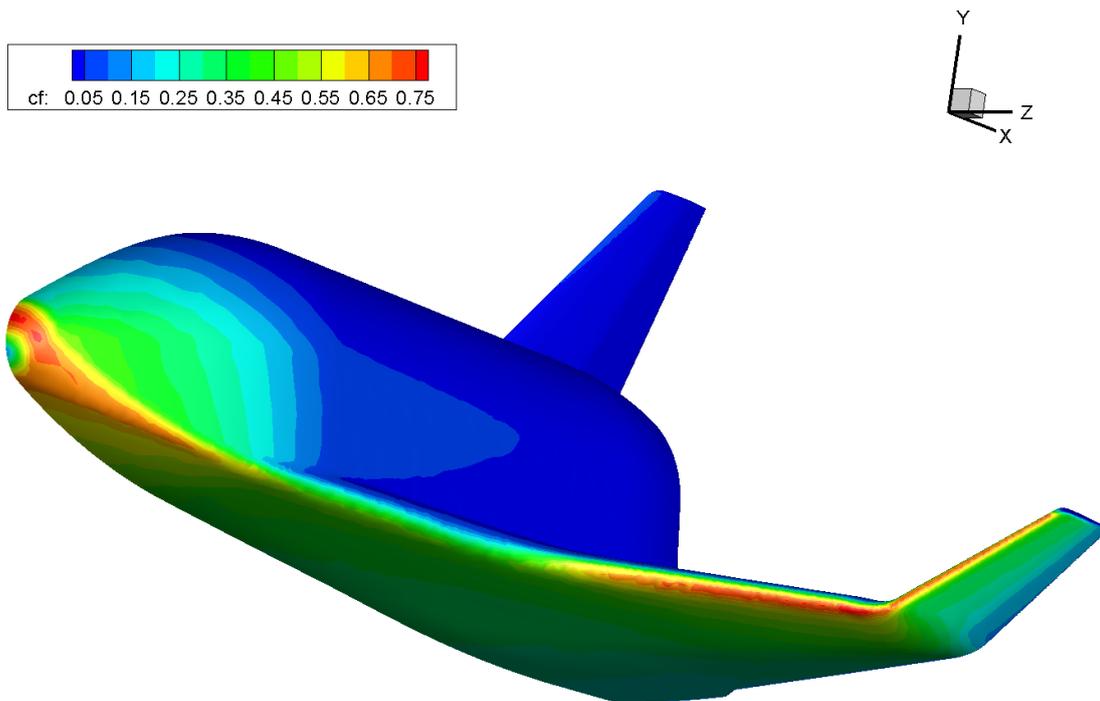


(а) Расчет на сетке тетра-призм

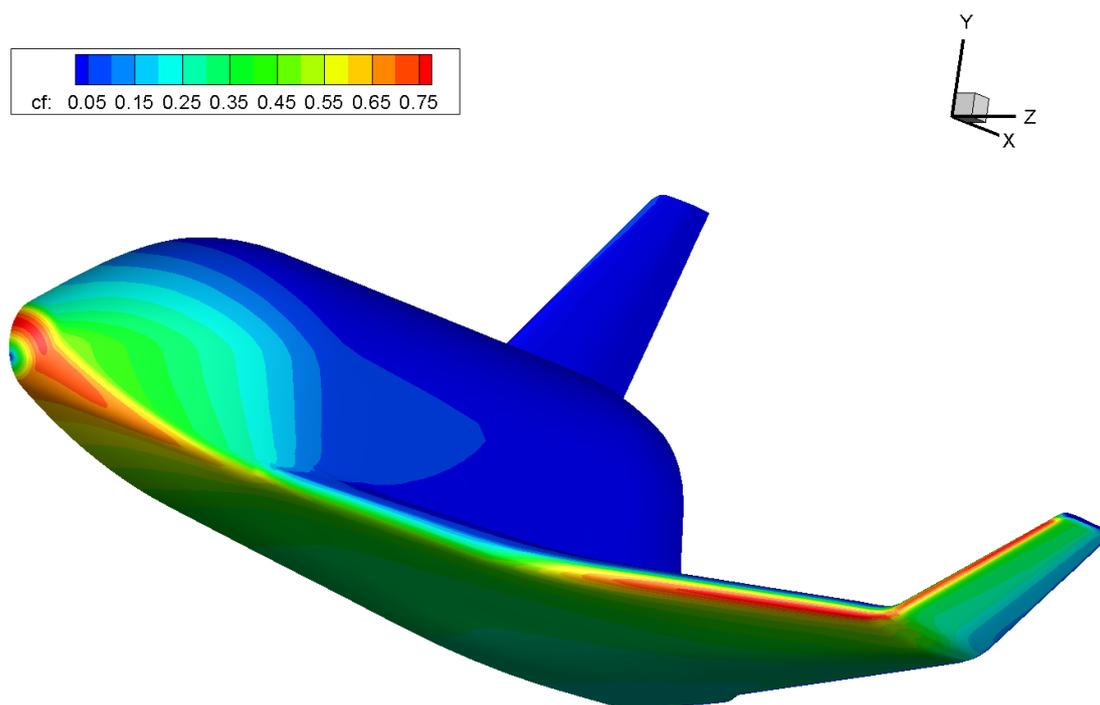


(б) Расчет на гексаэдральной сетке

Рисунок 5.29 – Распределение коэффициента давления  $c_p$  по поверхности ВКА для  $U_\infty = 7900$  м/с, высоты 100 км, угла атаки 25 градусов.

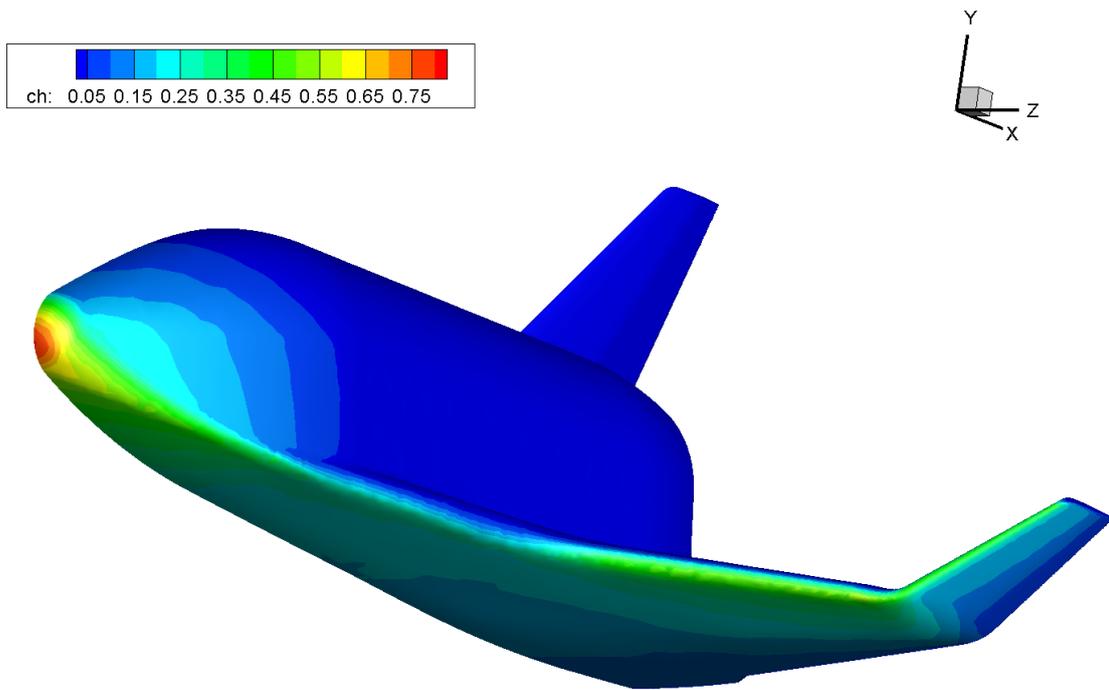


(a) Расчет на сетке тетра-призм

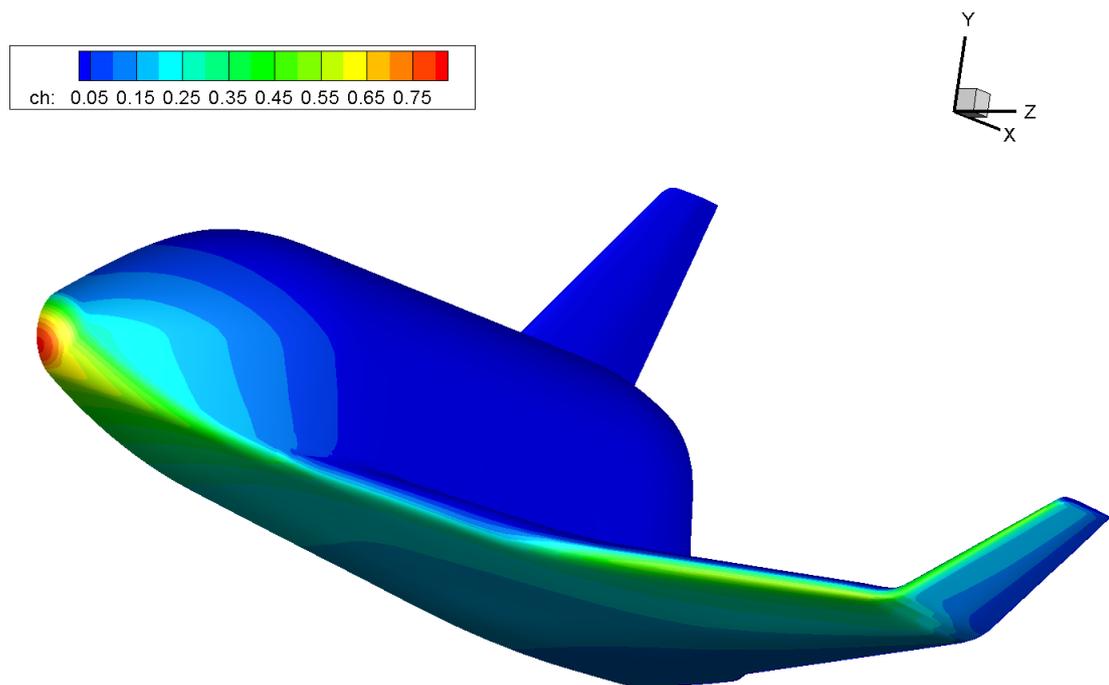


(б) Расчет на гексаэдральной сетке

Рисунок 5.30 – Распределение коэффициента трения  $c_f$  по поверхности по ВКА для  $U_\infty = 7900$  м/с, высоты 100 км, угла атаки 25 градусов.



(а) Расчет на сетке тетра-призм



(б) Расчет на гексаэдральной сетке

Рисунок 5.31 – Распределение коэффициента теплоотдачи  $c_h$  по поверхности по ВКА для  $U_\infty = 7900$  м/с, высоты 100 км, угла атаки 25 градусов.

