Разработка и практическое применение методов численного моделирования в задачах механики разреженного газа

В.А. Титарев

ФИЦ "Информатика и Управление" РАН, г. Москва

XXVI Международная конференция и молодежная школа "Математическое моделирование и суперкомпьютерные технологии"

ННГУ им. Н.И. Лобачевского,

16 ноября 2026 г.

О ФИЦ ИУ РАН

ФГУ «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» (ФИЦ ИУ РАН)

ФИЦ ИУ РАН - научная организация, которая создана в рамках реализации принципов объединения, интеграции и укрупнения научных центров, на основании приказа Федерального агентства научных организаций России (ФАНО) от 31.12.2014 г. № 1421.

Федеральный исследовательский центр
«Информатика и управление» Российской академии наук

Институт проблем информатики Российской академии наук
1983-2015



Наумов Б.Н.
1927-1988

Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Российской академии наук
1951-2015



Дородницын А.А.
1910-1994

Институт системного анализа Российской академии наук
1976-2015



Гвишиани Д.М.
1928-2003

Разреженный газ

- Число Кнудсена как степень разреженности газа: $\mathrm{Kn} = \dfrac{\lambda}{\mathrm{L}}$, где
  - λ – длина свободного пробега ($\approx 6.374 \times 10^{-8}$ м у Земли и 0.164 м на 100 км);
  - L – характерный размер задачи (размер обтекаемого тела или диаметр трубы)
- При $\mathrm{Kn} > 0.3$ уравнения сплошной среды неприменимы и необходимо использовать кинетические подходы (DSMC, кинетические уравнения, ...).
- Задачи механики разреженного газа:
  - моделирование аэродинамики и теплообмена космических аппаратов, движущихся в верхних слоях атмосферы (высота полета $\geq$ 90 км).
  - течения в различных микроэлектромеханических устройствах (MEMS) (микросопла, системы охлаждения электронных компонентов и др)
  - Импульсная лазерная абляция (испарение) широко используется в современных технологиях осаждения тонких пленок, синтеза наночастиц и обработки поверхности.
- Как правило, течения разреженного газа характеризуются большими перепадами величин, наличием одновременно областей сплошносредного и свободно-молекулярного течения и сложной геометрией задачи.

Кинетическое уравнение Больцмана

- Состояние одноатомного газа описывается функцией распределения молекул по скоростям $f = f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})$, где (ξ_1, ξ_2, ξ_3) – компоненты вектора молекулярной скорости по направлениям (x_1, x_2, x_3) соответственно.
- Макроскопические переменные определяются в виде интегралов по ξ (безразмерная форма):

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

- Кинетическое уравнение Больцмана (УБ) для f записывается в виде [Коган, 1967, Шахов, 1974]

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = I(f, f), \quad I(f, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f' f_1' - f f_1) g b db d\phi d\xi_1.$$

- Трудность численного решения УБ в основном состоит в его высокой размерности, сложности аппроксимации $I(f, f)$ и трудностями в построении неявных методов продвижения по времени.
- Как правило, в приложениях основной интерес представляют макропараметры, а не сама функция распределения (но бывают важные исключения). Поэтому построение решения УБ часто является избыточным.

Кинетическая S-модель Е.М. Шахова

- Альтернатива УБ – построение приближенных (модельных) кинетических уравнений, которые аппроксимируют точное УБ:

$$\int \phi(\boldsymbol{\xi}) I(f,f) d\xi = \int \phi(\boldsymbol{\xi}) J(f, \boldsymbol{W}) d\xi, \quad \phi(\boldsymbol{\xi}) = 1, \boldsymbol{\xi}, \xi^2, \boldsymbol{\xi}\xi^2, \ldots$$

- В безразмерной форме S-модель имеет вид [Шахов, 1968, Шахов, 1974]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = J, \quad J = \nu(f^{(S)} - f), \quad \nu = \frac{nT}{\mu}\delta,$$

$$f^{(S)} = f_M \left(1 + \frac{4}{5}(1-\mathrm{Pr})\boldsymbol{Sc}(c^2 - \frac{5}{2})\right), \quad \mu = \mu(T) = T^\omega,$$

$$f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp(-c^2), \quad \boldsymbol{c} = \frac{\boldsymbol{v}}{\sqrt{T}}, \quad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{S} = \frac{2\boldsymbol{q}}{nT^{3/2}}.$$

- При $\mathrm{Pr} = 1$ S-модель сводится к модели БГК [Bhatnagar et al., 1954]
- Степень разреженности газа определяется т.н. параметром разреженности δ, который обратно пропорционален числу Кнудсена Kn:

$$\delta = \frac{l_* p_*}{\mu_* \sqrt{2R_g T_*}}, \quad \mathrm{Kn} = \frac{\lambda_*}{l_*} \quad (\text{для твердых сфер } \delta = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\mathrm{Kn}} \approx \frac{0.9}{\mathrm{Kn}})$$

Трудности численного решения (масштаб задачи)

Хотя кинетическое уравнение с приближенным интегралом столкновений проще уравнения Больцмана с точным интегралом, оно все еще остается очень сложным интегро-дифференциальным уравнением.

Основные сложности численного решения состоят в следующем:

- Большая размерность задачи: шестимерное фазовое пространство + время
- Сложная геометрия решаемых задач
- Решение уравнения (функция распределения) содержит разрывы даже для гладких граничных и начальных условий
- Уравнение становится жестким в областях течения с малым локальным числом Кнудсена Kn, так как в правую часть входит коэффициент $\frac{1}{\mathrm{Kn}}$
- Разностная схема должна быть консервативной по правой части, что является довольно нетривиальным требованием к методу решения
- Моделируемые течения могут быть очень разномасштабными по числу Кнудсена: одновременно содержать области свободномолекулярного течения и сплошносредного течения

Общий вид метода дискретных скоростей (I)

- Обозначим через $\boldsymbol{\xi}_j = (\xi_{1j}, \xi_{2j}, \xi_{3j})^T$ и ω_j центры и объемы ячеек скоростной сетки. Функции $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{f}^{(S)}$ будем задавать в центрах ячеек скоростной сетки, интерпретируя их как векторы длины N_ξ с компонентами

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

- Кинетическое уравнение переписывается в виде системы из N_ξ уравнений

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{f} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}(\boldsymbol{\Xi}_\alpha \circ \boldsymbol{f}) = \boldsymbol{J}, \quad \boldsymbol{J} = \nu(\boldsymbol{f}^{(S)} - \boldsymbol{f}).$$

- Здесь $\boldsymbol{\Xi}_k$ — вектор, компонентами которого являются k-компонента молекулярной скорости во всех узлах сетки: $\boldsymbol{\Xi}_k = (\xi_{k1}, \xi_{k2}, \xi_{k3}, \ldots \xi_{kN_\xi})^T$; через $\circ$ обозначена операция покомпонентного умножения двух векторов: $c = a \circ b$ – вектор с компонентами $c_i = a_i b_i$.
- Число уравнений определяется размером сетки в скоростном пространстве и может быть достаточно большим (десятки и даже сотни тысяч).
- Для построения решения могут использоваться современные разностные схемы как на неподвижной, так и на подвижной пространственной сетке.

Общий вид метода дискретных скоростей (II)

- Полудискретная схема для нахождения значений функции распределения $\boldsymbol{f}_i$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{f}_i|V_i|) = \boldsymbol{R}_i, \quad \boldsymbol{R}_i = -\sum_l \boldsymbol{\Phi}_{li} + |V_i|\boldsymbol{J}_i,$$

$$\boldsymbol{\Phi}_{li} = \int_{A_{li}} \hat{\boldsymbol{\xi}}_{nli} \circ \boldsymbol{f}\, ds, \quad \hat{\boldsymbol{\xi}}_{nli} = \hat{\boldsymbol{\xi}}_\alpha n_{\alpha li},$$

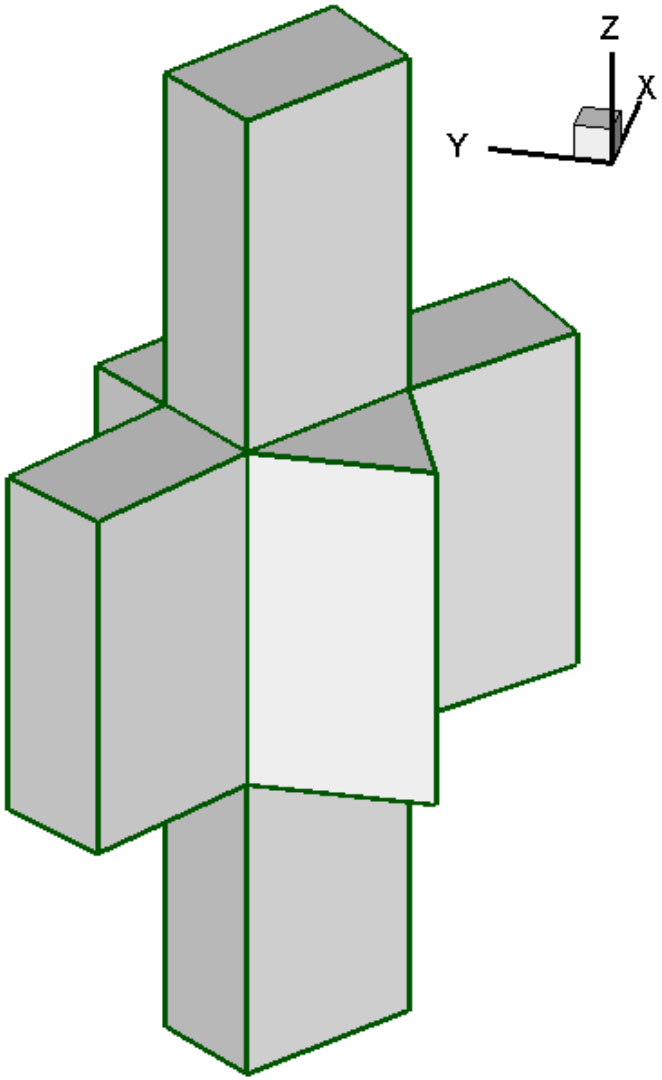
  где $\boldsymbol{n}_{li} = (n_1, n_2, n_3)^T_{li}$ – внешняя единичная нормаль к грани A_{li} (l — номер грани) пространственной ячейки V_i.

