

Численное исследование некоторых задач механики разреженного газа

В.А. Титарев¹, А.А. Морозов², И.В. Воронич³

¹ФИЦ “Информатика и Управление” РАН, г. Москва

²Институт Теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск

³МФТИ, г. Долгопрудный

Dynamics in Siberia – 2026

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН,

02 – 06 марта 2026 г.



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



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

Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук



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

Кинетическое уравнение Больцмана

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

$$n = \int f d\xi, \quad nu = \int \boldsymbol{\xi} f d\xi, \quad \frac{3}{2} mnR_g T + \frac{1}{2} mnu^2 = \frac{1}{2} m \int \xi^2 f d\xi,$$

где m – масса молекулы, $\rho = mn$, $p = \rho R_g T$.

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

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = I(f, f), \quad I(f, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{b_m} (f' f'_1 - ff_1) g b d b d \phi d \xi_1.$$

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

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

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

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

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

- При $\text{Pr} = 1$ S-модель сводится к модели БГК [Bhatnagar et al., 1954]
- Макроскопические переменные определяются в виде интегралов по $\boldsymbol{\xi}$:

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

- Степень разреженности газа определяется т.н. параметром разреженности δ , который обратно пропорционален числу Кнудсена Kn :

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

Трудности численного решения (масштаб задачи)

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

Основные сложности численного решения состоят в следующем:

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

Общий вид метода дискретных скоростей (I)

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

$$f_j = f(t, \mathbf{x}, \xi_j), \quad f_j^{(S)} = f^{(S)}(t, \mathbf{x}, \xi_j).$$

- Кинетическое уравнение переписывается в виде системы из N_ξ уравнений

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

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

Общий вид метода дискретных скоростей (II)

- Полудискретная схема для нахождения значений функции распределения f_i :

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_i |V_i|) = R_i, \quad R_i = - \sum_l \Phi_{li} + |V_i| J_i,$$
$$\Phi_{li} = \int_{A_{li}} \hat{\xi}_{nli} \circ f ds, \quad \hat{\xi}_{nli} = \hat{\xi}_\alpha n_{\alpha li},$$

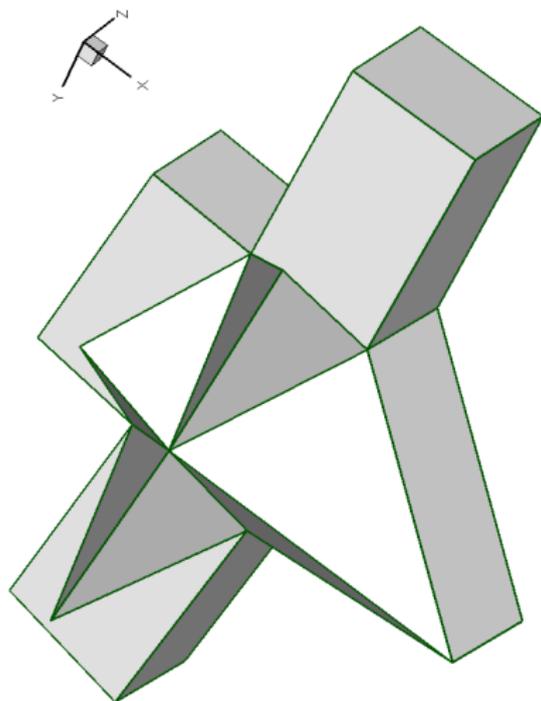
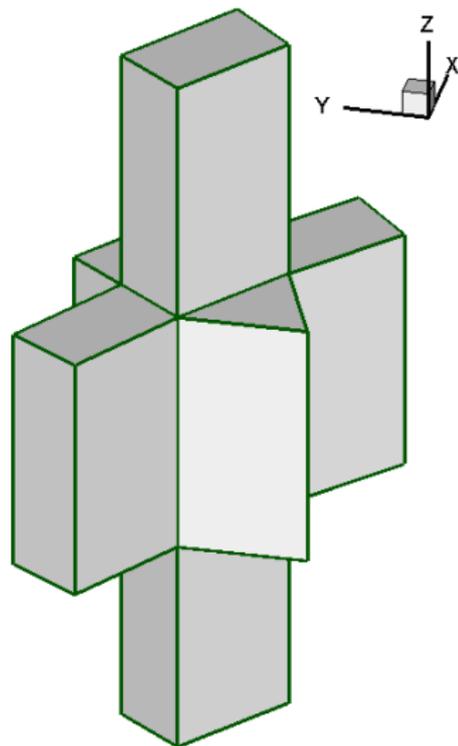
где $\mathbf{n}_{li} = (n_1, n_2, n_3)_{li}^T$ – внешняя единичная нормаль к грани A_{li} (l – номер грани) пространственной ячейки V_i .

- Процедура многомерной реконструкции выдает f_{li}^- , f_{li}^+ для каждой грани.
- Для неподвижной сетки выражение для численного потока Φ_{li} имеет вид

$$\Phi_{li} = \frac{1}{2} \hat{\xi}_{nli} \circ [(f_{li}^- + f_{li}^+)) - K_{li} \circ (f_{li}^+ - f_{li}^-)] |A_{li}|, \quad K_{li} = \text{sign} \hat{\xi}_{nli}.$$

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

Типичные шаблоны TVD схемы на произвольной сетке



Нахождение макропараметров для S-модели

- “Наивный” способ расчета макропараметров:

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

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

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

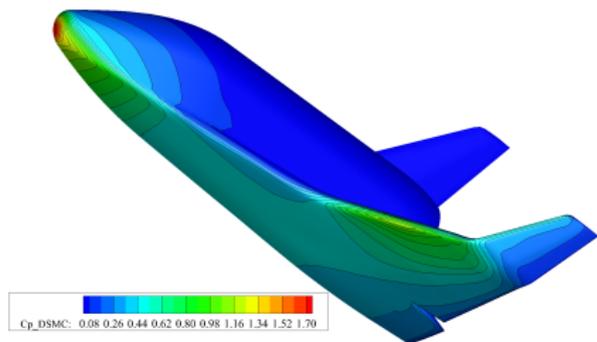
Здесь индексы i, n опущены для простоты.