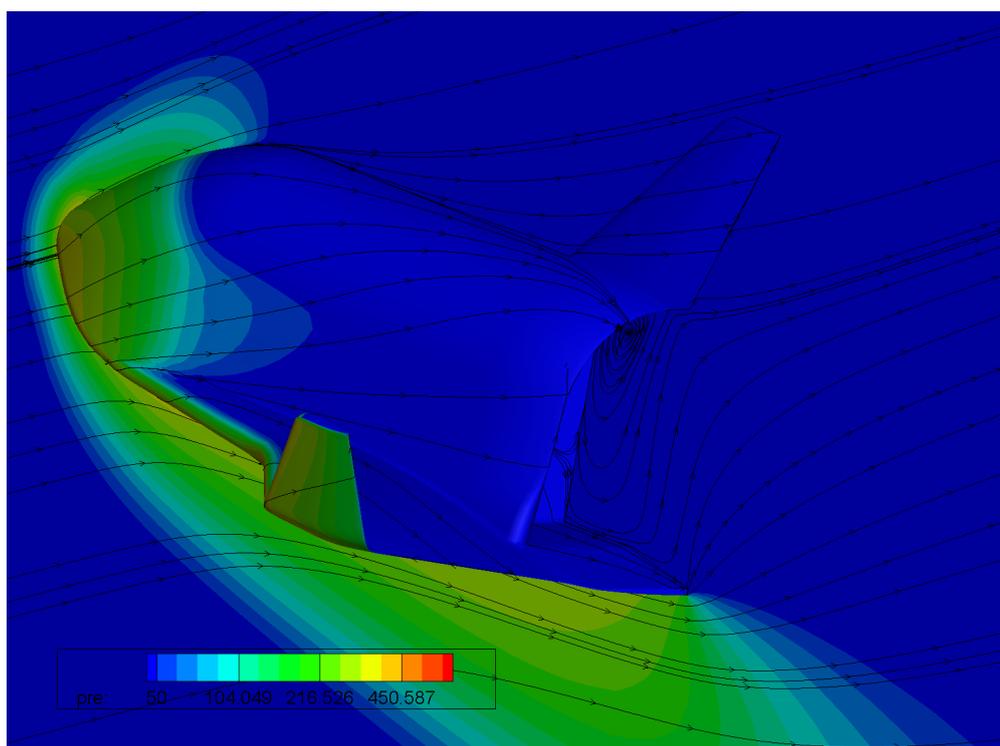
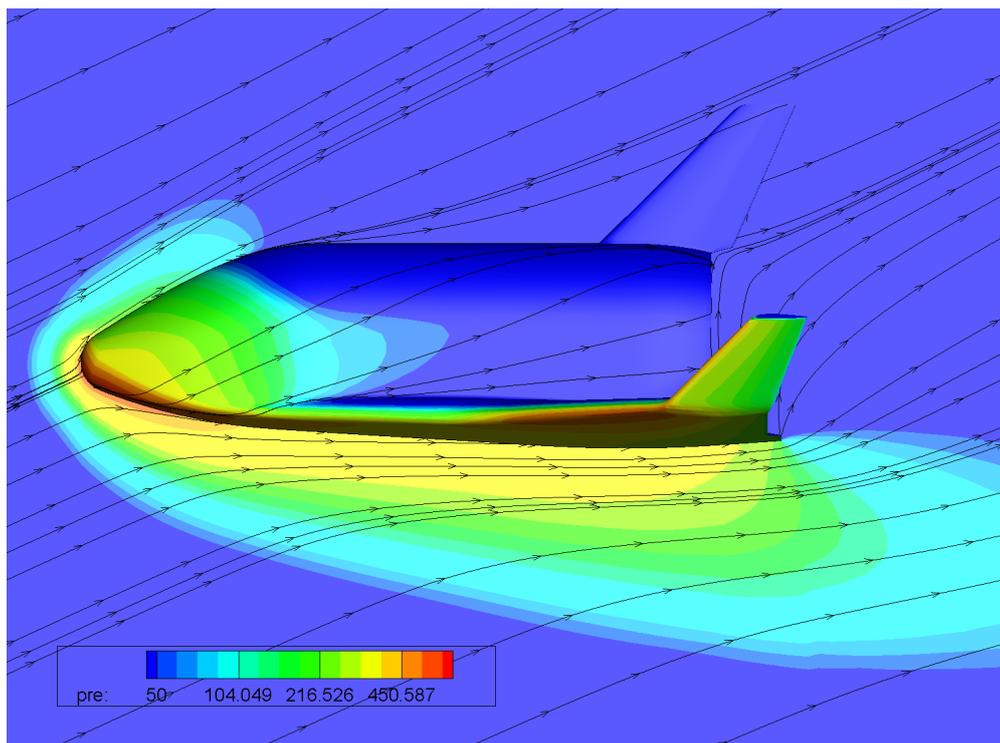


Рисунок 5.32 – Давление и линии тока для  $U_\infty = 7900$  м/с, высоты 100 км, гексаэдральной сетки.

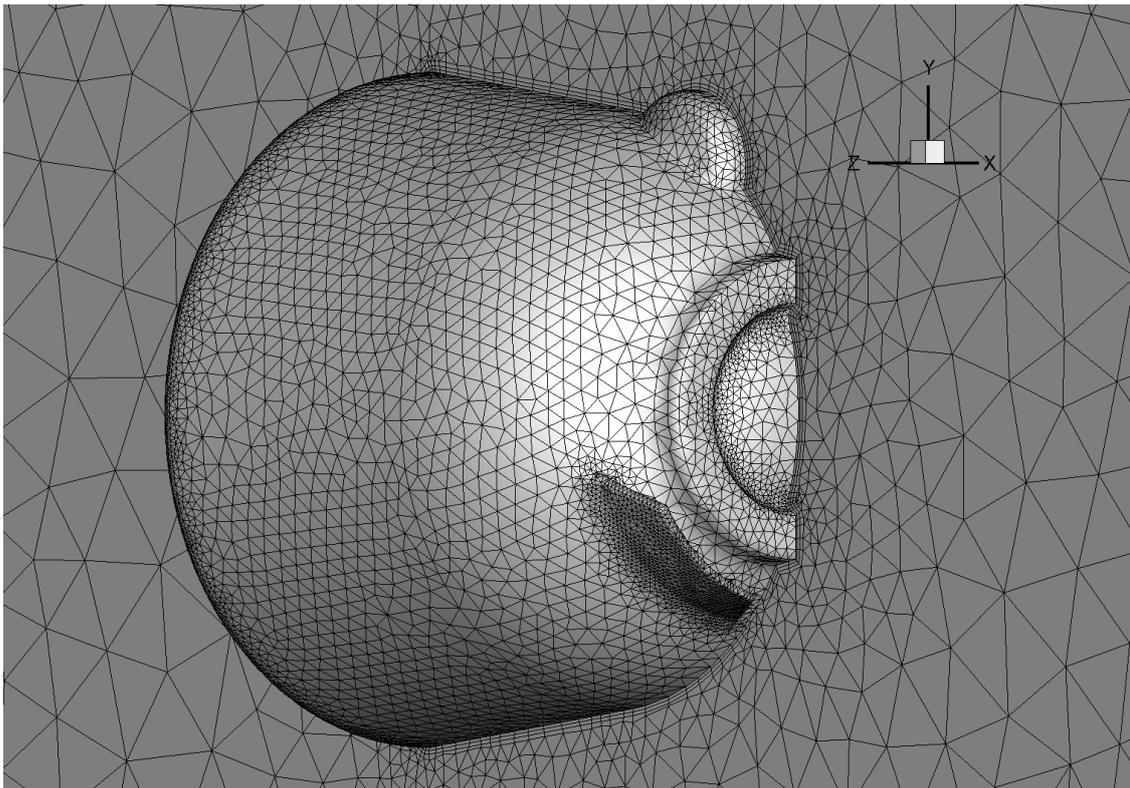
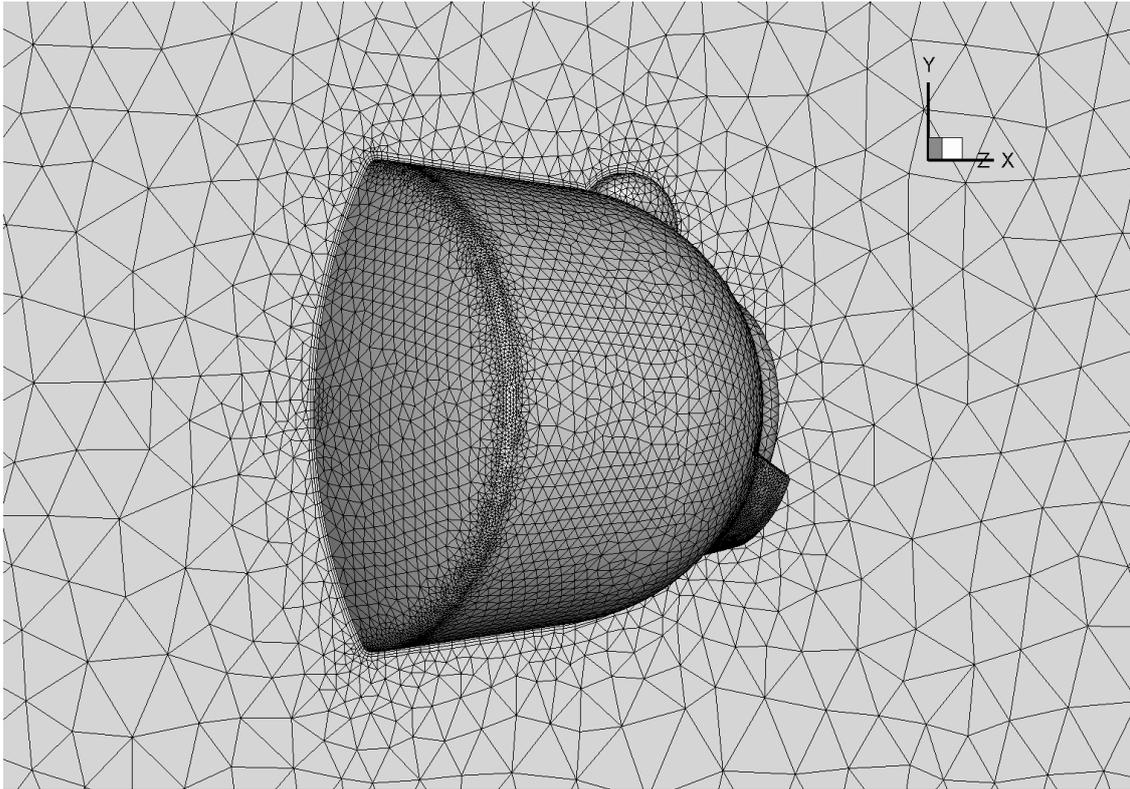


Рисунок 5.33 – Тетра-призматическая сетка в физическом пространстве для задачи обтекания затупленного сегментально – конического тела с надстройками.

