



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Ю. Клосс, Ф. Г. Черемисин, П. В. Шувалов, Решение уравнения Больцмана для нестационарных течений с ударными волнами в узких каналах, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2010, том 50, номер 6, 1148–1158

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.135.216.170

7 ноября 2024 г., 14:22:19



УДК 519.634

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕЧЕНИЙ С УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ В УЗКИХ КАНАЛАХ¹⁾

© 2010 г. Ю. Ю. Клосс*, **, Ф. Г. Черемисин*, ***, П. В. Шувалов*, **

(* 141700 Долгопрудный, М.о., Институтский пр., 9, МФТИ; ** 123182 Москва, пл. Курчатова, 1, РНЦ “Курчатовский ин-т”; *** Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ РАН)

e-mail: tcherem@ccas.ru

Поступила в редакцию 09.11.2009 г.

Нестационарные течения разреженного газа в узких каналах, сопровождающиеся формированием и распространением ударных волн, изучаются на основе решения кинетического уравнения Больцмана. Рассматриваются процессы формирования ударной волны из начального разрыва параметров газа, ее распространения и затухания и отражения от торца канала. Уравнение Больцмана решается конечно-разностным методом. Интеграл столкновений вычисляется на фиксированной сетке в пространстве скоростей консервативным проекционным методом. Для слежения за перемещением фронта ударной волны разработан детектор ее положения. Реализованы параллельные вычисления на кластере с применением технологии MPI. Получены графики затухания ударной волны и подробные поля течения. Библ. 13. Фиг. 13. Табл. 1.

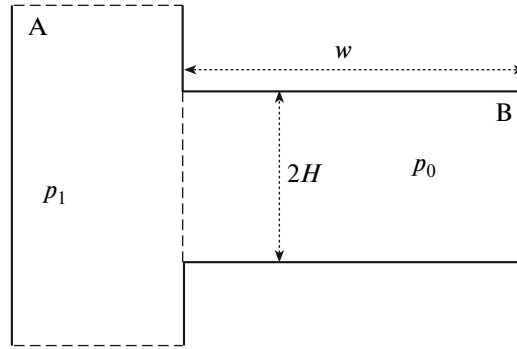
Ключевые слова: кинетическое уравнение Больцмана, нестационарные течения с ударной волной в узких каналах, проекционный метод численного решения.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование течений газа с ударными волнами в узких каналах приобретает практический интерес по мере развития новых технологий, использующих устройства с характерным размером, сравнимым с длиной свободного пробега молекул. Примером такого устройства может служить представленная в [1] ударная труба с диаметром рабочей секции 2 мм, работающая при числах Кнудсена в диапазоне от 10^{-1} до 0.5×10^{-3} и предназначенная для генерирования молекулярных пучков высокой энергии. Традиционным подходом к изучению распространения ударных волн в узких каналах является решение уравнений Навье–Стокса (см. [2]–[4]) или применение их упрощенных моделей (см. [5]). В рамках кинетической теории газов распространение ударной волны в плоском канале рассмотрено в [6] на основе модельного кинетического уравнения (S-модели Шахова). Вопрос о применимости уравнений Навье–Стокса с условиями скольжения для расчета затухания ударной волны в узкой щели изучался в [7] путем сравнения расчетов, проведенных методом статистического моделирования, на основе кинетической S-модели и на основе уравнений Навье–Стокса.

Расчет рассматриваемых течений любым из перечисленных методов представляет собой сложную задачу по нескольким причинам. Прежде всего, задача нестационарная, что добавляет новую независимую переменную — время. Размерность решения в случае плоского канала становится равной 3, а для канала квадратного сечения — равной 4. При решении кинетического уравнения добавляются новые независимые переменные — молекулярные скорости, что увеличивает размерность задачи еще на 2 или 3 единицы. Нестационарность задачи создает возможность накопления с течением времени вычислительной ошибки, что может разрушить счет или исказить результат. Наконец, характерной особенностью рассматриваемых течений является наличие невозмущенных областей газа, находящегося в состоянии термодинамического равнове-

¹⁾ Расчеты выполнены на суперкомпьютере МФТИ-60 в рамках проекта “Применение суперкомпьютерных вычислительных систем и технологий для анализа и моделирования газокинетических процессов в микро- и нано-структурах” (№ 2.1.2/2837, руководитель Н.Н. Пономарев-Степной) и в рамках ведомственной целевой программы Министерства образования и науки РФ “Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2010 гг.)”.



Фиг. 1.

сия, которые должны оставаться таковыми вплоть до прихода ударной волны и не содержать флуктуаций, вызванных счетом.

В настоящей работе анализ течения осуществляется на основе решения кинетического уравнения Больцмана методом, предложенным в [8] и подробно описанным в [9], [10], где он применялся для расчета стационарных течений газа.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ

Моделируемая ударная труба показана на фиг. 1 и состоит из двух секций: более широкой толкающей секции (секция А) и узкой измерительной секции (секция В), что соответствует ударной трубе, описанной в [1]. В начальный момент времени давление в толкающей секции в 10 раз больше, чем в измерительной, а температуры в обеих секциях равны.

На стенках сосудов задано условие полной аккомодации с диффузным отражением молекул, имеющих максвелловскую функцию распределения по скоростям. Распад начального разрыва давления создает ударную волну (УВ), которая движется внутри измерительной секции. Теоретическое значение числа Маха УВ, вычисленное по соотношениям Ренкино–Гюгонио на основе одномерной теории распада произвольного разрыва, дает $M = 1.55$. В работе рассматриваются две геометрические размерности задачи: двумерное (2D) плоское течение, что соответствует течению в щели, и трехмерное (3D) течение в канале квадратного сечения. Основные результаты получены для случая 3D, который требует значительно больших вычислительных ресурсов, но является более реалистичным.

