

Т. Г. Елизарова

КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ
УРАВНЕНИЯ И МЕТОДЫ РАСЧЕТА
ВЯЗКИХ ТЕЧЕНИЙ

Москва
Научный Мир
2007

УДК 519.633:533.5

Т. Г. Елизарова. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. Лекции по математическим моделям и численным методам в динамике газа и жидкости. — М.: Научный Мир, 2007. — 350 с.

Монография посвящена современным математическим моделям и основным на них численным методам решения задач динамики газа и жидкости. Приведены две взаимосвязанные математические модели, обобщающие систему уравнений Навье–Стокса и отличающиеся от нее дополнительными диссипативными слагаемыми с малым параметром в качестве коэффициента. Новые модели получили название квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений. На базе этих уравнений построены эффективные конечно-разностные алгоритмы расчета вязких нестационарных течений и приведены примеры численных расчетов. Универсальность, эффективность и точность построенных алгоритмов обеспечивается выполнением для них интегральных законов сохранения и теоремы о балансе энтропии.

Книга представляет собой курс лекций и предназначена для научных работников и инженеров, занимающимся построением численных алгоритмов и проведением практических расчетов течений газа и жидкости, а также студентам и аспирантам соответствующих вузов.

©Елизарова Т.Г., 2007

©Научный Мир, 2007

Оглавление

Введение	6
1 Построение уравнений газовой динамики	10
1.1 Процедура осреднения	10
1.2 Интегральные законы сохранения	18
1.3 Законы сохранения в дифференциальном виде	21
1.4 Уравнения Эйлера и Навье–Стокса	22
1.5 Квазигазодинамические уравнения	26
2 Элементы кинетической теории газов	38
2.1 Уравнение Больцмана	38
2.2 Равновесная функция распределения и система Эйлера	40
2.3 Уравнения Навье–Стокса	41
2.4 Уравнение Бхатнагара–Гросса–Крука	43
2.5 Средние характеристики движения частиц	44
2.6 Коэффициенты переноса в равновесном газе	46
2.7 Численное моделирование течений разреженного газа	49
2.8 Кинетически-согласованные разностные схемы	53
3 Квазигазодинамические уравнения	57
3.1 Регуляризованное кинетическое уравнение	58
3.2 Кинетический вывод КГД уравнений	61
3.3 КГД уравнения в форме законов сохранения	63
3.4 Коэффициенты диссипации	71
3.5 Система Навье–Стокса как асимптотика КГД системы	75
3.6 Модель для течений с внешними источниками	79
3.7 Уравнение баланса энтропии	84
4 КГД уравнения и системы координат	89
4.1 КГД уравнения в произвольной системе координат	89
4.2 Декартова система координат	93
4.3 Цилиндрическая система координат	99

5	Алгоритмы решения задач газовой динамики	103
5.1	Система уравнений для плоских двумерных течений .	103
5.2	Система уравнений в цилиндрической геометрии . . .	106
5.3	Граничные условия	108
5.4	Безразмерный вид уравнений	110
5.5	Разностная аппроксимация	111
5.6	Введение искусственной диссипации	116
5.7	Задача о распаде сильного разрыва	118
5.8	Задача о течении в окрестности цилиндра	126
5.9	Задача о течении в канале с уступом	133
5.10	Численный алгоритм расчета дозвуковых течений . .	137
5.11	Устойчивость и точность КГД алгоритмов	140
6	Расчеты течений на неструктурированных сетках	144
6.1	Выбор сетки и построение контрольного объема . . .	144
6.2	Аппроксимация системы уравнений	147
6.3	Аппроксимация частных производных	149
6.4	Разностные схемы для двумерных течений	155
6.5	Аппроксимация граничных условий	162
6.6	Расчет течения в окрестности цилиндра	164
7	Течения вязкой несжимаемой жидкости	170
7.1	Квазигидродинамическая система уравнений	170
7.2	Вычислительный алгоритм	175
7.3	Отрывное течение за обратным уступом	179
7.4	Тепловая конвекция в квадратной области	186
7.5	Тепловая конвекция при низких числах Прандтля . .	190
7.6	Конвекция Марангони в невесомости	197
7.7	Течение в кубической камере с подвижной крышкой	201
8	КГД уравнения для течений неравновесного газа	208
8.1	Молекулярная модель и функции распределения . . .	208
8.2	Системы координат и некоторые интегралы	211
8.3	Построение моментных уравнений	213
8.4	Вычисление обменных членов	219
8.5	КГДР уравнения	221

