#### ИНДЕКС УДК

# ПАДЕНИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ НА ПЛОСКУЮ ПРЕГРАДУ, СОДЕРЖАЩУЮ МИК-РОЩЕЛИ

# Додулад О.И.<sup>1,3</sup>, Клосс Ю.Ю.<sup>1,3</sup>, Черемисин Ф.Г.<sup>1,2</sup>

1 – Московский физико-технический институт, Долгопрудный, М.О.
 2 – Вычислительный центр имени А.А. Дородницына РАН, Москва
 3 – Российский научный центр "Курчатовский институт", Москва dodulad@list.ru, kloss@mnpt.kiae.ru, tcherem@ccas.ru

#### Аннотация

Ударная волна падает на содержащую периодическую систему щелей плоскую преграду и входит в щели, частично отражаясь от поверхности преграды. Формирование отраженной ударной волны и ее распространение в щели изучаются на основе решения кинетического уравнения Больцмана конечно-разностным методом. Основное внимание обращено на процессы в микро щели. Рассмотрены две модели молекулярного потенциала: твердые сферы и потенциал Леннарда-Джонса аргона. Реализованы параллельные вычисления на кластере с применением технологии МРІ. Получены графики затухания ударной волны в щели, и подробные поля течения на разных стадиях процесса.

### SHOCK WAVE FALLING ON A FLAT BARRIER THAT CONTAINS MICRO SHELLS.

The shock wave falls on the barrier that contains periodic system of shells and enters the shells partially reflecting from the surface of barrier. Forming of reflected shock wave and its propagation in the shell is studied by solving the Bolzmann kinetic equation by a finite-difference method. Main attention is paid to the processes in the micro shell. Two molecular models are considered: that of hard spheres and with Lennard-Johnes potential of Argon. Parallel computations are realized at a cluster by using MPI technology. Graphics of the shock wave attenuation and detailed fields of flow parameters are reported.

### Введение.

Исследование течений газа с ударными волнами в узких каналах приобретает практический интерес в связи с разработкой микро и нано электронных механических систем (MEMS/NEMS) и развитием новых технологий, позволяющих создавать каналы микронного размера [1]. Одним из способов генерирования ударных волн в узких каналах является проникновение в них ударных волн извне. Экспериментальное изучение течений в микро каналах сопряжено с большими трудностями из-за размеров устройств, что делает необходимым их численное моделирование.

Традиционным методом расчета распространения ударных волн в узких каналах является решение уравнений Навье-Стокса [2-4], или их упрощенных моделей [5]. Такой подход обоснован, если длина свободного пробега молекул пренебрежимо мала по сравнению с диаметром канала и эффекты разреженности газа не играют существенной роли. Некоторого продвижения данной методики в область слабо разреженного газа можно добиться, используя граничные условия скольжения газа на поверхности твердого тела [6], однако эти условия являются приближенными и их точность в режиме разреженного газа не известна. В рамках кинетической теории, формирование ударной волны из начального разрыва параметров газа в плоском канале рассмотрено в [7] на основе модельного кинетического уравнения (S-модели Шахова). В настоящей работе моделирование нестационарного процесса распространения ударной волны в щели осуществляется на основе решения кинетического уравнения Больцмана методом, предложенным в [8] и подробно описанным в улучшенной версии в [9], где он применялся для расчета внешних сверхзвуковых стационарных течений газа. В [10-12] этот метод был применен для расчета медленных дозвуковых течений в каналах различной формы. Здесь же описана методика организации параллельных вычислений и программномоделирующая среда для анализа течений в микро- и нано устройствах.

# 1. Постановка задачи.

Моделируемое течение соответствует экспериментальной установке, заявленной в [1], где высота, ширина и глубина прямоугольного канала составляют, соответственно, 17, 2000 и 2000 микрон, а сам канал помещен в торцевую часть измерительной секции ударной трубы. При атмосферном давлении длина свободного пробега молекул газа составляет приблизительно 0.1 микрона. При типичных режимах работы ударной трубы давление в измерительной секции на 1-3 порядка меньше атмосферного, что дает число Кнудсена, определяемое по минимальному размеру канала в диапазоне от 0.05 до 5.