Параметры газа $n(\mathbf{x}, t)$, $T(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ вычисляются при помощи численного интегрирования по скоростной векторной переменной ξ молекулярной функции распределения $f(\xi, \mathbf{x}, t)$, которая находится из конечно-разностного решения кинетического уравнения Больцмана

$$\partial f / \partial t + \xi \partial f / \partial \mathbf{x} = I(\xi, \mathbf{x}, t). \quad (1.1)$$

Рассматривается одноатомный газ, не обладающий внутренними степенями свободы молекул, и интеграл столкновений имеет классический вид

$$I(\xi, \mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f' f'_* - f f_*') g b d b d \varphi d \xi_*'. \quad (1.2)$$

Функции f' и f_*' содержат в качестве аргументов “скорости после столкновения” ξ' и ξ_*' . Уравнение (1.1) решается на сетке S_0 из N_0 равноотстоящих скоростных узлов ξ_γ с шагом \mathbf{h} , заключенной в область Ω объема V , и сетке \mathbf{x} , в физическом пространстве. Выбор равномерной скоростной сетки обусловлен методом вычисления интеграла столкновений. Область решения Ω выбирается так, чтобы вне ее значения функции распределения были пренебрежимо малы. Построение скоростной сетки осуществляется следующим образом. Вначале определяется куб в пространстве скоростей и в нем строится равномерная сетка узлов. Затем в куб вписывается сфера и исключаются все внешние узлы. Число узлов сетки сокращается примерно вдвое. В случае плоской симметрии берется полусфера и число используемых узлов сокращается еще в два а раза.

В физическом пространстве использовалась прямоугольная сетка с постоянным шагом. В скоростном пространстве функция распределения и интеграл столкновений могут быть представлены в базисе δ -функций в виде

$$f(\xi, \mathbf{x}, t) = \frac{V}{N_0} \sum_{\gamma=1}^{N_0} f_{\gamma}(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_{\gamma}), \quad I(\xi, \mathbf{x}, t) = \frac{V}{N_0} \sum_{\gamma=1}^{N_0} I_{\gamma}(\mathbf{x}, t) \delta(\xi - \xi_{\gamma}). \quad (1.3)$$

Для определения дискретных значений $I_{\gamma}(\mathbf{x}, t)$ интеграла столкновений используется консервативный проекционный метод (см. [9]), после чего задача сводится к решению конечно-разностным методом системы уравнений

$$\partial f_{\gamma} / \partial t + \xi_{\gamma} \partial f_{\gamma} / \partial \mathbf{x} = I_{\gamma}(\mathbf{x}, t). \quad (1.4)$$

Система (1.4) из N_0 уравнений решается методом расщепления с шагом по времени $\tau = t^{j+1} - t^j$:

$$\partial f_{\gamma}^* / \partial t + \xi_{\gamma} \partial f_{\gamma}^* / \partial \mathbf{x} = 0, \quad f_{\gamma}^{*,j} = f_{\gamma}^j, \quad (1.5)$$

$$\partial f_{\gamma} / \partial t = I_{\gamma}, \quad f_{\gamma}^j = f_{\gamma}^{*,j+1}. \quad (1.6)$$

Уравнение (1.5) аппроксимируем явной TVD-схемой второго порядка точности для плоских течений и явной консервативной по потокам схемой первого порядка точности для трехмерных течений. Уравнение (1.6) решается как интегральное с контролем положительной определенности получаемого решения.

В проекционном методе [9] интеграл столкновений в скоростном узле ξ_{γ} определяется как проекция 8-кратного функционала в узел скоростной сетки ξ_{γ} с помощью комбинации δ -функций $\phi(\xi_{\gamma}) = \delta(\xi - \xi_{\gamma}) + \delta(\xi_{*} - \xi_{\gamma}) - \delta(\xi' - \xi_{\gamma}) - \delta(\xi'_{*} - \xi_{\gamma})$:

$$I_{\gamma}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2/\pi b_m^2} \int_0^{2/\pi b_m^2} \phi(\xi_{\gamma}) (f' f'_{*} - f f_{*}) g d\sigma d\varphi d\xi_{*} d\xi. \quad (1.7)$$

Такая форма интеграла столкновений использована в [10] и представляет небольшое улучшение метода из [9] путем перехода к интегрированию по переменной $\sigma = b^2/2$, что исключает явную зависимость подынтегрального выражения от переменной b .

Для вычисления (1.7) используется равномерная кубатурная сетка по переменным интегрирования S_v из N_v узлов $\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, \sigma_v, \varphi_v$, причем узлы ξ_{α_v} и ξ_{β_v} совпадают с узлами скоростной сетки S_0 . Поскольку векторы скоростей после столкновения не попадают в узлы сетки S_0 , две последние δ -функции в проекторе $\phi(\xi_{\gamma})$ заменяются на комбинацию проекторов в две пары ближайших к ξ' и ξ'_{*} узлов $(\xi_{\lambda_v}, \xi_{\lambda_v+s_v})$ и $(\xi_{\mu_v}, \xi_{\mu_v-s_v})$, где s_v — трехмерный вектор смещения в соседний узел сетки, компоненты которого могут принимать значения, равные 0, 1, -1:

$$\delta(\xi'_{\alpha_v} - \xi_{\gamma}) = (1 - r_v) \delta(\xi_{\lambda_v} - \xi_{\gamma}) + r_v \delta(\xi_{\lambda_v+s_v} - \xi_{\gamma}),$$

$$\delta(\xi'_{\beta_v} - \xi_{\gamma}) = (1 - r_v) \delta(\xi_{\mu_v} - \xi_{\gamma}) + r_v \delta(\xi_{\mu_v-s_v} - \xi_{\gamma}).$$

Такая замена означает, что вклады в интеграл столкновений в неузловые точки ξ' и ξ'_{*} распределяются между парами ближайших сеточных узлов. Коэффициент $0 \leq r_v \leq 1$ находится из условия сохранения энергии. Законы сохранения массы и импульса на равномерной сетке выполняются автоматически.

