

УДК 51-37

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД АНАЛИЗА СВОЙСТВ МИКРОНАСОСОВ КНУДСЕНА**Ю. Ю. Клосс¹, Д. В. Мартынов², Ф. Г. Черемисин³**

Приводится метод численного решения кинетического уравнения Больцмана. Упругие столкновения вычисляются с помощью проекционного метода. Оператор переноса аппроксимируется с помощью тетраэдрических сеток. Сформулированы основные требования к координатным сеткам; показано, насколько переменные размеры ребер и оптимизаторы качества тетраэдров позволяют сократить время расчета задачи. В качестве примеров обсуждаются модели прямых цилиндрических и изогнутых трубок, а также змейчатого насоса Кнудсена.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, проекционный метод, тетраэдрические сетки, насос Кнудсена.

1. Введение. В настоящее время имеется значительный интерес к процессам, происходящим на микроуровне. Развитие технологий позволяет создавать различные микро- и наноустройства и наблюдать за процессами, происходящими в них. Одно из важных направлений — это неравновесное течение газов и жидкостей в микроструктурах. Такая область исследований имеет широкую прикладную направленность [1–3]. Данная область сложна для теоретического исследования, а эксперименты часто требуют много времени и больших финансовых затрат.

Течение газов можно изучать с помощью численного моделирования. Классическое математическое описание основывается на уравнении Навье–Стокса, где газ представляет собой сплошную среду, а течения являются всегда равновесными. Однако уравнение Навье–Стокса применимо только в тех случаях, когда число Кнудсена меньше 10^{-2} . Для разреженных газов вблизи твердых поверхностей существует разнообразие эффектов, которые не заметны для плотных газов. Например, эффекты, создаваемые температурным полем, приложенным к твердой поверхности, не могут быть описаны в рамках классической газовой динамики, и уравнения Навье–Стокса при моделировании таких задач становятся неприменимыми.

На сегодняшний день широко распространены два подхода к моделированию течений при неравновесных процессах: это применение метода прямого статистического моделирования (метод Монте-Карло) и использование различных приближенных решений уравнения Больцмана. Первый из них применяется для расчетов сверхзвуковых течений и, с недавнего времени, микротечений. Однако для относительно медленных дозвуковых процессов данный метод требует очень больших вычислений из-за значительной статистической погрешности $O(N^{-0.5})$. Основа других методов — это различные приближения модели столкновений молекул. Для численного решения такие методы имеют ряд недостатков: чувствительны к начальным условиям и требуют производных высокого порядка в уравнении, что значительно усложняет граничные условия.

Современное состояние вычислительных систем и программного обеспечения позволяет эффективно использовать метод прямого решения уравнения Больцмана для молекул со сферически симметричным потенциалом на основе расщепления разностной схемы [4]. Оператор переноса аппроксимируется с помощью метода конечных объемов. Дискретизация по пространству осуществляется с помощью неравномерных тетраэдрических сеток, что позволяет моделировать движение газа в любых областях. Интеграл столкновений вычисляется консервативным методом [5] на сетках Коробова [6], обладающих точностью $O(N^{-1})$.

Приведенный в настоящей статье метод позволяет рассматривать модели насосов Кнудсена, основанных на эффекте теплового скольжения газа вдоль неравномерно нагретых стенок. Устройства имеют периодическую структуру, состоящую из чередующихся последовательно соединенных трубок двух видов. Распределение температуры периодически с тем же периодом, которым обладает структура. Температура

¹ Российский научный центр “Курчатовский институт” (РНЦ КИ), пл. Академика Курчатова, 1, 123182, Москва; начальник лаборатории, e-mail: kloss@mnpt.kiae.ru

² Московский физико-технический институт (МФТИ), факультет общей и прикладной физики, Институтский переулок, 9, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный; студент, e-mail: mart1989@list.ru

³ Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН (ВЦ РАН), ул. Вавилова, 40, 119333, Москва; вед. науч. сотр., e-mail: tcherem@ccas.ru

вдоль трубок первого вида линейно возрастает от некоторого значения T_1 до T_2 , а вдоль трубок второго вида линейно убывает от T_2 до T_1 .

Существуют различные виды насосов Кнудсена, зависящие от формы и размеров трубок. Классический насос Кнудсена, впервые предложенный им в 1910 г. [7, 8], численно исследован в [9, 10]. Основными частями классического насоса Кнудсена являются прямые узкие и широкие цилиндрические трубки. В настоящей статье исследуется змейчатый насос Кнудсена, предложенный в [11, 12]. Все трубки в этом устройстве имеют одинаковый диаметр. Трубки первого вида изогнутые, а трубки второго вида прямые.

2. Математические основы.

2.1. Уравнение Больцмана. Запишем уравнение Больцмана в форме

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial x} = I. \tag{1}$$

Интеграл столкновений Больцмана для молекул со сферически симметричным потенциалом, опуская переменные x и t , запишем в виде $I(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f' f'_1 - f f_1) g b db d\varphi d\xi_1$, где $f = f(\xi)$, $f_1 \equiv f(\xi_1)$, $f' = f(\xi')$, $f'_1 \equiv f(\xi'_1)$, $g = \xi_1 - \xi$, b и φ — параметры бинарного столкновения. Скорости после столкновения ξ' , ξ'_1 зависят от скоростей до столкновения ξ , ξ_1 и параметров столкновения b , φ .

Решением уравнения является функция распределения молекулярных скоростей $f(\xi, x, t)$, зависящая от молекулярной скорости ξ , координаты x и времени t . После того как эта функция найдена, могут быть посчитаны наблюдаемые макроскопические величины газа: числовая плотность $n(x, t)$, скорость $u(x, t)$, температура $T(x, t)$, тензор давлений $P_{ij}(x, t)$, поток энергии $E(x, t)$, тепловой поток $q(x, t)$, имеющие вид

$$\begin{aligned} n &= \int f d\xi, & u_\alpha &= \frac{1}{n} \int \xi_\alpha f d\xi, & T &= \frac{m}{3nk} \int c^2 f d\xi, \\ P_{ij} &= m \int c_i c_j f d\xi, & E_\alpha &= \frac{m}{2} \int \xi^2 \xi_\alpha f d\xi, & q_\alpha &= \frac{m}{2} \int c^2 c_\alpha f d\xi. \end{aligned}$$

Здесь использованы тензорные обозначения, $c = (c_x, c_y, c_z) = \xi - u$, m — масса молекулы и k — постоянная Больцмана.

2.2. Переход к безразмерным переменным. Перейдем к безразмерным переменным и безразмерной функции распределения:

$$\begin{aligned} \xi^* &= \frac{\xi}{v_0}, & t^* &= \frac{t}{\tau_0}, & b^* &= \frac{b}{\sigma_{\text{eff}}}, & x^* &= \frac{x}{\lambda}, & T^* &= \frac{T}{T_0}, \\ n^* &= \frac{n}{n_0}, & f^* &= \frac{f}{n_0 v_0^{-3}}, & v_0 &= \sqrt{\frac{kT_0}{m}}, & \lambda &= \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0 \sigma_{\text{eff}}^2}}, & \tau_0 &= \frac{\lambda}{v_0}. \end{aligned}$$

Здесь b — прицельное расстояние сталкивающихся молекул, ξ — скорость молекулы, v_0 — нормировочная скорость, t — время, τ_0 — нормировочное время, k — постоянная Больцмана, m — масса молекул газа, $x = (x_1, x_2, x_3)$ — точка в координатном пространстве, λ — длина свободного пробега молекулы газа, σ_{eff} — эффективный диаметр молекул, T — температура газа, T_0 — нормировочная температура, n — числовая плотность газа, n_0 — нормировочная числовая плотность и f — функция распределения по скоростям.