Геометрия задачи изображена на рисунке 1. Рассматривается падение плоской ударной волны (УВ) на периодическую структуру, состоящую из щелей. В вычислительном отношении такая постановка задачи несколько проще, чем рассмотрение одной щели. Ввиду симметрии задачи расчет проводился в области, показанной на рисунке 2, где CDE - стенка цели с диффузным отражением. Длина отрезка CD вдвое больше полуширины щели D. Температура стенки равна температуре невозмущенного газа, АС и HF – линии симметрии с зеркальными граничными условиями. На AH задано граничное условие, являющееся максвелловской функцией с параметрами за УВ, на EF - максвелловская функция с параметрами невозмущенного газа, ВС – начальное положение УВ. Начальная структура падающей УВ в виде функции распределения молекулярных скоростей рассчитывается предварительно по решению одномерной задачи и помещается в область счета с центром на линии BG.







Рис.2. Область счета

Численной моделирование было проведено для числа Маха падающей волны M=3 и чисел Кнудсена  $Kn = \lambda / D$ , где  $\lambda$ - длина свободного пробега в невозмущенном газе и D-полуширина щели, равных 0.2 и 0.05. Шаг пространственной сетки вдоль щели был равен  $h_x=0.6 \lambda$ , шаг поперек щели выбирался так, чтобы внутри ее укладывалось 20 ячеек, причем во внешнем пространстве он растягивался с коэффициентов 1.25. Параметры расчетов для разных случаев приведены в таблице 1. В ней также указано число узлов в скоростном пространстве и число узлов 8-мерной кубатурной сетки Коробова, применяемой для

#### вычисления интеграла столкновений Больцмана.

Таблица 1. Параметры расчетов.

Потенциал	Число Кнудсена	$h_x$	$h_y$	Размер скоростного пространства	Мощность сетки Коробова
Твердые сферы	0.05	0.6 λ	1λ	18×18×9	$2.10^{6}$
	0.2		0.25 λ	26×26×13	$0.8 \cdot 10^{6}$
				32×32×16	$1.8 \cdot 10^{6}$
Ленард-Джонс				26×26×13	$0.8 \cdot 10^{6}$

# 2. Численный метод.

Численный метод основан на решении кинетического уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{x} \frac{\partial f}{\partial x} = I(f, f) \,. \tag{2.1}$$

Данное уравнение аппроксимируется системой уравнений для функций  $f_{\gamma} = f(\mathbf{x}_{\gamma}, x, t)$ ,  $I_{\gamma} = I(\mathbf{x}_{\gamma}, x, t)$  определенных на сетке  $\boldsymbol{\xi}_{\gamma}$  из  $N_0$  равноотстоящих с шагом  $\boldsymbol{h} = (h, h, h)$  узлов в шаре  $\Omega$  объема V

$$\frac{\partial f_{\gamma}}{\partial t} + \mathbf{x}_{\gamma} \frac{\partial f_{\gamma}}{\partial x} = I_{\gamma}.$$
(2.2)

Система (2.2) решается на шаге по времени т методом расщепления

$$\frac{\partial f^*}{\partial t} + \mathbf{x} \frac{\partial f^*}{\partial x} = 0, f^{*,j} = f^j$$
(2.3)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I_{\gamma}, f^{j} = f^{*,j+1}$$
(2.4)

Чтобы сделать схему расщепления симметричной, решение уравнения (2.3) повторяется дважды на полуинтервале по времени.

Для аппроксимации интеграла столкновений используется следующий метод. Запишем интеграл столкновений в виде

$$I(\mathbf{x}) = \int_{R^3} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{b_m} (f'f'_1 - ff_1)gbdbd\varepsilon d\mathbf{x}_1.$$

По определению  $\delta$ -функции, значение интеграла столкновений в скоростном узле  $\xi_{\gamma}$  может быть представлено в виде  $I(\mathbf{x}_{\gamma}) = \int \delta(\mathbf{x}_{\gamma} - \mathbf{x}) I(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ . Пользуясь свойством симметрии интеграла столкновений

$$\int \phi(x) I(x) dx = \frac{1}{4} \int (\phi(x) + \phi(x_1) - \phi(x') - \phi(x'_1)) I(x) dx,$$