Окончательно формула вычисления интеграла столкновений (см. [10]) имеет вид

$$I_{\gamma} = B \sum_{v=1}^{N_v} [-(\delta_{\gamma, \alpha_v} + \delta_{\gamma, \beta_v}) + (1 - r_v)(\delta_{\gamma, \lambda_v} + \delta_{\gamma, \mu_v}) + r_v(\delta_{\gamma, \lambda_v+s} + \delta_{\gamma, \mu_v-s})] \Delta_v, \quad (1.8)$$

где $\delta_{\gamma, \beta}$ — символ Кронекера, $B = V\pi b_m^2 / (4N_c)$, $N_c = N_v / N_0$, $\Delta_v = (f_{\alpha_v} f_{\beta_v} - f'_{\alpha_v} f'_{\beta_v}) g_v$, $f'_{\alpha_v} f'_{\beta_v} = (f_{\lambda_v} f_{\mu_v})^{1-r_v} (f_{\lambda_v+s_v} f_{\mu_v-s_v})^{r_v}$.

Формула (1.8) обеспечивает свойство консервативности интеграла по массе, импульсу и энергии:

$$\sum_{\gamma} \Psi_{\gamma} I(\xi_{\gamma}) = 0, \quad \Psi_{\gamma} = \{1, \xi, \xi^2\}. \quad (1.9)$$

Следствием приведенной выше интерполяции произведения $f'f_*$ является точное равенство нулю интеграла столкновений от максвелловской функции f_M :

$$I_{\gamma}[f_M, f_M] = 0. \quad (1.10)$$

Свойство (1.9) создает возможность продолжительного счета без накопления вычислительной ошибки в законах сохранения массы, импульса и энергии, а условие (1.10) сохраняет области невозмущенного газа вплоть до прихода фронта УВ.

Использование фиксированной скоростной сетки S_0 и одинаковой кубатурной сетки S_v позволяет резко сократить объем вычислений, так как массивы величин r_v, g_v и индексов $\alpha_v, \beta_v, \lambda_v, \mu_v, \lambda_v + s_v, \mu_v - s_v$ (всего 8 массивов) могут быть вычислены однократно и применены во всех узлах физического пространства. Необходимый для этого трудоемкий расчет скоростей после столкновения делается один раз. Кроме того, применение одинаковой кубатурной сетки сглаживает флуктуации решения в соседних узлах физического пространства, связанные с ее ограниченностью. На разных временных шагах, напротив, имеет смысл использовать отличающиеся кубатурные сетки, чтобы в процессе решения осуществлялся перебор возможно большего числа пар “столкновений”, дающих вклады в интеграл. Новая кубатурная сетка с тем же числом узлов может быть получена из основной сетки путем ее периодического сдвига на случайный вектор.

Для построения сетки S_v использовались 8-мерные сетки узлов Коробова, построенные на основе генерирующих коэффициентов, приведенных в [11] и дающих максимальное число узлов, равное 100000. Кубатурные узлы M_k строятся для 8-мерного куба на основе вычисленных предварительно коэффициентов a_2, \dots, a_8 по формуле

$$M_k = \left(\frac{k}{p}, \left\{ \frac{a_2 k}{p} \right\}, \dots, \left\{ \frac{a_8 k}{p} \right\} \right),$$

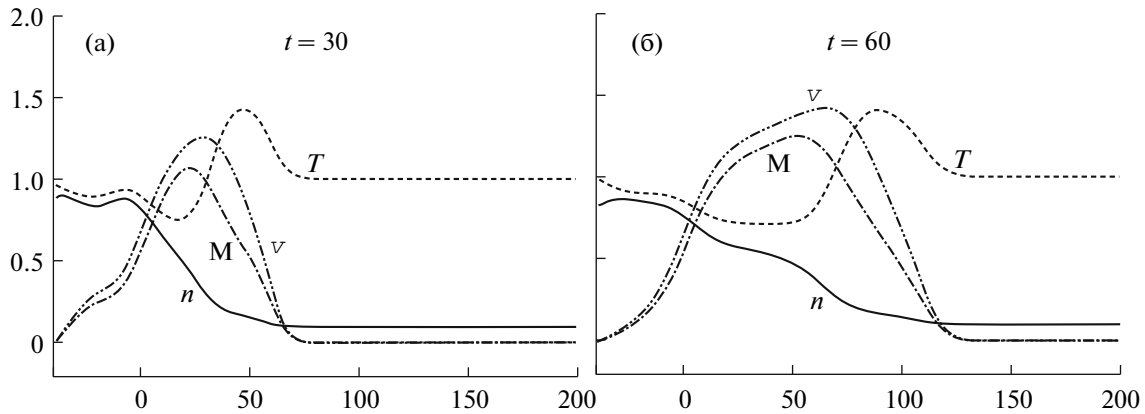
где $k = 1, 2, \dots, p - 1$, p – простое число, определяющее число узлов. Скобки $\{a/b\}$ означают остаток от деления двух целых чисел. Сетки с большим числом узлов строились как суперпозиция исходных сеток, сдвинутых на случайный вектор. Таким образом, для разных шагов по времени получают новые кубатурные сетки.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