При решении задачи использовался потенциал Леннарда-Джонса, в котором σ_{eff} определяется следующим образом: $\sigma_{LJ,\text{eff}} = \sigma \sqrt{\Omega^{(2,2)}}$, где σ — диаметр молекул, $\Omega^{(2,2)}$ табулированы в [13] и мало отличаются от 1. Опустим знак “*” и вернемся к прежним обозначениям.

Уравнение Больцмана (1) в безразмерных переменных переписывается в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial x} = I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int (f' f'_1 - f f_1) g b db d\varphi d\xi_1. \tag{2}$$

2.3. Дискретизация фазового пространства. Для численного решения уравнения (2) необходимо перейти от непрерывной функции распределения к дискретной. Для этого введем скоростную сетку, построение которой осуществляется следующим образом. Вначале определяется куб в пространстве скоростей и в нем строится равномерная сетка узлов. Выбор равномерной сетки узлов обусловлен методом вычисления интеграла столкновений. Ребро куба равно $4.8 \sqrt{T_{\text{max}}}$, где T_{max} — максимальная температура в системе. Затем в куб вписывается сфера и исключаются все внешние узлы. Число узлов сетки сокращается примерно вдвое. Далее уравнение решается в каждом из N_0 равноотстоящих скоростных узлов ξ_γ в каждой ячейке пространственной тетраэдрической сетки.

Обозначив $f_\gamma \equiv f(\xi_\gamma, x, t)$ и $I_\gamma \equiv I(\xi_\gamma, x, t)$, перепишем уравнение для каждого узла скоростной сетки ξ_γ в форме

$$\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \xi_\gamma \frac{\partial f_\gamma}{\partial x} = I_\gamma(x, t). \quad (3)$$

Для решения системы уравнений (3) необходимо найти $I_\gamma(x, t)$. Метод вычисления $I_\gamma(x, t)$ описан в [5]. Для дискретизации физического пространства в нем строится неравномерная тетраэдрическая сетка, в каждой ячейке которой функция распределения считается постоянной. Рассмотрим аппроксимацию уравнения переноса

$$\frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \xi_\gamma \frac{\partial f_\gamma}{\partial x} = 0. \quad (4)$$

Выделим из расчетной области некоторую подобласть Π , ориентированную полем внутренних единичных нормалей, и проинтегрируем по ней уравнение (4):

$$\int_{\Pi} \frac{\partial f_\gamma}{\partial t} dV + \oint_{\Pi} \xi_\gamma \frac{\partial f_\gamma}{\partial x} dS = 0. \quad (5)$$

По теореме Остроградского–Гаусса из уравнения (5) получим

$$\int_{\Pi} \frac{\partial f_\gamma}{\partial t} dV = \oint_{\partial\Pi} (\xi_\gamma, n) f_\gamma dS. \quad (6)$$

Если в качестве области Π взять i -ю ячейку координатного пространства, то из уравнения (6) следует, что $\frac{\partial f_{i\gamma}}{\partial t} V_i = \sum_{k=1}^K (\xi_\gamma, n_{ik}) f_{ik\gamma} S_{ik}$, где $K = 4$ — число граней тетраэдра, V_i — объем, n_{ik} — внутренняя единичная нормаль к k -й грани, S_{ik} — площадь k -й грани и $f_{ik\gamma}$ — функция распределения на k -й грани i -й ячейки.

2.4. Конечно-разностная схема. Эффективным методом решения системы (3) является метод расщепления по физическим процессам [4]. На малом по сравнению со средним временем свободного пробега молекул шаге по времени $\tau = t^{j+1} - t^j$ осуществляется расщепление на две стадии: расчет переноса молекул без соударений и расчет упругих столкновений. Обозначив функцию распределения в i -й ячейке координатного пространства после первого этапа через $f_{i\gamma}^*$, после второго этапа через $f_{i\gamma}$ и решение на предыдущем временном слое через $f_{i\gamma}^{t-\tau}$, получим следующую последовательность уравнений:

$$\frac{f_{i\gamma}^* - f_{i\gamma}^{t-\tau}}{\tau} = \sum_{k=1}^K (\xi_\gamma, n_{ik}) f_{ik\gamma} S_{i,k}, \quad (7)$$

$$\frac{f_{i\gamma} - f_{i\gamma}^*}{\tau} = I_{i\gamma}. \quad (8)$$

Для численного решения уравнения (7) необходимо для каждой ячейки координатного пространства определить $f_{ik\gamma}$. Если тетраэдр i по k -й грани граничит с тетраэдром p , то $f_{ik\gamma} = f_{pk\gamma}$, а значит, нет необходимости считать $f_{ik\gamma}$ для каждой ячейки i . Нужно определить $f_{q\gamma}$ на каждой грани q и, вычисляя потоки, решить уравнение (7). Такой способ сокращает время решения уравнения примерно в два раза и может быть применен к любым видам пространственных сеток. Возможные расположения тетраэдров представлены на рис. 1.

Определим функцию распределения $f_{q\gamma} = f_{ik\gamma}$ на k -й грани i -го тетраэдра. Обозначим $n_q = n_{ik}$, $S_q = S_{ik}$. Возможны следующие три случая.

1. Грань q принадлежит тетраэдрам i и p : $f_{q\gamma} = \begin{cases} f_{i\gamma}, & (\xi, n_q) < 0, \\ f_{p\gamma}, & (\xi, n_q) > 0. \end{cases}$

2. Грань q лежит на стенке с температурой T_{wall} , тогда имеет место диффузное отражение:

$$f_{q\gamma} = \begin{cases} f_{i\gamma}, & (\xi, n_q) < 0, \\ - \sum_{(\xi, n_q) < 0} (\xi, n_q) f_{i\gamma} \left(\sum_{(\xi, n_q) > 0} (\xi, n_q) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_{\text{wall}}}\right) \right)^{-1} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2T_{\text{wall}}}\right) ((\xi, n_q) S_q)^{-1}, & (\xi, n_q) > 0. \end{cases}$$