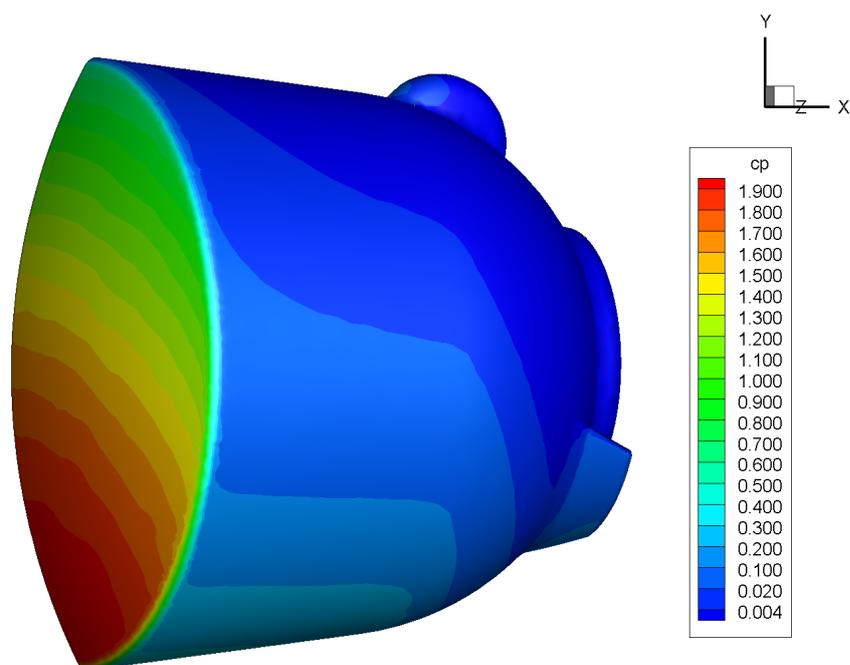


Рисунок 5.34 – Распределение коэффициента давления  $C_p$  по поверхности сегментально – конического тела.

## 5.5 Расчет обтекания сегментально-конического тела

Рассмотрим задачу обтекания модели затупленного сегментально – конического тела с надстройками. Геометрия модели и расчетная тетраэдрально – призматическая сетка в физическом пространстве представлены на рис. 5.33. Выбор полностью неструктурированной сетки обусловлен сложной геометрией тела. Общее число элементов в пространственной сетке равнялось 326 тысячам, из них 294 тысячи тетраэдров, 31,5 тысяча призм и 360 пирамид.

Все параметры потока соответствуют входу в атмосферу с первой космической скоростью и приведены в разделе 5.4.4. Общее число узлов в

6-мерной сетке равнялось 14,7 миллиардам.

На рис. 5.34–5.36 представлено распределение по поверхности тела коэффициентов давления, трения и теплопередачи. На рис. 5.37, 5.38 представлена картина течения с линиями тока. Видна типичная картинка обтекания тела гиперзвуковым потоком разреженного газа. Перед передней крышкой аппарата формируется отошедшая ударная волна, в то время как в донной области давление падает до околонулевых значений: перепад между передней и задней точками торможения составляет  $10^5$  раз. Тем не менее, программный комплекс “Несветай-3Д” позволяет построить решение задачи.

## 5.6 Тестирование масштабируемости

В заключение данной главы рассмотрим результаты тестирования масштабируемости параллельной версии кода “Несветай-3Д” на задачах внешнего обтекания на кластерах РСК-ПетаСтрим [119] и РСК-Торнадо, установленных в Межведомственном суперкомпьютерном центре РАН (МВС 10Q) и Суперкомпьютерном центре СПбПУ Петра Великого ( “Политехник - РСК ПетаСтрим”, “Политехник - РСК Торнадо”). Так, каждый узел кластера “Политехник - РСК ПетаСтрим” состоит из одного сопроцессора Intel Xeon Phi 5120D (240 гиперпотоков, частота 1,053 ГГц, 8 Гб ОЗУ). Система “Политехник - РСК Торнадо” является классической суперЭВМ на основе процессоров Intel Xeon E5-2697 v3 (14 ядер, 2,6 ГГц); в каждом узле кластера установлено два таких процессора.

Сначала рассмотрим задачу обтекания цилиндра потоком аргона для  $M_\infty = 25$ ,  $\delta = 1.6$  из раздела 5.3.2. Было выполнено две серии расче-

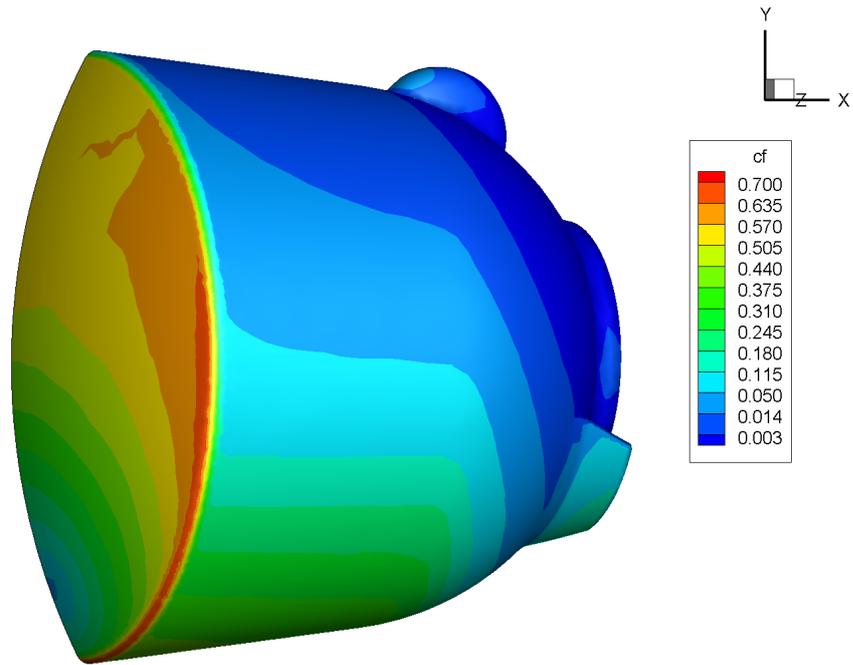


Рисунок 5.35 – Распределение коэффициента трения  $c_f$  по поверхности сегментально – конического тела.

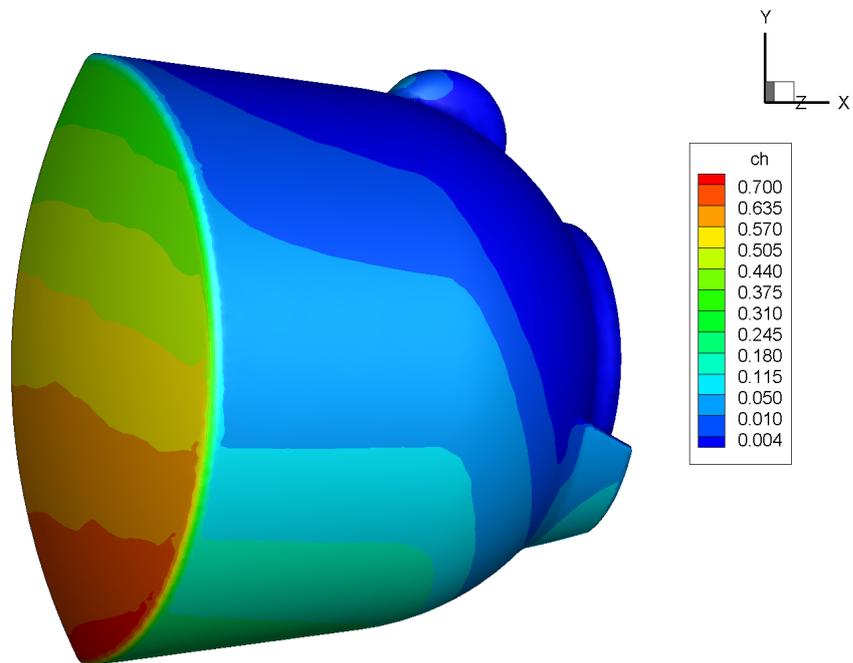


Рисунок 5.36 – Распределение коэффициента теплопередачи  $c_h$  по поверхности сегментально – конического тела.

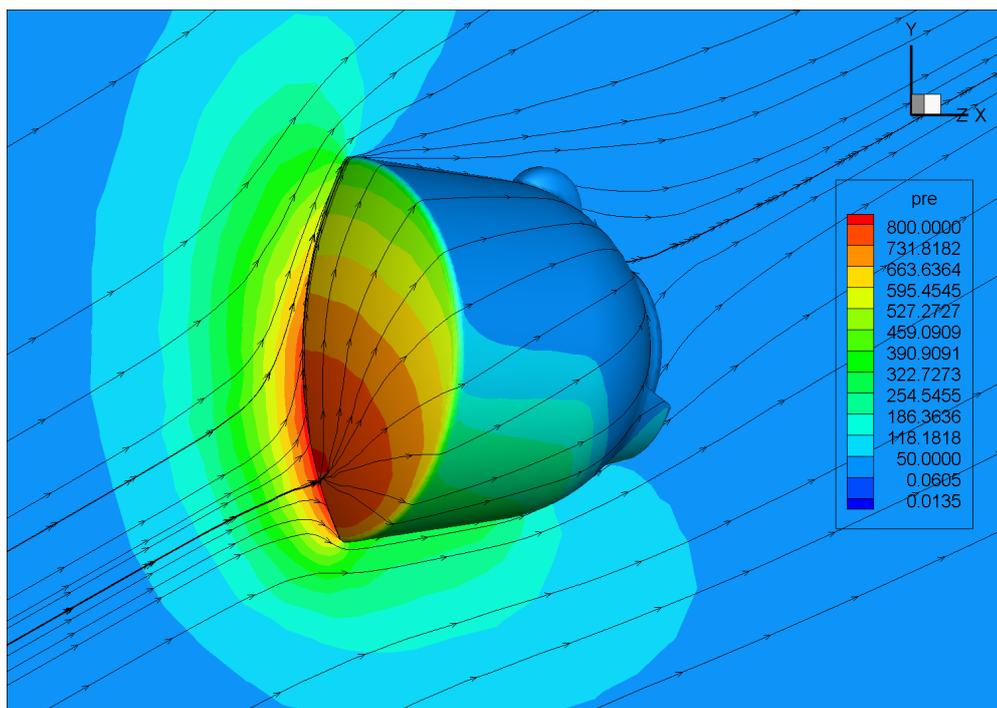


Рисунок 5.37 – Линии уровня давления и линии тока при обтекании сегментально – конического тела.