где  $\phi(x)$  произвольная весовая функция (в нашем случае б-функция), получаем

$$I_{\gamma} = \frac{1}{4} \int_{R^3} \int_{R^3} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{b_m} (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\gamma}) + \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_{\gamma}) - \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{\gamma}) - \delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}_{\gamma})(f'f'_1 - ff_1))gbdbd\varepsilon d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x} .$$
(2.5)

Для вычисления интеграла (2.5) используется сетка Коробова [13] для  $\mathbf{x}_{\alpha_{\nu}}$ ,  $\mathbf{x}_{\beta_{\nu}}$ ,  $b_{\nu}$ ,  $\varepsilon_{\nu}$ из  $N_{\nu}$  узлов в области  $\Omega \times \Omega \times [0, 2\pi] \times [0, b_m]$  так, что  $\mathbf{x}_{\alpha_{\nu}}$ ,  $\mathbf{x}_{\beta_{\nu}}$  совпадают с узлами скоростной сетки; максимальное прицельное расстояние  $b_m$  выбирается так, чтобы угол рассеяния при этом прицельном расстоянии был достаточно мал.

Для вычисления скоростей после столкновения требуется знать угол отклонения  $\theta$ , который зависит от потенциала взаимодействия. В случае твердых шаров радиуса  $\sigma_0$  его вычисление не представляет сложности, так как  $\theta = \pi - 2 \cdot \arcsin(\frac{b}{\sigma_0})$ . Для произвольного потенциала решается интегральное уравнение [14]

$$\theta(b,g) = \pi - 2 \int_{0}^{y_0} \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2 - U^*(y) / mg^2}},$$

где  $y = \frac{b}{r}$ ,  $U^* = U(\frac{b}{r})$ , а  $y_0$  минимальный корень подкоренного выражения.

При вычислении угла разлета для потенциала Ленарда-Джонса  $U(r) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right)$  используется следующий метод решения данного интегрального

уравнения. С достаточно малым шагом идет суммирование в интеграле до тех пор, пока подкоренное выражение больше нуля. Последний вклад исключается. Для сокращения вычислений углы разлета вычислялись заранее для различных *b* и *g*. Затем по полученной дискретной зависимости угол разлета для данных *b* и *g* определяется путем интерполяции.

Так как в общем случае скорости после столкновения  $x'_{\alpha_{\nu}}$ ,  $x'_{\beta_{\nu}}$  не лежат в узлах скоростной сетки, то две последние  $\delta$ -функции в выражении (1.3) заменяются на

$$\delta(\boldsymbol{\xi}_{\alpha_{v}} - \boldsymbol{\xi}_{\gamma}) = (1 - r_{v})\delta(\boldsymbol{\xi}_{\lambda_{v}} - \boldsymbol{\xi}_{\gamma}) + r_{v}\delta(\boldsymbol{\xi}_{\lambda_{v}+s} - \boldsymbol{\xi}_{\gamma}),$$
  
$$\delta(\boldsymbol{\xi}_{\beta} - \boldsymbol{\xi}_{v}) = (1 - r_{v})\delta(\boldsymbol{\xi}_{\mu} - \boldsymbol{\xi}_{v}) + r_{v}\delta(\boldsymbol{\xi}_{\mu-s} - \boldsymbol{\xi}_{v}),$$

где  $\xi_{\lambda_{\nu}}$  и  $\xi_{\mu_{\nu}}$  ближайшие узлы к  $x'_{\alpha_{\nu}}$  и  $x'_{\beta_{\nu}}$  соответственно, *s* -вектор сдвига, который определяет пару узлов,  $\xi_{\lambda_{\nu}+s}$ , ,  $\xi_{\mu_{\nu}-s}$  расположенных симметрично на расстоянии шага сетки от  $\xi_{\lambda_{\nu}}$  и  $\xi_{\mu_{\nu}}$ , а коэффициент  $r_{\nu}$  выбирается так, чтобы выполнялись законы сохранения импульса и энергии (закон сохранения массы при данной замене уже выполняется). Сначала находятся  $\xi_{\lambda_{\nu}}$ ,  $\xi_{\lambda_{\nu}+s}$ , путем перебора 8 соседних узлов и выбора из них двух наиболее близко по модулю относительной скорости подходящих с меньшей и большей стороны сферы столкновений [14] к узлу  $\xi_{\alpha_{\nu}}$ . Затем скорости  $\xi_{\mu_{\nu}}$ ,  $\xi_{\mu_{\nu}-s}$  находятся из закона сохранения импульса