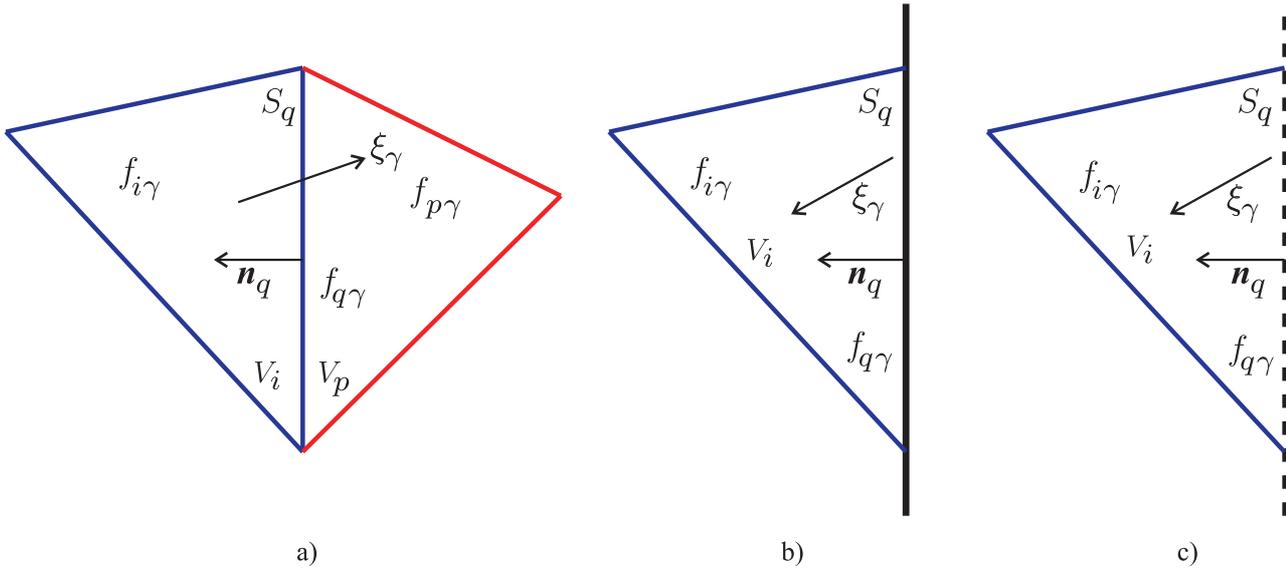


Рис. 1. Возможные расположения тетраэдров: а) граничащие тетраэдры, б) тетраэдр, граничащий со стенкой, в) тетраэдр, граничащий с плоскостью симметрии

3. Грань q лежит на плоскости симметрии, тогда имеет место зеркальное отражение, где узел скоростной сетки β определяется условием $\xi_\beta = \xi_\gamma - 2(n_q, \xi_\gamma)$: $f_{q\gamma} = \begin{cases} f_{i\gamma}, & (\xi, n_q) < 0, \\ f_{\beta\gamma}, & (\xi, n_q) > 0. \end{cases}$

Уравнение (8) решается как интегральное с контролем положительной определенности получаемого решения методом, приведенным в [5].

2.5. Определение шага по времени. Уравнение переноса (4) аппроксимируется явной схемой первого порядка точности (7). Для устойчивости схемы необходимо определить критический шаг по времени τ_{cr} , при котором схема (7) начинает расходиться. Условие Куранта для неструктурированных координатных сеток запишем в виде

$$\tau_{cr} = C \frac{V_0}{\max_k \{S_{0k}(\xi, n_{0k})\}}, \tag{9}$$

где C — некоторая постоянная и $V_0 = \min_i \{V_i\}$. Поскольку $\max_k \{S_k(\xi, n_k)\} \leq S_{0\max} \xi_{\max}$, где ξ_{\max} — радиус скоростной сферы, то условие Куранта (9) можно переписать в виде

$$\tau_{cr} = C \frac{V_0}{S_{0\max} \xi_{\max}}. \tag{10}$$

Дроби в уравнениях (9) и (10) учитывают процесс вытекания газа через одну грань тетраэдра. Величина $\frac{V_0}{S_{0\max}}$ имеет смысл эффективного шага по пространству. Постоянная C учитывает то, что газ может также вытекать через две или три грани. В расчетах принимается значение $C = 0.7$.

Для того чтобы разрешить кинетические процессы, должно быть выполнено условие $\tau < \tau_0$, где τ_0 — среднее время между столкновениями молекул. Если для шага по времени по формуле выполнено неравенство $\tau > \tau_0$, то сетка в координатном пространстве делается более подробной.

3. Построение тетраэдрических сеток.

3.1. Неструктурированные сетки. Сетка в физическом пространстве должна отвечать следующим требованиям:

- сгущаться в тех областях, в которых движение газа представляет наибольший интерес, и быть менее подробной там, где важно только распределение макропараметров;
- сгущаться у искривленных поверхностей системы, чтобы лучше повторять ее геометрию.

Этим требованиям удовлетворяют неравномерные тетраэдрические сетки. С их помощью можно моделировать устройства с любой геометрией. Для генерации тетраэдрических сеток используется пакет GMSH [14] — автоматический генератор неструктурированных сеток.

GMSH использует граничное представление для задания геометрии. Модели создаются путем последовательного объявления точек, ориентированных линий, ориентированных плоских или кривых по-

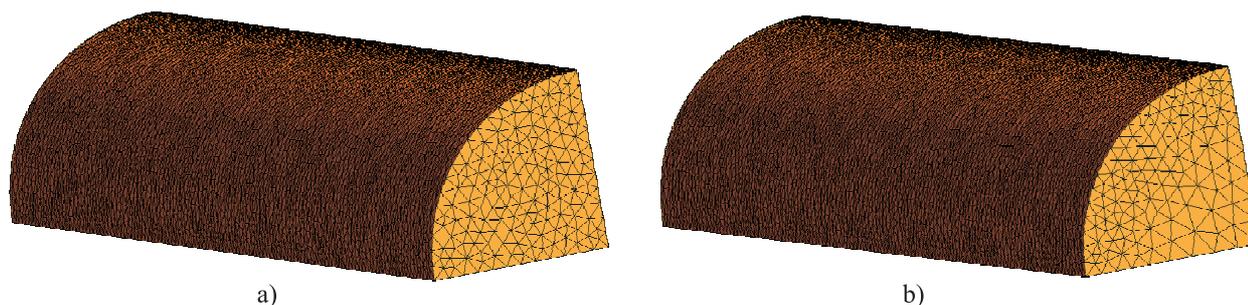


Рис. 2. Сектор цилиндрической трубки с тетраэдрической сеткой: а) сетка без полей, б) сетка с полями

верхностей и объемов. На поверхностях строится треугольная сетка, в объемах — тетраэдрическая. В GMSH реализованы три алгоритма построения треугольных сеток на поверхностях: MeshAdapt, Delaunay и Frontal и два алгоритма построения тетраэдрических сеток в объеме: Delaunay и Frontal.

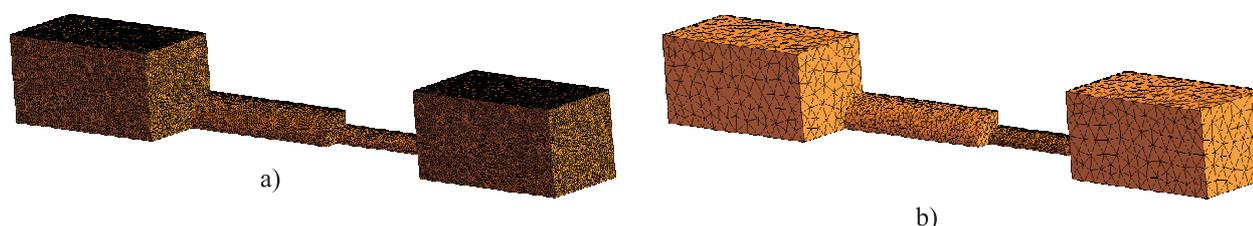


Рис. 3. Модель однокаскадного классического насоса Кнудсена: а) сетка без полей, б) сетка с полями

Для создания неравномерных сеток в GMSH используются специальные поля. Основные поля, необходимые для моделирования течения газа в цилиндрических трубках и в насосах Кнудсена: Attractor, Vox, Restrict, Max, Min, Threshold [14].

