

01

Использование разрывного метода Галеркина для расчета распределения температуры в системе твердое тело—газ при малых числах Кнудсена

© С.И. Гращенков

Псковский государственный университет,
180760 Псков, Россия
e-mail: grasi@mail.ru

(Поступило в Редакцию 5 июня 2014 г. В окончательной редакции 23 октября 2014 г.)

Рассмотрено использование разрывного метода Галеркина для расчета распределения температуры в системе твердое тело—газ. Анализ проведен с учетом скачка температур на границе раздела газа и твердого тела и теплопроводностей веществ твердого тела и газа. Получен соответствующий вариант слабой формы уравнения Пуассона.

Введение

В связи с расширяющимся использованием микро-электромеханических систем [1] возрастает роль технологий расчета распределений температур в устройствах микронных размеров, находящихся в газовой среде или содержащих газовые включения малых объемов. Особую роль при этом играют различные численные методы расчета, так как структура таких устройств может быть достаточно сложной для применения аналитических методов. Применение таких расчетов актуально и для нахождения распределения температур в окрестности аэрозольных частиц в неоднородно нагретой газовой среде и при анализе течения газа в микроканалах. При этом достаточно часто вследствие малости характерного размера задачи распределение температуры можно считать квазистационарным и пренебрегать переносом тепла за счет конвективных процессов. При описании таких процессов [2,3] распределение температуры в рассматриваемой области можно описывать уравнением Пуассона:

$$-\nabla(\kappa_p \nabla T) = f, \quad (1)$$

где κ_p — теплопроводность вещества в рассматриваемой точке, f — плотность мощности тепловых источников. Если размеры исследуемой области и ее подобластей много больше длины свободного пробега молекул газа, то распределение температуры во всей области можно считать непрерывным. В этом случае нахождение распределения температур в рассматриваемой области, по крайней мере при заданных значениях температуры на ее границах, в настоящее время является достаточно простой и фактически инженерной задачей, которая может быть решена при помощи различных математических пакетов численного моделирования, таких как COMSOL Multiphysics, FreeFem++, GetFEM++, ADINA и множества других. Однако когда в рассматриваемой области размеры подобластей твердых тел, граничащих с газом, становятся сравнимыми с длиной свободного пробега молекул газа, задача осложняется

тем, что распределение температур уже нельзя считать непрерывным и необходимо учитывать, что на поверхности соприкосновения неравномерно нагретого газа и твердого тела имеется некоторая разность температур. При этом, строго говоря, континуальное описание становится неприменимым, и для нахождения распределения температуры в газе необходимо использовать такие подходы, как прямое моделирование Монте-Карло или использование кинетического уравнения Больцмана. Однако если число Кнудсена (отношение средней длины свободного пробега молекул газа к характерной длине системы) не превышает 0.1, можно использовать упрощенный подход, в котором в каждой подобласти используется континуальное описание, и при этом температуры газа и твердого тела на границе их раздела связаны уравнением [4]

$$T_g - T_s = K_T (\nabla T)_g \mathbf{n}_g, \quad (2)$$

где T_g — температура газа на поверхности раздела сред, T_s — температура твердого тела на этой поверхности, $(\nabla T)_g$ — градиент температуры газа на границе раздела сред, \mathbf{n}_g — вектор нормали к данной поверхности, проведенный от твердого тела в газ, K_T — коэффициент скачка температуры, значение которого вычисляется методами кинетической теории газов и по порядку величины равно средней длине свободного пробега молекул газа. В том случае, когда газ полностью ограничен поверхностью твердого тела и ищется распределение температуры в газе при заданном распределении T_s на поверхности твердого тела, нахождение соответствующего решения на представляет существенных сложностей [5]. Необходимость же учета скачков температуры на границах раздела газа и твердого тела, находящихся внутри исследуемой области, существенным образом усложняет проведение соответствующих численных расчетов, так фактически предполагает согласование решений для отдельных областей на границах их соприкосновения. Поэтому соответствующие исследования с использованием численных методов отсутствуют. Вме-

сте с тем имеется математическая близкая, хотя и не эквивалентная, задача, для которой такие исследования проводились. Речь идет о нахождении распределения температуры в среде при наличии в ней неидеального теплового контакта. Наличие такого контакта учитывается введением на контактной поверхности скачка температуры, пропорционального нормальной к данной поверхности составляющей плотности потока тепла [6]. Для этой задачи разработаны различные варианты использования разрывного метода Галеркина для расчета распределения температуры [7–10]. Ввиду математической схожести задач можно ожидать, что на основе этих подходов можно разработать и метод расчета распределения температур в областях с границами раздела газа и твердого тела с учетом скачков температуры на этих границах, что и является целью настоящей работы.