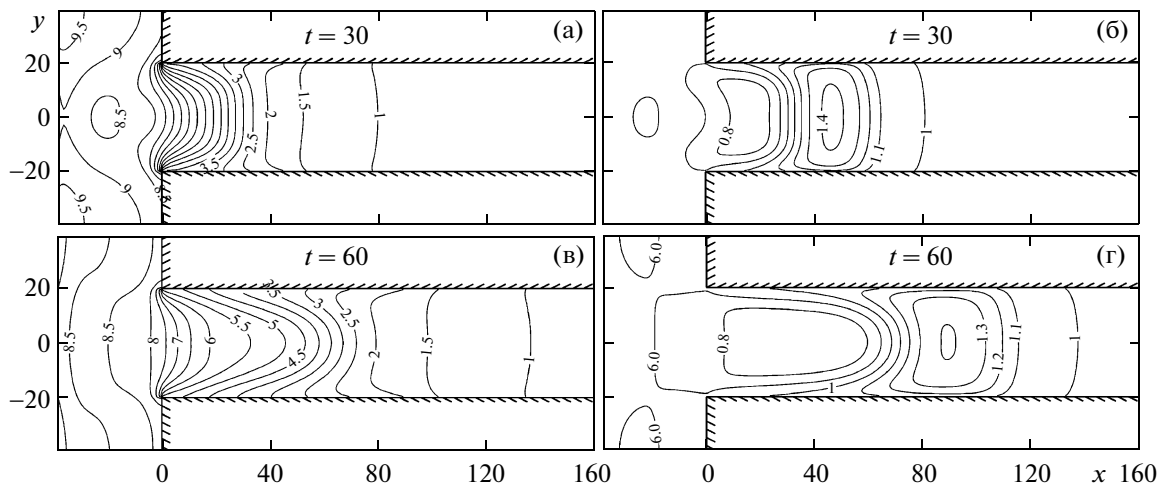
Вычисления проводятся в безразмерных переменных. Плотность газа и температура нормируются на их значения в измерительной секции в начальный момент времени. Характеристические скорость v_0 , длина λ и интервал времени τ определяются по формулам $v_0 = \sqrt{(kT_0/m)}$, $\lambda = (\sqrt{2} \pi n_0 d^2)^{-1}$, $\tau = \lambda/v_0$, где m – молекулярная масса, T_0 и n_0 – начальные плотность и температура в измерительной секции, d – молекулярный диаметр и k – постоянная Больцмана. Безразмерная функция распределения f^* определяется как $f^* = f/(n_0 v_0^{-3})$. На приводимых ниже графиках, если не оговорено особо, все величины выражены в именно так определенных единицах. Локальное число Маха определяется по скорости газа U как $M = U/\sqrt{\gamma k T/m}$ при $\gamma = 5/3$, а число Кнудсена определяется по формуле $\text{Kn} = \lambda/H$.

Вычисления проведены для фиксированного начального отношения давлений в толкающей и измерительной секциях $p_1/p_0 = 10$ и для чисел Кнудсена $\text{Kn} = 0.5, 0.1, 0.05$ и 0.025 . Интеграл столкновений вычисляется для молекулярной модели жестких сфер, но возможны и другие центрально-симметричные молекулярные потенциалы.

Для 3D-случая скоростная сетка имеет $18 \times 18 \times 18$ узлов, а для 2D-случая имеет $20 \times 20 \times 10$ узлов. Вычислительный код использует симметрию задачи, что сокращает размер пространственной сетки в 2 раза для 2D-случая и в 4 раза для 3D-случая. Число узлов в физическом пространстве зависит от размера счетной области и, в общем, растет, когда число Кнудсена умень-



Фиг. 2.



Фиг. 3.

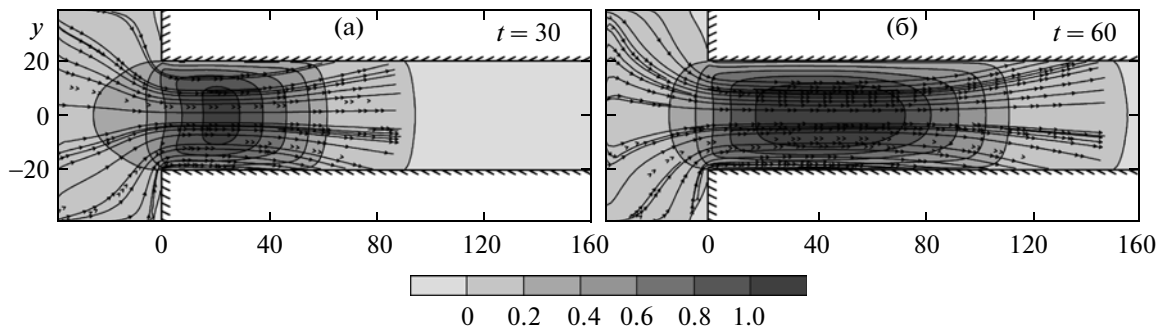
шается. Для $Kn = 0.025$ полное число узлов в скоростном и координатном пространстве было $\sim 2 \times 10^9$. Вычисления были выполнены с использованием параллельного солвера NSOLVER (см. [12]). При распараллеливании пространственная сетка разделялась между процессами на блоки пропорционально количеству ячеек. Такое разделение приводило к тому, что время расчета в разных областях было одинаковым. Число процессов варьировалось от 20 до 120. Для плоской задачи при $Kn = 0.05$ расчет времени свободного пробега при 40 процессах в среднем 1 мин, для аналогичной трехмерной задачи расчет при 80 процессах требовал ~ 12 мин.

2.1. Прямая ударная волна

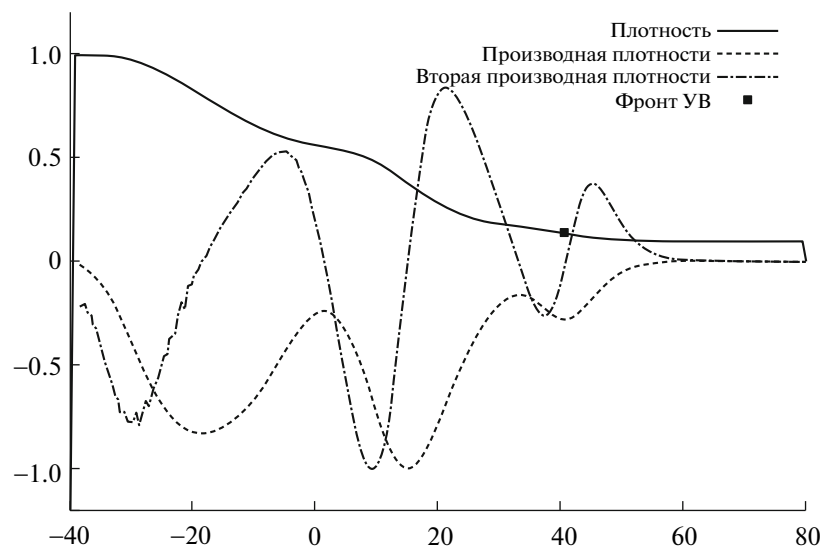
Распространение УВ в канале квадратного сечения было детально изучено для $Kn = 0.05$. Длина канала в расчетах была равна $5H$, что было достаточно для формирования структуры волны. Графики плотности, температуры, скорости и локального числа Маха вдоль центральной линии для двух моментов времени представлены на фиг. 2. Здесь скорость газа нормирована на скорость звука в невозмущенном газе.