На рис. 2 представлены сетки в цилиндрической трубке с использованием полей и без них. В цилиндрической трубке характерные размеры тетраэдров у стенок задавались в 1.5 раза меньше, чем вблизи оси трубки.

На рис. 3 представлены сетки в насосе Кнудсена с использованием полей и без них. Слева характерные размеры тетраэдров задавались одинаковыми во всей расчетной области и равнялись 0.2 радиуса узкой трубки. Справа характерный размер у стенок узкой трубки не изменился, но увеличился в 2 раза в широкой трубке и в 5 раз в резервуарах.

В табл. 1 сравнивается число тетраэдров в сетке, получаемой без применения полей и с полями.

Применение полей позволяет уменьшить число тетраэдров в сетке в насосе Кнудсена в 40 раз, не внося существенных изменений в решение. Это показывает, насколько необходимо использовать неравномерные сетки при численном решении уравнения Больцмана. С их помощью можно сгущать сетку у искривленных поверхностей и в тех областях, в которых движение газа представляет наибольший интерес. Таким образом, сетки GMSH удовлетворяют сформулированным требованиям.

3.2. Качество неструктурированных сеток. При расчете медленных течений, когда система приходит в состояние равновесия через большой промежуток времени, шаг по времени τ необходимо брать как можно больше. При использовании явных схем шаг по времени τ не может превышать критического значения τ_{cr} , который определяется геометрическими свойствами сетки. Отсюда получается еще одно требование к неструктурированной сетке в физическом пространстве: $\tau_{cr} \rightarrow \max$ при заданной мелкости сетки.

Из (10) следует, что $\tau_{cr} \rightarrow \max$, если $S_k/V \approx \text{const}$ для всех $k = 1, 2, 3, 4$. Это условие означает, что тетраэдры, образующие сетку в координатном пространстве, должны быть равносторонними. В связи с тем, что сетка может изменять мелкость в пространстве и геометрия может быть сложной, построить сетку, состоящую только из равносторонних тетраэдров, невозможно. Однако можно использовать те сетки, ячейки которых близки к равносторонним тетраэдрам.

Таблица 1

Рассматриваемая модель устройства	Число тетраэдров	
	без полей	с полями
Цилиндрическая трубка	75982	55135
Насос Кнудсена	506815	12694

Определим качество тетраэдров γ по формуле $\gamma = 6\sqrt{6} V \left(\sum_{k=1}^4 S_k L \right)^{-1}$, $\gamma \in (0, 1]$, L — длина самого длинного ребра тетраэдра, $\gamma = 1$ для равностороннего тетраэдра.

Чем больше γ , тем более качественный тетраэдр построен. Шаг по времени определяется по самому некачественному тетраэдру, поэтому при генерации тетраэдрической сетки необходимо отслеживать качество γ всех тетраэдров.

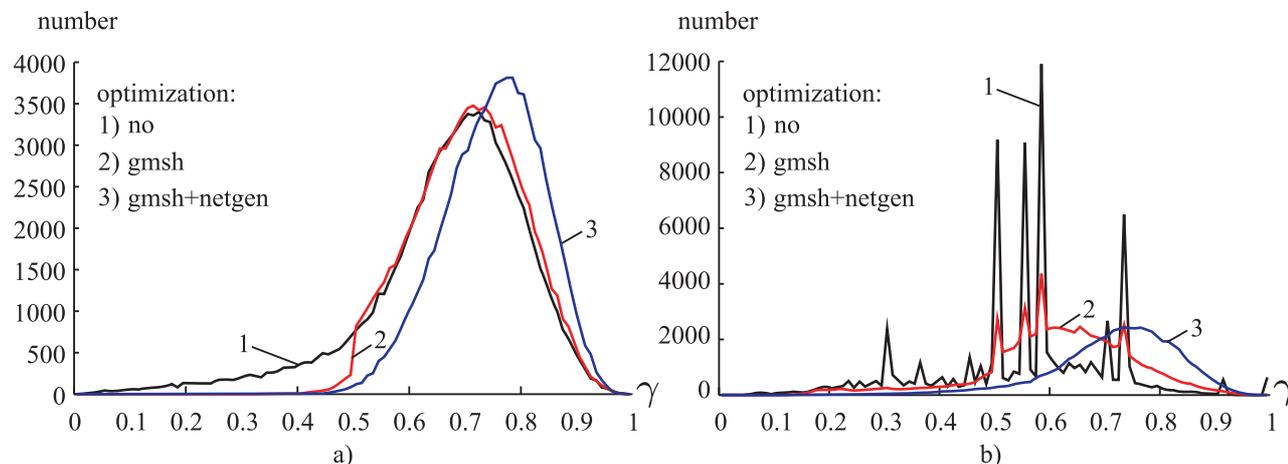


Рис. 4. Распределение качества тетраэдров: а) Delaunay, б) Frontal

Для генерации тетраэдрических сеток использовались алгоритмы Delaunay и Frontal. Для улучшения качества тетраэдров использовались оптимизаторы GMSH и Netgen. На рис. 4 изображено распределение качества тетраэдров, сгенерированных в цилиндрической трубке алгоритмами Delaunay и Frontal.

В табл. 2 приведены значения γ на разных этапах оптимизации.

В процессе оптимизации число тетраэдров в сетке убывало, потому что оптимизаторы уничтожают некачественные почти плоские тетраэдры. Большинство тетраэдров, генерируемых алгоритмом Delaunay, даже без оптимизации являются качественными благодаря критерию построения сеток Delaunay. Оптимизатор GMSH об-

Таблица 2

Оптимизация	Диапазон γ		Число тетраэдров	
	Delaunay	Frontal	Delaunay	Frontal
нет	0.0839–0.9887	$8.131e-7-1$	94779	88041
gsmh	0.2358–0.9861	$0.0747-1$	89671	83554
gsmh+netgen	0.2986–0.984	$0.1829-0.9865$	85717	65620

резают ветвь некачественных тетраэдров $\gamma \in (0.08, 0.23)$ и при этом практически не изменяет распределение в высококачественной зоне $\gamma > 0.7$. Далее оптимизатор Netgen делает сетку еще более качественной.

Алгоритм Frontal генерирует тетраэдры во всем диапазоне значений $\gamma \in (0, 1]$. В распределении числа тетраэдров в сетке по γ наблюдаются резкие пики. Такая сетка не применима для решения уравнения переноса, однако с помощью оптимизаторов сетка становится приемлемой для расчетов.

Из проведенного анализа можно сделать вывод, что после оптимизации GMSH и Netgen качество сеток Delaunay выше, чем качество сеток Frontal. При моделировании компьютерных моделей для построения треугольной сетки на поверхностях используется алгоритм MeshAdapt, для генерации тетраэдров в расчетной области используется алгоритм Delaunay.