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

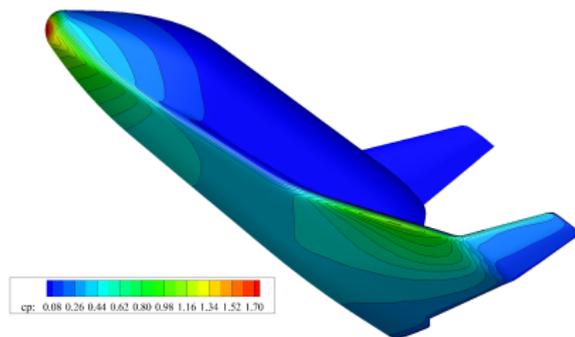
- Произвольные трехмерные сетки в физическом пространстве (структурированные из шестигранников, неструктурированные из тетраэдров, призм и пирамид)
- Произвольные трехмерные сетки в скоростном пространстве (структурированные из шестигранников, неструктурированные из тетраэдров, призм и пирамид)
- Численный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

Сравнение с кодом SMILE

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



Слева - SMILE



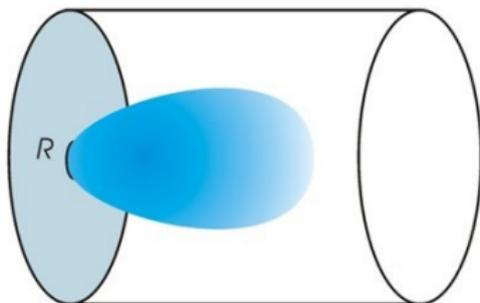
справа - Несветай

Импульсная лазерная абляция

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

Постановка задачи

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

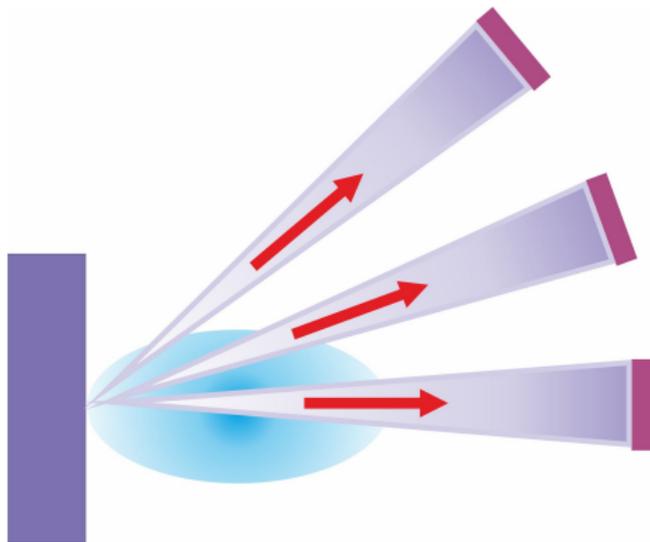


Цель настоящих расчетов

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

Расчет параметров частиц, летящих на детектор

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



Расчет параметров частиц, летящих на детектор II

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

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

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

$$E_{\text{tof}}(t, \alpha, \Theta) = \frac{E}{E_0}, \quad E = \frac{\frac{1}{2} m \int_0^\infty \int_{\beta \leq \alpha} \xi^2 f d\xi dx}{\int_0^\infty \int_{\beta \leq \alpha} f d\xi dx}, \quad E_0 = 2kT_0,$$

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

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

Типичные расчетные режимы

- Удобно использовать безразмерные параметры:
 - число монослоев Θ ; одному монослою соответствует такое количество частиц, что они полностью покрывают испаряющуюся поверхность.
 - безразмерный радиус пятна испарения $b = R_0/(u_T\tau)$, где $u_T = \sqrt{8kT_0/(\pi m)}$ – средняя тепловая скорость частиц при испарении.
 - параметр разреженности $\delta = R_0\rho_0/(\mu_0\beta_0)$, где $\beta_0 = \sqrt{2kT_0/m}$ – наиболее вероятная скорость молекул
- Типичный размер пятна испарения при лазерной абляции $R_0 = 0.1 \dots 1$ мм. Для $m = 12 \dots 200$ а.е.м. и $T_0 = 4000 \dots 8000$ К получаем тепловую скорость $u_T = 700 \dots 8000$ м/с. В результате для длительности испарения $\tau = 10$ нс, безразмерный радиус пятна испарения $b = 3 \dots 150$.
- Задаем безразмерные параметры b и $\theta \rightarrow$ получаем параметры δ и τ_* , требуемые для решения модели БГК.
- Для модели твердых сфер

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

Типичные расчетные режимы II

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

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

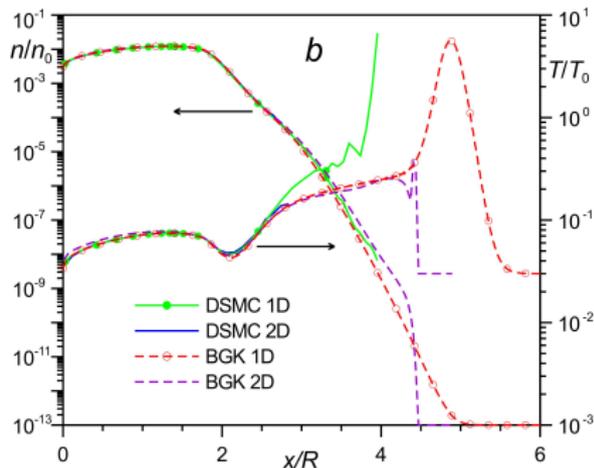
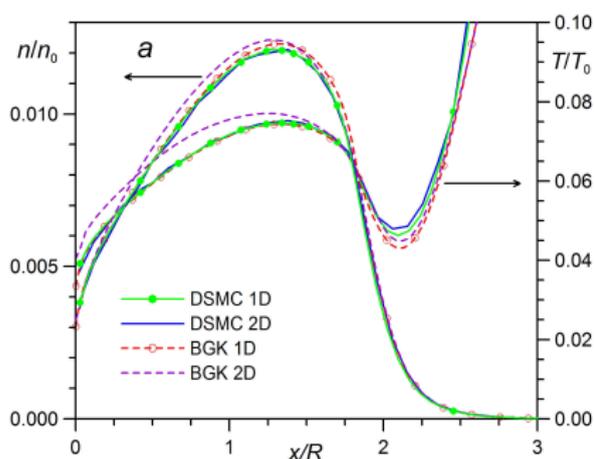
- Значение температуры фонового газа не имеет большого значения и для простоты принимается равным

$$T_b = 0.03 T_0.$$

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

Осевые профили плотности и температуры.