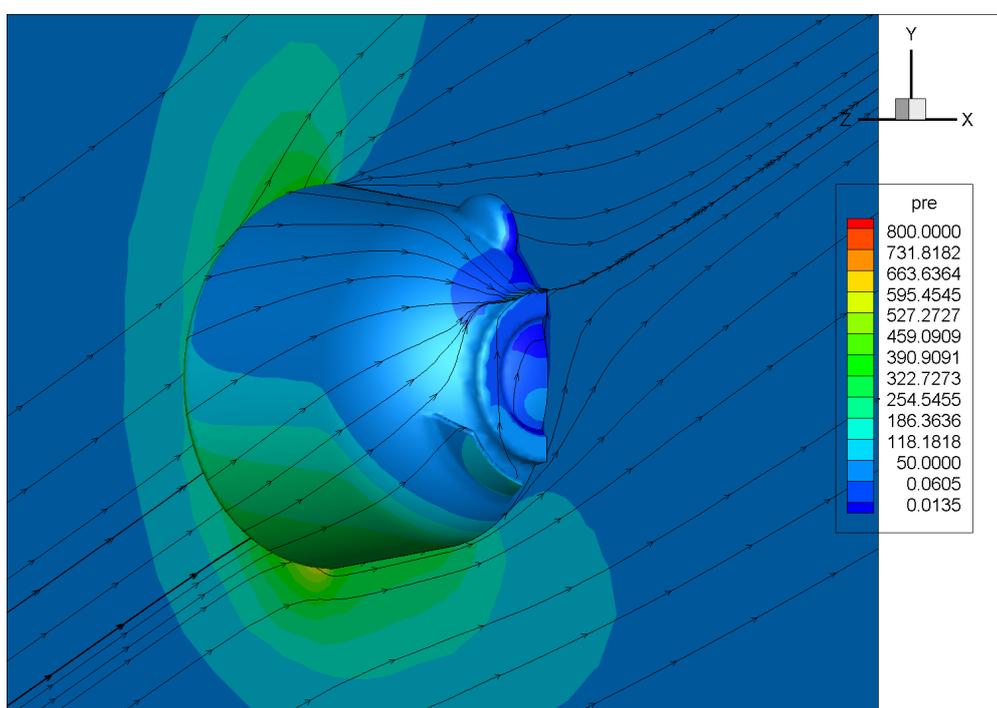
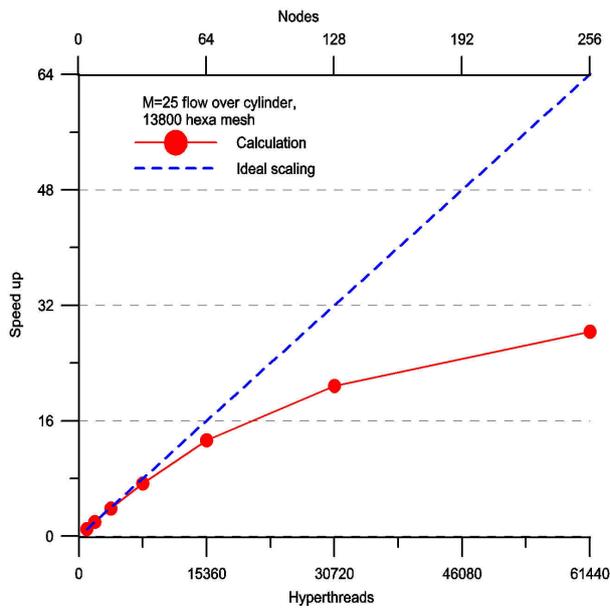
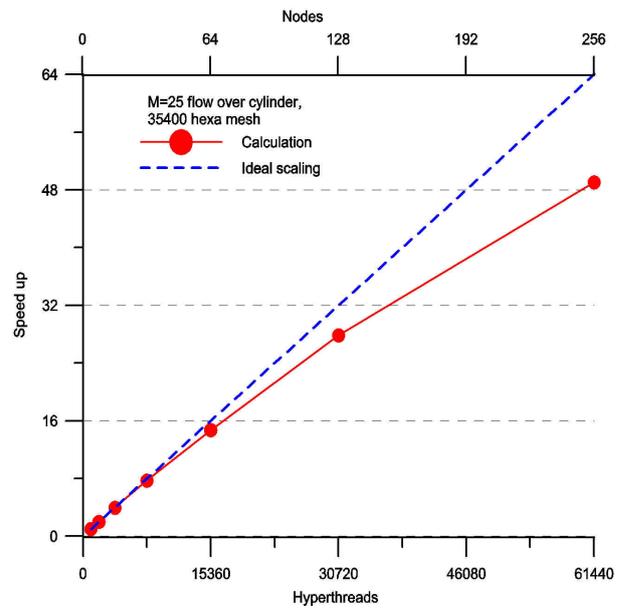


Рисунок 5.38 – Линии уровня давления и линии тока при обтекании сегментально – конического тела; донная область.

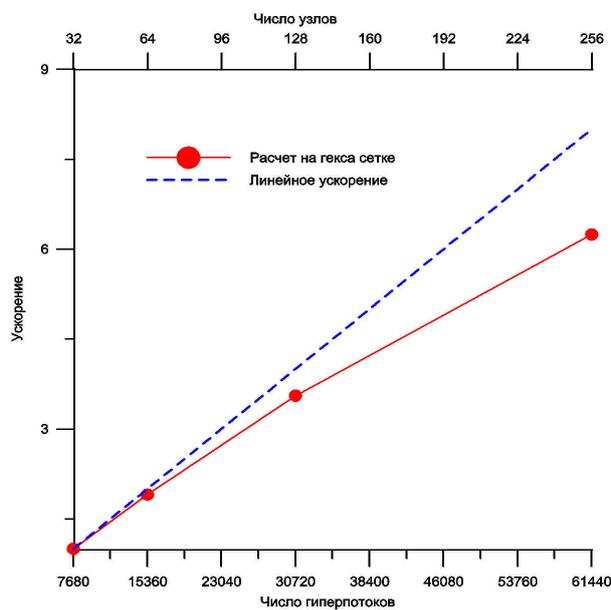


(a) 13800 гексаэдров

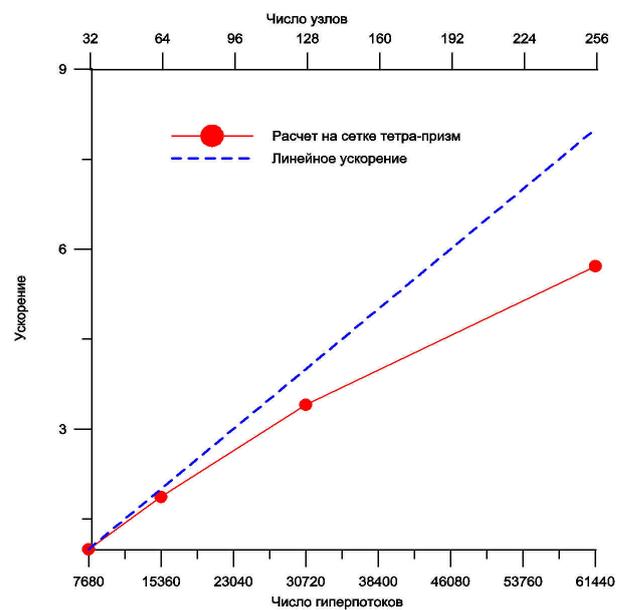


(б) 35400 гексаэдров

Рисунок 5.39 – Тестирование масштабируемости на задаче обтекания цилиндра потоком аргона с  $M_\infty = 25$ .



(a) Гексаэдральная сетка,  $9.5 \times 10^9$  ячеек



(б) Сетка тетра-призм,  $8.7 \times 10^9$  ячеек

Рисунок 5.40 – Ускорение счета на примере решения задачи обтекания ВКА на системе “РСК-Петастрим”.

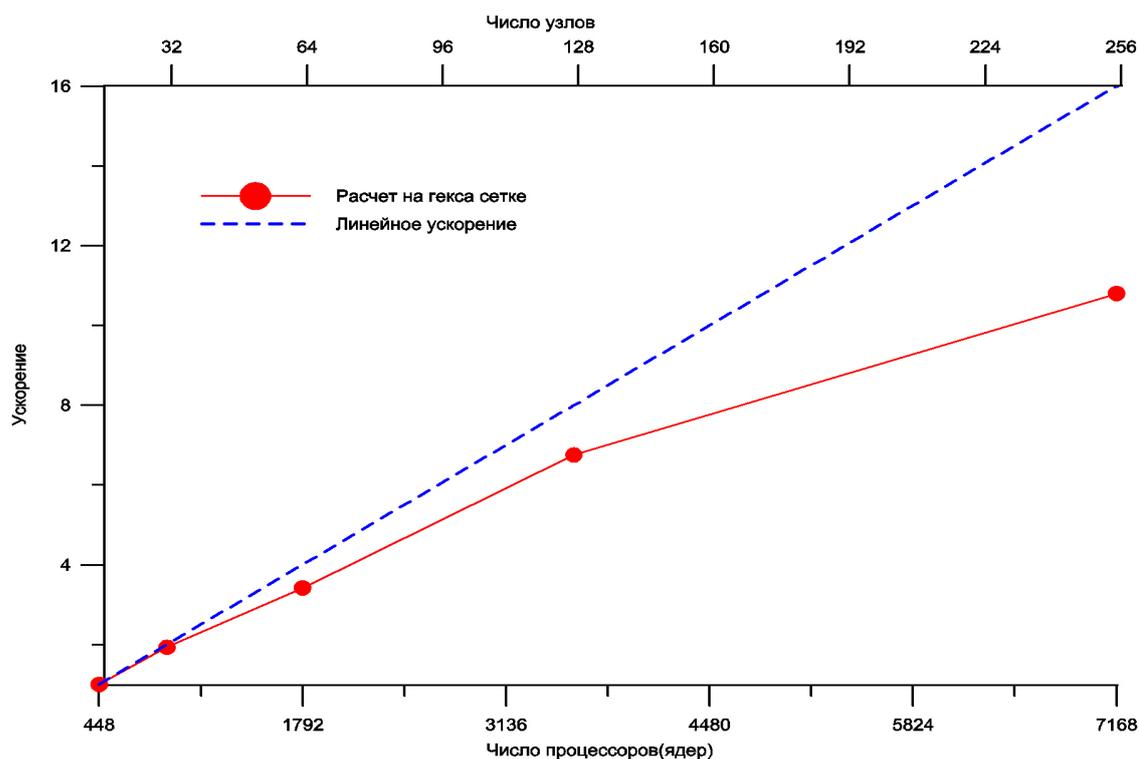


Рисунок 5.41 – Ускорение счета на примере решения задачи обтекания ВКА на системе “РСК-Торнадо”. Расчет на гексаэдральной сетке.

тов. В первой серии задача решалась на основной гексаэдральной сетке в физическом пространстве, состоящей из 13800 ячеек. Во второй серии использовалась более подробная сетка из 35400 ячеек. Полное число узлов в шестимерной расчетной сетке равнялось 0.5 и 1.2 миллиарда, соответственно. Результаты тестирования представлены на рис. 5.39. Видно, что на грубой сетке расчет хорошо масштабируется до 128 узлов кластера, после чего кривая ускорения выходит на полку. На более подробной сетке при использовании 256 узлов получена эффективность примерно 75%, что является хорошим результатом.

Далее, на рис. 5.40 представлены результаты тестирования кода на задаче обтекания модели ВКА для скорости потока 1500 м/с на обеих сетках в

физическом пространстве. На тетра-призматической сетке для пространственной аппроксимации оператора переноса использовался метод наименьших квадратов, в то время как для гексаэдральной сетки использовалась локально-одномерная реконструкция. В расчетах получена эффективность около 75%, что является очень хорошим результатом. Время счета одного варианта на 256 сопроцессорах составляет 12 часов для  $U_\infty = 1500$  м/с и 48 часов для  $U_\infty = 7900$  м/с.

В заключение, на рис. 5.41 приведен расчет на системе “РСК-Торнадо” с использованием гексаэдральной сетке. Видна хорошая масштабируемость кода до 7168 физических ядер.

Таким образом, показана принципиальная возможность моделирования гиперзвуковых течений вокруг спускаемых аппаратов с помощью численного решения кинетического уравнения за приемлемое время. Кинетические модели без учета внутренних степеней свободы позволяют получать удовлетворительную точность для нахождения аэродинамических характеристик и параметров теплопередачи для больших высот полета.