3.3. Разбиение сетки. Решение кинетического уравнения Больцмана методом конечных объемов требует разбиения координатного пространства на малые объемы, количество которых N зависит от требуемой мелкости дискретизации пространства. В каждой ячейке координатной сетки необходимо построить скоростную сетку, количество узлов в которой $M = M_u M_v M_w$, где M_u, M_v, M_w — число узлов вдоль направлений u, v, w соответственно. В зависимости от задачи число узлов вдоль каждого направления берется в диапазоне 18–28. Таким образом, общее число ячеек, необходимое для решения уравнения Больцмана, равняется $N M_u M_v M_w$. Для компьютерного моделирования некоторых микроустройств, таких как многокаскадный классический или змейчатый насосы Кнудсена, необходимо брать $N \approx 500000$, $M_u = M_v = M_w = 24$. Тогда при расчете с двойной точностью под функцию распределения необходимо выделить 55 Гб. Поэтому необходимо разделять расчетную область между несколькими вычислительны-

ми узлами. Возникает необходимость распараллеливания алгоритма. Для этого используется библиотека MPI (Message Passing Interface).

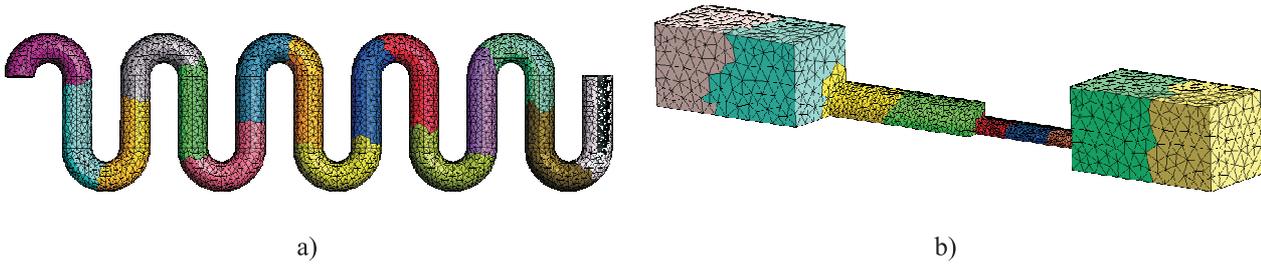


Рис. 5. Разбиение расчетной области насосов: а) многоуровневый алгоритм Кернигена–Лина, б) k -мерный алгоритм

При разработке алгоритма распараллеливания в основе лежали четыре основных предположения: на одном вычислительном ядре работает один процесс, все вычислительные ядра идентичны, все вычислительные ядра связаны одинаковой сетью, для одной итерации решения уравнения Больцмана необходимо одинаковое время для всех узлов пространственной сетки.

Таблица 3

Тогда если P процессов будут проводить вычисления, то для эффективного распараллеливания необходимо, чтобы каждый процесс выполнял примерно одинаковое количество работы, т.е. проводил расчеты в $\left\lceil \frac{N}{P} \right\rceil$ или $\left\lfloor \frac{N}{P} \right\rfloor + 1$ тетраэдрах. После разбиения каждый из P процессов устанавливает, какие узлы пространственной сетки, ему не принадлежащие, необходимы для решения уравнения переноса и какие узлы, ему принадлежащие, необходимы другим процессам для решения уравнения переноса. Для сокращения времени передачи сообщений между процессами необходимо минимизировать количество тетраэдров, функция распределения которых передается или принимается от других процессов. Перед началом каждого цикла решения уравнения Больцмана по схеме расщепления процессы обмениваются между собой функциями распределения недостающих им тетраэдров для решения уравнения переноса.

	Metis	Chaco
Число тетраэдров в сетке	40457	
1 процесс	4081	4045
2 процесс	4050	4046
3 процесс	4116	4046
4 процесс	3932	4046
5 процесс	3989	4045
6 процесс	4098	4046
7 процесс	4167	4046
8 процесс	4145	4045
9 процесс	3959	4046
10 процесс	3929	4046

Для разбиения сетки используются алгоритмы семейства Chaco [15] и Metis [16]. В настоящий момент Chaco состоит из пяти алгоритмов: простого, спектрального, инерциального, Кернигена–Лина и многоуровневого алгоритма Кернигена–Лина. Для компьютерного моделирования насосов Кнудсена использовался последний алгоритм. Алгоритмы Metis основаны на новейших многоуровневых парадигмах. Использовались рекурсивный и k -мерный алгоритмы. На рис. 5 представлены модели различных насосов Кнудсена, расчетная область которых разбита на 10 примерно одинаковых частей.

Сравним работу алгоритмов Кернигена–Лина из семейства Chaco и k -мерного алгоритма из семейства Metis. В табл. 3 представлены результаты деления сетки в компьютерной модели однокаскадного классического насоса Кнудсена. Число узлов в сетке равнялось 40457. Она разбивалась на 10 частей.

Из табл. 3 следует, что если разбивать сетку на много частей, то многоуровневый алгоритм Кернигена–Лина из Chaco является предпочтительнее, чем k -мерный из Metis, потому что разбивает сетку между процессами более сбалансированно. При этом число граничных тетраэдров, функцией распределения в которых нужно будет обмениваться процессам, является сравнимым.

4. Примеры моделей. Рассмотрим применение описанного метода к модели змейчатого насоса Кнудсена. Этот прибор состоит из последовательно соединенных цилиндрических прямых и изогнутых трубок. Температура вдоль прямой трубки возрастает от значения T_1 до T_2 , в то время как вдоль искривленной трубки температура убывает от значения T_2 до T_1 . Температуры на концах устройства одинаковы и равны T_1 .

Устройство может быть использовано как насос, если оно соединяет два резервуара с температурой газа T_1 . Классическая механика жидкостей и газов утверждает, что давление в обоих резервуарах должно быть одинаковым. Однако если диаметр трубок примерно равен длине свободного пробега газа, то под действием эффекта теплового скольжения в трубках образуются противоположно направленные потоки газа. Из-за того, что геометрии трубок различны, один из потоков будет сильнее другого, и тогда давления

на концах устройства будут различны. При нормальных условиях длина свободного пробега газов порядка 10^{-5} см, т.е. прибор может быть использован в MEMS-системах (MicroElectroMechanical Systems).

Все расчеты были проведены для аргона при начальной температуре газа $T_0 = 300$ К с максвелловской функцией распределения по скоростям при температуре T_0 и числовой плотности молекул n_0 :

$$f(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = n_0 \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi k T_0}\right)^3} \exp\left(-\frac{m(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2k T_0}\right),$$

где ξ_x, ξ_y, ξ_z — проекции скорости молекулы на координатные оси.