Оглавление	5
8.6 Примеры численных расчетов	225
9 КГД уравнения для бинарной смеси газов	232
9.1 Исходная кинетическая модель	233
9.2 Построение моментных уравнений	235
9.3 Вычисление обменных членов	239
9.4 Определение частот столкновений	241
9.5 Квазигазодинамические уравнения для смеси газов .	242
9.6 Одножидкостные приближения	244
9.7 КГДМ система для одномерного течения	249
9.8 Структура ударной волны в смеси гелия и ксенона . .	252
9.9 Задача диффузии аргона и гелия	263
A Пример построения КГД уравнений	267
B Течение вязкого сжимаемого газа в микроканалах	273
C Структура неподвижной ударной волны	299
D Турбулентное течение за обратным уступом	316
Список литературы	349

Введение

Предлагаемая читателю книга посвящена изложению нового эффективного подхода к численному моделированию широкого круга течений вязкого газа и жидкости. Этот подход основан на использовании двух математических моделей, обобщающих систему уравнений Навье–Стокса и отличающиеся от нее дополнительными диссипативными слагаемыми с малым параметром в качестве коэффициента. Новые модели получили название квазигазодинамических и квазигидродинамических (КГД) уравнений. Приведен способ построения и теоретическое обоснование КГД уравнений. На базе этих уравнений построены конечно-разностные алгоритмы расчета вязких нестационарных течений газа и жидкости. Универсальность, эффективность и точность построенных алгоритмов обеспечивается заложенными в них математическими свойствами и выполнением для них интегральных законов сохранения и теоремы о балансе энтропии. Простота и удобство численной реализации позволяют строить численные алгоритмы для расчета сложных течений и использовать параллельные технологии программирования для ускорения счета. Последнее особенно важно при расчетах нестационарных течений.

Описание течений газа и жидкости на основе уравнений Навье–Стокса имеет богатую историю. В настоящее время созданы и успешно применяются многочисленные коммерческие пакеты программ, реализующие численные алгоритмы решения этих уравнений. Однако используемые в них подходы нельзя считать совершенными. В разное время предпринимались попытки расширить возможности описания течений, заложенные в системе Навье–Стокса. Однако предлагаемые модели оказались существенно сложнее классической системы и не нашли применения в практических расчетах.

Система квазигазодинамических уравнений, расширяющая возможности модели Навье–Стокса, впервые появилась в ходе исследований, выполненных в восьмидесятых годах небольшой группой

пой сотрудников Института прикладной математики АН СССР им. М.В. Келдыша под руководством профессора, а ныне члена-корреспондента Российской Академии Наук, Б.Н. Четверушкина.

В самом начале этих исследований в 1982 г. автору посчастливилось включиться в эту работу, и с его непосредственным участием был выписан первый вариант квазигазодинамических уравнений. Эти уравнения отличались от классических уравнений динамики газа дополнительными слагаемыми, имеющими вид вторых пространственных производных. Новые модели сразу позволили построить эффективные численные алгоритмы решения уравнений Эйлера, а впоследствии и уравнений Навье–Стокса.

Позднее в работах Ю.В. Шеретова квазигазодинамические уравнения были представлены в виде законов сохранения, детально исследованы и теоретически обоснованы. Кроме того, им была построена родственная этим уравнениям квазигидродинамическая система. Принципиальным и существенным отличием КГД подхода от теории Навье–Стокса явилось использование процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных газодинамических величин — плотности, скорости и температуры. Дополнительное сглаживание по времени явилось причиной возникновения в уравнениях дополнительных диссипативных слагаемых, которые формально отличают КГД системы от системы Навье–Стокса.