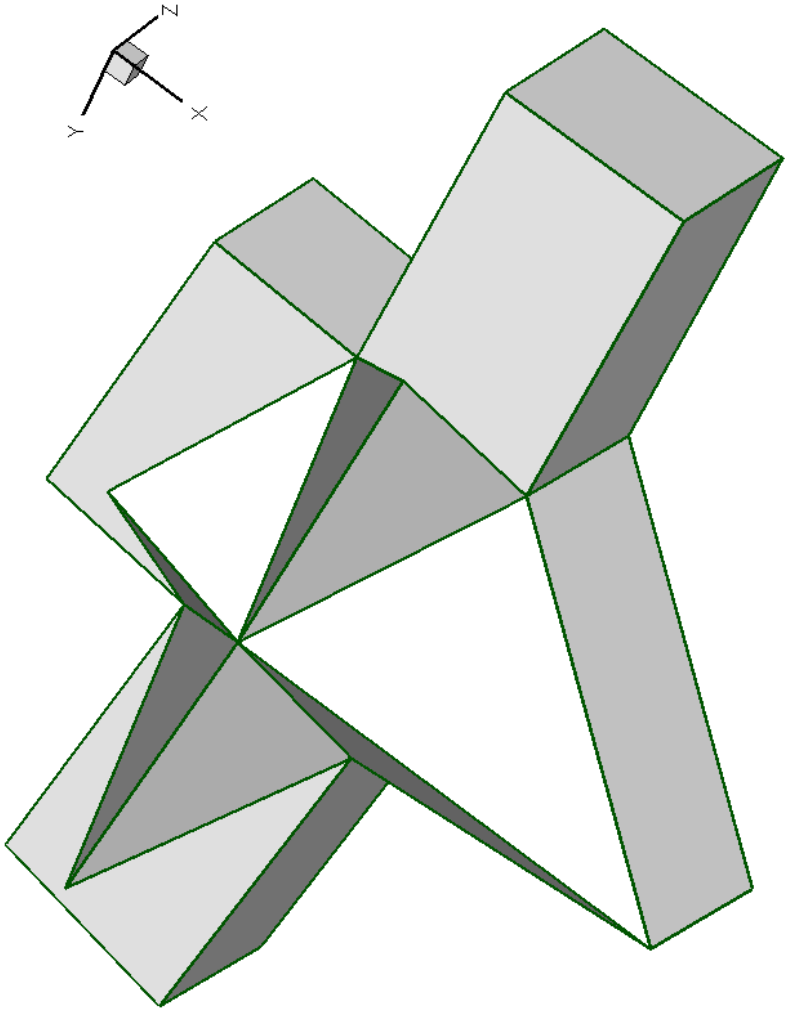
- Процедура многомерной реконструкции выдает $\boldsymbol{f}^-_{li}$, $\boldsymbol{f}^+_{li}$ для каждой грани.
- Для неподвижной сетки выражение для численного потока $\boldsymbol{\Phi}_{li}$ имеет вид

$$\boldsymbol{\Phi}_{li} = \tfrac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\xi}}_{nli} \circ \left[(\boldsymbol{f}^-_{li} + \boldsymbol{f}^+_{li})) - \boldsymbol{K}_{li} \circ (\boldsymbol{f}^+_{li} - \boldsymbol{f}^-_{li})\right] |A_{li}|, \quad \boldsymbol{K}_{li} = \mathrm{sign}\hat{\boldsymbol{\xi}}_{nli}.$$

- Получившийся метод можно интерпретировать как полудискретную схему решения системы большого числа линейных уравнений сохранения, связанных через нелинейный жесткий источник (интеграл столкновений).
- Стационарные задачи: неявный метод с LU-SGS [Yoon and Jameson, 1988], [Men'shov and Nakamura, 1995], адаптированный для кинетического уравнения
- Для нестационарных течений на подвижной сетке используется метод TVD RK2 [Shu, 1988, Gottlieb and Shu, 1998]

Типичные шаблоны TVD схемы на произвольной сетке





Неоднородная аппроксимация оператора переноса

- Для нахождения численных потоков требуются значения $\boldsymbol{f}$ на гранях ячеек
- Общая формула для вычисления $\boldsymbol{f}_{li}$ на грани l ячейки i интерполяцией на границу изнутри ячейки

$$\boldsymbol{f}_{li} = \boldsymbol{f}_i + \boldsymbol{f}_{li}^{\text{поправка}}$$

- Пространственный метод произвольного порядка: $\boldsymbol{f}_{li}$ выражаются с помощью метода наименьших квадратов через средние значения в ячейках шаблона реконструкции V_{m_i} в локальной системе координат [Dumbser et al., 2007, Titarev et al., 2010, Титарев, 2010, Tsoutsanis et al., 2010] по формуле

$$\boldsymbol{f}_{li}^{\text{поправка}} = \psi_i^{3d} \cdot \left(\sum_{m=0}^{M} \omega_{iml} \boldsymbol{f}_{m_i} - \boldsymbol{f}_i \right).$$

- Локально-одномерный метод для гексаэдров: $\boldsymbol{f}_{li}$ находятся одномерной интерполяцией в направлении нормали к грани:

$$\boldsymbol{f}_{li}^{\text{поправка}} = \psi_{li}^{1d}(\boldsymbol{S}_L, \boldsymbol{S}_R)\Delta_l,$$

где Δ_l – рассстояние от центра ячейки i до центра грани l; $\boldsymbol{S}_L$ и $\boldsymbol{S}_R$ - левая и правая оценки наклона решения.

- В обоих случаях функция ψ – т.н. ограничитель наклонов

Нахождение макропараметров для S-модели

- "Наивный" способ расчета макропараметров:

$$\left(n, n\boldsymbol{u}, \frac{3}{2}nT + n\boldsymbol{u}^2\right) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \left(1, \boldsymbol{\xi}_j, \xi_j^2\right) f_j \omega_j.$$

- В [Titarev, 2007] предложено находить $\boldsymbol{W} = (n, u_1, u_2, u_3, T, q_1, q_2, q_3)^T$ из условий вывода приближенного интеграла столкновений:

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{W}) = \sum_{j=1}^{N_\xi} \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{\xi}_j \\ \xi_j^2 \\ \boldsymbol{v}_j v_j^2 \end{pmatrix} (f_j^{(S)} - f_j)\omega_j + \begin{pmatrix} 0 \\ \boldsymbol{0} \\ 0 \\ 2\,\mathrm{Pr}\,\boldsymbol{q} \end{pmatrix} = \boldsymbol{0}.$$

  Здесь индексы i, n опущены для простоты.

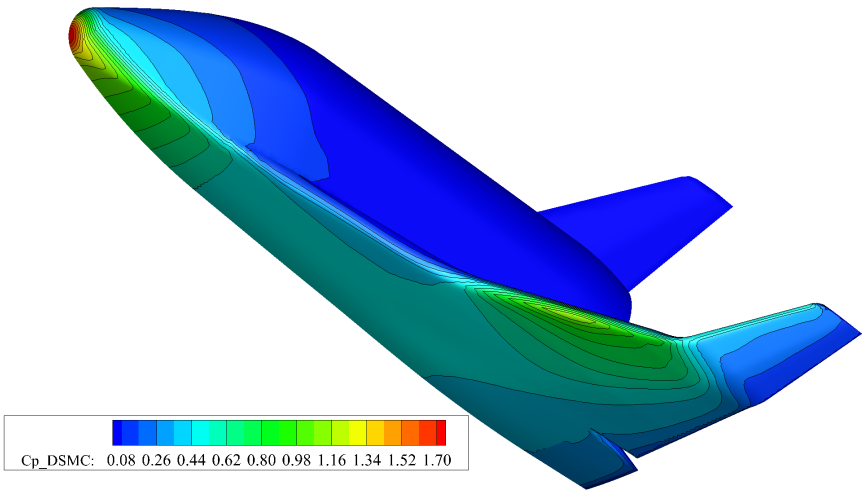
- Новый метод применим к любому приближенному интегралу столкновений; протестирован на моделях Е.М. Шахова, В.А. Рыкова
- Для радикального ускорения вычислений предложена приближенная формула для якобиана [Титарев, 2010].
- В случае $\mathrm{Pr} = 1$ первые 5 уравнений сводятся к методу [Mieussens, 2000] [Gusarov and Smurov, 2002], полученному из других соображений.

Резюме по численному методу

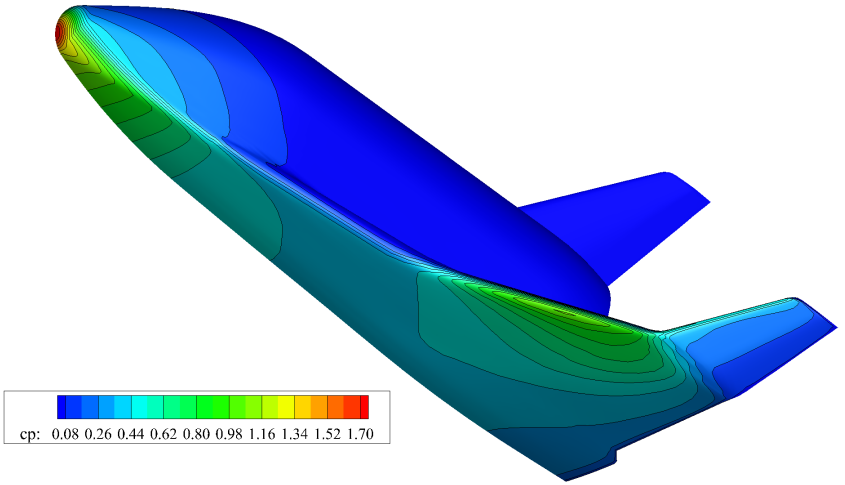
- Произвольные трехмерные сетки в физическом пространстве (структурированные из шестигранников, неструктурированные из тетраэдров, призм и пирамид)
- Произвольные трехмерные сетки в скоростном пространстве (структурированные из шестигранников, неструктурированные из тетраэдров, призм и пирамид)
- Численный метод консервативен по интегралу столкновений для произвольных чисел Кнудсена
- Для стационарных задач реализована одношаговая неявная схема типа LU-SGS
- Для нестационарных задач используется явный метод TVD RK на подвижной сетке в физическом пространстве
- Масштабируемость до нескольких тысяч ядер архитектуры x86
- Численный метод и пакет программ могут быть использованы для решения промышленных задач.

Сравнение с кодом SMILE

- Результаты взяты из [Titarev et al., 2020]
- Расчеты кодом SMILE [Ivanov et al., 2007], реализующим метод прямого статистического моделирования, проводились сотрудниками ИТПМ СО РАН Е.А. Бондарем, П.В. Ващенковым и А.А. Шевыриным
- Высота $H = 90$ км, воздух без учета внутренних степеней свободы, $M_\infty = 10$, угол атаки $\alpha = 25$, расчетная сетка больше 10 миллиардов узлов
- Видно отличное согласие расчетов для коэффициента давления c_p.