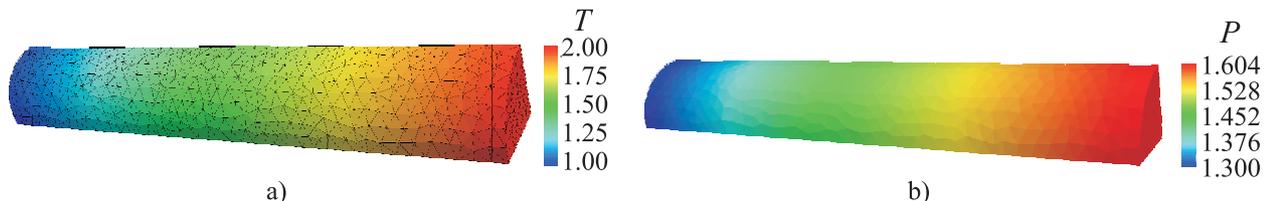


Рис. 6. Распределение макропараметров в прямой трубке: а) распределение температуры, б) распределение давления

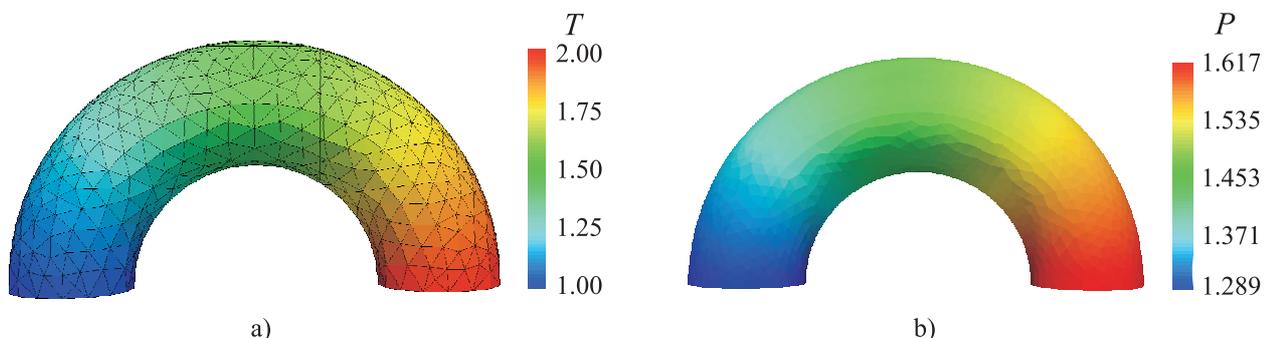


Рис. 7. Распределение макропараметров в изогнутой трубке: а) распределение температуры, б) распределение давления

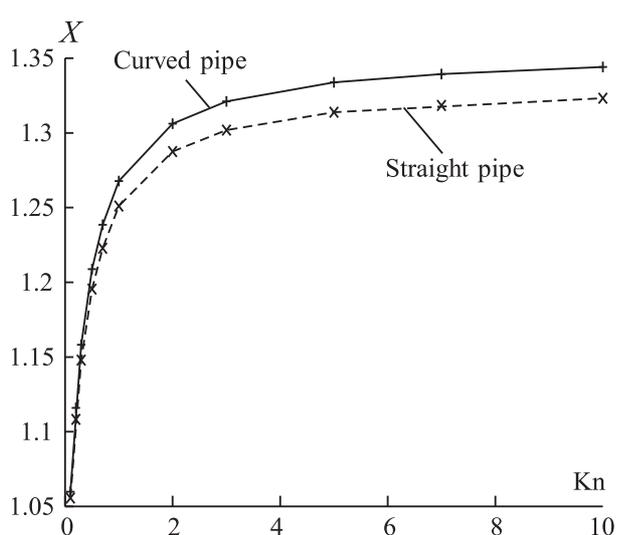


Рис. 8. Зависимость отношения давления на концах трубки от числа Кнудсена

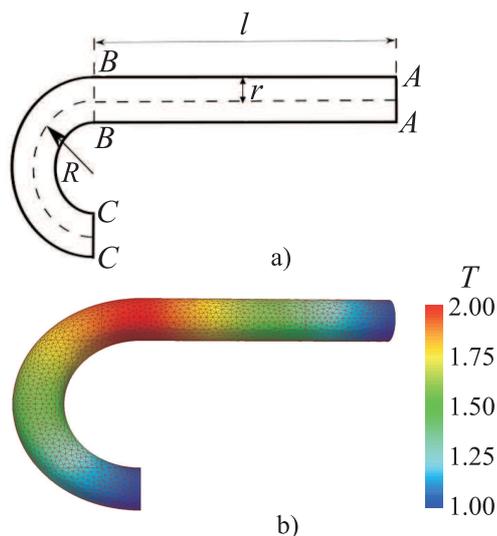


Рис. 9. Схема устройства (а), распределение температуры (б)

В качестве модели взаимодействия молекул использовался потенциал Леннарда-Джонса с параметрами $\epsilon = 124$ К, $\sigma = 3.418$ Å, значение интеграла $\Omega^{(2,2)} = 1.093$ взято из [13]. При моделировании насоса

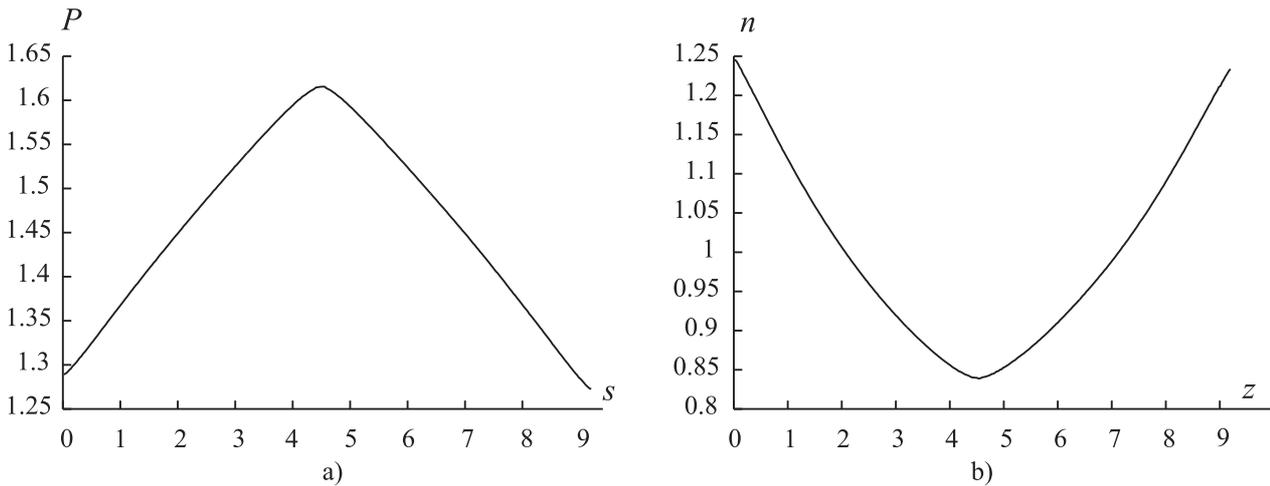


Рис. 10. Распределение макропараметров: а) распределение давления при $\text{Kn} = 1$, б) распределение плотности при $\text{Kn} = 1$

рассматривались следующие геометрические параметры: $l/r = 9$, $R/r = 3$, где l — длина прямой трубки, r — радиус трубок и R — радиус кривизны искривленной трубки. Число Кнудсена в начальный момент времени определялось как отношение длины свободного пробега газа к диаметру трубок $\text{Kn} = \frac{\lambda}{2r}$. Отношение температур на концах трубок бралось в виде $\frac{T_2}{T_1} = 2$.

4.1. Прямая и изогнутая трубки. Исследуем составные части насоса для определения, в какой из трубок эффект теплового скольжения создает более сильный поток. Схемы трубок представлены на рис. 6а и 7а.

На рис. 6б и 7б изображено трехмерное распределение давления в прямой и изогнутой трубках при $\text{Kn} = 0.7$. Давление линейно возрастает вдоль градиента температуры в каждой трубке.