В стационарном случае обе КГД системы отличаются от уравнений Навье–Стокса и друг от друга дивергентными членами, имеющими формальные асимптотические порядки малости $O(Kn^2)$ при $Kn \rightarrow 0$, где Kn — число Кнудсена. Приближением пограничного слоя для новых уравнений, также как и для уравнений Навье–Стокса, служат уравнения Прандтля. Влияние добавочных членов незначительно для стационарных и квазистационарных газодинамических течений при малых числах Кнудсена. Однако для сильно нестационарных течений, а также при числах Kn , близких к единице, их вклад становится существенным. Именно в этом классе задач следует искать преимущества новых моделей. При численном моделировании дополнительные слагаемые проявляют себя как эффективные регуляризаторы.

Каждой из двух КГД систем соответствует свой способ реше-

ния проблемы замыкания. Квазигазодинамические уравнения следует использовать при моделировании течений идеального политропного газа, а квазигидродинамические — при исследовании движений газов и жидкостей с более общим уравнением состояния.

Монография состоит из девяти глав и четырех приложений.

В первой главе сформулированы общие идеи, позволяющие наряду с классической системой уравнений газовой динамики — системой уравнений Навье–Стокса, построить две новые математические модели для описания вязких течений — квазигазодинамическую и квазигидродинамическую системы уравнений.

Во второй главе приведены элементы кинетической теории, необходимые для дальнейшего изложения, и описан способ построения кинетически-согласованных разностных схем, которые послужили основой для первых вариантов КГД уравнений.

В третьей главе, которая имеет ключевой характер, приведены два возможных способа построения квазигазодинамических уравнений. Первый основан на использовании известной кинетической модели движения частиц, второй основан на интегральных законах сохранения, выписанных для малого, но конечного объема. Здесь же изложен способ записи полученных уравнений в виде законов сохранения, выписано уравнение баланса энтропии и прослежена связь КГД системы с уравнениями Навье–Стокса. Одним из результатов этой главы является получение приближенной формулы для вычисления коэффициента объемной вязкости.

В четвертой главе КГД уравнения выписаны для произвольной ортогональной системы координат.

Пятая, самая объемная глава, посвящена построению эффективных конечно-разностных алгоритмов решения КГД уравнений для численного моделирования газодинамических течений с использованием ортогональных сеток. Здесь же приведены примеры расчетов тестовых задач.

В шестой главе предложенные алгоритмы обобщаются на случай неструктурированных двумерных пространственных сеток. Седьмая глава посвящена исключительно второй КГД системе — системе квазигидродинамических уравнений. На основе этих уравнений построены новые эффективные алгоритмы расчета нестационарных

течений вязкой несжимаемой жидкости и приведены примеры моделирования двумерных и трехмерных течений.

В восьмой и девятой главах построены обобщения квазигазодинамических уравнений для моделирования течений газа с неравновесностью между поступательной и вращательной степенями свободы, и уравнения для описания бинарной смеси не реагирующих между собой газов.

В приложениях приведен детальный вывод квазигазодинамической системы уравнений для плоского одномерного течения, а также примеры расчета течения разреженного газа в тонком капилляре, течения в одномерной ударной волне и численное моделирование ламинарно-турбулентного перехода в потоке газа за обратным уступом.

Данная книга основана на курсе лекций, прочитанных автором для аспирантов кафедры математики Физического факультета МГУ в 2004 – 2008 гг. и изданных в 2005г. в качестве учебного пособия. Всем коллегам, в разное время принимавшим участие в развитии КГД теории, я искренне благодарна за сотрудничество. Их вклад отражен в публикациях, послуживших основой этой монографии.