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

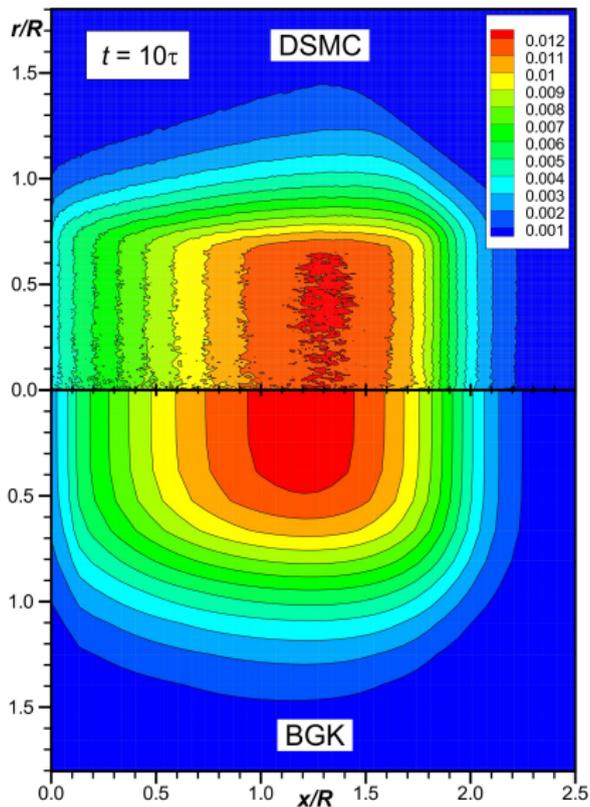


Было проведено множество тестовых расчетов с целью оптимального выбора размера расчетной области в пространстве скоростей.

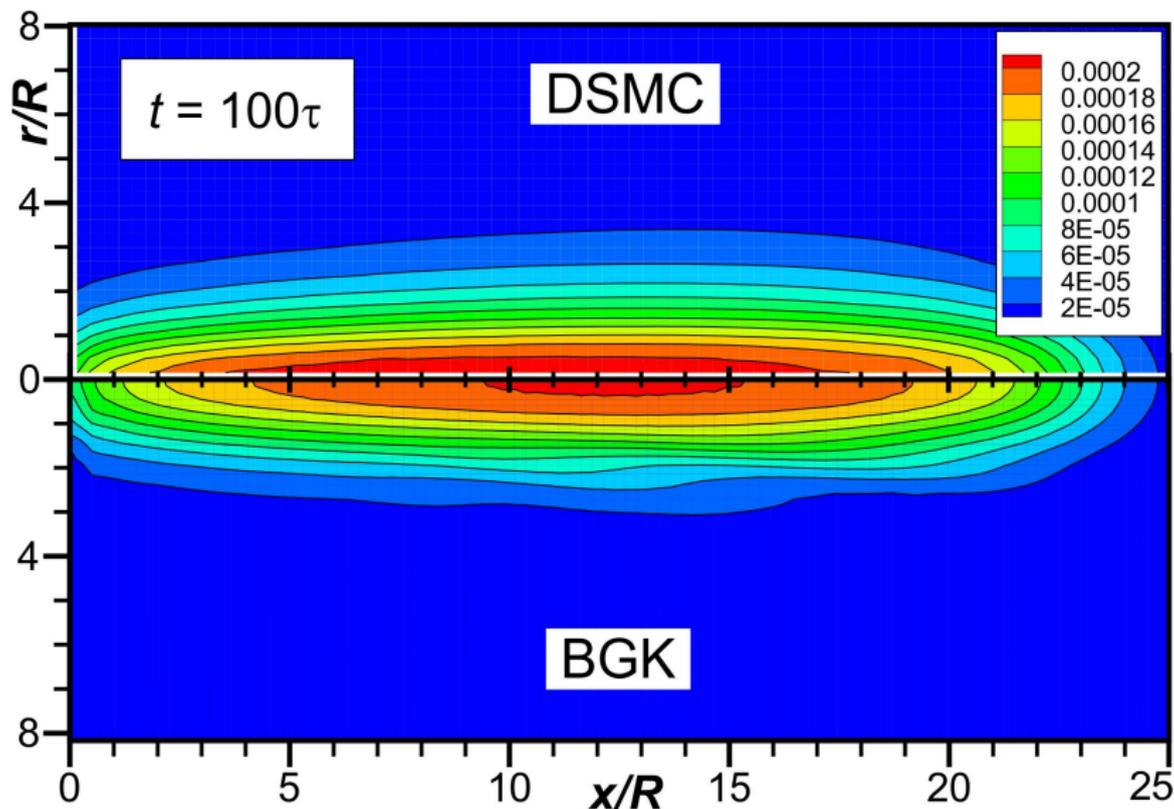
Видно, что ограничение размера расчетной области не ухудшает точность расчета облака.

Детали профиля ударной волны неважны.