# Основные результаты

- Разработана новая методология численного моделирования сложных трехмерных задач механики разреженного газа на основе решения кинетических уравнений на суперЭВМ.
- Разработан новый неявный численный метод решения модельного кинетического уравнения, позволяющий моделировать течения разреженного газа на общих неструктурированных сетках для произвольных режимов обтекания. Применение метода к задаче гиперзвукового обтекания тел обеспечивает ускорение счета до 1000 раз по сравнению с общепринятыми схемами решения кинетических уравнений.
- Создан комплекс параллельных программ “Несветай-3Д”, позволивший эффективно построить решение трехмерного кинетического уравнения на современных суперЭВМ с использованием рекордного числа процессоров / гиперпоток (более 60000).
- Построено решение задачи о стационарном течении разреженного газа через канал произвольной конечной длины и сложной формы. Уточнены границы применимости приближения плоских сечений, как для расхода массы, так и для распределения параметров по оси симметрии. Для составной трубы показано формирование диска Маха при достаточно малых числах Кнудсена.

- Впервые проведена количественная оценка точности моделирования гиперзвуковых течений разреженного газа на основе численного решения модельного кинетического уравнения. Показано, что при больших числах Маха около тела возникают параметры течения, которые соответствуют условию применимости S-модели.
- Впервые построено решение кинетического уравнения для задачи обтекания реалистичных моделей спускаемого аппарата для режима обтекания, соответствующего входу спускаемого аппарата в атмосферу с первой космической скоростью. Для расчетов использовались шестимерные пространственные сетки с общим числом узлов до 19 миллиардов.

## Список литературы

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. – 440 с.
2. Шахов Е.М. Метод исследования движений разреженного газа. М.: Наука, 1974. – 207 с.
3. Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А. Прикладная динамика разреженного газа. М.: Машиностроение, 1977. – 184 с.
4. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Наука, 1978. – 495 с.
5. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. – 319 с.
6. Веденяпин В.В. Кинетические уравнения Больцмана и Власова. М.: Физматлит, 2001. – 112 с.
7. Ho C.M., Tai Y.C. Micro-electro-mechanical-systems and fluid flows // Annu. Rev. Fluid Mech. – 1998 – V. 30. – P. 579–612.
8. Sharipov F., Seleznev V.D. Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1994. - V. 12, № 5. – P. 2933–2935.
9. Шарипов Ф.М., Селезнев В.Д. Движение разреженных газов в каналах и микроканалах. Екатеринбург. УРО РАН. – 2008. – 231 с.
10. Ковтуненко В.М., Камеко В.Ф., Яскевич Э.П. Аэродинамика орби-

- тальных космических аппаратов. Киев: “Наукова думка”, 1977. – 157 с.
11. Ivanov M.S., Gimelshein S.F. Computational hypersonic rarefied flows // Annu. Rev. Fluid Mech. – 1998. - V. 30. – P. 469–505.
  12. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. Ч. I. Основы построения метода // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1975. – Т. 15, № 5. – С. 1195–1208.
  13. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. Ч. II. Вычислительные аспекты метода // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1975. – Т. 15, № 6. – С. 1553–1567.
  14. Белоцерковский О.М., Ерофеев А.И., Яницкий В.Е. О нестационарном методе статистического моделирования столкновительных процессов в разреженном газе // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1980. – Т. 20, № 5. – С. 1174–1204.
  15. Горелов С.М., Коган М.Н. Течение разреженного газа между двумя параллельными пластинами // Ученые записки ЦАГИ. – 1970. – Т. I, № 6. – С. 125–130.
  16. Ерофеев А.И., Перепухов В.А. Расчет обтекания пластины, расположенной вдоль потока разреженного газа // Ученые записки ЦАГИ. – 1975. – Т. 6, № 3. – С. 51–57.
  17. Ерофеев А.И., Перепухов В.А. Расчет обтекания пластины потоком разреженного газа // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1976. – № 4. – С. 106–112.
  18. Абрамов А.А., Коган М.Н. Сильная дозвуковая конденсация одноатомного газа // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1989. – № 1. – С. 165–169.

19. Ерофеев А.И. Исследование структуры ударной волны в азоте на основе траекторных расчетов взаимодействия молекул // Изв. РАН. МЖГ. – 2002. – № 6. – С. 134–147.
20. Горелов С.М., Русаков С.В. Физико-химическая модель гиперзвукового обтекания тел разреженным газом // Известия РАН. МЖГ. – 2002. – № 4. – С. 131-144.
21. Бочкарев А.А., Косинов В.А., Приходько В.Г., Ребров А.К. Обтекание затупленного тела сверхзвуковой струей азота и азотоводородной смеси низкой плотности // Прикладная механика и техническая физика. – 1972 – № 6. – С. 50.
22. Морозов А.А., Плотников М.Ю., Ребров А.К. Кинетика деградации молекулярного пучка в покоящемся газе // Прикладная механика и техническая физика. – 1997. – V. 38, № 4. – P. 103–110.
23. Плотников М.Ю., Ребров А.К. Прямое статистическое моделирование поперечного обтекания цилиндра сверхзвуковым потоком бинарной смеси разреженных газов // Прикладная механика и техническая физика. – 2005. – Т. 46, № 5. – С. 53–59.
24. Мальцев Р.В., Ребров А.К. Поперечное обтекание полосы сверхзвуковым потоком разреженного газа // Изв. РАН. МЖГ. – 2005. – № 1. – С. 159–167.
25. Morozov A.A., Maltsev R.V., Rebrov A.K. Interpretation of impact and static pressure measurements in non-equilibrium supersonic flow by the DSMC method // Proceedings of 25th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – 2007. – P. 527–532.
26. Morozov A.A. Analysis of time-of-flight distributions under pulsed laser ablation in vacuum based on the DSMC calculations // Appl. Phys. A. –

2013. – V. 111. – P. 1107–1112.
27. Плотников М.Ю., Ребров А.К. Сверхзвуковое течение разреженного газа сквозь проволочную преграду // Прикладная механика и техническая физика. – 2013. – Т. 54, № 4. – С. 5–12.
  28. Yanenko N.N., Grigoryev Yu.N., Ivanov M.S. Numerical simulation of the rarefied gas flows // Lecture Notes in Physics. – Melville, New York. – 1981. – V. 141. – P. 454.
  29. Иванов М.С., Рогазинский С.В. Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // ВЦ СО АН СССР, Новосибирск. – 1988. – С. 177.
  30. Ivanov M.S., Antonov S.G., Gimelshein S.F., Kashkovsky A.V. Computational tools for rarefied aerodynamics // Progress in Astronautics and Aeronautics Series. - 1994. – V. 160 – P. 115.
  31. Иванов М.С., Кашковский А.В., Гимельшейн С.Ф., Маркелов Г.Н. Статистическое моделирование разреженных гиперзвуковых течений от свободно-молекулярного до околосреднемолекулярного режимов течения // Теплофизика и аэромеханика. – 1987. – Т. 4, № 3. – С. 251–268.
  32. Ivanov M.S., Markelov G.N., Gimelshein S.F., Mishina L.V., Krylov A.N., Grechko N.V. High-altitude capsule aerodynamics with real gas effects // Journal of Spacecraft and Rockets. – 1998. - V. 35, №. 1. – P. 16–22.
  33. Bondar Ye.A., Markelov G.N., Gimelshein S.F., Ivanov M.S. Numerical modeling of near-continuum flow over a wedge with real gas effects // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. – 2006. – V. 20, №4. – P. 699–709.
  34. Бондарь Е.А., Гимельшейн С.Ф., Молчанова А.Н., Иванов М.С. Учет VV-обмена в прямом статистическом моделировании разреженных га-

- зовых течений // Выч. мет. & программирование. – 2014. – Т. 15, № 4. – С. 549–559.
35. Шевырин А.А., Бондарь Е.А., Калашников С.Т., Хлыбов В.И., Дегтярь В.Г. Прямое статистическое моделирование разреженного высокоэнтальпийного течения около капсулы RAM C-II // ТВТ. – 2016. – Т.54, № 3. – С. 408–414.
36. Хлопков Ю.И., Воронич И.В., Ровенская О.И. Прямое статистическое моделирование эволюции вихревой системы в разреженном газе // Математическое моделирование. – 2007. – Т. 19, № 2. – С. 39–47.
37. Kogan M.N., Voronich I.V. Free molecular levitation of particle in closed vessel // AIP Conference Proceedings. 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, RGD26. Kyoto. – 2009. – P. 212–217.
38. Воронич И.В., Мьинт З.М. Влияние особенностей взаимодействия газа с поверхностью на аэродинамические характеристики космического аппарата // Вестник Московского авиационного института. – 2010. – Т. 17, № 3. – С. 59–67.
39. Voronich I., Nikolskiy Yu., Friedlander O. Gas flows through double-layer membrane of thermomolecular pump // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1628. – P. 841.
40. Voronich I., Vershkov V. Development of VRDSMC method for wide range of weakly disturbed rarefied gas flows // Proc. 2nd European Conference on Non-equilibrium Gas Flows. Paper NEGF15-44. – 2015.
41. Кусов А.Л. Численное моделирование обтекания цилиндра со сферическим носком методом прямого статистического моделирования Монте-Карло // Математическое моделирование. – 2015 – Т. 27, № 12. – С. 33–47.

42. Ivanov M.S., Kashkovsky A.V., Gimelshein S.F., Markelov G.N., Alexeenko A.A., Bondar Ye.A., Zhukova G.A., Nikiforov S.B., Vashenkov P.V. SMILE System for 2D/3D DSMC computations // Proc. of 25th Int. Symp. On RGD. – Publishing House of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. – 2007. – P. 539–544.
43. Dietrich S., Boyd I. D. Scalar and parallel optimized implementation of the direct simulation Monte Carlo method // J. Comput. Phys. – 1996. – V. 126, № 2. – P. 328–342.
44. LeBeau G.K., Lumpkin F.E. Application highlights of the DMSC analysis code (DAC) software for simulating rarefied flows // Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg. – 2001. – V.191. – P. 595–609.
45. Шахов Е.М. Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1968. – № 5. – С. 142–145.
46. Ларина И.Н. Обтекание сферы разреженным газом // Прикл. матем. и механ. – 1969. – Т. 33, № 5. – С. 895–898.
47. Шахов Е.М. Поперечное обтекание пластины разреженным газом // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1972 – № 6. – С. 106–113.
48. Жук В.И., Рыков В.А., Шахов Е.М. Кинетические модели и задача о структуре ударной волны // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1973. – № 4. – С. 135–141.
49. Шахов Е.М. Решение осесимметричных задач теории разреженных газов методом конечных разностей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1974. – Т. 14, № 4. – С. 970–981.
50. Рыков В.А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // Изв. АН СССР, МЖГ. – 1975. – № 6. – С. 107–115.