Я искренне благодарна Борису Николаевичу Четверушкину, идеи которого послужили основой КГД подхода. Я глубоко благодарна Юрию Владимировичу Шеретову за помощь в написании первой главы и ряда разделов в главах 2, 3, 5 и 7. Я признательна Александру Андреевичу Самарскому и Алексею Георгиевичу Свешникову за постоянную поддержку этого научного направления.

Глава 1

Построение уравнений газовой динамики на основе законов сохранения

В этой главе излагаются физические принципы, положенные в основу вывода уравнений классической газовой динамики и новых КГД уравнений — квазигазодинамической и квазигидродинамической систем. КГД уравнения, также как и уравнения Навье–Стокса, являются следствием интегральных законов сохранения, имеют диссипативный характер и могут быть получены из общей системы уравнений сохранения. Принципиальным и существенным отличием КГД уравнений от уравнений Навье–Стокса представляется использование процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных гидродинамических величин — плотности, скорости и температуры. Использование пространственных средних приводит к системе уравнений Навье–Стокса. Для пространственно-временных средних предложено два варианта замыкания общей системы уравнений, которые приводят к двум КГД системам. Выражения для векторов плотности потока массы, потока тепла и тензора вязких напряжений для КГД систем в этой главе приведены без вывода. Два способа построения этих величин для первой КГД системы представлены в главе 3. Обсуждается физический смысл вектора плотности потока массы. Изложение этой главы в основном основано на материалах [53, 111, 114, 120].

1.1 Процедура осреднения

Рассмотрим одноатомный газ, состоящий из достаточно большого числа N атомов-шариков радиуса r_0 и массы m_0 . В евклидовом пространстве R^3 выберем декартову систему координат (x_1, x_2, x_3)

и время t .

Движение каждого атома может быть описано уравнениями механики Ньютона. Однако такой подход к моделированию задач газовой динамики оказывается очень далеким от практики, поскольку N очень велико. Кроме того, возникают проблемы с определением начальных условий задачи и с последующим осреднением получающихся величин, которое необходимо для вычисления измеряемых величин — плотности, скорости и температуры среды.

В классической гидродинамике используется другой подход, основанный на переходе от большого числа отдельных частиц к сплошной среде с помощью процедур осреднения. Эти процедуры могут быть выбраны по-разному.

1.1.1 Пространственные средние

В теории Навье–Стокса используются так называемые мгновенные пространственные средние, которые определяются следующим образом.

Пусть ΔV — шар радиуса R_V с центром в точке \vec{x} (рис. 1.1). Пусть атом находится в шаре, если его центр принадлежит этому шару. Пусть $N_{\Delta V}(t)$ — число молекул в объеме ΔV в момент времени t . Определим плотность, средний импульс и среднюю энергию единицы объема как

$$\rho(\vec{x}, t) = \frac{m_0}{\Delta V} N_{\Delta V}(t), \quad (1.1)$$

$$\vec{I}(\vec{x}, t) = \rho \vec{u} = \frac{m_0}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_{\Delta V}(t)} \vec{\xi}_i(t), \quad (1.2)$$

$$E(\vec{x}, t) = \rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) = \frac{m_0}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_{\Delta V}(t)} \frac{\xi_i^2(t)}{2}, \quad (1.3)$$

где $\vec{\xi}_i(t)$ — скорость i -той частицы в момент времени t , m_0 — ее масса. В приведенных выражениях $\varepsilon = \varepsilon(\vec{x}, t)$ — удельная внутренняя энергия. Введем температуру T , которая определяется из выражения

$$\varepsilon = c_v T, \quad (1.4)$$

где $c_v = c_p - \mathcal{R}$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме, c_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении, $\mathcal{R} = k_B/m_0 = \mathcal{R}_*/\mathcal{M}$ — газовая постоянная, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К — постоянная Больцмана, \mathcal{R}_* — универсальная газовая постоянная, \mathcal{M} — молекулярная масса газа, $\gamma = c_p/c_v$ — показатель адиабаты.