$$\xi_{\alpha_{\nu}}+\xi_{\beta_{\nu}}=\xi_{\lambda_{\nu}}+\xi_{\mu_{\nu}},$$

$$\boldsymbol{\xi}_{\alpha_{\nu}} + \boldsymbol{\xi}_{\beta_{\nu}} = \boldsymbol{\xi}_{\lambda_{\nu}+s} + \boldsymbol{\xi}_{\mu_{\nu}-s}$$

Коэффициент  $r_{\nu}$  находится из закона сохранения энергии  $E_0 = (1 - r_{\nu})E_1 + r_{\nu}E_2$ , где  $E_0 = \boldsymbol{\xi}_{\alpha_{\nu}}^2 + \boldsymbol{\xi}_{\beta_{\nu}}^2$ ,  $E_1 = \boldsymbol{\xi}_{\lambda_{\nu}}^2 + \boldsymbol{\xi}_{\mu_{\nu}}^2$  и  $E_2 = \boldsymbol{\xi}_{\lambda_{\nu}+s}^2 + \boldsymbol{\xi}_{\mu_{\nu}-s}^2$ , откуда следует

$$r_{\nu} = \frac{E_0 - E_1}{E_2 - E_1},$$

Выбор узлов  $\lambda_{\nu}$ ,  $\lambda_{\nu} + s$  обеспечивает выполнение условия  $0 \le r_{\nu} \le 1$ . Для вычисления  $f'_{\alpha_{\nu}} f'_{\beta_{\nu}}$  используется следующая интерполяция

$$f'_{a_n} f'_{b_n} = (f'_{a_1} f'_{m_n})^{1-r_n} (f'_{l_n+s} f'_{m_n-s})^{r_n}$$
(2.6)

Она обеспечивает точное равенство нулю интеграла столкновений от максвелловской функции, что сохраняет области невозмущенного газа до прихода УВ.

Для перехода к безразмерным величинам в качестве нормировочных постоянных берутся параметры газа  $n_0$  и  $T_0$  в невозмущенной области перед УВ. По ним определяются масштабы скорости  $v_0 = \sqrt{\frac{kT_0}{m}}$ , длины  $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0 \sigma_{eff}^2}}$  и времени  $\tau_0 = \frac{\lambda}{v_0}$ . Уравнение (2.2) в

безразмерных величинах  $\boldsymbol{\xi}^* = \frac{\boldsymbol{\xi}}{v_0}, \quad x^* = \frac{x}{\lambda}, \quad t^* = \frac{t}{\tau_0}, \quad b^* = \frac{b}{\sigma_{eff}}$  и  $f^* = \frac{fv_0^3}{n_0}$  запишется в виде

(значок \* опускаем)

$$\frac{\partial f_{\gamma}}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_{\gamma} \frac{\partial f_{\gamma}}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_{\gamma}$$

где  $I_{\gamma} = B \sum_{\nu=1}^{N_{\nu}} \left[ (1-r_{\nu})(\delta_{\lambda_{\nu},\gamma} + \delta_{\mu_{\nu},\gamma}) + r_{\nu}(\delta_{\lambda_{\nu}+s,\gamma} + \delta_{\mu_{\nu}-s,\gamma}) - (\delta_{\alpha_{\nu},\gamma} + \delta_{\beta\nu},\gamma) \right] \Delta_{\nu} , \qquad B = \frac{V\pi b_{m}N_{0}}{2N_{\nu}} \qquad \text{M}$  $\Delta_{\nu} = (f_{\alpha_{\nu}}f_{\beta_{\nu}} - f'_{\alpha_{\nu}}f'_{\beta_{\nu}})g_{\nu}b .$ 