Постановка задачи и описание метода

Рассмотрим некоторую область пространства, граница которой нигде не является границей раздела газа и твердого тела, и поэтому на ней скачки температуры отсутствуют. Будем считать, что по крайней мере на части этой границы известно распределение температуры T_D . При этом на оставшейся части Γ_N границы, если она есть, в каждой ее точке известна плотность потока тепла через границу и, как следствие, проекция g градиента температуры на нормаль, проведенную из рассматриваемой области. Внутри области имеются границы Γ_S раздела сред, на которых необходимо учитывать наличие скачков температур. Будем полагать, что перепады температур внутри рассматриваемой области достаточно малы для того, чтобы теплопроводность κ_g газа можно было считать постоянной величиной. Кроме того, будем считать, что число Кнудсена достаточно мало для того, чтобы распределение температур T в рассматриваемой области можно было искать исходя из уравнения (1) с использованием условия (2) на границах разделов газа и твердого тела. Разобьем исследуемую область Ω на подобласти Ω_i (геометрические конечные элементы) в соответствии с выбранной расчетной сеткой, где i — номер области. При этом расчетная сетка должна быть выбрана так, чтобы границы разделов сред совпадали с некоторыми границами некоторых подобластей. Естественно, данное условие накладывает дополнительные ограничения на возможные структуры исследуемых областей при используемых алгоритмах построения сетки или на возможные алгоритмы при выбранной структуре расчетной области. Следуя традиционному подходу [11], умножим правую и левую части уравнения (1) на некоторую пробную гладкую в каждой из подобластей Ω_i функцию v , применим формулу Грина для каждой из подобластей и, полагая, что искомое распределение T также описывается внутри каждой подобласти гладкой

функцией, получаем [10]

$$\int_{\Omega} f v dV = \int_{\Omega} \kappa_p (\nabla T) (\nabla v) dV + \sum_i \int_{\partial \Omega_i} (-\kappa_p \nabla T) \Big|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i v \Big|_{\Omega_i} dS. \quad (3)$$

Здесь $\partial \Omega_i$ — граница подобласти Ω_i , V — объем, если рассматривается трехмерная геометрическая область, или площадь, если речь идет о двумерной задаче, S — площадь, если граница представляет собой двумерную поверхность, или длина, если речь идет о двумерной задаче, \mathbf{n}_i — внешний по отношению к подобласти Ω_i вектор нормали к границе этой подобласти. Обратим внимание на то, что каждая граница между подобластями при суммировании учитывается два раза. Теперь осталось согласовать входящие в последнее слагаемое уравнения (3) потоки тепла так, чтобы получить искомое решение с заданными условиями на границе области, с требуемыми скачками на границах раздела газа и твердого тела и непрерывное на остальных границах раздела подобластей. Следуя распространенному подходу [10,11], введем для этих целей операторы скачка и среднего на границе. Пусть u — некоторая гладкая в пределах каждой подобласти функция, u_{ext} — предельное значение u на границе текущего элемента области при стремлении к ней извне, т.е. предельное значение функции в соседней подобласти, а u_{int} — предельное значение u на границе текущего элемента области при стремлении к ней изнутри, т.е. предельное значение функции в текущей подобласти. Тогда оператор скачка $[]_i$ на границе $\partial \Omega_i$ подобласти Ω_i определяется выражением

$$[u]_i = u_{\text{ext}} - u_{\text{int}}.$$

Оператор среднего $\{ \}_i$ на границе $\partial \Omega_i$ определяется выражением

$$\{u\}_i = \frac{1}{2} (u_{\text{ext}} + u_{\text{int}}).$$

Как следует из закона сохранения энергии, поток тепла через любую границу двух соседних подобластей непрерывен, поэтому на любой границе подобласти Ω_i с другой подобластью

$$[\mathbf{n}_i \kappa_p \nabla T]_i = 0. \quad (4)$$

Обратим внимание на то, что как ∇T , так и κ_p могут испытывать скачок на рассматриваемой границе, в то время как вектор \mathbf{n}_i всегда внешний к подобласти Ω_i и скачка не испытывает. Умножая правую и левую части уравнения (2) на теплопроводность κ_g газа и используя (4), получаем следующее условие на границе раздела газа и твердого тела:

$$(\kappa_p (\nabla T)) \Big|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i = [T]_i \frac{\kappa_g}{K_T}. \quad (5)$$