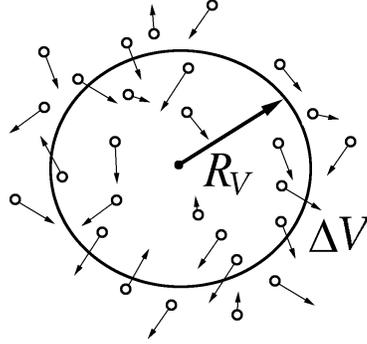


Рис. 1.1. К определению средних величин

При изменении объема осреднения ΔV значения средних могут изменяться. Примем гипотезу о наличии двух масштабов R_{max} и R_{min} таких, что $R_{max} \gg R_{min}$, и при фиксированных \vec{x} и t при любом $R_{max} > R_V > R_{min}$ значения указанных средних практически постоянны и не зависят от ΔV . Тогда соответствующие средние назовем газодинамическими величинами — плотностью, импульсом и полной энергией. Предположим также, что все эти функции являются достаточно гладкими, то есть непрерывно дифференцируемыми столько раз, сколько это потребуется.

1.1.2 Пространственно-временные средние

Определим пространственно-временные средние, которые отличаются от определений (1.1)–(1.3) дополнительным сглаживанием по времени. Для этого введем дополнительно некоторый интервал времени Δt и определим плотность, импульс и энергию единицы объема как

$$\rho(\vec{x}, t) = \frac{m_0}{\Delta V} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} N_{\Delta V}(t') dt', \quad (1.5)$$

$$\vec{I}(\vec{x}, t) = \rho \vec{u} = \frac{m_0}{\Delta V} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \left(\sum_{i=1}^{N_{\Delta V}(t')} \vec{\xi}_i(t') \right) dt', \quad (1.6)$$

$$E(\vec{x}, t) = \rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) = \frac{m_0}{\Delta V} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \left(\sum_{i=1}^{N_{\Delta V}(t')} \frac{\xi_i^2(t')}{2} \right) dt'. \quad (1.7)$$

Предположим далее, что помимо двух пространственных масштабов R_{max} и R_{min} , существуют также два временных масштаба $\Delta t_{max} \gg \Delta t_{min}$, таких, что при любом $\Delta t_{max} > \Delta t > \Delta t_{min}$ значения указанных средних практически постоянны и не зависят от ΔV и Δt . Характерные значения указанных масштабов связаны между собой как $\Delta t_{max} \sim R_{max}/c$, $\Delta t_{min} \sim R_{min}/c$, где c – скорость звука, определяющая скорость распространения возмущений в газе. Тогда соответствующие средние можно рассматривать как газодинамические величины – плотность, импульс и полную энергию. Предположим также, что эти функции достаточно гладкие.

Иерархия характерных пространственных и временных масштабов для газодинамических течений детально обсуждается, в частности, в [63, 64] и [122].

Введение дополнительного сглаживания по времени при определении газодинамических величин представляется естественным по многим причинам. В экспериментах измерение всех газодинамических величин осуществляется за конечное время, что автоматически приводит к сглаживанию по некоторому временному интервалу. Число частиц в малом объеме ΔV с прозрачными границами естественным образом меняется на временах порядка R_V/c за счет частиц, хаотическим образом пересекающих его границу. При достаточно большом числе частиц в объеме осреднения ΔV пространственные и пространственно-временные средние могут быть очень близки, что соответствует эргодической гипотезе об идентичности мгновенных пространственных и пространственно-временных средних.

В дальнейшем мы не будем отождествлять мгновенные пространственные и пространственно-временные средние, сохраняя

при этом привычные обозначения для всех газодинамических величин. При необходимости будем обозначать мгновенные пространственные средние индексом s , а пространственно-временные средние – индексом st .