Слева - SMILE



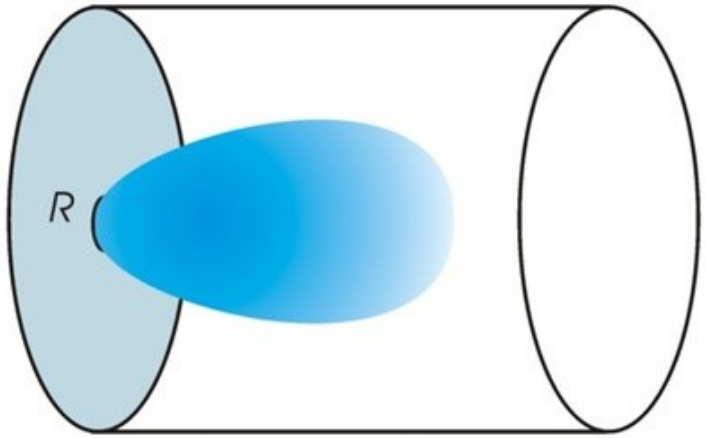
справа - Несветай

Импульсная лазерная абляция

- Практически важным примером сложного нестационарного течения разреженного газа является разлет газового облака в окружающее пространство вследствие испарения с твердой поверхности, вызванного наносекундным лазерным облучением умеренной интенсивности.
- Импульсная лазерная абляция (испарение) широко используется в современных технологиях осаждения тонких пленок, синтеза наночастиц и обработки поверхности [Eason, 2007, Bauerle, 2011].
- При этом типичным является абляция в газ низкого давления (1 – 100 Па), что требует учета эффектов разреженного газа. В результате испарения образуется быстро расширяющееся облако пара.
- В приложениях требуется построить картину течения на временах, равных сотням или тысячам времен испарения.
- Для проверки полученных результатов желательно провести расчеты с помощью нескольких разных математических моделей.

Постановка задачи

- Задача решается в полупространстве $x \geq 0$. На границе области $x = 0$ принимается г.у. полного поглощения падающих молекул.
- В течении интервала времени $0 < t \leq \tau$ на круглое пятно на на поверхности $y^2 + z^2 \leq R_0^2$ падает луч лазера, что приводит к испарению молекул и образованию газового облака После окончания процесса испарения внутри пятна принимается граничное условие полного поглощения падающих молекул.
- С течением времени фазе газовое облако движется вдоль оси x_1 и расширяется в радиальном направлении, занимая в дальнейшем довольно большую пространственную область размером $\approx 10R_0$.
- Решение задачи в данной постановке однозначно определяется количеством испаренного вещества и размером пятна испарения.

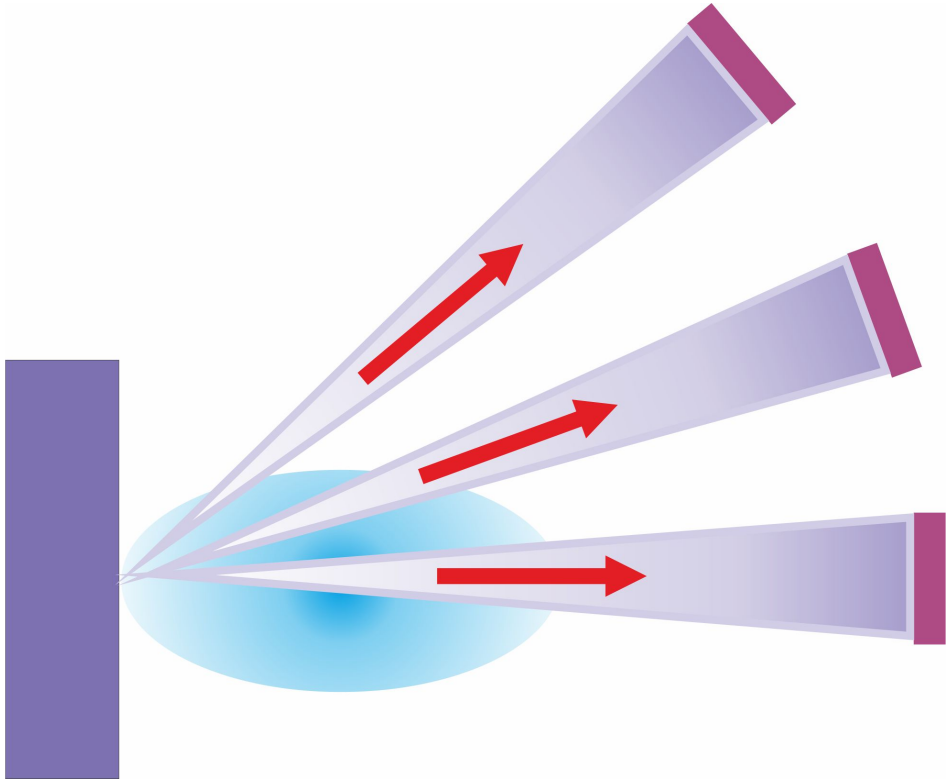


Цель настоящих расчетов

- В расчетах методом прямого численного моделирования (ПСМ) Монте-Карло получались сложные и не совсем понятные зависимости основных расчетных величин (функции распределения скоростей и средняя энергия газа на детекторе)
- Для проверки полученных результатов было решено провести сравнительный численный анализ для различных значений интенсивности луча лазера с использованием двух вычислительных подходов:
  - Первый подход основан на использовании метода ПСМ [Берд, 1981], реализованного Морозовым А.А. в авторском коде LasInEx [Morozov, 2018, Morozov et al., 2021].
  - Второй подход основан на численном решении кинетического уравнения Бхатнагара-Гросса-Крука [Bhatnagar et al., 1954] с использованием оригинального метода дискретной скоростей на подвижной расчетной сетке [Titarev and Morozov, 2022], реализованного в коде Несветай, разрабатываемом Титаревым В.А.
- Результаты расчетов испарения газа для различных значений давления фонового газа кодами LasInEx и Несветай использовались в совместных работах авторов [Titarev and Morozov, 2022], [Morozov and Titarev, 2022], [Morozov et al., 2024].

Расчет параметров частиц, летящих на детектор

- В экспериментах небольшой детектор обычно располагается на большом расстоянии от мишени в направлении, нормальном к поверхности испарения.
- Одним из основных инструментов экспериментального контроля процессов лазерной абляции и десорбции являются измерения так называемых времяпролетных распределений частиц, проходящих через этот детектор.
- Прямой расчет средней энергии требует огромных вычислительных затрат, так как связан с необходимостью вычислять поле течения на расстояниях $D \sim 1000 R_0$.



Расчет параметров частиц, летящих на детектор II

- Альтернативный способ рассчитать энергию только тех частиц, вектор скорости которых лежит в конус с малым углом полураствора α.
- Начиная с момента практически свободномолекулярного разлета облака именно эти частицы попадут на детектор размера $D\tan(\alpha)$
- Функция распределения скоростей молекул в конусе $f_\alpha(t, \xi_r, \alpha)$ рассчитывается как интеграл по сферической поверхности при заданном ξ_r:

$$f_\alpha(t, \xi_r, \alpha) = \int\limits_{\xi_x>0, |\xi=\xi_r|, \beta\le\alpha} \bar{f}\, dS, \quad \bar{f}(t, \boldsymbol{\xi}) = \int\limits_{R^3} f dx, \quad \beta = \arcsin\frac{\sqrt{\xi_y^2 + \xi_z^2}}{|\xi|}$$

- Расчет средней энергии $E_{\text{tof}}(t, \alpha, \Theta)$ частиц ведется по формулам

$$E_{\text{tof}}(t, \alpha, \Theta) = \frac{E}{E_0}, \quad E = \frac{\frac{1}{2}m\int\limits_0^\infty \int\limits_{\beta\le\alpha} \xi^2 f d\xi dx}{\int\limits_0^\infty \int\limits_{\beta\le\alpha} f d\xi dx}, \quad E_0 = 2kT_0,$$

где E_0 – средняя кинетическая энергия одиночной испаренный молекулы [Morozov, 2008].

Прямое статистическое моделирование

- Используется традиционная схема прямого статистического моделирования (ПСМ) Монте-Карло [Bird, 1994] с некоторыми элементами "усложненной"версии [Bird, 2007]. Физическая область делится на вычислительные ячейки, и решение изменяется дискретными временными шагами. Столкновения между частицами моделируются по схеме “без счетчика времени” (no time counter).
- Схема ПСМ реализована вторым автором А.А. Морозовым в параллельном коде LasInEx (Laser-Induced-Expansion). Ранее этот код успешно использовался во многих исследованиях импульсной абляции.
- Длина расчетной области в начальный момент времени составляла 0.5R, а затем в ходе расчета она увеличивалась каждые 1000-2000 шагов по времени таким образом, чтобы частицы не вылетали из расчетной области. Сетка задавалась с единым размером ячеек.
- Для более точного моделирования столкновений на каждом этапе столкновений использовались временные столкновительные подъячейки [Bird, 2007].
- Некоторые режимы (с плотным начальным облаком, например $\theta > 10$ для $b = 10$) рассчитывались с использованием “равновесной” модификации метода ПСМ [Titov and Levin, 2007].

Типичные расчетные режимы

- Удобно использовать безразмерные параметры:
  - число монослоев Θ; одному монослою соответствует такое количество частиц, что они полностью покрывают испаряющуюся поверхность.
  - безразмерный радиус пятна испарения $b = R_0/(u_T\tau)$, где $u_T = \sqrt{8kT_0/(\pi m)}$ – средняя тепловая скорость частиц при испарении.
  - параметр разреженности $\delta = R_0 p_0/(\mu_0\beta_0)$, где $\beta_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ – наиболее вероятная скорость молекул
- Типичный размер пятна испарения при лазерной абляции $R_0 = 0.1\ldots1$ мм. Для $m = 12\ldots200$ а.е.м. и $T_0 = 4000\ldots8000$ K получаем тепловую скорость $u_T = 700\ldots8000$ м/с. В результате для длительности испарения $\tau = 10$ нс, безразмерный радиус пятна испарения $b = 3\ldots150$.
- Задаем безразмерные параметры b и $\theta \rightarrow$ получаем параметры δ и τ_*, требуемые для решения модели БГК.
- Для модели твердых сфер

$$\delta = \frac{8}{5\sqrt{\pi}}\frac{1}{\mathrm{Kn}} = \frac{32\sqrt{2}}{5\sqrt{\pi}}\theta b.$$