Обратим внимание на то, что в отличие от формулы (2) здесь градиент берется в подобласти Ω_i , и это может быть как подобласть, содержащая газ, так и подобласть, содержащая твердое тело. При выводе формулы (5) учитывалось, что в подобласти, содержащей газ, теплопроводность κ_p вещества подобласти и теплопроводность κ_g газа являются одной и той же величиной и, следовательно, равны. Отметим, что условие (5) с математической точки зрения полностью эквивалентно уравнению для расчета разности температур на неидеальном тепловом контакте [9,10], в котором роль термического сопротивления контакта играет величина K_T/κ_g . Следуя подходу, изложенному в [10], из (3)–(5) с учетом тождества $ab - cd = (a + c)(b - d)/2 + (a - c)(b + d)/2$ получаем следующую слабую форму уравнения Пуассона с согласованными потоками на границах раздела твердого тела и газа:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{fv}{\kappa_g} dV &= \int_{\Omega} \kappa(\nabla T)(\nabla v) dV \\ &+ \sum_i \int_{\partial\Omega_i/\Gamma_S} (-\kappa\nabla T)|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i v|_{\Omega_i} dS \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \int_{(\partial\Omega_i \cap \Gamma_S)} [T]_i [v]_i \frac{1}{K_T} dS, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\kappa = \kappa_p/\kappa_g$.

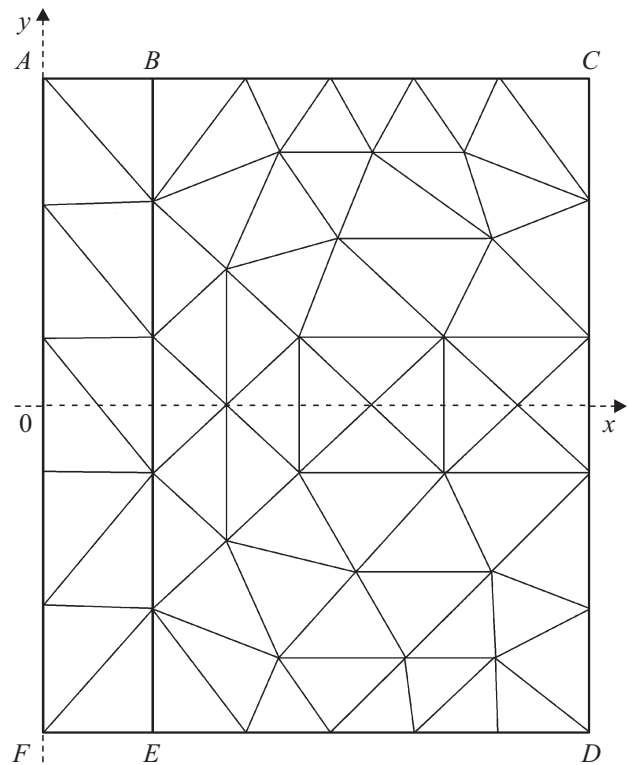
Что касается согласования потоков, позволяющего обеспечить непрерывность распределения температуры на остальных границах разделов подобластей и выполнение заданных условий на границах Γ_D и Γ_N , то для решения данной задачи существует целый ряд хорошо проработанных методов [11,12] и в принципе мы можем воспользоваться любым из них. Для того чтобы не усложнять изложение несущественными для цели настоящей работы деталями, воспользуемся методом Бауманна–Одена [13] как наиболее простым из них. Следуя этому подходу [11–13], из (6) получаем следующую итоговую слабую форму:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{fv}{\kappa_g} dV &= \int_{\Omega} \kappa(\nabla T)(\nabla v) dV \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \int_{\partial\Omega_i/(\Gamma_D \cup \Gamma_S \cup \Gamma_N)} ([v]_i \{\kappa \mathbf{n}_i \nabla T\}_i - [T]_i \{\kappa \mathbf{n}_i \nabla v\}_i) dS \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \int_{(\partial\Omega_i \cap \Gamma_S)} [T]_i [v]_i \frac{1}{K_T} dS \\ &+ \sum_i \int_{(\partial\Omega_i \cap \Gamma_D)} (T\kappa\nabla v - \kappa v\nabla T - T_D\kappa\nabla v)|_{\Omega_i} \mathbf{n}_i dS \\ &- \sum_i \int_{\partial\Omega_i \cap \Gamma_N} \kappa g v|_{\Omega_i} dS. \end{aligned} \quad (7)$$