Для решения уравнения (2.4) используется схема "непрерывного счета". Запишем это уравнение в интегральном виде

$$f_{\gamma}^{j+1} = f_{\gamma}^{j} + \int_{t_j}^{t_{j+1}} I_{\gamma}(t) dt ,$$

введя переменную  $t^{j} = \tau v / N_{v}$  и промежуточное значение  $f_{v}^{j+v/N_{v}}$ , получаем схему

$$f_{\gamma}^{j+\nu/N_{\nu}} = f_{\gamma}^{j+(\nu-1)/N_{\nu}} + \tau \Delta_{\gamma,\nu}^{j+(\nu-1)/N_{\nu}}.$$

Неотрицательность решения обеспечивается путем увеличением числа узлов  $N_{\nu}$ . Для этого на каждом шаге проверяется, не стала ли функция распределения отрицательной, и в случае отрицательности вклад отбрасывался. Если число отброшенных узлов превышает значение  $10^{-4} \cdot N_{\nu}$ , то производится пересчет с увеличенным числом узлов.

## 3. Программная реализация.

Задание геометрии системы осуществляется следующим образом. В области расчета строится пространственная прямоугольная сетка. Информация о каждой ячейке этой сетки хранится в отдельной структуре данных. Расположение ячейки относительно других задается указанием соседних для нее ячеек. В структуре, описывающей ячейку, хранятся указатели на структуры соседних ячеек, а также размер ячейки. Таким образом, геометрия системы полностью задается указанием соседей и размеров каждой ячейки.

Распараллеливание ведется с помощью технологии MPI. Все ячейки равномерно распределяются между процессами. Существуют ячейки, за соседей которых отвечает другой процесс. На каждом шаге их функцию распределения нужно получать путем приема MPI сообщения. Для этого ответственный за соседнюю ячейку процесс, должен знать, что ее функцию распределения необходимо переслать. Информация от том, функцию распределения каких узлов необходимо принять, а каких отправить, хранится в двух списках. После того так ячейки распределились между процессами, происходит выделение памяти для функции распределения только тех ячеек, за которые отвечает данный процесс.

Вычисление интеграла столкновений занимает основную часть времени работы программы. Поэтому оно требует тщательной оптимизации. Первая проблема касается экспоненциальной интерполяции (2.6). Стандартная функция вычисления степени довольно медленная, но можно применить более быстрый, но менее точный метод. Расчет степени можно свести к расчету экспоненты и логарифма. Рассмотрим приближенный метод вычисления логарифма (приближенное вычисление экспоненты аналогично — операции нужно поводить в обратном порядке). Машинным представлением вещественных чисел является х\*2<sup>у</sup>. Тогда  $log_2(x^2) = v + log_2(x)$ , причем v можно выбрать так, чтобы x находилось в промежутке [1, 2). Тогда  $log_2(x)$  можно приближенно вычислить, разложив его в ряд и взяв всего несколько членов ряда. Вторая проблема касается обращений к памяти. Обращения к оперативной памяти занимают сотни тактов процессора. Для сокращения времени обращения существуют кэш-память различных уровней. Для того, чтобы процессор наиболее эффективно использовал кэш-память, необходимо обращаться в последовательные участки оперативной памяти. В каждом «столкновении» - вкладе в интеграл (2.5) - участвует 6 довольно беспорядочно расположенных скоростей. Поэтому неэффективно выполнять внутренний цикл по всем столкновениям в одной пространственной ячейке. Лучше применять одно столкновение сразу ко всем пространственным ячейкам и функцию распределения хранить так, чтобы значения функции распределения в одном скоростном узле находились рядом для всех пространственных ячеек. Более эффективное использование памяти достигается также путем хранения одного массива кубатурной сетки Коробова для всех процессов на одном вычислительном узле.

### 4. Результаты.

Вычисления проводились на кластере МФТИ-60. При использовании двух четырехядерных процессоров Xeon время расчета одного времени релаксации при числе узлов пространственной сетки 38000 составляло около 25 минут. Суммарный объем используемой памяти был равен 4ГБ.