1.1.3 Преобразование Галилея

Рассмотрим две инерциальные системы координат. Пусть K^* – система координат, движущаяся относительно исходной системы координат K с постоянной скоростью \vec{U} (рис. 1.2). Тогда координаты материальной точки \vec{x}^* и время t^* в K^* связаны с координатами x и t в системе K соотношениями

$$\vec{x}^* = \vec{x} - \vec{U}(t - t_0), \quad (1.8)$$

$$t^* = t. \quad (1.9)$$

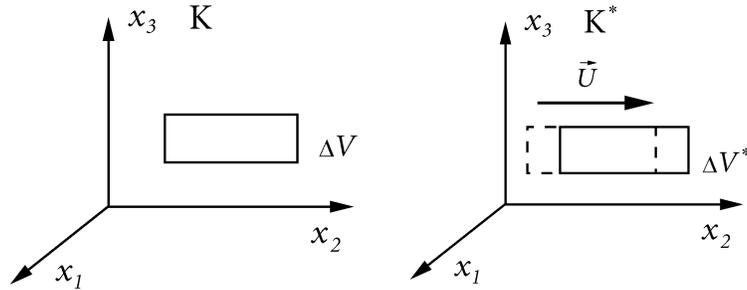


Рис. 1.2. Пространственно-временные средние и преобразование Галилея

В момент t_0 обе системы совпадают. Формулы (1.8)–(1.9) были названы Ф. Франком "преобразованиями Галилея" [80]. Преобразование Галилея сначала было выписано для материальной точки в классической механике Ньютона. При этом существенно использовалась гипотеза (1.9) об абсолютности времени. Согласно принципу Галилея инерциальные системы координат, движущиеся друг относительно друга с постоянными скоростями, равноправны с точки

зрения протекания в них механических явлений, то есть уравнения движения в этих системах координат инвариантны.

Однако для того, чтобы исследовать инвариантность уравнений гидродинамики, формул (1.8)–(1.9) недостаточно. Необходимо знать еще, как изменяются при переходе от K к K^* макроскопические параметры — плотность ρ , гидродинамическая скорость \vec{u} и температура T . Ответ на последний вопрос зависит от используемой процедуры осреднения при определении этих макропараметров.

При использовании мгновенных пространственных средних имеют место равенства

$$\rho_s^* = \rho_s, \quad \vec{u}_s^* = \vec{u}_s - \vec{U}, \quad T_s^* = T_s. \quad (1.10)$$

Инвариантность уравнений Навье–Стокса, которые строятся на основе пространственных средних, по отношению к преобразованиям (1.8)–(1.9) проверяется непосредственно.

Для пространственно-временных средних объемы, по которым проводится осреднение в неподвижной ΔV и движущейся ΔV^* системах координат, будут различаться — неподвижный для наблюдателя из системы координат K объем ΔV представляется движущимся наблюдателю, связанному с системой координат K^* , и наоборот. Поэтому равенства (1.10) выполняются не точно, а лишь приближенно:

$$\rho_{st}^* \approx \rho_{st}, \quad \vec{u}_{st}^* \approx \vec{u}_{st} - \vec{U}, \quad T_{st}^* \approx T_{st}. \quad (1.11)$$

Таким образом, плотность, скорость и температура оказываются относительными, и инвариантность по отношению к преобразованиям Галилея нарушается.

Сходная ситуация возникает в релятивистской гидродинамике, где несправедлива гипотеза (1.9) об абсолютности времени. Поэтому уравнения релятивистской гидродинамики также не инвариантны относительно преобразования Галилея.

Для существования инвариантности в уравнениях гидродинамики необходимо выполнение двух условий:

- определение гидродинамических величин как пространственных средних (то есть в неподвижной и подвижной системах

координат используется один и тот же объем осреднения, что дает $\rho = \rho^*$),

- абсолютность времени (время одинаково в неподвижной и движущейся системах координат, следовательно, $t = t^*$).

Инвариантность нарушается, если не выполняется хотя бы одно из этих двух условий. Для уравнений Навье–Стокса выполнены оба условия. Для уравнений релятивистской механики не выполнено второе условие. Для уравнений, которые строятся на основе пространственно-временных средних, не выполняется первое условие. Детальному обсуждению справедливости преобразования Галилея для уравнений гидродинамики посвящена работа Ю.В. Шеретова [118].