В области размытого фронта УВА видно возрастание температуры, а за фронтом температура падает в волне разрежения. Плоская область контактного газа за фронтом не наблюдается, так как она сливается с размытым ударным фронтом, с одной стороны, и с зоной разрежения – с другой. Такое поведение вызвано быстрым ослаблением УВ.

Поля плотности и температуры для $Kn = 0.05$, представленные на фиг. 3, показывают охлаждение газа и замедление УВ у стенок канала, что вызывает повышение его плотности. Области сжа-



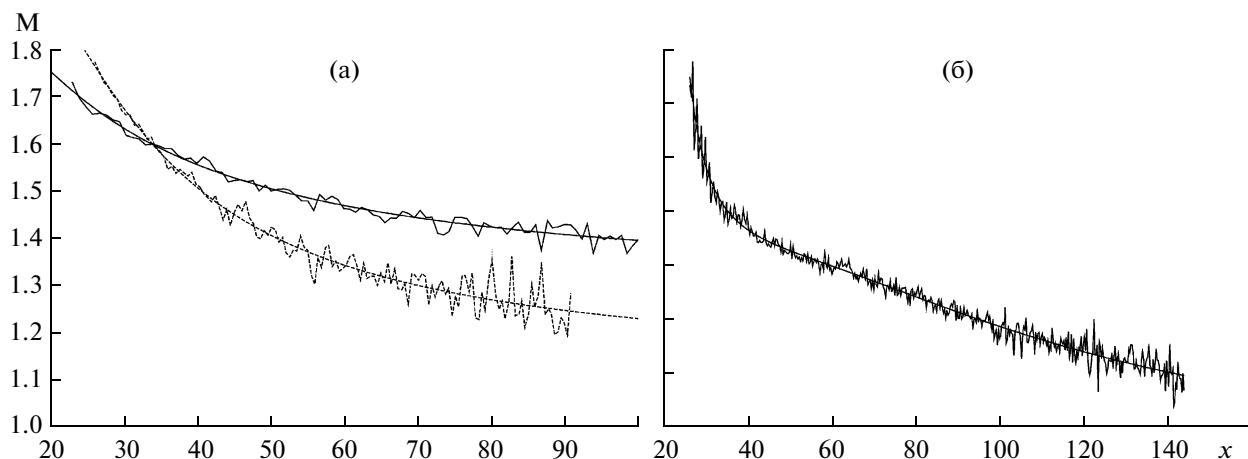
Фиг. 4.



Фиг. 5.

тия и разрежения особенно хорошо видны на полях температуры. Волна разрежения распространяется в толкающую секцию. Поля локального числа Маха и линии тока показаны на фиг. 4, на котором хорошо видно торможение газа на стенках сосуда.

Вычисление скорости УВ требует фиксации какой-либо фазовой точки внутри фронта и слежения за ее перемещением. Мы выбрали в качестве такой точки центр УВ на линии симметрии, который определяем как точку, в которой первая производная графика плотности достигает максимального абсолютного значения. Чтобы найти эту точку, мы вычисляем вторую производную графика плотности и находим ее нулевое значение. Вычисления производных производятся численно с третьим порядком точности. Определение нулевого значения второй производной происходило в два этапа: сначала определялись узлы, между которыми находится нулевое значение, далее вторая производная (заданная в виде сеточной функции) вокруг этих узлов аппроксимировалась линейной функцией и определялось точное значение. Пример работы детектора показан на фиг. 5. На фиг. 6 замедление УВ показано в зависимости от координаты вдоль канала. Замедление УВ возрастает с увеличением числа Кнудсена, а при равных числах Кнудсена оно выше для 3D-течений. Структура УВ формируется на расстоянии примерно 25λ от входа в измерительную секцию. В начале процесса скорость УВ превышает рассчитанную по одномерной теории. Скорость торможения плавно уменьшается по мере продвижения УВ. Для малых чисел Кнудсена, как показано на фиг. 6б для $Kn = 0.025$, график торможения становится почти линейным. Флуктуации на графиках замедления вызваны погрешностью расчета второй производной графика плотности для УВ, перемещающейся по дискретной сетке вдоль оси канала.



Фиг. 6. Число Маха вдоль ударной трубы: (а) — сплошная для 2D, штриховая для 3D-геометрии; $Kn = 0.05$; (б) — 3D-геометрия.

Для проверки достоверности полученных результатов был проведен расчет с удвоенным числом узлов скоростной и кубатурной сеток. За основу был взят расчет в двумерной геометрии при $Kn = 0.05$. Критерием проверки служила зависимость числа Маха от расстояния вдоль ударной трубы. Параметры расчета приведены в табл. 1, а результаты сравнения — на фиг. 7.

Можно заключить, что точность основного расчета достаточна для анализа течения.

Помимо формирования и распространения УВ изучалось затухание УВ, связанное с торможением ее по мере распространения вдоль канала. Для сравнения были взяты двумерный и трехмерный случаи с $Kn = 0.05$. В процессе распространения вдоль канала структура УВ расплывается, однако фронт УВ можно детектировать и для размытой структуры УВ. Когда скорость фронта становится меньше 1, детектирование становится затруднительным.

На фиг. 8 показано затухание УВ для трехмерной и двумерной геометрий. Как было показано на фиг. 6а, затухание в случае трехмерной геометрии сильнее. Из фиг. 8 видно, что начиная с $6.5H$ число Маха становится меньше 1 и появляется шум в работе детектора. Для двумерного случая 10 характерных размеров для затухания УВ не хватает.