51. Шахов Е.М. Численные методы решения аппроксимирующих кинетических уравнений // В сб. “Численные методы в динамике разреженных газов”, вып. 2. – М., ВЦ АН СССР. – 1975. – С. 35–76.
52. Ларина И.Н., Рыков В.А. Обтекание сферы двухатомным газом на основе кинетических уравнений // Доклады АН СССР. – 1976. – Т. 227, № 1. – С. 60–62.
53. Рыков В.А., Черемисин Ф.Г., Шахов Е.М. Численные исследования по динамике разреженных газов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1980. – Т.20, № 5. – С. 1266–1283.
54. Бишаев А.М., Лимар Е.Ф., Попов С.П., Шахов Е.М. Вход свободно расширяющейся газовой струи в круговое отверстие в поперечной преграде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1989. – Т.29, № 2. – С. 2772–285.
55. Ларина И.Н., Рыков В.А. Расчет течений разреженного двухатомного газа через плоский микроканал // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2012. – Т.52, № 4. – С. 720–732.
56. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1980. – Т. 20, № 1. – С. 191–207.
57. Ларина И.Н., Рыков В.А. Гиперзвуковое обтекание конических тел потоком разреженного газа // Сообщения по прикладной математике. – М.: ВЦ АН СССР. – 1990. – 44 с.
58. Черемисин Ф.Г. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2006. – Т. 46, № 2. – С. 329–343.
59. Arslanbekov R., Kolobov V., Frolova A., Zabelok S. Evaluation of unified

- kinetic/continuum solver for computing heat flux in hypersonic blunt body flows // AIAA-2007-4544. – 2007.
60. Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A., Arslanbekov R.R., Kolobov V.I. Simulations of pressure-driven flows through channels and pipes with unified flow solver // Vacuum, Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”. – 2012. – V. 86, № 11. – P. 1717–1724.
  61. Arslanbekov R.R., Kolobov V.I., Frolova A.A. Kinetic solvers with adaptive mesh in phase space // Physical Review E. – 2013. – V. 88. – P. 063301.
  62. Фролова А.А., Черемисин Ф.Г. Обтекание цилиндрических тел разреженным газом // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1998. – Т. 38, № 12. – С. 2002–2018.
  63. Zeitoun D.E., Burtschell Y., Graur I.A., Ivanov M.S., Kudryavtsev A.N., Bondar Y.A. Numerical simulation of shock wave propagation in microchannels using continuum and kinetic approaches // Shock Waves. – 2009. – V.19, № 4. – P. 307–316.
  64. Шоев Г.В., Бондарь Е.А., Хотяновский Д.В., Кудрявцев А.Н., Марута К., Иванов М.С. Численное исследование входа и распространения ударной волны в микроканале // Теплофизика и аэромеханика. – 2012. – Т.19, № 1. – С. 19–34.
  65. Шоев Г.В., Бондарь Е.А., Хотяновский Д.В., Кудрявцев А.Н., Марута К., Иванов М.С. Об одной схеме вычисления интеграла столкновений Больцмана // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2012. – Т.13, № 1. – С.98–106.
  66. Shershnev A., Kudryavtsev A. Kinetic simulation of near field of plume

- exhausting from a plane micronozzle // *Microfluidics and Nanofluidics*. – 2015. – V. 19, № 1. – P. 105–115.
67. Бишаев А.М., Калашников В.К., Ким В. Численное исследование струи разреженной плазмы стационарного ускорителя с замкнутым дрейфом электронов (НЗДП) // *Физика плазмы*. – 1992. – Т. 18, № 6. – С. 698–708.
68. Бишаев А.М. Численное моделирование струи разреженного слабо ионизованного газа, выходящего из кольцевого отверстия // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 1993. – Т. 33, № 7. – С. 1109–1118.
69. Бишаев А.М., Калашников В.К., Ким В., Шавыкина А.В. Численное моделирование плазменной струи стационарного плазменного двигателя, распространяющейся в среде низкого давления // *Физика плазмы*. – 1998. – Т. 24, № 11. – С. 989–995.
70. Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Хохлов Н.И., Шурыгин Б.А. Программно-моделирующая среда для исследования течений газа в микро- и наноструктурах на основе решения уравнения Больцмана // *Атомная энергия*. – 2008. – Т. 105, № 4. – С. 211–217.
71. Аникин Ю.А., Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г. Компьютерное моделирование и анализ эксперимента Кнудсена 1910 года // *Нано- и микросистемная техника*. – 2010. – № 8. – С. 6–14.
72. Попов С.П., Черемисин Ф.Г. Обтекание сверхзвуковым потоком разреженного газа решетки плоских поперечных пластин // *Изв. РАН. МЖГ*. – 2002. – № 3. – С. 159–168.
73. Архипов А.С., Бишаев А.М. Численное моделирование в трехмерной постановке струи плазмы, выходящей в окружающее пространство из стационарного плазменного двигателя // *Ж. вычисл. матем. и матем.*

- физ. – 2007. – Т. 47, № 3. – С. 490–505.
74. Архипов А.С., Бишаев А.М. Применение метода расщепления по физическим процессам для построения численного метода решения системы кинетических уравнений, описывающих поведение струи разреженной плазмы, возникающей от работы электрического реактивного двигателя // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2012. – Т. 52, № 10. – С. 1904–1925.
75. Крюков А.П., Ястребов А.К. Тепломассоперенос через пленку пара с учетом движения межфазной поверхности жидкость - пар и роста температуры границы раздела фаз // Теплофизика высоких температур. – 2006. – Т. 44, № 4. – С. 560–567.
76. Loyalka S.K. Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric Effect. I. // The Journal of Chemical Physics. – 1971. – V. 55, № 9. – P. 4497–4503.
77. Loyalka S.K., Storvik T.S., Park H.S. Poiseuille flow and thermal creep flow in long, rectangular channels in the molecular and transition flow regimes // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1976. – V. 13, № 5. – P. 1188–1192.
78. Li Z.-H., Zhang H.-X. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum // J. Comput. Phys. – 2004. – V. 193, № 2. – P. 708–738.
79. Yang J.Y., Huang J.C. Rarefied flow computations using nonlinear model Boltzmann equations // J. Comput. Phys. – 1995. – V. 120, № 2. – P. 323–339.
80. Mieussens L. Discrete velocity model and implicit scheme for the BGK equation of rarefied gas dynamics // Math. Models and Meth. Appl. Sci. – 2000. – V. 8, № 10. – P. 1121–1149.

81. Mieussens L. Discrete-velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries // J. Comput. Phys. - 2000. - V. 162, № 2. - P. 429–466.
82. Baranger C., Claudel J., Herouard N., Mieussens L. Locally refined discrete velocity grids for stationary rarefied flow simulations // J. Comput. Phys. - 2014. - V. 257. - P. 572–593.
83. Lihnaropoulos J., Valougeorgis D. Unsteady vacuum gas flow in cylindrical tubes // Fusion Engineering and Design. - 2011. - V. 86. - P. 2139–2142.
84. Graur I., Sharipov F. Non-isothermal flow of rarefied gas through a long pipe with elliptic cross section // Microfluidics and Nanofluidics. - 2009. - V. 6, № 2. - P. 267–275.
85. Graur I., Polikarpov A.Ph., Sharipov F. Numerical modelling of rarefied gas flow through a slit into vacuum based on the kinetic equation // Computers and Fluids. - 2011. - V. 49. - P. 87–92.
86. Kolobov V.I., Arslanbekov R.R., Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A. Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement // J. Comput. Phys. - 2007. - V. 223. - P. 589–608.
87. Arslanbekov R.R., Kolobov V.I., Frolova A.A. Analysis of compressible viscous flow solvers with adaptive Cartesian mesh // 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference 27 - 30 June 2011, Honolulu, Hawaii. - 2011.
88. Anikin Yu.A., Dodulad O.I., Kloss Yu.Yu., Martynov D.V., Shuvalov P.V., Tcheremissine F.G. Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // Vacuum, Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”. - 2012. V. 86, № 11. - P. 1770–1777.

89. Li Z.-H., Zhang H.-X. Numerical investigation from rarefied flow to continuum by solving the Boltzmann model equation // International Journal for Numerical Methods in Fluids. – 2003. – V. 42, № 4. – P. 361–382.
90. Colonia S., Steijl R., Barakos G. Kinetic models and gas-kinetic schemes for hybrid simulation of partially rarefied flows // AIAA Journal. – 2016. – V. 54, № 4. – P. 1264–1276.
91. Bobylev A. V., Cercignani C. Discrete velocity models without nonphysical invariants // Journal of Statistical Physics. – 1999. – V. 97, № 3. – P. 677–686.
92. Веденяпин В.В., Амосов С.А., Тоскано Л. Дискретные модели уравнения Больцмана для смесей // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12, № 7. – С. 18–22.
93. Аджиев С.З., Веденяпин В.В. О размерах дискретных моделей уравнения Больцмана для смесей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2007. – Т. 47, № 6. – С. 1045–1054.
94. Grad H. On the kinetic theory of gases // Comm. on pure and appl. mathem. – 1949. – V. 2, №4. – P. 331–407. (Русский перевод в сб. “Механика”, 1952, №4, 5)
95. Ivanov I.E., Timokhin M.Y., Kryukov I.A., Bondar Y.A., Kokhanchik A.A., Ivanov M.S. Study of the shock wave structure by regularized grads set of equations // AIP Conference Proceedings, 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. – 2012. – V. 141. – P. 215–222.
96. Никитченко Ю.А. Модели неравновесных течений. М.: Изд-во МАИ. – 2013. – 160 с.
97. Иванов И.Э., Крюков И.А., Тимохин М.Ю. Применение системы

- моментных уравнений для математического моделирования газовых микротечений // Журнал выч. математики и матем. физики. – 2013. – Т. 53, № 10. – С. 1721–1738.
98. Четверушкин Б.Н. Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике: новая модель вязкого газа, алгоритмы, параллельная реализация, приложения. Изд-во МГУ Москва – 1999. – 232 с.
99. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007. – 351 с.
100. Li Z.-H., Zhang H.-X. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry // J. Comput. Phys. – 2009. – V. 228, № 4. – P. 1116–1138.
101. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации. Санкт-Петербург, Изд. Санкт-Петербургского университета, 2003. – 274 с.
102. Nagnibeda E., Kustova E. Non-equilibrium reacting gas flows. Springer, 2009. – 250 p.
103. Kustova E., Nagnibeda E., Oblapenko G., Savelev A., Sharafutdinov I. Advanced models for vibrational-chemical coupling in multi-temperature flows // Chemical Physics. – 2016. – V. 464 – P. 1–13.
104. Armenise I., Reynier P., Kustova E. Advanced models for vibrational and chemical kinetics applied to MARS entry aerothermodynamics // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. – 2016. – V. 30, № 4. – P. 705–720.
105. Шоев Г.В., Бондарь Е.А., Облапенко Г.П., Кустова Е.В. Разработка и апробация методики численного моделирования термически неравновесных диссоциирующих течений в Ansys Fluent // Теплофизика и аэромеханика. – 2016. – Т. 23, № 2. – С. 159–171.