Типичные расчетные режимы II

- При решении кинетического уравнения во избежание деления на ноль начальное состояние вакуума замещается фоновым газом с плотностью

$$n_b = 10^{-13} n_0$$

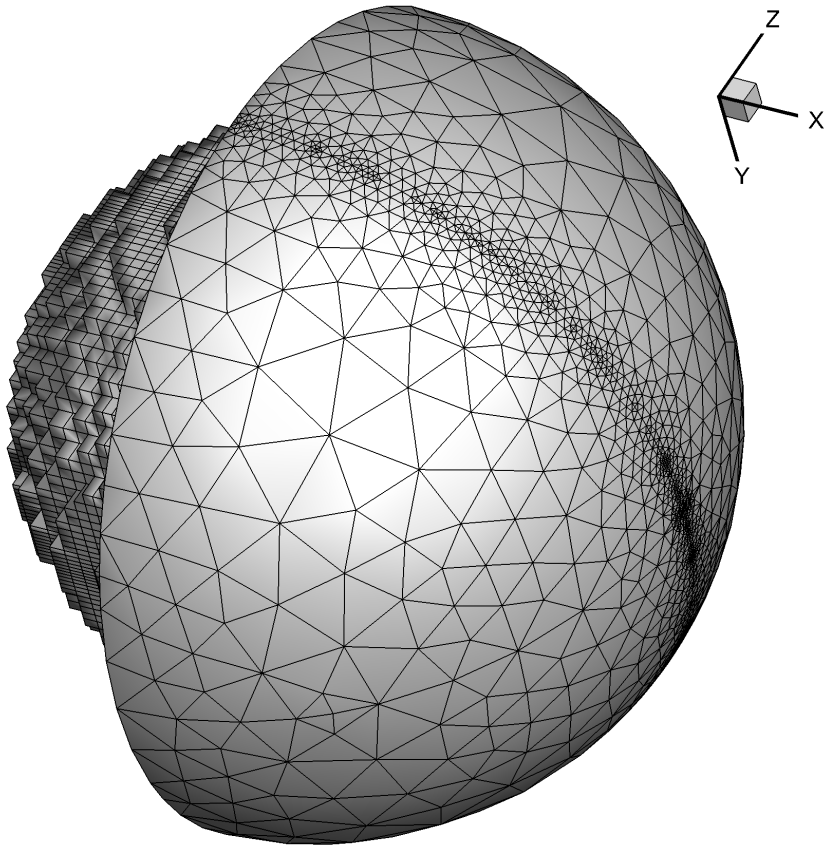
- Значение температуры фонового газа не имеет большого значения и для простоты принимается равным

$$T_b = 0.03\, T_0.$$

- В начальный момент времени задается максвелловская функция распределения скоростей с плотностью и температурой фонового газа.
- Результаты будут представлены для следующих режимов:
  - безразмерный размер пятна $b = 10$
  - число монослоев $\theta = 0.1,\ 1,\ 10,\ 100$ ($\delta = 20.4258,\ 204.258,\ 2042.58,\ 20425.8$).
  - безразмерное время испарения $\tau_* = 0.08862$

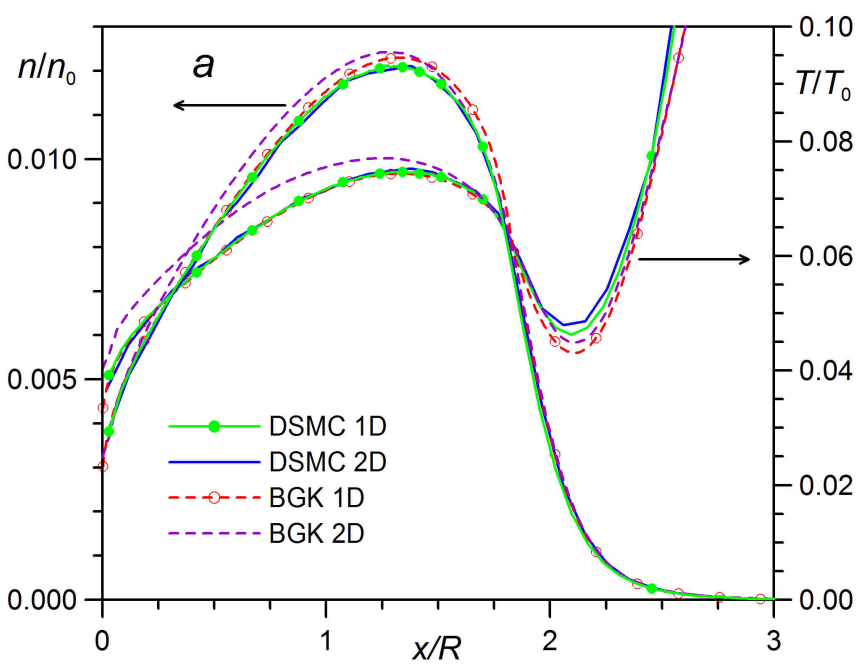
Организация расчетов

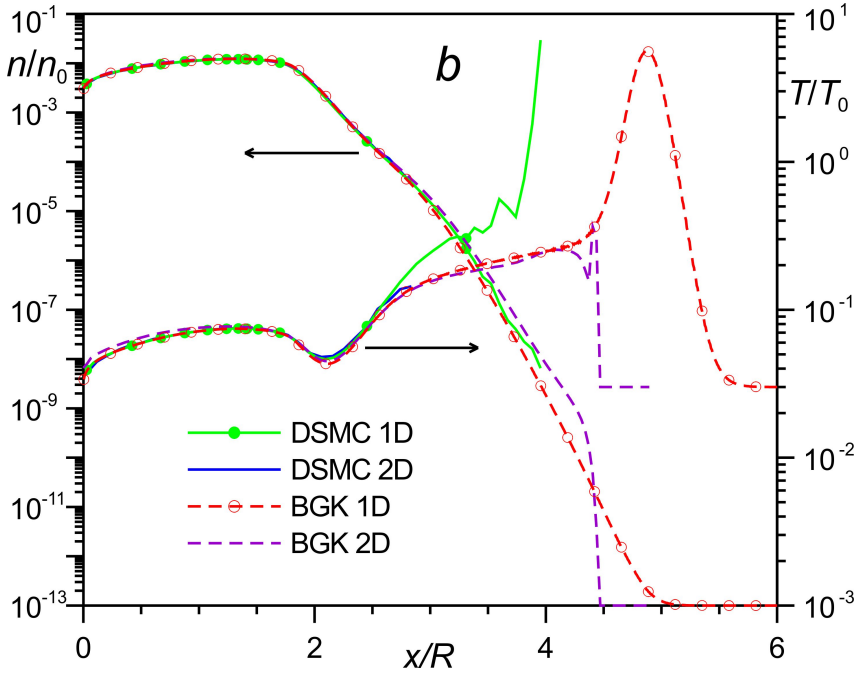
- В физическом пространстве используется четвертинка трехмерной области с двумя плоскостями симметрии. Число ячеек по угловой координате равно 8. . . 12. Начальный размер $0 \leq x \leq 0.05 R_0$
- Скорость расширения расчетной области в физическом пространстве переменная и более гибко учитывает особенности течения при заданных параметрах b, θ и δ.
- Скоростная сетка позволяет рассчитывать $E_{\mathrm{tof}}(t, \alpha, \Theta)$ не только для детектора, стоящего вдоль оси X, но и для детекторов, стоящих под углом.
- Вычисления проводились на суперкомпьютерах ЦКП “Информатика” ФИЦ ИУ РАН.



Осевые профили плотности и температуры.

Режим $b = 10$, $\theta = 100$, время $t/\tau = 10$.



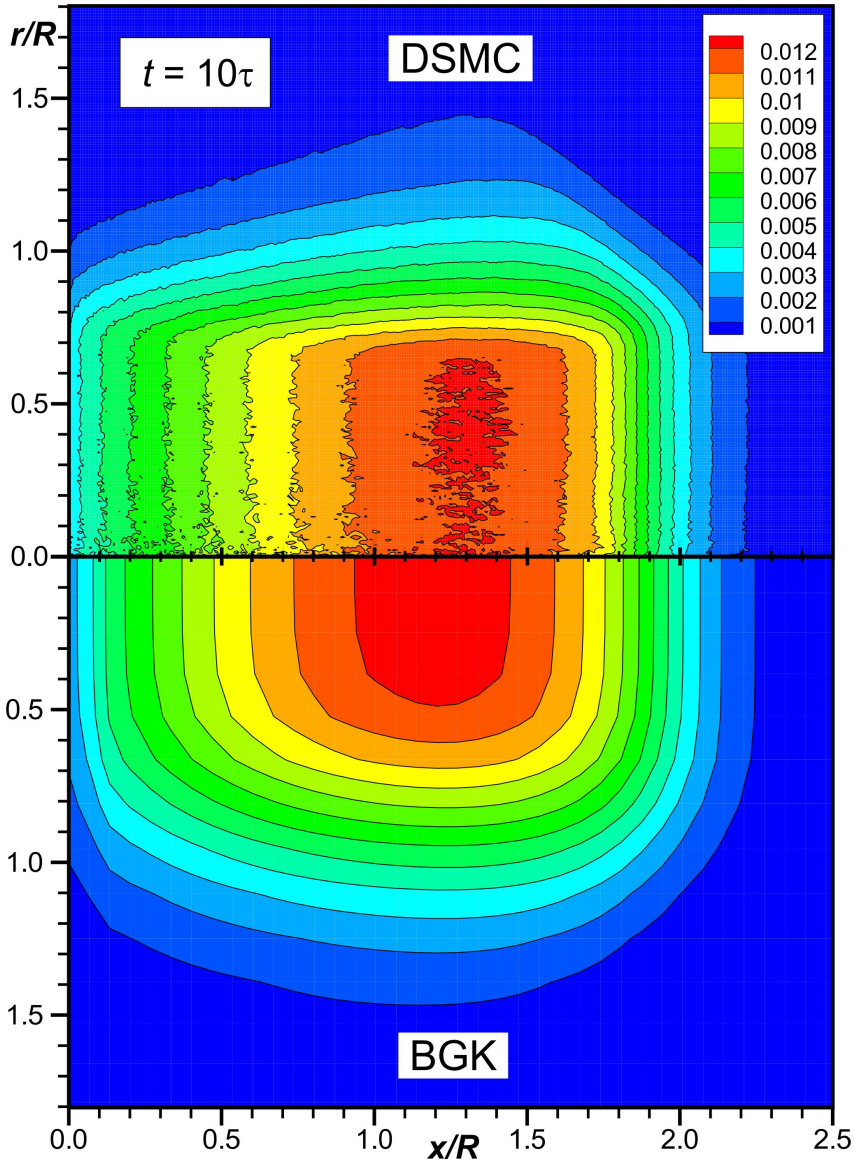


Было проведено множество тестовых расчетов с целью оптимального выбора размера расчетной области в пространстве скоростей.