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

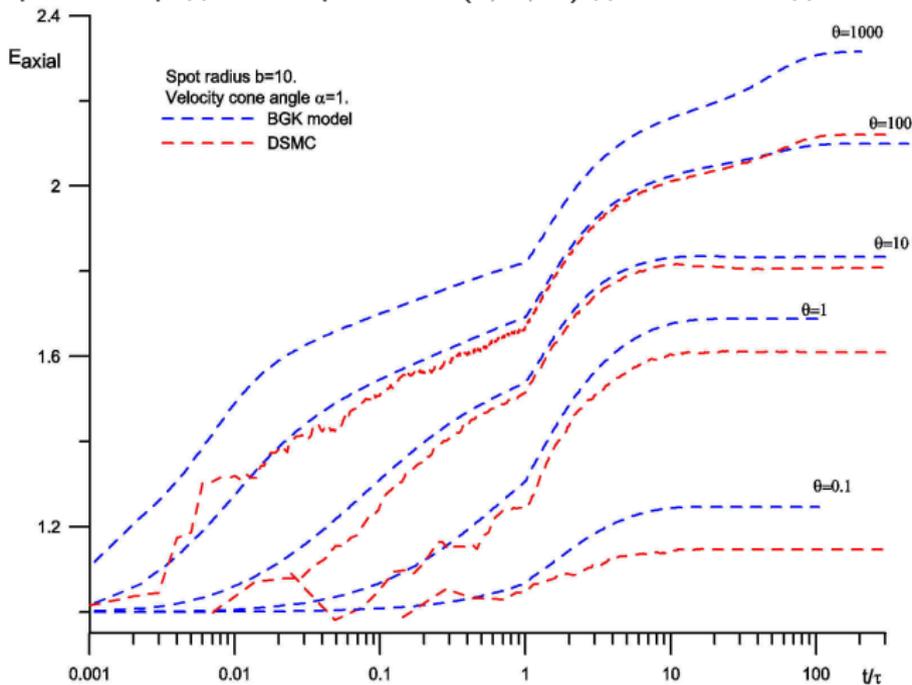


Поле плотности n/n_0 для $b = 10$, $\theta = 100$, $t/\tau = 100$.



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

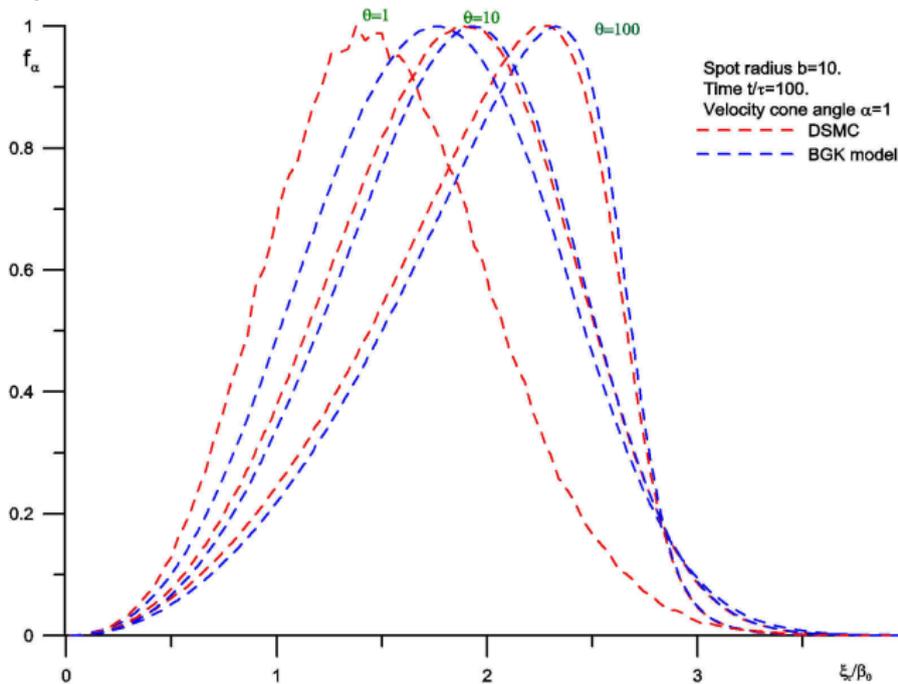
Расчет $E_{\text{tof}}(t, \alpha, \Theta)$ на основе разных моделей для осевого детектора.
Для этой величины важен точный расчет функции распределения f .
С течением времени средняя энергия $E_{\text{tof}}(t, \alpha, \Theta)$ должна выходить на полку.



Функция распределения скоростей, осевой детектор

Сравнение профилей функции распределения скоростей молекул в конусе $f_\alpha(t, \xi_r, \alpha)$, полученных кодами **LasInEx** и **Несветай**.

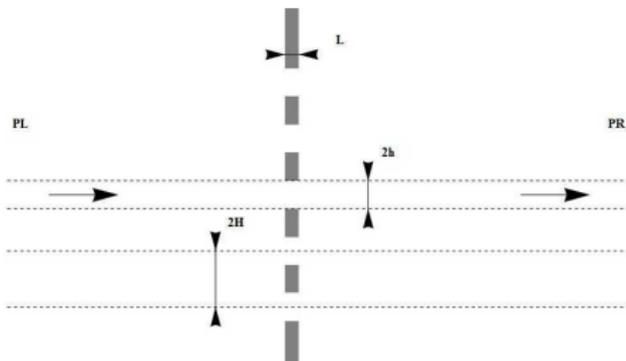
Для этой величины важен точный расчет функции распределения f , а не только макропараметров.