106. Дектерев А.А., Гаврилов А.А., Харламов Е.Б., Литвинцев К.Ю. Использование программы SigmaFlow для численного исследования технологических объектов // Вычислительные технологии. – 2003. – Т. 8, № 1. – С. 250 – 255.
107. Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Смирнов П.Е., Щур Н.А., Якубов С.А. Опыт параллелизации вычислений при расчете отрывных течений на основе трехмерных нестационарных формулировок // Вычислительные методы и программирование. – 2007 – V. 8, № 1. – С. 99–106.
108. Щур М.Л., Спаларт Ф.Р., Стрелец М.Х. Расчет шума сложных струй на основе первых принципов // Математическое моделирование. – 2007. – Т. 27, №. 7. – С. 5 – 26.
109. Bosnyakov S., Kursakov I., Lysenkov A., Matyash S., Mikhailov S., Vlasenko V., Quest J. Computational tools for supporting the testing of civil aircraft configurations in wind tunnels // Progress in Aerospace Sciences. – 2008. – V. 44, № 2. – P. 67 – 120.
110. Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Горобец А.В., Дубень А.П., Козубская Т.К. Параллельный программный комплекс NOISETTE для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики // Выч. мет. программирование. – 2012. – Т. 13, № 3. – С. 110–125.
111. Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Якубов С.А., Балашов М.Е. Комплекс программ для создания блочно-структурированных сеток // Программные продукты и системы. – 2012. – № 2. – С. 32–35.
112. Погосян М.А., Савельевских Е.П., Шагалиев Р.М., Козелков А.С., Стрелец Д.Ю., Рябов А.А., Корнев А.В., Дерюгин Ю.Н., Спиридонов В.Ф., Циберев К.В. Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной тех-

- ники // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. – 2013. – № 2. – С. 3–18.
113. Дерюгин Ю.Н., Жучков Р.Н., Зеленский Д.К., Козелков А.С., Саразов А.В., Кудимов Н.Ф., Липницкий Ю.М., Панасенко А.В., Сафронов А.В. Результаты валидации многофункционального пакета программ Логос при решении задач аэрогазодинамики старта и полета ракет-носителей // Математическое моделирование. – 2014. – Т. 26, № 9. – С. 83–95.
114. Johnson F.T., Tinoco E.N., Yu N.J. Thirty years of development and application of CFD at Boeing commercial airplanes, Seattle // Computers and Fluids. – 2005. – V. 34, № 10. – P. 1115 – 1151.
115. Храбрый А.И., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М. Разработка и примеры приложения специализированного параллельного кода для численного моделирования турбулентных нестационарных течений со свободной поверхностью // Вестник УГАТУ. – 2016. – Т. 20, № 3(73). – С. 153-163.
116. Аксёнов А.А. FlowVision: индустриальная вычислительная гидродинамика // Компьютерные исследования и моделирование. – 2017. – Т. 9, № 1. – С. 5–20.
117. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера “Ломоносов” // Открытые системы. – 2012. – № 7. – С. 36–39.
118. Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin Vl., Opanasenko V. "Lomonosov": Supercomputing at Moscow State University // Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward

- Exascale, Chapman & Hall/CRC Computational Science, Boca Raton, USA, CRC Press, – 2013. – V. VIII/2. – P. 283–307.
119. Semin A., Druzhinin E., Mironov V., Shmelev A., Moskovsky A. The Performance Characterization of the RSC PetaStream Module // Lecture Notes in Computer Science, 29th International Conference, ISC 2014, Leipzig, Germany, – 2014. V. 8488. – P. 420–429.
  120. Титарев В.А., Утюжников С.В. Программный комплекс для расчета гиперзвуковых течений воздуха. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ 2013619670. – 2013.
  121. Titarev V.A. Conservative numerical methods for model kinetic equations // Computers and Fluids. – 2007. – V. 36, № 9. – P. 1446–1459.
  122. Dumbser M., Käser M., Titarev V.A., Toro E.F. Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems // J. Comput. Phys. – 2007. – V. 226. – P. 204–243.
  123. Титарев В.А. Численный метод расчета двумерных нестационарных течений разреженного газа в областях произвольной формы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2009. – Т. 49, № 7. – С. 1255–1270.
  124. Титарев В.А., Шахов Е.М. Консервативный метод высокого порядка для расчета течения Пуазейля разреженного газа в канале произвольного поперечного сечения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 3. – С. 563–574.
  125. Titarev V.A. Implicit unstructured-mesh method for calculating Poiseuille flows of rarefied gas // Commun. Comput. Phys. – 2010. – V. 8, № 2. – P. 427–444.
  126. Titarev V.A., Tsoutsanis P., Drikakis D. WENO schemes for mixed-element unstructured meshes // Commun. Comput. Phys. – 2010. – V. 8,

№ 3. – P. 585–609.

127. Титарев В.А. Неявный численный метод расчета пространственных течений разреженного газа на неструктурированных сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 10. – С. 1811–1826.
128. Титарев В.А., Шахов Е.М. Неизотермическое течение газа в длинном канале на основе кинетической S-модели // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 12. – С. 2246–2260.
129. Tsoutsanis P., Titarev V.A., Drikakis D. WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions // J. Comput. Phys. – 2010. – V. 230. – P. 1585 – 1601.
130. Titarev V.A., Drikakis D. Uniformly high-order schemes on arbitrary unstructured meshes for advection-diffusion equations // Computers and Fluids. – 2011. – V. 46, № 1. – P. 467–471.
131. Titarev V.A. Implicit high-order method for calculating rarefied gas flow in a planar microchannel // J. Comput. Phys. – 2012. – V. 231, № 1. – P. 109–134.
132. Titarev V.A. Efficient deterministic modelling of three-dimensional rarefied gas flows // Commun. Comput. Phys. – 2012. – V. 12, № 1. – P. 161–192.
133. Titarev V.A., Shakhov E.M. Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // Vacuum, Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”. – 2012. – V. 86, № 11. – P. 1709–1716.
134. Думбсер М., Титарев В.А., Утюжников С.В. Неявный многоблочный метод решения кинетического уравнения на неструктурированных сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2013. – Т. 53, № 5.

- С. 762–782.
135. Титарев В.А., Шахов Е.М. Концевые эффекты при истечении разреженного газа через длинную трубу в вакуум // Известия РАН. МЖГ. – 2013. – № 5. – С. 146–158.
136. Titarev V.A. Rarefied gas flow in a circular pipe of finite length // Vacuum. – 2013. – V. 94. – P. 92–103.
137. Титарев В.А., Утюжников С.В., Шахов Е.М. Истечение разреженного газа в вакуум через трубу квадратного сечения, переменного по длине // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2013. – Т. 53, № 8. – С. 1402 – 1411.
138. Aristov V.V., Shakhov E.M., Titarev V.A., Zabelok S.A. Comparative study for rarefied gas flow into vacuum through a short circular pipe // Vacuum. – 2014. – V. 103. – P. 5–8.
139. Titarev V.A., Shakhov E.M., Utyuzhnikov S.V. Rarefied gas flow through a diverging conical pipe into vacuum // Vacuum. – 2014. – V. 101. – P. 10–17.
140. Titarev V.A., Dumbser M., Utyuzhnikov S.V. Construction and comparison of parallel implicit kinetic solvers in three spatial dimensions // J. Comput. Phys. – 2014. – V. 256. – P. 17–33.
141. Titarev V.A., Shakhov E.M. Rarefied gas flow into vacuum through a pipe composed of two circular sections of different radii // Vacuum. Special Issue “Advances in Vacuum Gas Dynamics”. – 2014. – V. 109. – P. 236–245.
142. Титарев В.А. Программный комплекс “Несветай-3Д” моделирования пространственных течений одноатомного разреженного газа // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Элект. журнал. – 2014. – № 6.

- С. 124–154.
143. Титарев В.А., Утюжников С.В., Чикиткин А.В. OpenMP+MPI параллельная реализация численного метода для решения кинетического уравнения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2016. – Т. 56, № 11. – С. 1949–1959.
  144. Titarev V.A. Numerical modeling of high-speed rarefied gas flows over blunt bodies using model kinetic equations // European Journal of Mechanics / B Fluids, Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows. – 2017. – V. 64. – P. 112–117.
  145. Titarev V.A. Application of model kinetic equations to hypersonic rarefied gas flows // Computers & Fluids, Special Issue “Nonlinear flow and transport”. – 2017. DOI 10.1016/j.compfluid.2017.06.019.
  146. Valougeorgis D., Vasileiadis N., Titarev V. Validity range of linear kinetic modeling in rarefied pressure driven single gas flows through circular capillaries // European Journal of Mechanics / B Fluids, Special Issue on Non-equilibrium Gas Flows. – 2017. – V. 64. – P. 2–7.
  147. Titarev V.A. Direct numerical solution of model kinetic equations for flows in arbitrary three-dimensional geometries // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1501. – 2012. – P. 262–271.
  148. Titarev V.A., Shakhov E.M. Rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1501. – 2012. – P. 465–472.
  149. Titarev V.A. Efficient numerical solution of the model kinetic equations // Vazquez-Cendon et al., editor, Numerical Methods for Hyperbolic Equations. – Taylor & Francis Group, London. – 2013. – P. 293–300.
  150. Titarev V.A., Shakhov E.M. Rarefied gas flow into vacuum through a long

- circular pipe composed of two sections of different radii // *Rarefied Gas Dynamics. Proc. 29th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1628.* – 2014. – P. 815–823.
151. Титарев В.А. Программный комплекс моделирования плоских течений одноатомного разреженного газа “Несветай-2Д”. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017613173 от 10.04.2017. – 2017.
152. Титарев В.А. Программный комплекс моделирования трехмерных течений одноатомного разреженного газа “Несветай-3Д”. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2017613138 от 10.04.2017. – 2017.
153. Титарев В.А. Численное решение кинетических уравнений для высокоскоростных течений разреженного газа // Труды международной конференции “Суперкомпьютерные дни в России”. – М.: Изд-во МГУ. – 2015. – С. 521–527.
154. Чикиткин А.В., Титарев В.А., Петров М.Н., Утюжников С.В. Параллельные технологии решения задач аэродинамики в комплексе программ “FlowModellium” // Труды международной конференции “Суперкомпьютерные дни в России”. – М.: Изд-во МГУ. – 2016. – С. 454–461.
155. Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* – 1954. – V. 94, № 3. – P. 511–525.
156. Sharipov F. Benchmark problems in rarefied gas dynamics // *Vacuum, Special Issue “Vacuum Gas Dynamics: Theory, experiments and practical applications”.* – 2012. – V. 86, № 11. – P. 1697–1700.

157. Varoutis S., Valougeorgis D., Sharipov F. Simulation of gas flow through tubes of finite length over the whole range of rarefaction for various pressure drop ratios // J. Vac. Sci. Technol. – 2009. – V. A 27, № 6. – P. 1377–1391.
158. Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Шувалов П.В. Решение уравнения Больцмана для нестационарных течений с ударными волнами в узких каналах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – Т. 50, № 6. – С. 1148 - 1158.
159. Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г. Компьютерное моделирование и анализ насоса Холвека в переходном режиме // Журнал технической физики. – 2012. – Т. 82, № 4. – С. 31–36.
160. Kolobov V.I., Bayyuk S.A., Arslanbekov R.R., Aristov V.V., Frolova A.A., Zabelok S.A. Construction of a unified continuum/kinetic solver for aerodynamic problems // AIAA Journal of Spacecraft and Rockets. – 2005. – V. 42, № 4. – P. 598.
161. Holway L.H. New statistical models for kinetic theory: methods of construction // Phys. of Fluids. – 1966. – V. 9, № 9. – P. 1658–1673.
162. Hamel B. Kinetic model for binary gas mixtures // Phys. Fluids. – 1965. – V. 8, № 3. – P. 418–425.
163. Garzo V., Santos A., Brey J.J. A kinetic model for a multicomponent gas // Phys. Fluids. – 1988. – V. 1, № 2. – P. 380–383.
164. Sharipov F., Seleznev V. Data on internal rarefied gas flows // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1998. – V. 27, № 3. – P. 657–706.
165. Graur I., Polikarpov A.Ph. Comparison of different kinetic models for the heat transfer problem // Heat & Mass Transfer. – 2009. – V. 46. – С. 237–244.