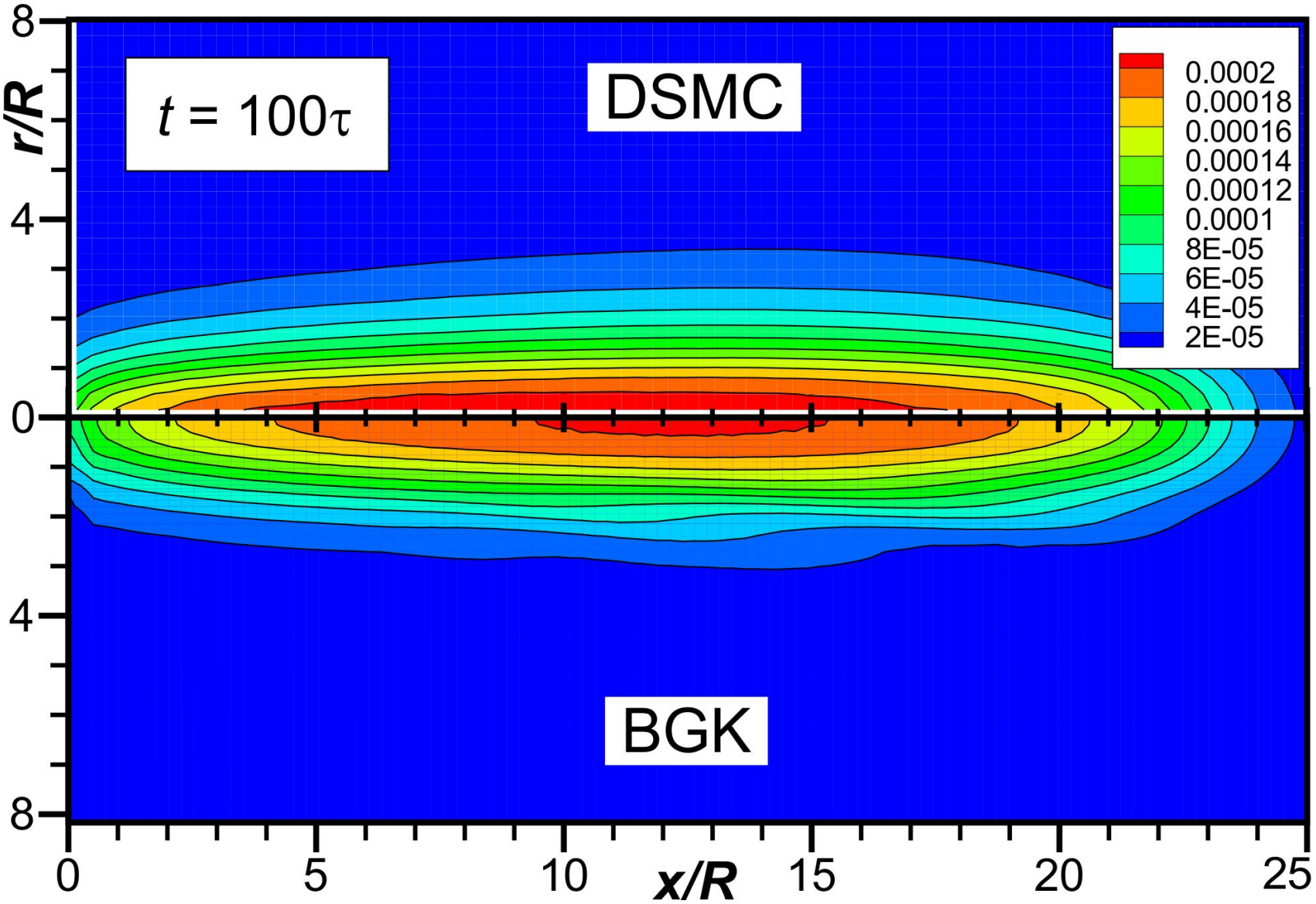
Видно, что ограничение размера расчетной области не ухудшает точность расчета.

Детали профиля ударной волны неважны.

Поле плотности n/n_0 для $b = 10$, $\theta = 100$, $t/\tau = 10$.

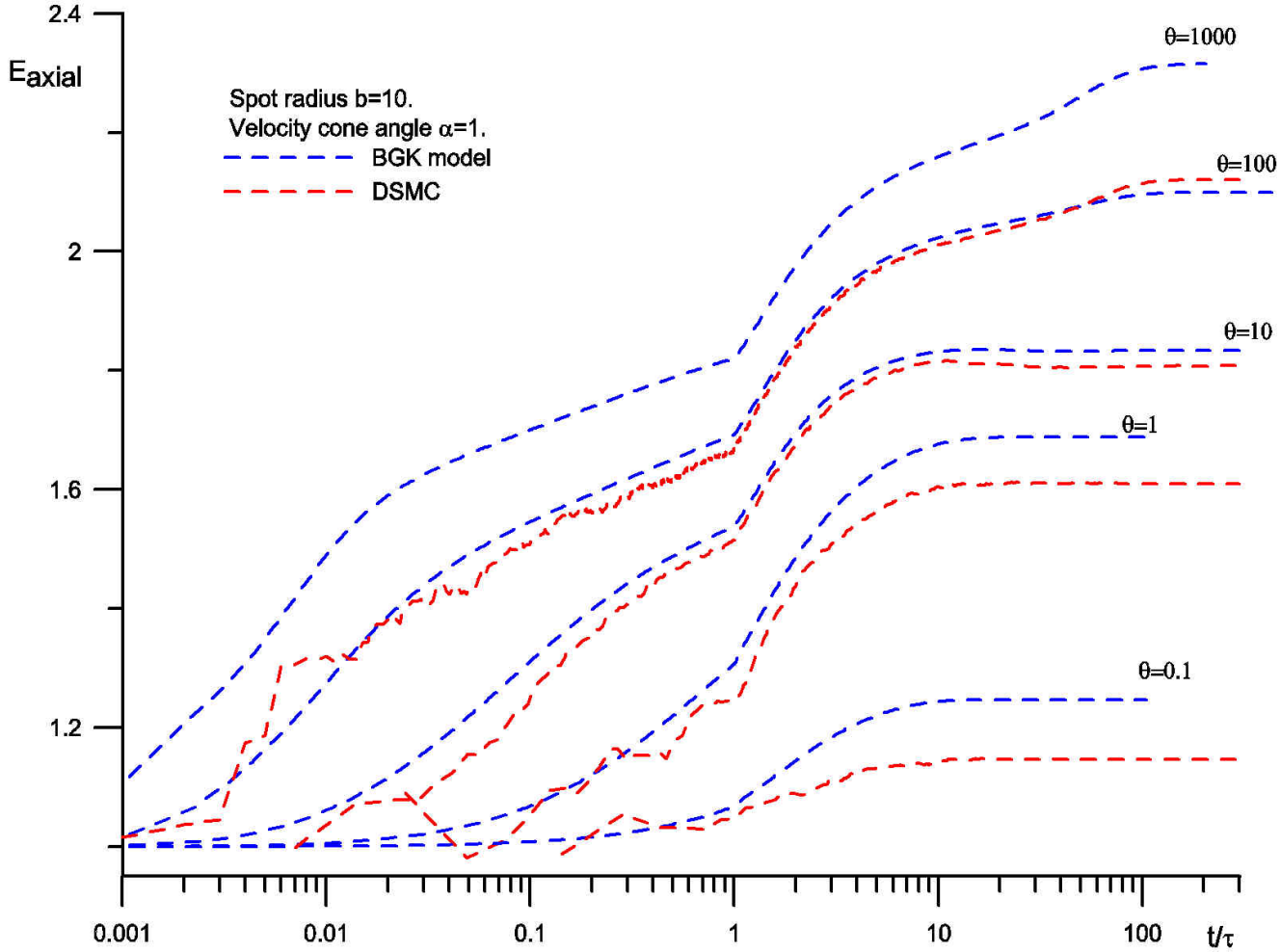


Поле плотности n/n_0 для $b = 10$, $\theta = 100$, $t/\tau = 100$.



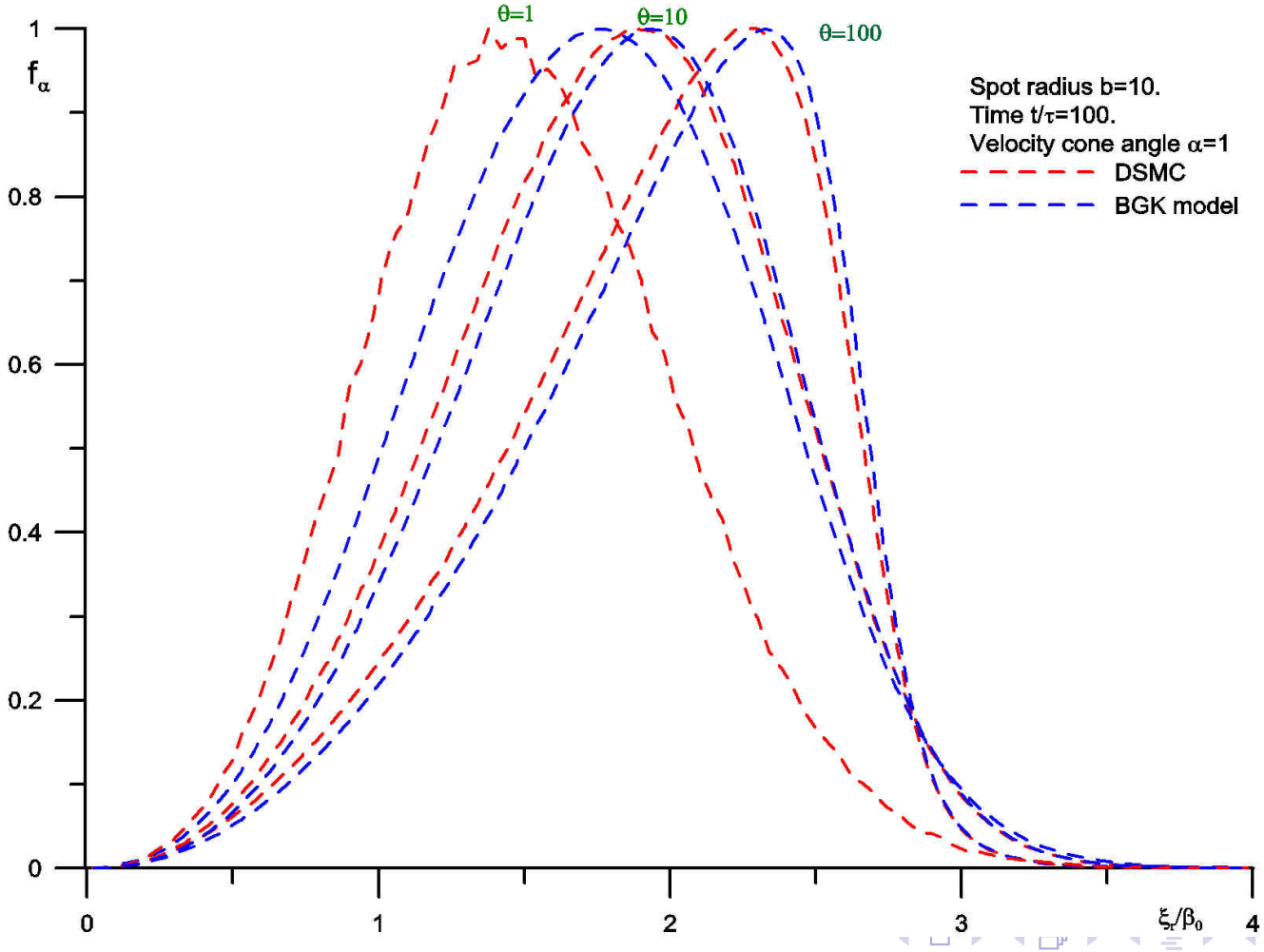
Средняя энергия $E_{\mathrm{tof}}(t, \alpha, \Theta)$, осевой детектор

Расчет $E_{\mathrm{tof}}(t, \alpha, \Theta)$ на основе разных моделей для осевого детектора.
Для этой величины важен точный расчет функции распределения f.
С течением времени средняя энергия $E_{\mathrm{tof}}(t, \alpha, \Theta)$ должна выходить на полку.