2.2. Отраженная ударная волна

Для изучения отраженной УВ мы сократили длину канала до 2.5 ширины измерительной секции и поместили на его конец торец с условием диффузного отражения при температуре стенки $T = 1$. Графики параметров газа в начале процесса взаимодействия прямой УВ с торцом показаны на фиг. 9а, $Kn = 0.05$.

Падение УВ вызывает значительное возрастание температуры в области протяженностью $\sim 10\lambda$ от торца, но непосредственно у торца температура газа падает, а плотность возрастает из-за низкой температуры поверхности. Формирование структуры отраженной УВ требует $\sim 40\tau$.

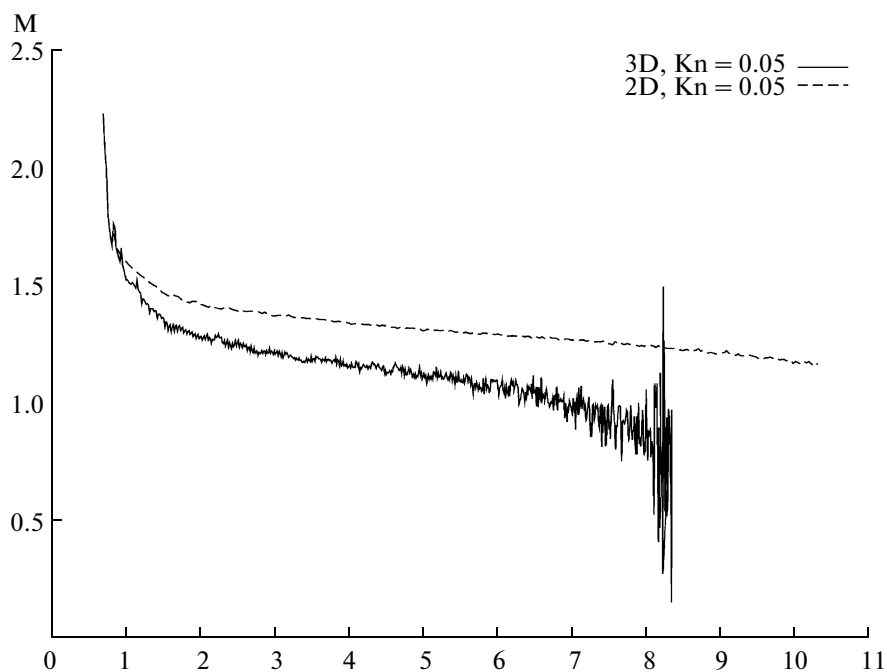
Скорость газа за УВ убывает по направлению к торцу, но остается положительной. Графики параметров газа на центральной линии для развившейся волны показаны на фиг. 9б. На фиг. 10а представлен график локального числа Маха отраженной УВ, скорость которой вычислена по отношению к потоку газа, идущему направо. Локальное число Маха монотонно падает для 3D- и

Таблица

Параметр	Основной расчет	Проверочный расчет
Сетка узлов в пространстве скоростей	$20 \times 20 \times 20$	$26 \times 26 \times 26$
Число скоростных узлов в сфере	4224	9328
Число узлов кубатурной сетки	7×10^5	18×10^5



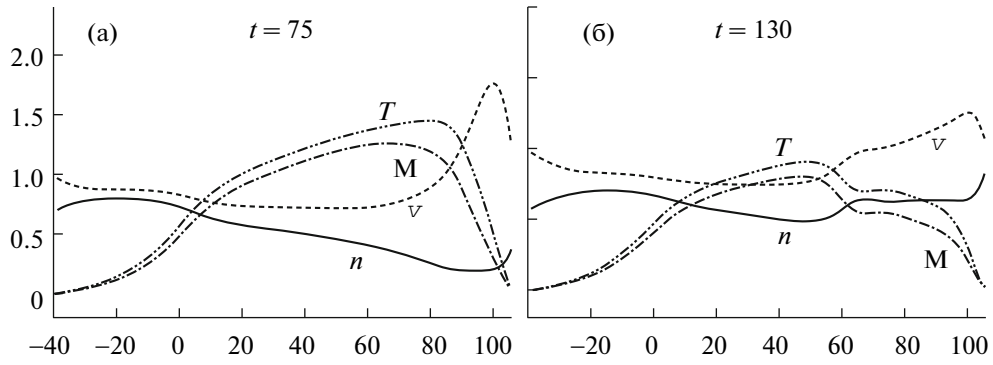
Фиг. 7.



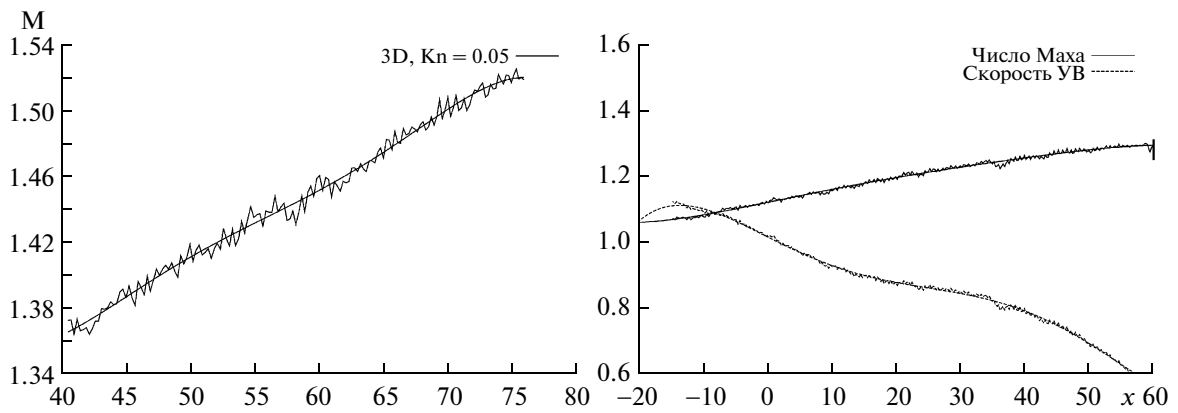
Фиг. 8.