1.1.4 Уравнение неразрывности

В основу гидродинамики положен принцип сохранения массы, или уравнение баланса массы, которое записывается как

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0, \quad (1.12)$$

где \vec{j}_m — вектор плотности потока массы. Это уравнение носит название уравнения неразрывности. Интегральный вид уравнения неразрывности

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \int_{\Sigma} (\vec{j}_m \cdot \vec{n}) d\Sigma = 0 \quad (1.13)$$

означает, что изменение массы в некотором замкнутом объеме V определяется потоком массы \vec{j}_m , протекающим через его границу Σ . При этом при построении уравнения (1.12) определения газодинамических величин не используются.

Для пространственных средних полагается (см., например, [93, 114]), что плотность потока массы равна импульсу единицы объема

$$\vec{j}_{ms} = \rho_s \vec{u}_s. \quad (1.14)$$

В этом случае уравнение (1.12) имеет вид

$$\frac{\partial \rho_s(\vec{x}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{u}_s(\vec{x}, t) \rho_s(\vec{x}, t)) = 0, \quad (1.15)$$

и для уравнения неразрывности (1.15), также как и для самих пространственных средних, преобразование Галилея выполняется.

Покажем, что при использовании определений пространственно-временных средних уравнение неразрывности вида (1.15) для этих средних не выполняется. Проинтегрируем уравнение (1.15) по малому интервалу времени Δt . Тогда, согласно определению ρ_{st} , первое слагаемое примет вид

$$\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \rho_s(\vec{x}, t')}{\partial t} dt' = \frac{\partial}{\partial t} \rho_{st}(\vec{x}, t).$$

Второе слагаемое (1.15) примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \operatorname{div}(\rho_s(\vec{x}, t') \vec{u}_s(\vec{x}, t')) dt' = \\ & = \operatorname{div} \left(\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho_s(\vec{x}, t') \vec{u}_s(\vec{x}, t') dt' \right) \neq \operatorname{div}(\rho_{st}(\vec{x}, t) \vec{u}_{st}(\vec{x}, t)), \end{aligned}$$

поскольку

$$\int_t^{t+\Delta t} \rho_s(\vec{x}, t') \vec{u}_s(\vec{x}, t') dt' \neq \int_t^{t+\Delta t} \rho_s(\vec{x}, t') dt' \cdot \int_t^{t+\Delta t} \vec{u}_s(\vec{x}, t') dt'.$$

Таким образом для пространственно-временных средних плотность потока массы \vec{j}_{mst} может не совпадать с импульсом единицы объема $\rho_{st} \vec{u}_{st}$. Это отражает тот факт, что даже за малое время Δt мгновенные значения плотности и импульса единицы объема успевают измениться.

В этом случае выражение для плотности потока массы можно записать в более общем виде. Введем малую добавку к скорости, которую обозначим как \vec{w}_{st} , и запишем плотность потока массы как

$$\vec{j}_{mst} = \rho_{st}(\vec{u}_{st} - \vec{w}_{st}).$$

Как было показано выше на основе качественных соображений, для уравнений газовой динамики, основанных на пространственно-временных средних величинах, преобразование Галилея не выполняется.

1.2 Интегральные законы сохранения

В евклидовом пространстве R^3 выберем инерциальную декартову систему координат (x_1, x_2, x_3) . Пусть $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ — соответствующий ей ортонормированный базис единичных векторов, t — время. Будем использовать следующие стандартные обозначения для величин, характеризующих течения сжимаемой вязкой теплопроводной среды: $\rho = \rho(\vec{x}, t)$ — плотность среды, $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x}, t)$ — скорость, $p = p(\vec{x}, t)$ — давление, $\varepsilon = \varepsilon(\vec{x}, t)$ — удельная внутренняя энергия, $T = T(\vec{x}, t)$ — температура, $s = s(\vec{x}, t)$ — удельная энтропия.