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

Постановка задачи

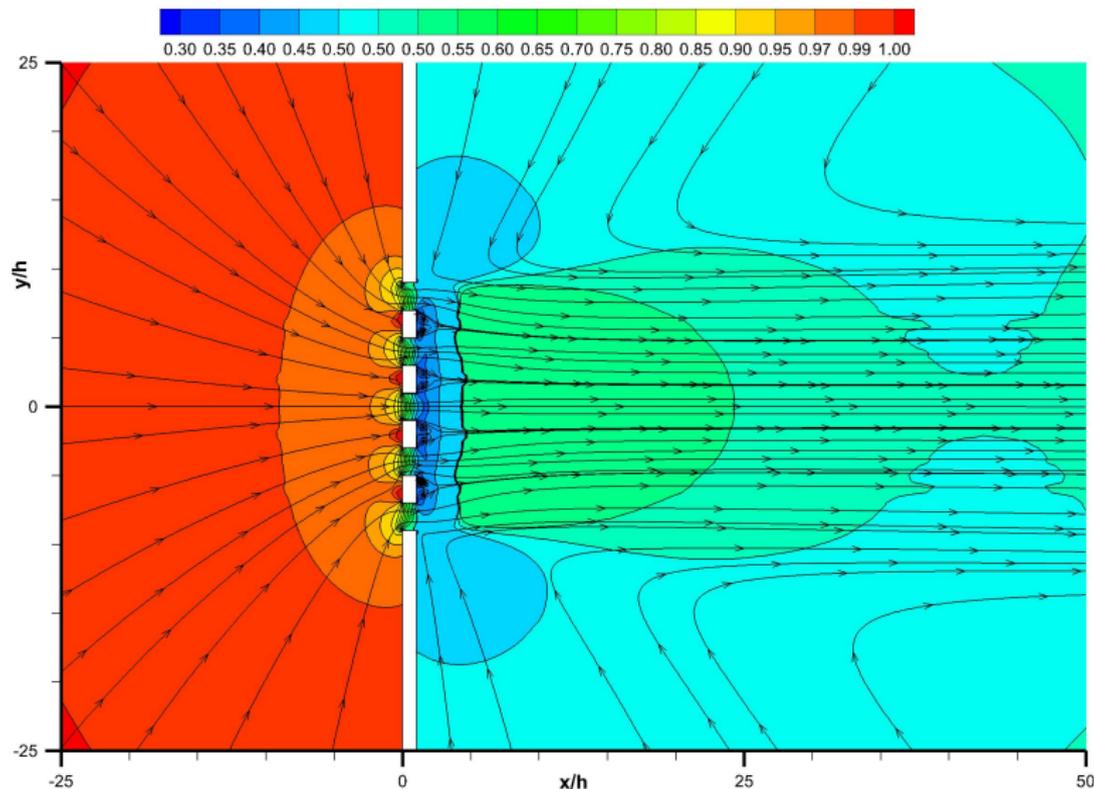
- Рассмотрим течение одноатомного разреженного газа через периодическую систему плоских каналов (пор), имитирующую течение газа через мембрану,
- Характеристики мембраны: геометрическая проницаемость $K = h/H$ и относительная длина пор $L_h = L/h$.
- Здесь h – полувысота (радиус в цилиндрическом случае)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



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

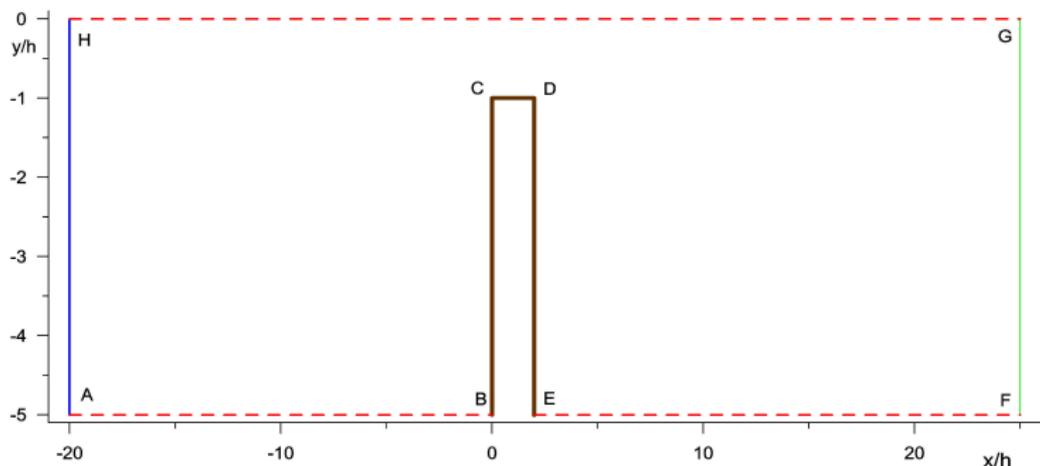
Картина течения в переходном режиме

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



Постановка задачи с учетом периодичности

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



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

$$\dot{M}(x) = \int m n u_x dy.$$

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

Параметры задачи

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

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

- Размерное давление слева для НС расчетов p_L :

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

В расчетах полагаем $h = 0.1$ мм \rightarrow для $\delta = 1$ получаем $p_L = 192$ Па.

- Температура поверхности мембраны T_s будет варьироваться в пределах

$$T_s = (0.5 \dots 1.5) T_L$$

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

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

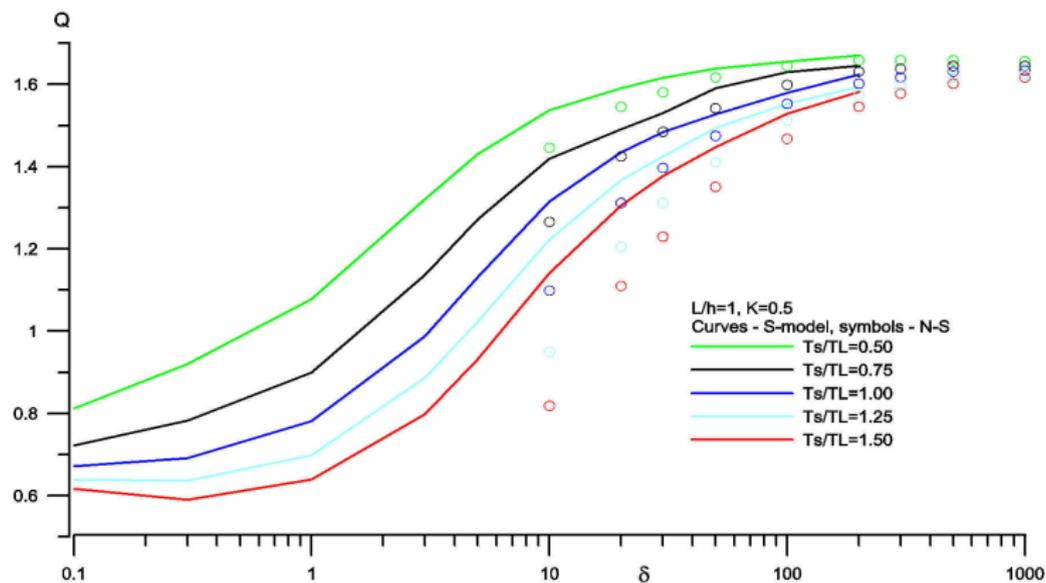
- Безразмерный массовый расход:

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

О граничных условиях притока и оттока

- Для решения кинетического уравнения на границах расчетной области для влетающих молекул задается локально-максвелловская функции с заданными плотностью, температурой и скоростью газа.
- Для случая $T_s = T_L = T_R$ на входе в канал задается давление p_L , скорость и температура газа экстраполируются изнутри области потока, плотность рассчитывается по p_L и экстраполированной температуре. Аналогичное условие используется на выходе.
- Однако для неизотермической постановки задачи при $T_s < T_L$ использование такого граничного условия приводило к нефизичным результатам.
- Поэтому в расчетах 2025 года на левой границе задаются давление и температура, экстраполируется только скорость. На правой границе используется условие 2024 года.
- Проведенные расчеты для $T_s = T_L$ показали совпадение с результатами 2024 года в пределах 1% по расходу массы.