2D-случаев. В то же время скорость УВ относительно стенок канала (нормированная на скорость звука в невозмущенном газе) монотонно возрастает (случай 2D, фиг. 106, $Kn = 0.05$).

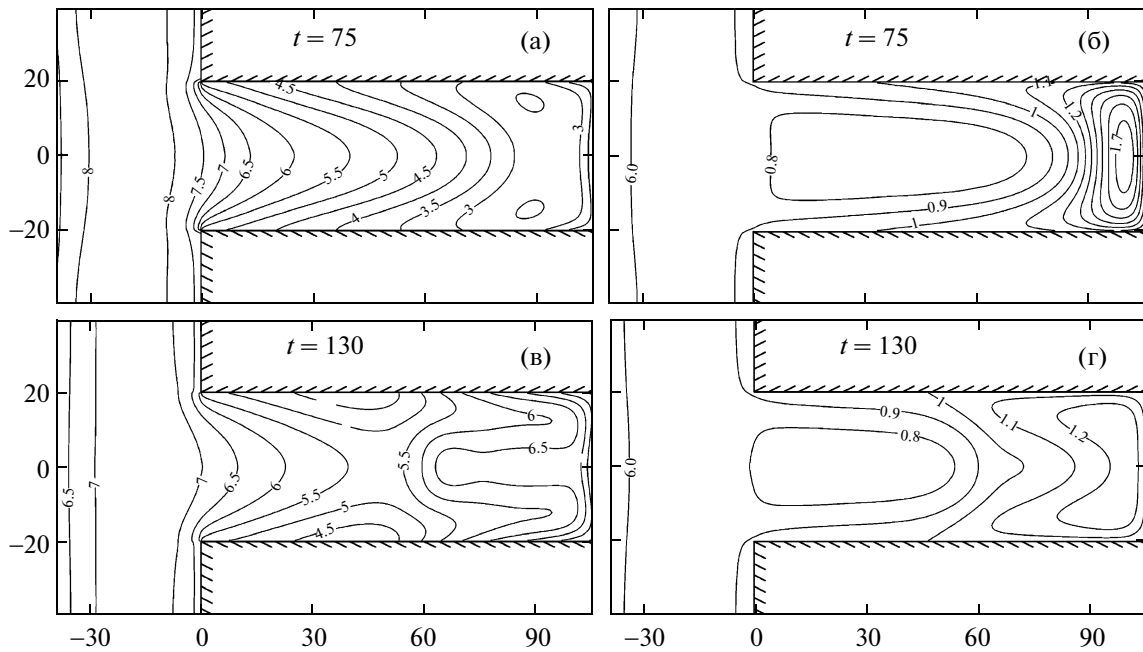
Поля плотности и температуры на разных стадиях отражения представлены на фиг. 11, а поля числа Маха и линии тока показаны на фиг. 12. Максимум интенсивности отраженной УВ локализован вблизи центральной линии. В направлении к стенкам канала плотность сначала падает, а затем немного возрастает из-за охлаждающего действия поверхности. Можно заметить некоторое возрастание скорости распространения УВ около стенок канала, что вызвано меньшей скоростью встречного потока газа в пограничном слое.



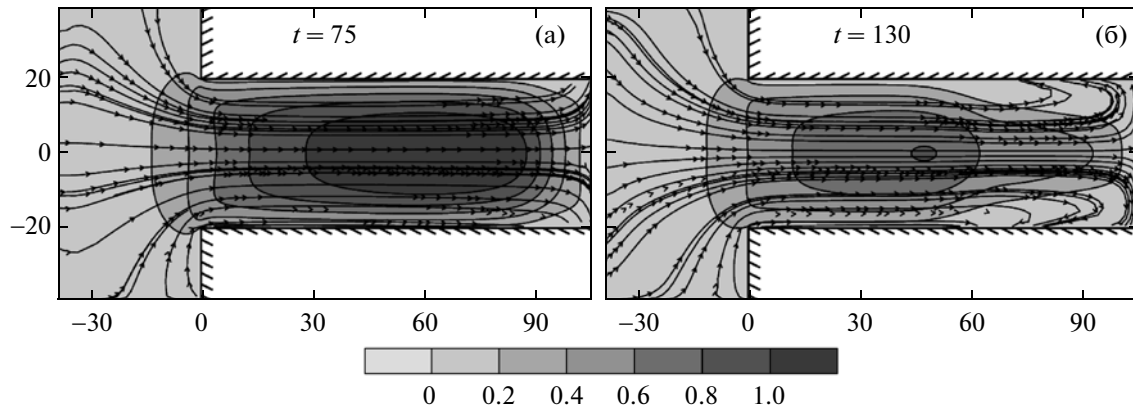
Фиг. 9.



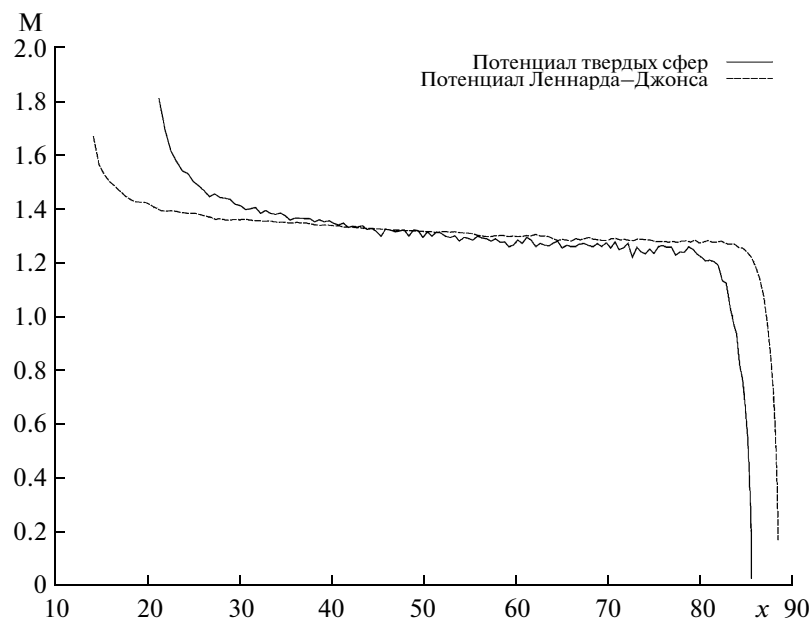
Фиг. 10.