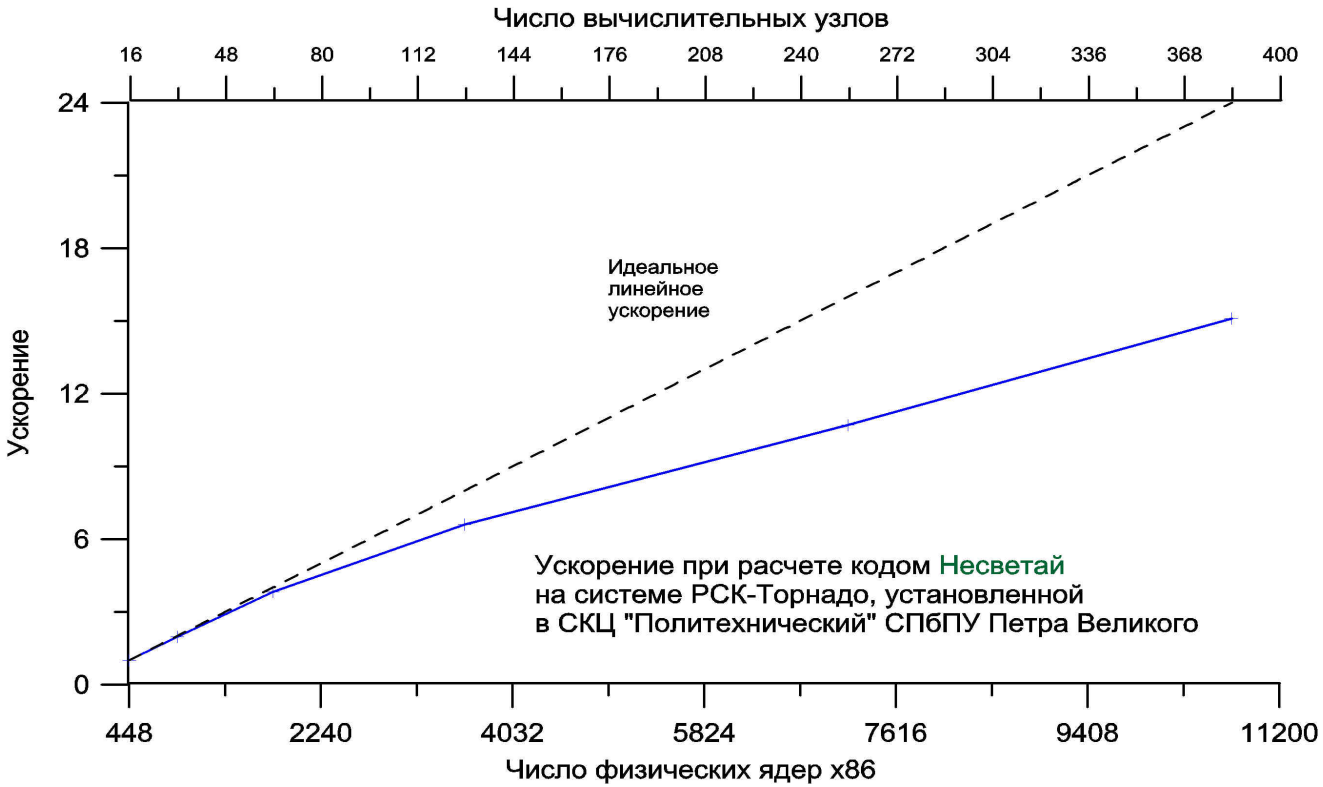
Функция распределения скоростей, осевой детектор

Сравнение профилей функции распределения скоростей молекул в конусе $f_\alpha(t, \xi_r, \alpha)$, полученных кодами LasInEx и Несветай.
Для этой величины важен точный расчет функции распределения f, а не только макропараметров.



Тестирование масштабируемости кода Несветай

- Двухуровневая модель параллельных вычислений: декомпозиция скоростной сетки на блоки для каждого MPI процесса и декомпозиция пространственной сетки для OpenMP нитей (8...16 нитей на каждый MPI процесс).
- При увеличении числа ядер от 448 до 10752 получено ускорение в 15 раз.
- С учетом ограничений топологии вычислительной сети (сокращенное количество связей 2:1), полученные результаты следует признать отличными.

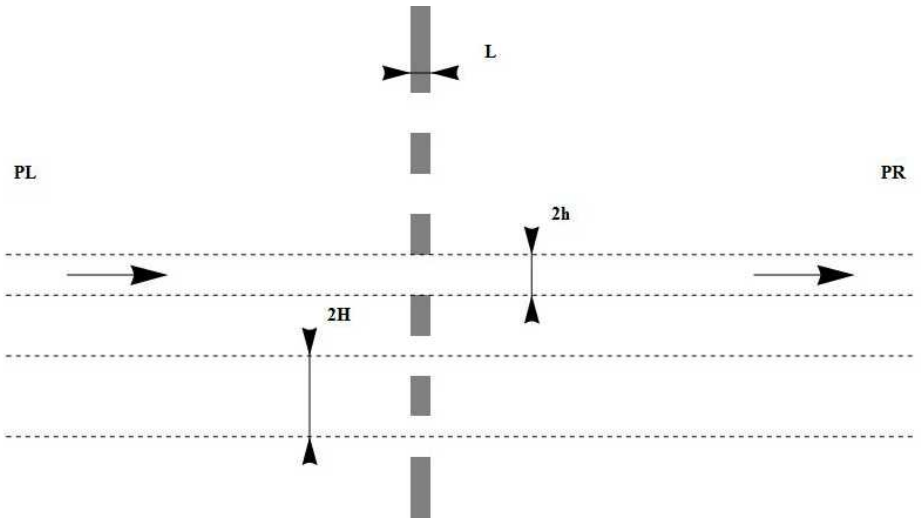


Актуальность моделирования течений в мембранах

- Области применения современных мембранных технологий включают фильтрацию (очистку) жидкостей, разделение газовых смесей, системы обнаружения компонент и другие.
- Современные технологии имеют дело с различными материалами упорядоченной и неупорядоченной структуры [Dou et al., 2021, Taassob et al., 2021, Wu et al., 2017, Memisoglu et al., 2020, Tina et al., 2024].
- Геометрия мембраны характеризуется долей проективной площади и объема пор (геометрическая проницаемость), удлиннением пор, формой пор в поперечном сечении и в продольном направлении.
- Использование современных технологий позволило добиться улучшения характеристик мембраны за счет увеличения количества пор на единицу площади [Dou et al., 2021].
- В некоторых приложениях в качестве высокопроницаемых мембран используются обычные проволочные сетки для создания потока с заданными свойствами [Popov and Tcheremissine, 2008, Plotnikov, 2018].

Постановка задачи

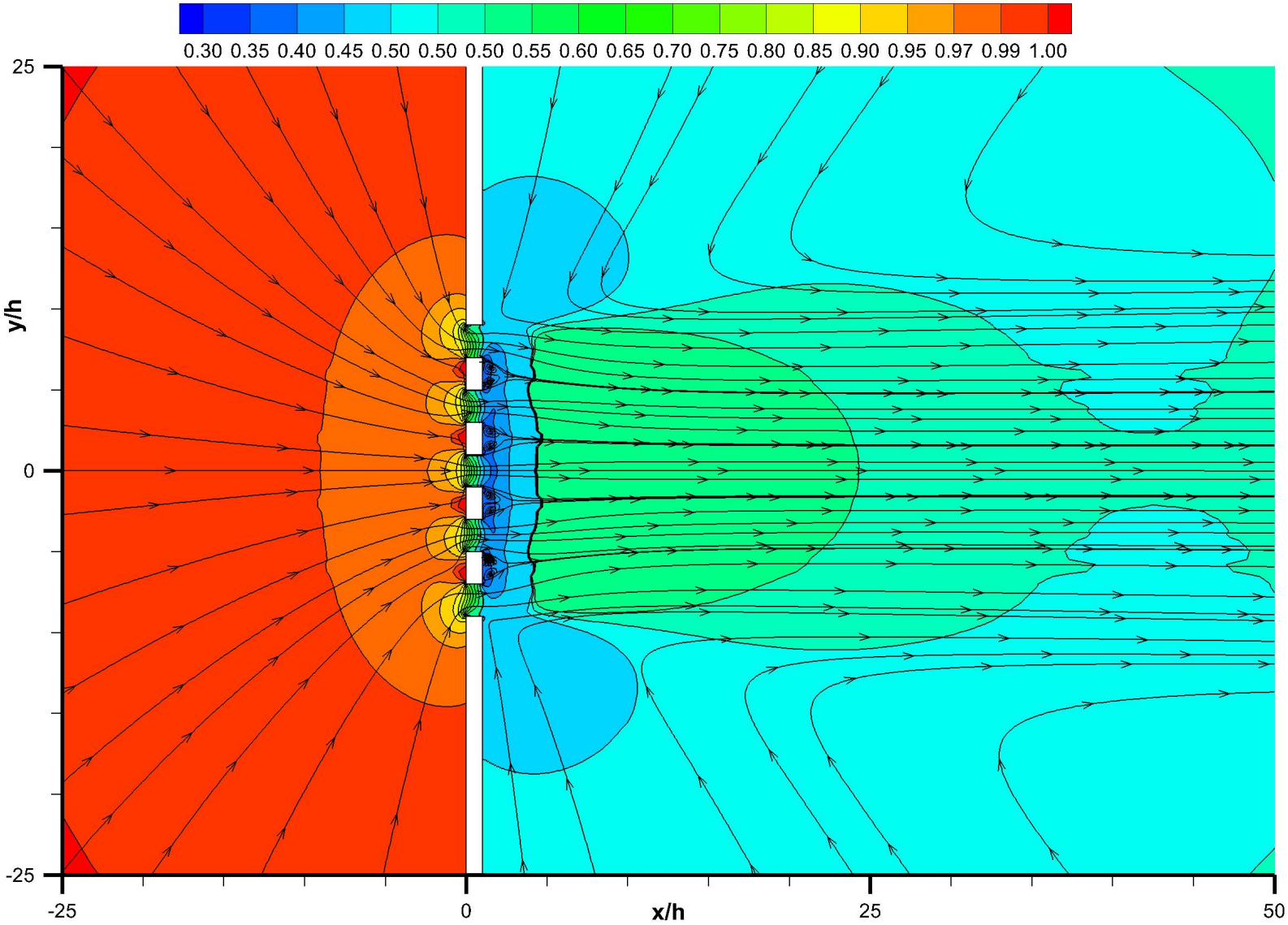
- Рассмотрим течение одноатомного разреженного газа через периодическую систему плоских каналов (пор), имитирующую течение газа через мембрану,
- Характеристики мембраны: геометрическая проницаемость $K = h/H$ и относительная длина пор $L_h = L/h$.
- Здесь h – полувысота (радиус в цилиндрическом случае) поры, H – полупериод структуры.
- Схематическое изображение течения для $K = 0.5$, $L_h = 1$ и 5 каналов:



- Частный случай $K = 0$ $(H = \infty)$ соответствует обычному течению в плоском канале, соединяющем два бесконечно больших резервуара.