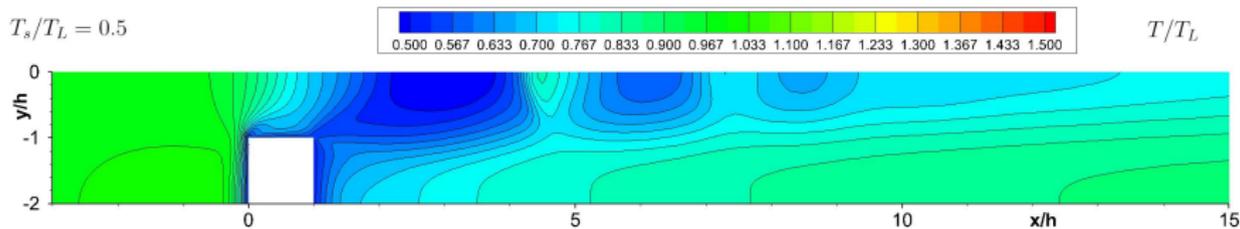
Кривые расхода для $L_h = 1$ и $K = 0.5$



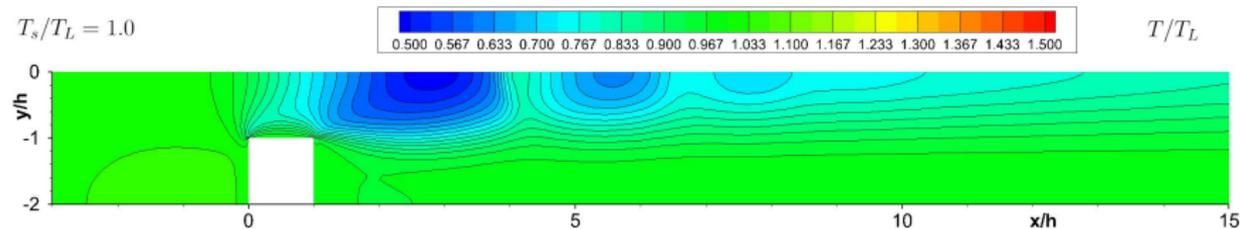
- При $\delta \approx 1 \dots 10$ температурный фактор значительно влияет на расход.
- Качественное объяснение - холодная стенка дает потоку большую площадь за счет поджатия газа вблизи стенки, что ведет к повышению расхода.
- С повышением δ (числа Re) эффект постепенно уменьшается
- При больших δ теплообмен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