Фиг. 11.



Фиг. 12.



Фиг. 13.

2.3. Распространение УВ для разных молекулярных потенциалов

Расчеты прямой и обратной ударной волны проводились также для потенциала Леннарда–Джонса и сравнивались с расчетами для потенциала твердых сфер. Потенциал Леннарда–Джонса имел вид $U(r) = 4\epsilon_0[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$. Для такого потенциала вязкость газа равна

$$\mu_{LJ} = \frac{5}{16\sigma^2} \left(\frac{mkT}{\pi} \right)^{1/2} [\Omega(kT/\epsilon_0)]^{-1}.$$

Поправочный коэффициент $\Omega(kT/\epsilon_0)$ определен в [13].

На основе вязкости газа определяется эффективный диаметр молекул, который входит в формулу для длины свободного пробега и на ее основе вычисляются безразмерные длины. При расчетах моделировался газ аргон при 300 К, глубина потенциальной ямы для аргона равна 120 К, а параметр $\Omega(2.5) = 1.093$. В случае потенциала твердых сфер максимальное прицельное расстояние b_m равно диаметру молекул. Для потенциала Леннарда–Джонса максимальное расстояние b_m определяется таким образом, чтобы для прицельных расстояний, больших b_m , угол разлета для всех относительных скоростей был меньше, чем некоторый минимальный угол (в расчетах он

принимался равным 1°). Вычисленные таким образом максимальный прицельный параметр b_m равен 2.95. Зависимость угла разлета от относительной скорости приводит к тому, что для некоторых скоростей угол разлета будет меньше минимального, разрешимого скоростной сеткой, что приводит к лишним вычислениям, так как такие столкновения не дают вклада в интеграл. Для оптимизации счета столкновения с углом разлета, неразрешимым сеткой, не рассчитывались, что позволило сократить объем вычислений на 55%.

Зависимость числа Маха от расстояния при распространении прямой УВ вдоль двумерного канала для случая $Kn = 0.05$ изображена на фиг. 13. Для потенциала Леннарда–Джонса формирование УВ происходит быстрее, примерно за 15 длин свободного пробега. Число Маха для потенциала Леннарда–Джонса в начале процесса распространения УВ несколько меньше, чем в случае потенциала твердых сфер, однако и скорость убывания числа Маха несколько меньше, что приводит к тому, что в конце процесса число Маха для потенциала твердых сфер становится меньше, чем для потенциала Леннарда–Джонса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В двух- и трехмерной геометрии проведено численное моделирование формирования, распространения и отражения УВ в узком канале, который представляет собой измерительную секцию микроударной трубы. Получены структуры прямой и отраженной УВ и индуцированных ими течений газа. Разработанный метод детектирования фронта УВ позволяет определять затухание УВ в разреженном режиме. Показано, что примененный метод численного решения кинетического уравнения Больцмана позволяет моделировать нестационарные течения газа, сопровождающиеся образованием УВ для реальных молекулярных потенциалов с использованием небольших вычислительных ресурсов, что важно для проведения параметрических вычислений. Разработанный вычислительный код может быть использован для изучения эффективности микроударных труб и других устройств, работающих в режиме течений разреженного газа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Nobuya Miyoshi, Shuhei Nagata, Ikuya Kinefuchi et al.* Development of ultra small shock tube for high energy molecular beam source // 26th Internat. Symp. Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc. 1084. Melville, New York, 2009. P. 557–562.
2. *Sun M., Ogawa T., Takayama K.* Shock propagation in narrow channel // 23rd Internat. Symp. Shock Waves. Fort Worth, Texas, USA, 2002.
3. *Brouillette M.* Shock waves at microscales // Shock Waves. 2003. V. 13. P. 3–12.
4. *Garen W., Meyerer B., Udagava S., Maeno K.* Shock waves in mini-tubes: Influences on the scaling parameter S // 26-th Internat. Symp. Shock Waves, paper 2062. Goettingen: Springer, 2007.
5. *Mirshecari G., Brouillette M.* One-dimensional model for microscale shock tube // Shock Waves. 2009. V. 19. P. 25–38.
6. *Ларина И.Н., Рыков В.А., Шахов Е.М.* Нестационарные течения разреженного газа между параллельными пластинами // Изв. РАН. Механ. жидкости и газа. 1997. № 2. С. 165–173.
7. *Zeitoun D.E., Graur I.E., Burtshell Y. et al.* Continuum and kinetic simulation of shock wave propagation in long microchannel // 26th Internat. Symp. Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc. 1084, Melville. New York, 2009. P. 464–469.
8. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Докл. РАН. 1997. Т. 357. № 1. С. 53–56.
9. *Черемисин Ф.Г.* Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343.
10. *Tcheremissine F.G.* Solution of the Boltzmann kinetic equation for low speed flows // Transport Theory and Statist. Phys. 2008. V. 37. № 5. P. 564–575.
11. *Коробов Н.М.* Тригонометрические суммы и их приложения. М.: Наука, 1989.
12. *Клосс Ю.Ю., Черемисин Ф.Г., Хохлов Н.И., Шурыгин Б.А.* Программно-моделирующая среда для исследования течей газа в микро- и наноструктурах на основе решения уравнения Больцмана // Ат. энергия. 2008. Т. 105. № 4. С. 211–217.
13. *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.