На рис. 8 представлена зависимость отношения давлений на концах трубок X от числа Кнудсена. Отношение давлений на концах изогнутой трубки больше, чем отношение давлений на концах прямой трубки во всем диапазоне рассматриваемых чисел Кнудсена, поэтому эффект теплового скольжения газа сильнее в изогнутой трубке.

4.2. Однокаскадный насос. Однокаскадный насос состоит из прямой цилиндрической трубки, последовательно соединенной с искривленной трубкой. Схема насоса и распределение температуры приведены на рис. 9.

При $\text{Kn} = 1$ в начальный момент времени на рис. 10 представлено распределение давления и плотности газа вдоль линии, проходящей через центры сечений трубок. На рис. 9а эта линия выделена пунктиром. Для произвольной точки K обозначим расстояние от точки A до K через $s(K)$. Тогда $s(A) = 0$, $s(B) = l$, $s(C) = \pi R + l$. По оси Ox за единицу длины принята длина свободного пробега газа в начальный момент времени.

Давление линейно возрастает вдоль прямой трубки и линейно убывает вдоль изогнутой трубки. Давление в точке A оказывается больше, чем в точке C , поэтому поток, создаваемый за счет эффекта теплового скольжения, в изогнутой трубке больше, чем в прямой трубке. Плотность газа в точке A также больше, чем в точке C и принимает минимальное значение в точке B , где температура газа максимальна и равна T_2 .

Обозначим давление в точке A через p_1 , а в точке C через p_2 , а их отношение через $X = \frac{p_1}{p_2}$. На рис. 11 приведена зависимость величины X в установившемся режиме от числа Кнудсена Kn .

При малых числах Кнудсена величина X приближается к 1, что согласуется с классической теорией жидкостей и газов. При числе Кнудсена $\text{Kn} = 1$ под действием эффекта теплового скольжения устанавливается отношение давлений $X = 1.013$. При числах Кнудсена $\text{Kn} > 5$ величина X практически не меняется. Практически это условие всегда может быть выполнено, если взять достаточно тонкие трубки.

В табл. 4 приведены результаты моделирования однокаскадного змейчатого насоса и его составных частей при различных числах Кнудсена. В численном эксперименте измерялось отношение давлений на концах моделей. Если предположить, что в стационарном режиме потоки через сечение, соединяющее

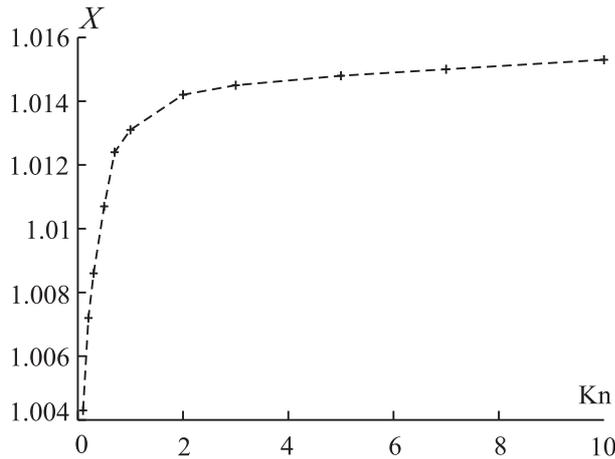


Рис. 11. Зависимость отношения давлений на концах насоса от числа Кнудсена

Таблица 4

Kn	X_{cur}	X_{str}	X_{cur}/X_{str}	X
0.1	1.0598	1.0556	1.0040	1.0043
0.2	1.1160	1.1083	1.0070	1.0072
0.3	1.1582	1.1479	1.0089	1.0086
0.5	1.2088	1.1955	1.0110	1.0107
0.7	1.2385	1.2228	1.0128	1.0124
1.0	1.2678	1.2511	1.0133	1.0131
2.0	1.3062	1.2875	1.0145	1.0142
3.0	1.3211	1.3019	1.0147	1.0145
5.0	1.3339	1.3138	1.0153	1.0148
7.0	1.3394	1.3184	1.0159	1.0150
10.0	1.3441	1.3232	1.0158	1.0153

прямую и изогнутую трубки отсутствуют, то отношение давлений на концах однокаскадного змейчатого насоса равно $X(Kn) = \frac{X_{cur}(Kn)}{X_{str}(Kn)}$, где $X_{cur}(Kn)$ — отношение давлений на концах изогнутой трубки и $X_{str}(Kn)$ — отношение давлений на концах прямой трубки при моделировании трубок по отдельности с тем же градиентом температуры и закупоренными концами.

Табл. 4 показывает, что величины $\frac{X_{cur}}{X_{str}}$ и X близки друг к другу. Это дает возможность судить о точности вычислительного эксперимента. Подробнее об этом написано ниже.

Змейчатый насос при $Kn > 1$ дает отношение давлений $X = 1.015$. Это значение намного меньше, чем отношение давлений на концах классического насоса Кнудсена, которое достигает $X = 1.17$ [10]. Однако змейчатый насос является более компактным, чем классический, и для эффективной откачки можно использовать многокаскадный змейчатый насос.

4.3. Десятикаскадный насос. Десятикаскадный змейчатый насос Кнудсена представлен на рис. 12а. Показано распределение температуры газа и грубая тетраэдрическая сетка.

При числе Кнудсена $Kn = 5$ на рис. 12а–12с представлены трехмерные распределения давления и плотности в установившемся режиме. Каждый каскад вносит вклад в отношение давлений на концах устройства, которое в установившемся режиме оказывается равным 1.15.

Таким образом, увеличивая число каскадов, можно создать существенное отношение давлений на концах устройства и направленный поток газа из одного резервуара в другой.

Отношение давлений на концах многокаскадного насоса Кнудсена может быть приближенно записано в виде $X_j \approx (X_1)^j \approx \left(\frac{X_{cur}}{X_{str}}\right)^j$, где j — число каскадов в насосе.

Таким образом, стокаскадный насос при $Kn > 5$ дает отношение давлений $X = 4.43$, а если число каскадов увеличить еще в пять раз, то отношение давлений станет равным $X = 1710$. Змейчатый насос обладает малыми размерами. Стокаскадный насос Кнудсена при рассмотренных размерах и длине свободного пробега газа $\lambda = 10^{-5}$ имеет объем $\approx 4 \times 10^{-11}$ см³. Змейчатый насос имеет гибкую структуру, поэтому может быть расположен в системе произвольным образом.

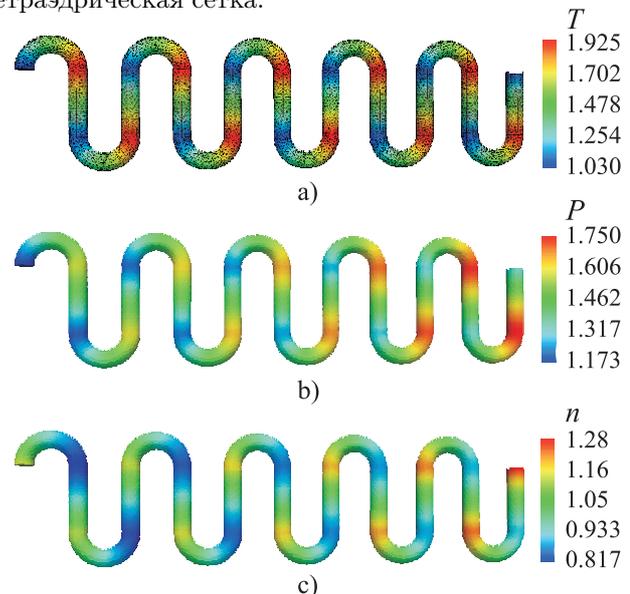


Рис. 12. Распределение макропараметров в десятикаскадном насосе Кнудсена: а) распределение температуры, б) распределение давления, в) распределение плотности

5. Точность вычислений. Для проверки точности вычислений расчеты проводились на скоростных и пространственных сетках разной подробности. Рассматривался один каскад змейчатого насоса Кнудсена при $Kn = 1$. В численном эксперименте измерялось отношение давлений на концах устройства.