166. Рыков В.А., Титарев В.А., Шахов Е.М. Структура ударной волны в двухатомном газе на основе кинетической модели // Изв. РАН. МЖГ. 2008. – № 2. – С. 171–182.
167. Pantazis S., Valougeorgis D. Rarefied gas flow through a cylindrical tube due to a small pressure difference // Eur. J. Mech.-B/Fluids. – 2013. – V. 38. – P. 114–127.
168. Шахов Е.М. Линеаризированная двумерная задача о течении разреженного газа в длинном канале // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1999. – Т. 39, № 7. – С. 1240–1249.
169. Шахов Е.М. Течение разреженного газа в трубе конечной длины // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2000. – Т. 40, № 4. – С. 647–655.
170. Aoki K., Kanba K., Takata S. Numerical analysis of a supersonic rarefied gas flow past a flat plate // Phys. Fluids. – 1997. – V. 9, № 4. – P. 1144–1161.
171. Титарев В.А., Шахов Е.М. Расчет донного вакуума за пластиной, обтекаемой гиперзвуковым потоком разреженного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2001. – Т. 41, №9. – С. 1444–1456.
172. Градобоев М.И., Рыков В.А. Консервативный метод численного решения кинетического уравнения при малых числах Кнудсена // Журнал вычисл. матем. и матем. физ. – 1994. - Т. 34, № 2. – С. 246–266.
173. Ларина И.Н., Рыков В.А. Численный метод расчета осесимметричных течений разреженного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1998. – Т. 38, № 8. – С. 1391–1403.
174. Titarev V.A. Conservative numerical methods for advanced model kinetic equations // P. Wessling, E. Onate, and J. Periaux, editors, Proceedings of the ECCOMAS 2006. TU Delft, The Netherlands. – 2006.

175. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1961. – Т. 1, № 2. – С. 267–279.
176. Toro E.F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Springer-Verlag, Third edition, 2009. – 724 p.
177. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001. – 607 с.
178. Venkatakrisnan V. On the accuracy of limiters and convergence to steady-state solutions // AIAA paper 93-0880, 31st Aerospace Science Meeting & Exhibit, January 11-14, 1993, Reno, NV. – 1993.
179. Barth T.J., Frederickson P.O. Higher order solution of the Euler equations on unstructured grids using quadratic reconstruction // AIAA paper no. 90-0013, 28th Aerospace Sciences Meeting. – 1990.
180. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных течений газовой динамики // Учен. зап. ЦАГИ. – 1972. – Т. 3, № 6. – С. 68–77.
181. Тилляева Н.И. Обобщение модифицированной схемы С.К. Годунова на произвольные нерегулярные сетки // Ученые записки ЦАГИ. – 1986. – Т. 17, № 2. – С. 18–26.
182. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme V: a second order sequel to Godunov' method // J. Comput. Phys. – 1979. – V. 32. – P. 101–136.
183. Gusarov A.V., Smurov I. Gas-dynamic boundary conditions of evaporation and condensation: numerical analysis of the Knudsen layer // Phys. Fluids.

- 2002. – V. 14, № 12. – P. 4242–4255.
184. Men'shov I.S., Nakamura Y. An implicit advection upwind splitting scheme for hypersonic air flows in thermochemical nonequilibrium // A Collection of Technical Papers of 6th Int. Symp. on CFD. Lake Tahoe, Nevada. – 1995. – V. 2. – P. 815.
185. Shakhov E.V., Titarev V.A. Non-stationary rarefied gas flow into vacuum from a circular pipe closed at one end // Vacuum. Special Issue “Advances in Vacuum Gas Dynamics”. – 2014. – V. 109. – P. 284–293.
186. Shakhov E.V., Titarev V.A. Time-dependent rarefied gas flow into vacuum from a long circular pipe closed at one end // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 29th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1628. – 2014. P. 1071–1078.
187. Титарев В.А., Шахов Е.М. Нестационарное течение разреженного газа с ударной волной в канале // Известия РАН. МЖГ. – 2018.
188. Sharipov F.M. Non-isothermal gas flow through long rectangular microchannels // J. Micromech. Microeng. – 1999. – V. 9. – P. 394–401.
189. van der Vegt J.J.W., van der Ven H. Discontinuous Galerkin finite element method with anisotropic local grid refinement for inviscid compressible flows // J. Comput. Phys. – 1998. – V. 141, № 1. – P. 46–77.
190. Men'shov I.S., Nakamura Y. On implicit Godunov's method with exactly linearized numerical flux // Computers and Fluids. – 2000. – V. 29, № 6. – P. 595–616.
191. Gropp W., Lusk E., Skjellum A. Using MPI: Portable parallel programming with the message-passing interface. The MIT Press, second edition, 1999. – P. 371.
192. Chorley M.J., Walker D.W. Performance analysis of a hybrid MPI/OpenMP application on multi-core clusters // J. Comput. Sci. –

2010. – V. 47. – P. 168–174.
193. Горобец А.В. Параллельная технология численного моделирования задач газовой динамики алгоритмами повышенной точности // Журнал выч. математики и матем. физики. – 2015. – Т. 4, № 55. – С. 641–652.
194. Аристов В.В., Забелок С.А. Детерминистический метод решения уравнения Больцмана с параллельными вычислениями // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2002. – Т. 42, № 3. – С. 425–437.
195. Karypis G., Kumar V. Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs // J. Parallel Distrib. Comput. – 1998. – V. 48. – P. 96–129.
196. Капорин И.Е., Милукова О.Ю. Массивно-параллельный алгоритм предобусловленного метода сопряженных градиентов для численного решения систем линейных алгебраических уравнений // В сб. трудов отдела проблем прикладной оптимизации ВЦ РАН. – М., изд-во ВЦ РАН. – 2011. – С. 132–157.
197. Титарев В.А., Шахов Е.М. Течение Пуазейля и термокрип в капилляре на основе кинетической R-модели // Известия РАН. МЖГ. – 2012. – № 5. – С. 114–125.
198. Titarev V.A. Rarefied gas flow in a planar channel caused by arbitrary pressure and temperature drops // Int. J. of Heat and Mass Transfer. – 2012. – V. 55, № 21-22. – P. 5916 – 5930.
199. Gad-el-Hak M. The Fluid Mechanics of Microdevices - The Freeman Scholar Lecture // J. of Fluids Engineering. – 1999. – V. 121. – P. 5–33.
200. Sharipov F. Analytical and numerical calculations of rarefied gas flows // Karl Jousten (редактор), Handbook of Vacuum Technology. Wiley-VCH, Berlin. – 2008. – P. 1012.

201. Varoutis S., Valougeorgis D., Sazhin O., Sharipov F. Rarefied gas flow through short tubes into vacuum // J. Vac. Sci. Technol. – 2008. – V. 26, № 1. – P. 228–238.
202. Ларина И.Н., Рыков В.А., Шахов Е.М. Испарение с поверхности и истечение пара через плоский канал в вакуум // Изв. РАН. МЖГ. – 1996. – № 1. – С. 150–158.
203. Шахов Е.М. Осесимметричная нелинейная задача о стационарном течении разреженного газа в трубе кругового сечения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1996. – Т. 36, № 8. – С. 169–179.
204. Sharipov F., Bertoldo G. Rarefied gas flow through a long tube of variable radius // J. Vac. Sci. Technol. A. – 2005. – V. 23, № 3. – P. 531–533.
205. Clausing P. Über die stromung sehr verdunnter gase durch röhren von beliebiger länge // Annalen der Physik. – 1932. – № 32. – P. 961–989.
206. Berman A.S. Free molecule transmission probabilities // J. Appl. Phys. – 1965. – V. 36. – P. 3356.
207. Berman A.S. Erratum: free molecule transmission probabilities // J. Appl. Phys. – 1966. V. 37. – P. 2930.
208. Lo S.S., Loyalka S.K. An efficient computation of near-continuum rarefied gas flows // J. Applied Mathematics and Physics (ZAMP). – 1982. – V. 33. – P. 419–424.
209. Roache P.J. Verification and validation in computational science and engineering. Hermosa Pub, 1998. – 464 p.
210. Graur I., Sharipov F. Gas flow through an elliptical tube over the whole range of the gas rarefaction // Eur. J. Mech. B/Fluids. – 2008. – V. 27, № 3. – P. 335–345.
211. Weissberg H.L. End correction for slow viscous flow through long tubes

- // Physics of Fluids. – 1962. – V. 5, № 9. – P. 1033–1036.
212. Shakhov E.M., Titarev V.A. Efficient solution method for rarefied gas flow in long finite-length channels // Rarefied Gas Dynamics. Proc. 28th Int. Symp., AIP Conf. Proc. 1501. – 2012. – P. 473–480.
213. Fujimoto T., Usami M. Rarefied gas flow through a circular orifice and short tubes // J. Fluids Eng Tran ASME. – 1984. – V. 106, № 4. – P. 367–373.
214. Валландер С.В. Лекции по гидроаэромеханике. Издательство ЛГУ им. А.А. Жданова, 1978. – 296 с.
215. Sharipov F.M. Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions // AIAA Journal. – 2002. – V. 40, № 10. – P. 2006–2008.
216. Sharipov F. Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice // J. Fluid Mech. – 2004. – V. 518. – P. 35–60.
217. Graur I., Polikarpov A.Ph., Sharipov F. // Numerical modelling of rarefied gas flow through a slit at arbitrary gas pressure ratio based on the kinetic equation // Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP). – 2012. – V. 63. – P. 503–520.
218. Титарев В.А., Шахов Е.М. Численное исследование сильного нестационарного испарения с поверхности сферы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2004. – Т. 44, №7. – С. 1314–1328.
219. Титарев В.А., Шахов Е.М. Численное исследование нестационарного испарения и теплоотдачи с поверхности сферы // Изв. РАН. МЖГ. – 2005. – № 1. – С. 181–192.
220. Ларина И.Н. Исследование сверхзвукового обтекания сферы разреженным газом // В сб. “Численные методы в динамике разреженных

- газов”, вып. 2. – М., ВЦ АН СССР. – 1975. – С. 77–94.
221. Ларина И.Н., Рыков В.А. О потоках энергии к сфере в разреженном газе // Изв. АН СССР, МЖГ. – 1982. – № 2. – С. 181–183.
222. Ларина И.Н., Рыков В.А. Метод исследования течений двухатомного газа // В сб. “Численные методы в динамике разреженного газа”, вып. 3. – ВЦ АН СССР. – 1977. – С. 99–116.
223. Ларина И.Н., Рыков В.А. Пространственное обтекание конических тел потоком разреженного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1989. – Т. 29, № 1. – С. 110–117.
224. Lofthouse A.J. Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics using the Direct Simulation Monte Carlo and Navier-Stokes models // Ph.D. thesis. The University of Michigan. – 2008. – 242 p.
225. Ваганов А.В., Дроздов С.М., Косых А.П., Нерсесов Г.Г., Чельшева И.Ф., Юмашев В.Л. Численное моделирование аэродинамики крылатого возвращаемого космического аппарата // Ученые записки ЦАГИ. – 2009. – Т. XL, № 2. – С. 3–15.