Теперь осталось в соответствии со спецификой задачи выбрать базис из разрывных финитных функций, каждая из которых отлична от нуля только в пределах одного конечного геометрического элемента, представить аппроксимируемое решение как разложение по этим базисным функциям с неизвестными коэффициентами, подставить это разложение в выражение (7), поочередно используя в этом выражении базисные функции в качестве пробных, получить систему линейных уравнений для неизвестных коэффициентов и вычислить эти коэффициенты. Более детальные описания различных вариантов нахождения численного решения поставленной задачи по ее известной слабой форме можно найти в соответствующей литературе [14–17].

Численные расчеты

Для проверки применимости полученного выражения для решения задач, удовлетворяющих описанным выше условиям, были проведены тестовые расчеты для ряда задач, допускающих аналитическое решение, и проведены сравнения результатов, полученных при помощи численного решения на основе уравнения (7), с результатами расчетов на основе соответствующего аналитического решения. Во всех случаях расчеты проводились для области на плоскости, изображенной на рисунке. На этом же рисунке изображена и используемая расчетная сетка. Во всех расчетах полагалось, что область $ABEF$ занята твердым телом, а область



Структура расчетной области.

$BCDE$ занята газом. Полагалось, что $|AF| = 60K_T$, $|AB| = 10K_T$, $|BC| = 40K_T$. Все расчеты на основе уравнения (7) проводились при помощи математического пакета FreeFem++. Расчетная сетка строилась при помощи поддерживаемой в этом пакете триангуляции Делоне [18]. Использовались базисные функции в виде полиномов второй степени от координат. Набор таких функций исходя из заданной расчетной сетки на плоскости пакет FreeFem++ позволяет сформировать автоматически. Для решения получаемой в процессе расчета системы уравнений был выбран алгоритм UMFPACK [19].

В первом случае полагалось, что на стороне AF задана постоянная температура T_1 , а на стороне CD — постоянная температура T_2 . На сторонах AC и DF полагались равными нулю нормальные к этим сторонам составляющие градиента температуры. В этом случае температура меняется только вдоль оси Ox , направленной, как показано на рисунке. Общее решение при этом можно представить в виде

$$T = T_1 + (T_2 - T_1)g_1(x, \kappa). \quad (8)$$

Здесь $g_1(x, \kappa)$ — функция, которая является линейной по x в областях $ABEF$ и $BCDE$ и терпит разрыв на границе BE их раздела. Конкретный вид этой функции здесь не приводится, так как он элементарным образом находится из условий (4), (5) с учетом того, что на стороне AF значение $g_1(x, \kappa)$ равно нулю, а на стороне CD — единице. Отметим, что приведенное аналитическое решение является также решением задачи о распределении температуры вблизи бесконечной плоской границы раздела газа и твердого тела при заданных значениях температур на некоторых расстояниях от этой границы. Результаты расчетов при различных значениях κ твердого тела в пределах от 1 до 10^4 показали, что разность между значениями $g_1(x, \kappa)$ в различных точках, полученных исходя из уравнений (7) и (8), по порядку величины не превышает 10^{-15} , т.е. наблюдается прекрасное согласие между аналитическим решением и решением, полученным на основе разрывного метода Галеркина.

Второй случай отличался от предыдущего только тем, что на стороне CD задавалась не температура, а неравное нулю значение нормальной к ней составляющей градиента температур. Результаты расчетов также показали прекрасное согласие между решением на основе разрывного метода Галеркина и соответствующим аналитическим решением.