Таблица 5

Число узлов на оси скоростного пространства	Шаг по скоростному пространству	Полное число узлов в скоростном пространстве	Отношение давлений на концах устройства
16	0.84	2176	1.01528
18	0.75	3112	1.01379
20	0.68	4224	1.01277
22	0.61	5616	1.01246
24	0.56	7208	1.01249

В табл. 5 приведены результаты моделирования одного каскада змейчатого насоса Кнудсена при различной подробности скоростной сетки. Скорость обрезания в безразмерных переменных равнялась $S_{cut} = 6.77$. Шаг по скоростному пространству вычислялся по формуле $\Delta v = 2S_{cut}/M$, где M — число узлов на одной оси скоростного пространства. Число M в данной работе бралось одинаковым для каждой оси.

Из табл. 5 следует, что при $M \geq 20$ результат с точностью 3×10^{-4} не зависит от числа узлов в скоростной сетке. Таким образом, для расчетов со скоростью обрезания $S_{cut} = 6.77$ достаточно брать $M = 20$. При моделировании задач с более высокой максимальной температурой газа скорость обрезания будет увеличена согласно формуле $S_{cut} = 4.8\sqrt{T_{max}}$, и тогда M необходимо также увеличивать. При моделировании задач с более низкой температурой газа число M может браться меньшим.

В табл. 6 приведены результаты вычисления отношения давлений на концах змейчатого насоса Кнудсена при координатных сетках различной подробности. Характерный размер тетраэдров указан в безразмерных переменных.

Таблица 6

Характерный размер тетраэдра	Полное число тетраэдров	Отношение давлений на концах устройства
0.175	6810	1.01301
0.150	10928	1.01243
0.125	18100	1.01277
0.100	32963	1.01305
0.075	69291	1.01336

Измеряя характерный размер тетраэдров, образующих сетку в координатном пространстве, мы получили одинаковые результаты для отношения давлений на концах устройства с точностью 10^{-3} .

6. Заключение. В работе представлен метод численного решения кинетического уравнения Больцмана, позволяющий моделировать движение газа в любых областях. Дискретизация скоростного пространства осуществляется с помощью равномерной кубатурной сетки. Интеграл столкновений вычисляется консервативным методом [5]. В физическом пространстве строится неравномерная тетраэдрическая сетка. Уравнение переноса аппроксимируется с помощью консервативной потоковой схемы первого порядка точности.

Для генерации сеток в расчетной области используется пакет GMSH [14]. Приведено сравнение алгоритмов Delaunay и Frontal. Показано, что первый генерирует более качественную сетку в расчетной области, что позволяет взять больший шаг по времени. Это является важным при расчете медленных течений. Разбиение сетки при распараллеливании осуществляется с помощью многоуровневого алгоритма Кернигена–Лина из Chaco [15]. Алгоритм делит сетку на равные части.

На основе предложенного метода рассматривалась модель змейчатого насоса Кнудсена и его составных частей — прямой и искривленной трубок с приложенным градиентом температуры. Показано, что эффект теплового скольжения сильнее в искривленной трубке, чем в прямой во всем диапазоне рассмотренных чисел Кнудсена: $Kn \in [0.1, 10]$.

Приведено параметрическое исследование однокаскадного змейчатого насоса Кнудсена. При $Kn > 5$ отношение давлений на концах устройства практически не изменяется и равняется $X = 1.015$. Десятикаскадный насос исследован при числе Кнудсена $Kn = 5$, получено отношение давлений $X_{10} = 1.15$. На основе рассмотренных моделей получена формула, позволяющая оценивать отношение давлений на концах насоса при большом числе каскадов.

Точность вычислений оценивалась с помощью изменения мелкости скоростной и координатной сеток. Показано, что метод обладает точностью не меньше, чем 10^{-3} , и может быть применен для расчета медленных течений и моделирования насосов Кнудсена.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Blomberg M., Rusanen O., Keranen K., Lehto A.* A silicon microsystem-miniaturised infrared spectrometer // Proc. of IEEE Int. Conf. on Solid-State Sensors and Actuators. 1997. **2**. 1257–1258.
2. *Terry S.C., Jerman J.H., Angell J.B.* A gas chromatographic air analyzer fabricated on a silicon wafer // IEEE Trans. on Electron Devices. 1979. **26**, N 12. 1880–1886.
3. *Vargo S.E., Muntz E.P., Shiflett G.R., Tang W.C.* The Knudsen compressor as a micro and macro scale vacuum pump without moving parts or fluids // J. Vac. Sci. Technol. 1999. **17**. 2308–2313.
4. *Аристов В.В., Черемисин Ф.Г.* Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. 1976. **231**, № 1. 49–52.
5. *Черемисин Ф.Г.* Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. 1997. **357**, № 1. 53–56.
6. *Коробов Н.М.* Тригонометрические суммы и их приложения. Москва: Наука, 1989.
7. *Knudsen M.* Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularströmung // Ann. Phys. 1910. **31**. 205–229.
8. *Knudsen M.* Thermischer Molekulardruck der Gase in Röhren // Ann. Phys. 1910. **338**, N 16. 1435–1448.
9. *Клосс Ю.Ю., Мартынов Д.В., Черемисин Ф.Г.* Разработка методов компьютерного моделирования и анализа микронасоса Кнудсена // Информационные технологии. № 10. 2010. 30–35.
10. *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. 6–14.
11. *Aoki K., Degond P., Mieussens L.* Numerical simulations of rarefied gases in curved channels: Thermal creep, circulating flow, and pumping effect // J. Comput. Phys. 2009. **6**, N 5. 919–954.
12. *Aoki K., Degond P., Mieussens L., Nishioka M., Takata S.* Numerical simulation of a Knudsen pump using the effect of curvature of the channel // Rarefied Gas Dynamics. M.S. Ivanov and A.K. Rebrov, Eds. Novosibirsk, 2007. 1079–1084.
13. *Hirschfelder J.O., Curtiss Ch. F., Bird R.B.* Molecular theory of gases and liquids. New York: Wiley, 1954.
14. *Geuzaine C., Remacle J.-F.* GMSH: a finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. 1996 (available from <http://www.geuz.org/gmsh>).
15. *Hendrickson B., Leland R.* The Chaco user's guide. Version 2.0. Sandia Tech Report SAND94-2692. 1994 (available from <http://www.sandia.gov/~bahendr/chaco.html>).
16. *Moulitsas I., Karypis G.* Architecture aware partitioning algorithms // Proc. of the 8th Int. Conf. on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP). 2008 (available from <http://www.cs.umn.edu/~metis>).

Поступила в редакцию
22.11.2010