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

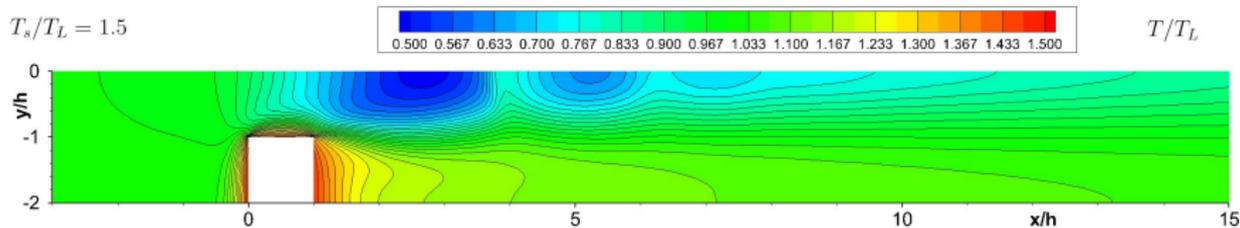
$T_s/T_L = 0.5$



$T_s/T_L = 1.0$

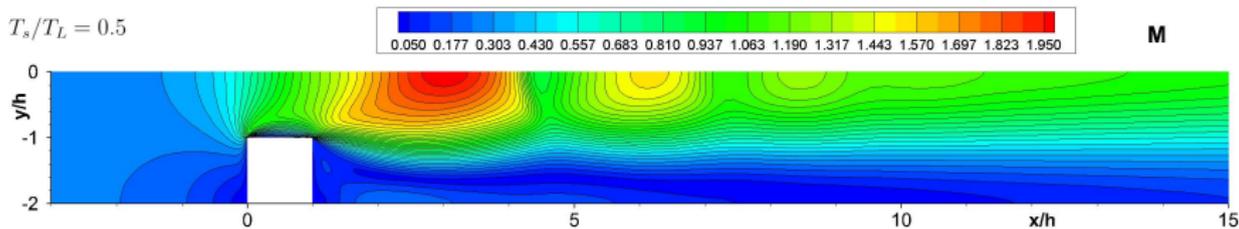


$T_s/T_L = 1.5$

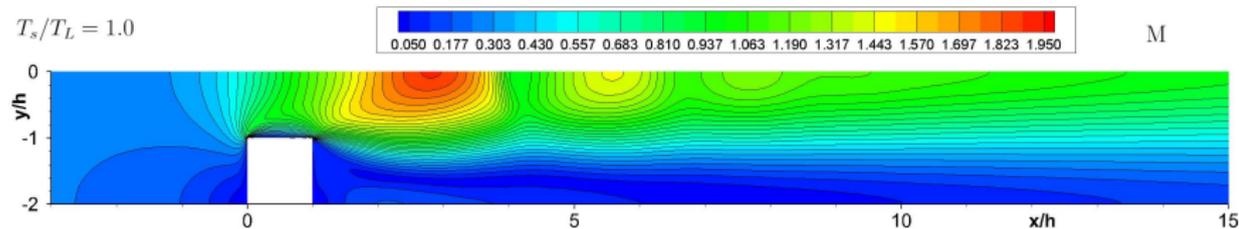


Линии уровня числа Маха для $L_h = 1$, $\delta = 100$, S-модель

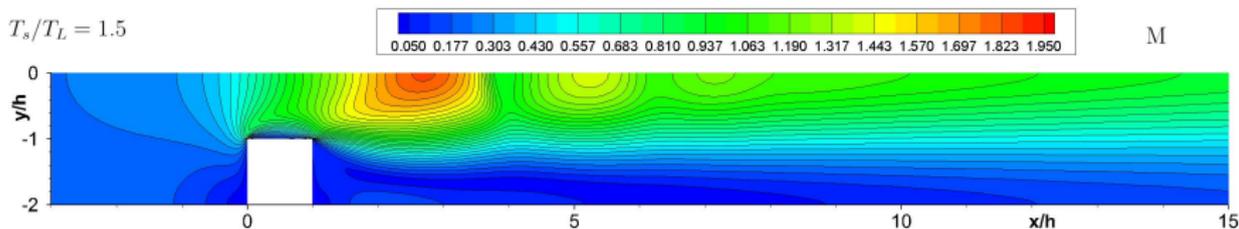
$T_s/T_L = 0.5$



$T_s/T_L = 1.0$

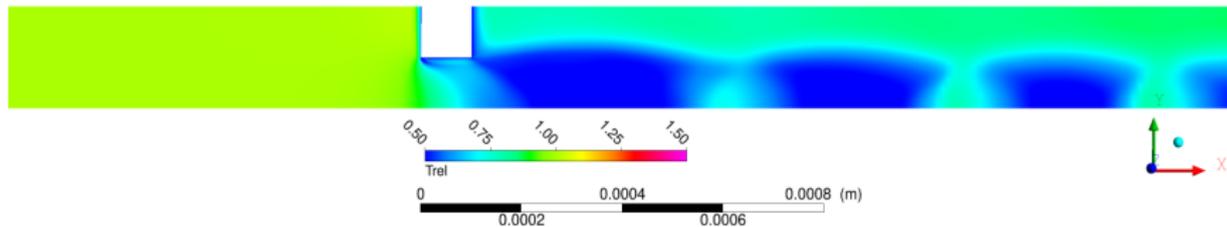


$T_s/T_L = 1.5$

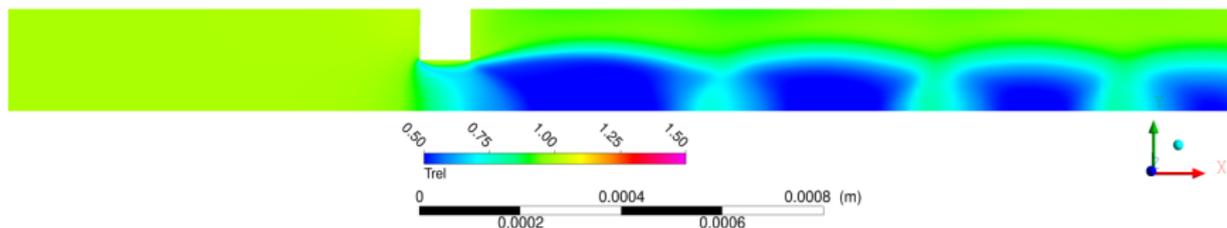


Поле температуры для $L_h = 1$, $\delta = 500$, уравнения Н.-С.