На рис. 3, 4, 5, 6 изображены результаты вычислений для газа из молекул - твердых сфер для Kn=0.2 и времен t = 9.6, 38.4, 86.4, 123.6 соответственно. Вверху каждого рисунка показаны значения основных параметров газа - плотности, температуры, продольной компоненты скорости и локального числа Маха - вдоль центра щели. Рассмотрим течение при t = 9.6. Здесь на верхнем графике видна ударная волна, в которой происходит возрастание плотности. За фронтом УВ следует область контактного газа, где в отличие от случая невязкого газа, плотность и температура не постоянные и растут по направлению к входу в щель. Этот рост можно объяснить двумя причинами: торможением и охлаждением потока газа у стенок щели, и втеканием в нее горячего и плотного газа из области перед щелью, где формируется отраженная УВ. В отраженной УВ максимум плотности лежит у стенок преграды, а максимум температуры напротив входа в щель, что объясняется наличием потоков газа, направленных к линии симметрии. Скорость газа за отраженной УВ положительна и направлена в сторону щели. На рисунках полей температуры, скорости и

плотности видно охлаждение и торможение потока газа у стенок, что приводит к возрастанию там плотности газа. При t = 38.4 процессы торможения и охлаждения газа продолжаются, и намечается локальный максимум плотности. В следующие моменты времени этот максимум усиливается и намного превышает значение плотности за отраженной УВ. При t = 123.6 локальное число Маха в центре канала уже не превышает 1. Течение переходит в дозвуковое и УВ исчезает.

На рис. 7, 8, 9, 10 изображены аналогичные распределения для Kn = 0.05. Здесь трение на стенках и охлаждение газа играют сравнительно меньшую роль. В начале процесса, при t = 9.6, скорость газа на линии симметрии течения за входом в щель превышает ее значение за падающей УВ. Происходит небольшое усиление УВ. На полях течения видно, что максимумы скорости и температуры в этот момент находятся не в центре щели, а на некотором расстоянии от линии симметрии. Структура УВ вблизи линии симметрии близка к структуре плоской УВ. В дальнейшем течение замедляется, максимумы температуры и скорости перемещаются на центральную линию, но локального максимума плотности, превышающего значение за отраженной УВ не наблюдается. Слева от входа в щель прослеживается формирование отраженной УВ. Ее интенсивность может быть определена по отношению плотностей в падающей волне  $n_1$  и отраженной волне  $n_2$  из соотношений Ренкина-Гюгонио для показателя адиабаты  $\gamma = 5/3$ 

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{(\gamma + 1)M_1^2}{(\gamma - 1)M_1^2 + 2}$$

получаем число Маха отраженной волны  $M_1 = 1.69$ .

На рис.10 показано замедление УВ в щели, вычисленное по перемещению точки, где вторая производная графика продольной скорости равна нулю. Интересно отметить выпуклость вверх графика для Kn = 0.05 после t = 20.

Для контроля точности был проведен расчет для более мелкой скоростной сетки состоящей из 32x32x16 узлов в сравнении с расчетом для сетки из 26x26x13 узлов. На рис.11 показано сравнение распределений температуры и плотности на линии симметрии. Из сравнения можно заключить, что основной расчет выполнен с достаточной точностью.

На рис.12 показано сравнение аналогичных распределений при использовании потенциала твердых сфер и потенциала Ленарда-Джонса для аргона с параметрами, взятыми при температуре 300К из [15]. Значительных отличий не наблюдается, что говорит о том, что модель твердых сфер хорошо описывает изучаемые процессы.



Рис.3. Параметры газа для Kn = 0.2 при t = 9.6.



Рис.4. Параметры газа для Kn = 0.2 при t = 38.4.



Рис.5. Параметры газа для Kn = 0.2 при t = 86.4.



Рис.6. Параметры газа для Kn = 0.2 при t = 123.6.



Рис.7. Параметры газа для Kn = 0.05 при t = 9.6.



Рис.8. Параметры газа для К<br/>п = 0.05 при t = 38.4.



Рис.9. Параметры газа для К<br/>п = 0.05 при t = 86.4.



Рис.10. Параметры газа для Kn = 0.05 при t = 138.24.



Рис.11. Замедление ударной волны для a)Кn = 0.2; б) Кn = 0.05.



Рис.12. Контроль точности.



Рис.13. Сравнение расчетов для потенциалов Ленарда-Джонса (LJ) и твердых сфер (HS).