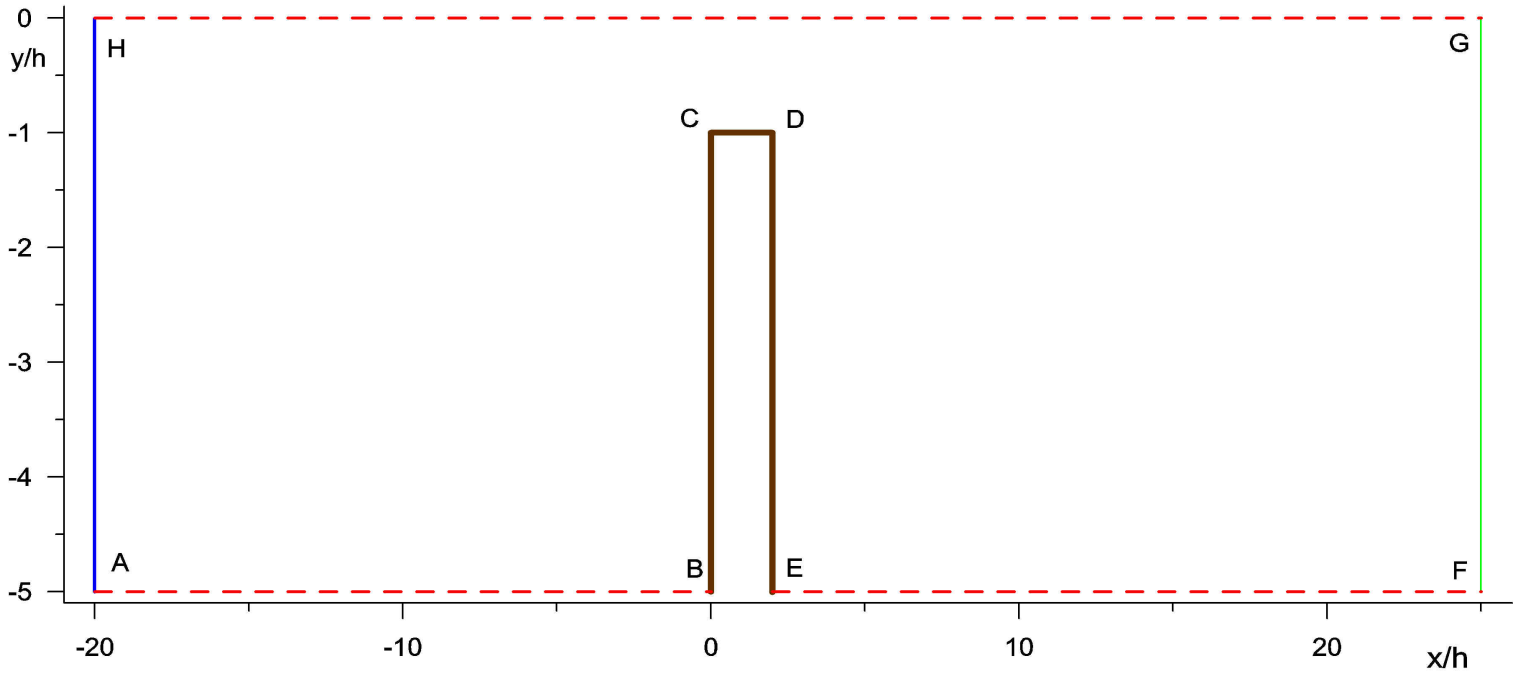
Картина течения в переходном режиме

Перепад давлений в два раза, $\delta = 20$ $(\mathrm{Kn} \approx 0.05)$ [Воронич and Титарев, 2023].



Постановка задачи с учетом периодичности

- Считаем геометрию бесконечной по y с повторением каналов.
- Схема расчетной области и постановки граничных условий:



- Частный случай $K = 0$ $(H = \infty)$ соответствует обычному течению в плоском канале, соединяющем два бесконечно больших резервуара.
- Основной расчетной характеристикой течения является массовый расход $\dot{M}$

$$\dot{M}(x) = \int mnu_x dy.$$

Предыдущие расчеты

- В нашей работе [Воронич et al., 2025] был представлен численный анализ течения разреженного газа через плоскую периодическую систему прямоугольных каналов (мембрану) в широком диапазоне чисел Кнудсена от свободномолекулярного до сплошносредного.
- Было показано существенное отличие результатов от данных для одиночных плоских каналов, особенно для коротких пор. Новой особенностью является появление при уменьшении числа Кнудсена отрыва потока внутри канала для случая коротких пор.
- Настоящее исследование является продолжением [Воронич et al., 2025] и посвящено анализу влияния температуры поверхности мембраны на поле течения и массовый расход газа. Рассматриваются случаи как нагретой, так и охлажденной поверхности.
- Проводятся детальные сравнения с результатами [Воронич et al., 2025] во всем диапазоне чисел Кнудсена.
- Описываются необходимые изменения в постановке граничных условий, потребность в которых возникает при расчете с температурой мембраны, отличающейся от температуры невозмущенного газа.

Параметры задачи

- В качестве газа рассмотрим гелий: $m = 6.65 \times 10^{-27}$ кг, $R = 2077.1$ J/(кг· K).
- Динамическую вязкость μ определим в соответствии с законом твердых сфер:

$$\mu = \mu_{\text{ref}} \sqrt{\frac{T}{T_{ref}}}, \quad T_{ref} = 273.15K, \quad \mu_{ref} = 0.000018 \text{ Па} \cdot \text{с}$$

- Размерное давление слева для НС расчетов p_L :

$$p_L = 0.0192 \frac{\delta}{h}.$$

  В расчетах полагаем $h = 0.1$ мм $\rightarrow$ для $\delta = 1$ получаем $p_L = 192$ Па.
- Температура поверхности мембраны T_s будет варьироваться в пределах

$$T_s = (0.5 \ldots 1.5)\, T_L$$

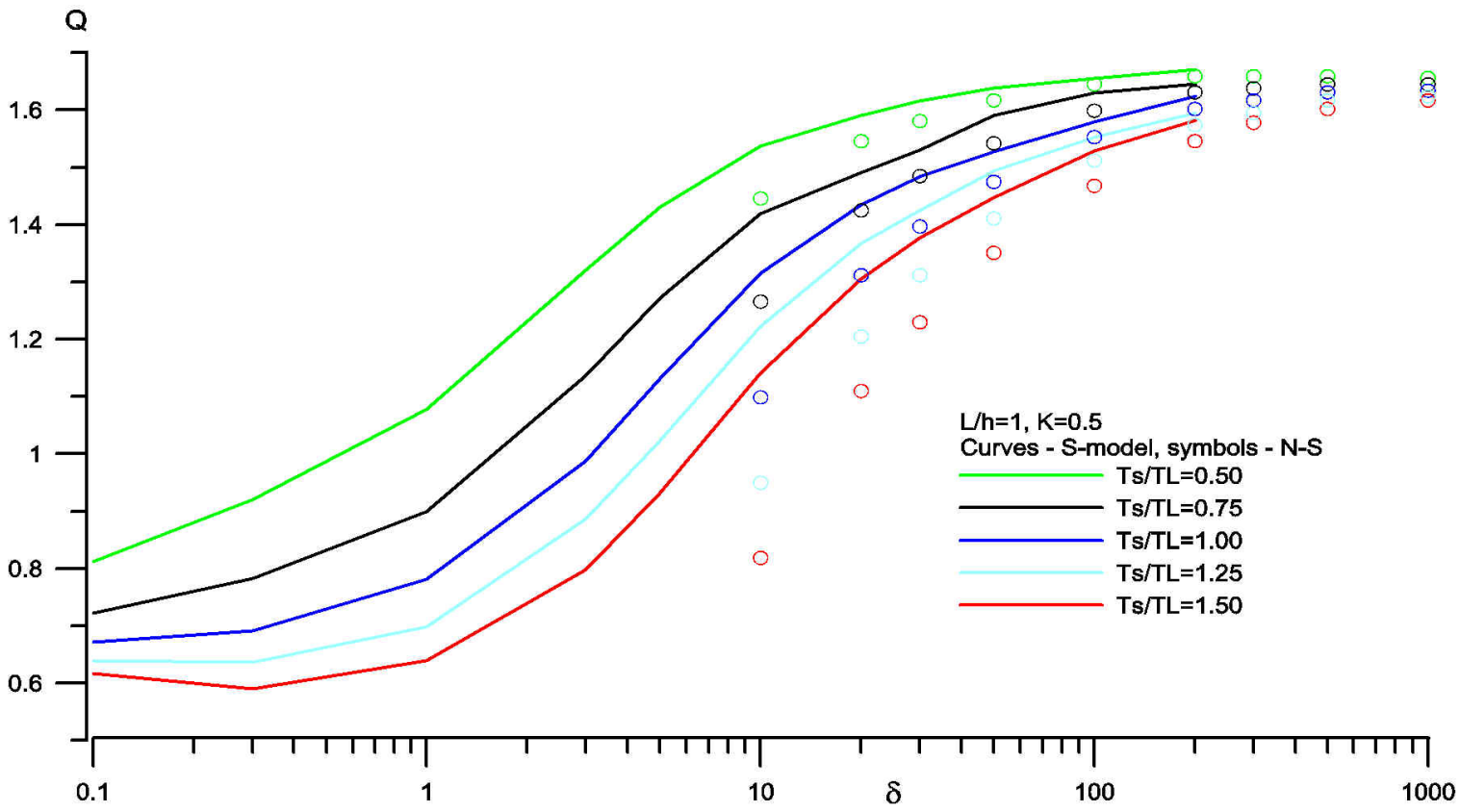
- Параметр разреженности для кинетического расчета $\delta = 0 \ldots 2000$:

$$\delta = \frac{h p_L}{\mu_L \beta_L}, \text{для модели твердых сфер)} : \delta = \frac{8}{5\sqrt{\pi}} \frac{1}{\text{Kn}}.$$

- Безразмерный массовый расход:

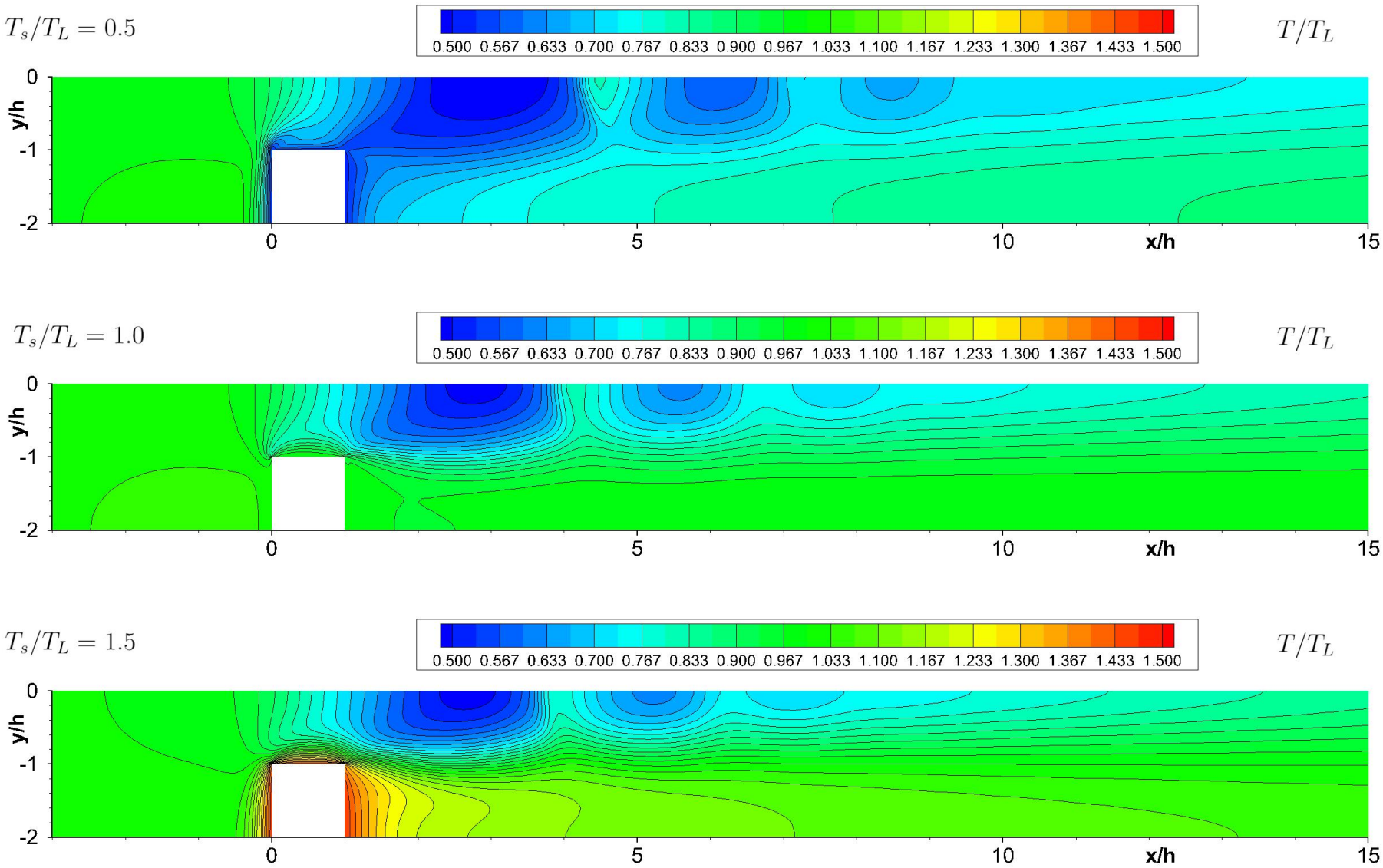
$$Q(x) = \frac{\dot{M}(x)}{\dot{M}_{\infty}^{vac}}, \quad \dot{M}_{\infty}^{vac} = \frac{h p_L}{\sqrt{\pi} \beta_L}.$$

Кривые расхода для $L_h = 1$ и $K = 0.5$

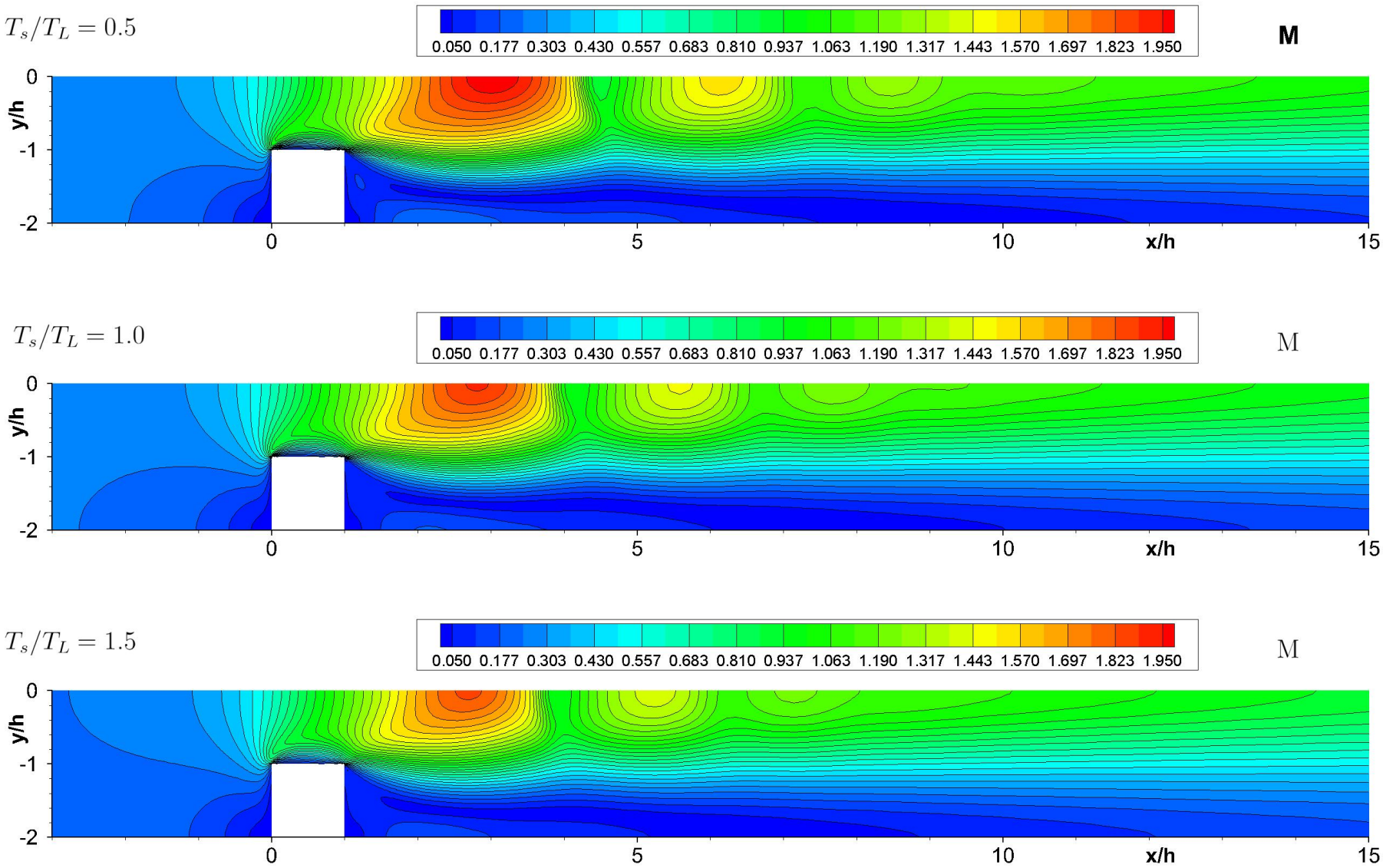


- При $\delta \approx 1 \ldots 10$ температурный фактор значительно влияет на расход.
- Качественное объяснение - холодная стенка дает потоку большую площадь за счет поджатия газа вблизи стенки, что ведет к повышению расхода.
- С повышением δ (числа Re) эффект постепенно уменьшается
- При больших δ теплообмен у стенки носит локальный характер, затрагивая только газ вблизи стенки.

Поле температуры для $L_h = 1$, $\delta = 100$, S-модель



Линии уровня числа Маха для $L_h = 1$, $\delta = 100$, S-модель



Выводы

- Для задачи импульсного испарения в вакуум получено хорошее количественное и качественное согласие результатов для всех расчетных величин (поле, времяпролетная функция распределения, средняя энергия молекул) для умеренного и сильного испарения (число монослоев $\theta \geq 10$) и безразмерного радиуса пятна $b = 10$ между решениями БГК и ПСМ.
- Для слабого испарения (число монослоев $\theta \leq 1$) имеется качественное согласие результатов.
- Для задачи течения газа через периодическую систему плоских каналов при наличии температурного фактора показано существенное влияние T_s на расход газа при $\delta \leq 100$.
- Зависимость расхода газа от T_s близка к линейной, что хорошо для приложений. Нагрев поверхности приводит к образованию минимума в кривой расхода. Для всех значений T_s в течении появляются дугообразные ударные волны за коротким каналом для режимов, близких к континууму
- Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования “Высокопроизводительные вычисления и большие данные” (ЦКП “Информатика”) ФИЦ ИУ РАН.

Некоторые публикации

- A.A. Morozov, V.A. Titarev. Kinetic modeling of pulsed laser evaporation into vacuum: Calculation of the collisional region size for time-of-flight distribution analysis // Physics of Fluids. 2025. V. 37, 096149
- И.В. Воронич, В.А. Титарев, А.В. Кудряшов Численный анализ течения разреженного газа через периодическую систему каналов // Известия РАН. Механика жидкости и газа, 2025, №3. С. 3-14
- А.А. Морозов, В.А. Титарев. Эволюция формы облака газа при импульсном лазерном испарении в вакуум: прямое статистическое моделирование и решение модельного уравнения // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2023. Т. 63. №12. С. 1960-1972
- A.A. Morozov, V.A. Titarev. Kinetic study of time-of-flight distributions during pulsed laser evaporation into vacuum // Physics of Fluids. 2024. V 36. P. 116112
- И.В. Воронич, В.А. Титарев. Численный анализ течения разреженного газа через систему коротких каналов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2023. Т. 63. №12. С. 1942-19
- V.A. Titarev, A.A. Morozov. Arbitrary Lagrangian-Eulerian discrete velocity method with ap-plication to laser-induced plume expansion // Applied Mathematics and Computation. 2022. V. 429. P. 127241

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Модели течения (уравнения Навье-Стокса)

- В сплошносредном подходе решаются уравнения Навье-Стокса:

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{U} + \nabla(\boldsymbol{F} - \boldsymbol{F}^v) = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{F} = (\boldsymbol{F}_1, \boldsymbol{F}_2, \boldsymbol{F}_3), \quad \boldsymbol{F}^v = (\boldsymbol{F}_1^v, \boldsymbol{F}_2^v, \boldsymbol{F}_3^v),$$

- Декторы независимых переменных $\boldsymbol{U}$, конвективных $\boldsymbol{F}$ и вязких $\boldsymbol{F}^v$ потоков:

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{F}_k = \begin{pmatrix} \rho u_k \\ \rho u_1 u_k + \delta_{1k} p \\ \rho u_2 u_k + \delta_{2k} p \\ \rho u_3 u_k + \delta_{3k} p \\ (E + p) u_k \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{F}_k^v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1k} \\ \tau_{2k} \\ \tau_{3k} \\ u_\alpha \tau_{\alpha k} - q_k \end{pmatrix}.$$

  Здесь δ_{ik} – символ Кронеккера.

- Замыкающие соотношениями:

$$p = \rho R T, \quad \rho = mn, \quad e = \frac{RT}{\gamma - 1}, \quad E = \rho e + \frac{1}{2}\rho u^2,$$

$$\tau_{ik} = \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\mathrm{div}\boldsymbol{u}\right), \quad q_k = -\lambda\frac{\partial T}{\partial x_k},$$

- Для коэффициентов вязкости μ и теплопроводности λ :

$$\lambda = \frac{c_p \mu}{\mathrm{Pr}}, \quad c_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1}.$$