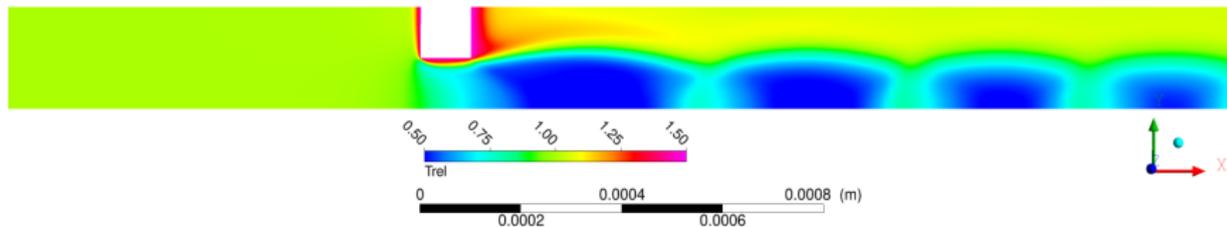
$$T_s/T_L = 0.5$$



$$T_s/T_L = 1.0$$

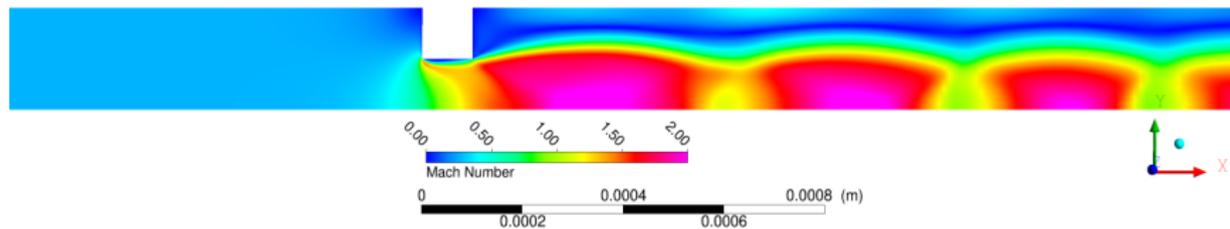


$$T_s/T_L = 1.5$$

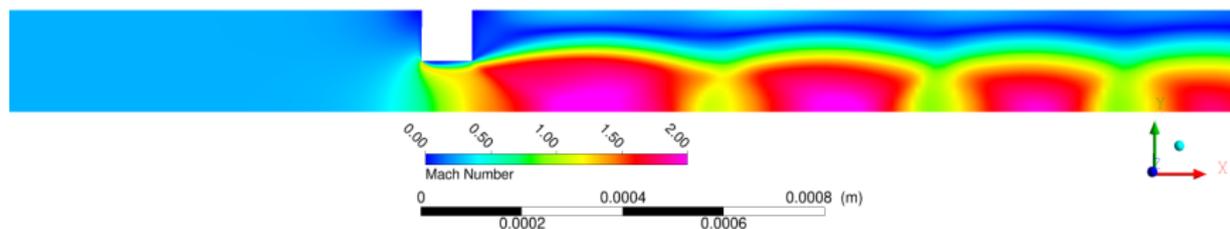


Линии уровня числа Маха для $L_h = 1$, $\delta = 500$

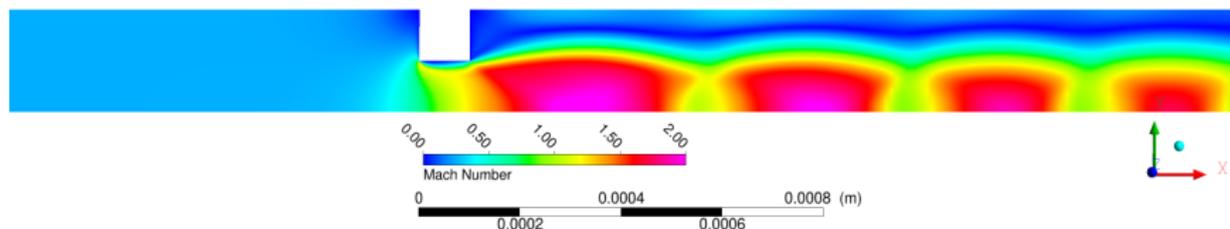
$T_s/T_L = 0.5$



$T_s/T_L = 1.0$



$T_s/T_L = 1.5$



- Для задачи импульсного испарения в вакуум получено хорошее количественное и качественное согласие результатов для всех расчетных величин (поле, времяпролетная функция распределения, средняя энергия молекул) для умеренного и сильного испарения (число монослоев $\theta \geq 10$) и безразмерного радиуса пятна $b = 10$ между решениями БГК и ПСМ.
- Для слабого испарения (число монослоев $\theta \leq 1$) имеется качественное согласие результатов.
- Для задачи течения газа через периодическую систему плоских каналов при наличии температурного фактора показано существенное влияние T_s на расход газа при $\delta \leq 100$.
- Зависимость расхода газа от T_s близка к линейной, что хорошо для приложений. Нагрев поверхности приводит к образованию минимума в кривой расхода. Для всех значений T_s в течении появляются дугообразные ударные волны за коротким каналом для режимов, близких к континууму
- Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования “Высокопроизводительные вычисления и большие данные” (ЦКП “Информатика”) ФИЦ ИУ РАН и частичной поддержке проекта [РНФ №25-11-00359](#)

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

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Неоднородная аппроксимация оператора переноса

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

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

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

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

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

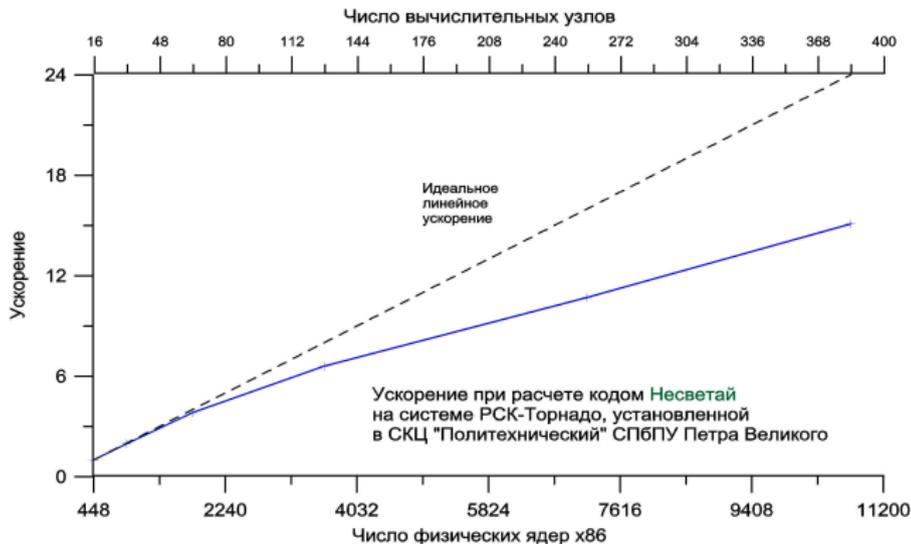
$$\mathbf{f}_{li}^{\text{поправка}} = \psi_{li}^{1d} (\mathbf{S}_L, \mathbf{S}_R) \Delta_l,$$

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

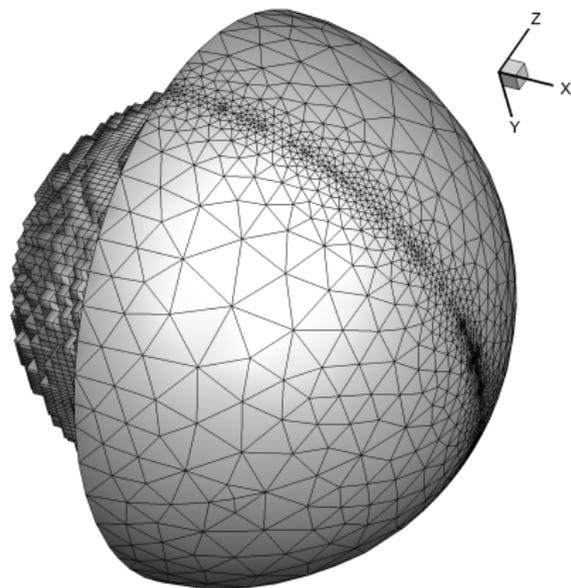
- В обоих случаях функция ψ – т.н. ограничитель наклонов

Тестирование масштабируемости кода **Несветай**

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



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



Модели течения (уравнения Навье-Стокса)

- В сплошном подходе решаются уравнения Навье-Стокса:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla(\mathbf{F} - \mathbf{F}^v) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F} = (F_1, F_2, F_3), \quad \mathbf{F}^v = (F_1^v, F_2^v, F_3^v),$$

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

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

Здесь δ_{ik} – символ Кронеккера.

- Замыкающие соотношениями:

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

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

- Для коэффициентов вязкости μ и теплопроводности λ :

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