#### Основные выводы

На основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана для одноатомного газа осуществлено моделирование падения плоской ударной волны на периодическую систему щелей. Изучен процесс формирования отраженной ударной волны, вхождения ее в щель, и распространения внутри щели. Обнаружено небольшое увеличение интенсивности ударной волны при входе в щель. Сравнение расчетных данных для двух различных чисел Кнудсена показывает значительное влияние поперечного размера щели на характер течения. При Kn = 0.2, когда ширина входного отверстия порядка толщины УВ, происходит быстрое охлаждение газа за ударной волной и образование максимума плотности, в несколько раз превышающего значение плотности за волной по одномерной теории. Для Kn = 0.05, при увеличении входного отверстия в 4 раза, охлаждение и торможение УВ менее значительно, и максима плотности не наблюдается. Расчеты показали эффективность разработанной методики решения уравнения Больцмана с применением параллельных алгоритмов для моделирования нестационарных течений с ударными волнами в микро каналах.

### Литература.

- 1. G. Mirshecari, M. Brouillette. Experimental study of the shock propagation in micro-scale cannel// Book of proceedings of 27-th International Symposium on Shock Waves. P.260. St. Petersburg, Russia, 2009.
- 2. D. Ngomo, A. Chinnayya and A. Hadjaji. Numerical investigation of viscosity and heat-losses effects on shock propagation and detonation in narrow channels// Book of proceedings of 27-th International Symposium on Shock Waves. P.350. St. Petersburg, Russia, 2009.
- 3. M. Brouillette. Shock waves at microscales // Shock Waves, Vol.13, pp.3-12, 2003.
- 4. W. Garen et al. Shock waves in mini-tubes: Influences on the scaling parameter S //Proc.of 26-th Intern. Symp.on Shock Waves, No 2062, Goettingen, Germany, 2007.
- 5. G.Mirshecari, M. Brouillette. One-dimensional model for microscale shock tube// Shock Waves, 19, pp. 25-38, 2009.
- D.E. Zeitoun et al. Continuum and Kinetic Simulation of Shock Wave Propagation in Long Microchannel.// In: 26<sup>th</sup> Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings 1084, pp.464-469, 2009
- 7. И.Н. Ларина, В.А. Рыков, Е.М. Шахов. Нестационарные течения разреженного газа между параллельными пластинами// Известия Академии наук / Механика жидкости и газа. № 2, с.165-173. 1997.

- 8. Ф.Г.Черемисин. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана// Доклады РАН. Т. 357. № 1. С. 53-56. 1997
- 9. Ф.Г.Черемисин. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений// ЖВМ и МФ.Т. 46 № 2, С.329-343. 2006
- N.I. Khokhlov, Yu.Yu. Kloss, B.A. Shurigin, F.G. Tcheremissine, Simulation of the Temperature Driven Micro Pump by solving the Boltzmann Kinetic Equation, In: 26<sup>th</sup> Int. Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conference Proceedings 1084, pp.1039-1046, 2009
- 11. Ю.Ю. Клосс, Ф.Г.Черемисин, Н.И. Хохлов, Б.А. Шурыгин. Программно-моделирующая среда для исследования течений газа в микро и нано структурах на основе решения уравнения Больцмана// Атомная энергия. Т. 105. № 4. С. 211-217. 2008.
- Ю.Ю. Клосс, Н.И. Хохлов, П.В. Шувалов, Б.А. Шурыгин, Ф.Г. Черемисин Моделирование и анализ газокинетических процессов в микро - и нано структурах. Сборник трудов под ред. ак. Н.Н. Пономарева-Степного, ИздАТ, 2008, ISBN 978-5-86656-1
- 13. Н. М. Коробов. Тригонометрические суммы и их приложения. Москва. Наука. 1989.
- 14. М.Н.Коган. Динамика разреженного газа. Москва, «Наука», 1967
- 15. J.O. Hirschfelder, Ch.F. Curtiss, R.B. Bird. Molecular Theory of Gases and Liquids, John Wiley and Sons, inc., N.-Y., Chapman and Hall, London, 1954.

Статья поступила в редакцию 30 ноября 2009 г.