В третьем случае полагалось, что в области $ABEF$ задано некоторое одинаковое во всех точках значение f_a плотности мощности тепловых источников. На стороне CD задана постоянная температура T_2 . На сторонах AC , AF и DF полагались равными нулю нормальные к этим сторонам составляющие градиента температуры. Общее решение в данном случае можно представить

в виде

$$T = T_2 + \frac{f_a}{\kappa_p} |AB|^2 g_2(x, \kappa).$$

Здесь $g_2(x, \kappa)$ — функция, которая является квадратичной по x в области $ABEF$ и линейной в области $BCDE$, а на границе BE их раздела терпит разрыв. Вывод конкретного вида этой функции также элементарен и здесь не приводится. Отметим, что в рассматриваемой области при любом значении κ значение $g_2(x, \kappa)$ в газе на границе раздела твердого тела и газа равно 4, а скачок этой функции равен -0.1 , в чем нетрудно убедиться, используя теорему Остроградского. Отметим, что указанное аналитическое решение является также решением задачи о распределении температуры внутри и вне бесконечной плоской пластины твердого тела в газе, нагреваемой однородно распределенными источниками тепла, при заданных значениях температур на некотором расстоянии по обе стороны от пластины. Результаты численных расчетов показали, что в различных точках рассматриваемой области разность между значениями $g_2(x, \kappa)$, найденными исходя из аналитического решения и решения на основе разрывного метода Галеркина, колеблется по порядку величины от 10^{-15} для $\kappa = 1$ до 10^{-10} для $\kappa = 10^4$. Таким образом, и в данном случае наблюдается прекрасное согласие между обоими решениями.

Заключение

Изложен подход, позволяющий с помощью разрывного метода Галеркина находить при малых числах Кнудсена распределения температур в области, содержащей газ и твердые тела, с учетом скачков температуры на границах раздела газа с твердыми телами. Предложен возможный вариант соответствующей слабой формы рассматриваемой задачи. Проведены тестовые расчеты с использованием этой формы для некоторых случаев, допускающих аналитическое решение. Результаты расчетов свидетельствуют о применимости предложенного подхода для численного расчета поля температур в системах твердые тела—газ при малых числах Кнудсена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Государственного задания, проект 074.01.10.0210059.611.

Список литературы

- [1] *MEMS: Introduction and Fundamentals* / Ed. by M. Gad-el-Hak. FL: CRC Press, 2006. 488 p.
- [2] Малай Н.В., Плесканев А.А., Щукин Е.Р. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 3. С. 25–29.
- [3] Яламов Ю.И., Хасанов А.С. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 4. С. 1–6.
- [4] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. С. 72.

- [5] Chaudhuri A., Guha C., Dutta T.K. // Chem. Eng. Technol. 2007. Vol. 30. N 4. P. 425–430.
- [6] Hahn D.W., Özisik M.N. Heat Conduction. John Wiley & Sons, 2012. 744 p.
- [7] Zheng X.P., Liu D.H., Liu Y.H. // Sci. China. Ser. G. 2011. Vol. 54. N 4. P. 666–674.
- [8] Kanapady R., Jain A., Tamma K.K., Siddharth S. // Proc. of the 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 2005. P. 8447–8455.
- [9] Liu D.H., Zheng X.P., Liu Y.H. // Comp. Model. Eng. 2009. Vol. 39. N 3. P. 263–299.
- [10] Carnes B.R., Capps K.D. Thermal Contact Algorithms in SIERRA Mechanics. Albuquerque: Sandia National Laboratories, 2008. 65 p.
- [11] Girault V., Wheeler M.F. // Partial Differential Equations. Modelling and Numerical Simulation. Series: Computational Methods in Applied Sciences. 2008. Vol. 16. P. 3–26.
- [12] Rivière B. Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation. FL: SIAM, 2008. 190 p.
- [13] Baumann C.E., Oden J.T. // Comput. Method. Appl. M. 1999. Vol. 175. N 3. P. 311–341.
- [14] Hesthaven J.S., Warburton T. Nodal discontinuous Galerkin methods: algorithms, analysis, and applications. N.Y.: Springer, 2007. 501 p.
- [15] Li B.Q. Discontinuous finite elements in fluid dynamics and heat transfer. London: Springer, 2006. 595 p.
- [16] Di Pietro D.A., Ern A. Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods. N.Y.: Springer, 2011. 401 p.
- [17] Chen Z. Finite element methods and their applications. Berlin: Springer, 2005. 410 p.
- [18] Делоне Б.Н. // Изв. АН СССР. ОМЕЖ. 1934. № 4. С. 793–800.
- [19] Davis T.A. // ACM T. Math. Software. 2004. Vol. 30. N 2. P. 196–199.