Предположим, что среда является двухпараметрической, то есть среди пяти термодинамических параметров $\rho, p, \varepsilon, T, s$ независимы лишь два. При этом заданы уравнения состояния

$$p = p(\rho, T), \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T), \quad s = s(\rho, T). \quad (1.16)$$

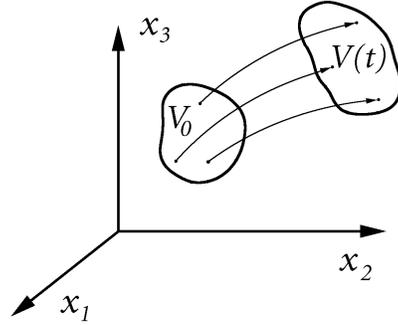


Рис. 1.3. К выводу уравнений сохранения

$\Sigma = \Sigma(t)$, ориентированной полем внешних единичных нормалей \vec{n} (рис. 1.3). Будем считать, что объем $V(t)$ возникает из объема $V_0 = V(t_0)$, где t_0 — начальный момент времени, путем непрерывной деформации, обусловленной его перемещением вдоль траекторий, определяемых некоторым векторным полем \vec{v} . Запишем известное тождество Эйлера–Лиувилля [93]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \varphi dV = \int_V [D\varphi + \varphi \operatorname{div} \vec{v}] dV = \int_V \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi \vec{v}) \right] dV, \quad (1.17)$$

Пусть $\vec{F} = \vec{F}(\vec{x}, t)$ — массовая плотность внешних сил. Например, для жидкости, находящейся в гравитационном поле Земли, $\vec{F} = \vec{g}$, где \vec{g} — ускорение свободного падения.

Выделим в области течения ограниченный движущийся материальный объем $V = V(t)$ с гладкой поверхностью

в котором $D = \partial/\partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ — дифференциальный оператор, $\varphi = \varphi(\vec{x}, t)$ — некоторое непрерывно дифференцируемое скалярное или векторное поле, dV — элемент объема в R^3 .

Пусть в каждой точке \vec{x} области течения в момент времени t определен вектор $\vec{j}_m = \vec{j}_m(\vec{x}, t)$, называемый плотностью потока массы. Пусть объем V_0 перемещается вдоль траекторий, определяемых векторным полем $\vec{v} = \vec{j}_m/\rho$. Согласно гипотезе (1.12) это обеспечивает сохранение массы в объеме при его смещении. Тогда тождество Эйлера–Лиувилля примет вид

$$\frac{d}{dt} \int_V \varphi dV = \int_V \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi \vec{j}_m / \rho) \right] dV. \quad (1.18)$$

Приведем постулаты, на основе которых будем строить уравнения газовой динамики.

В качестве первого постулата примем закон сохранения массы (1.12, 1.13), который для единообразия дальнейшего изложения запишем в эквивалентном интегральном виде как

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0. \quad (1.19)$$

Вторым постулатом будет служить закон сохранения импульса

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho \vec{u}) dV = \int_V \rho \vec{F} dV + \iint_{\Sigma} (\vec{n} \cdot P) d\Sigma, \quad (1.20)$$

где $d\Sigma$ — элемент площади поверхности Σ около единичного вектора \vec{n} . Скорость изменения импульса в объеме V равна сумме приложенных к нему сил. Первый интеграл в правой части (1.20) есть объемная сила, действующая со стороны внешнего поля; второй определяет силы давления и внутреннего вязкого трения, приложенные к поверхности Σ . Величина $P = P(\vec{x}, t)$ называется тензором внутренних напряжений. Символ $(\vec{n} \cdot P)$ обозначает свертку (скалярное произведение) вектора \vec{n} и тензора второго ранга P , осуществляемую по первому индексу тензора P . Соответственно, запись $(P \cdot \vec{n})$ означает, что свертка P и \vec{n} идет с участием второго индекса тензора P . В случае симметричного тензора P имеем $(\vec{n} \cdot P) = (P \cdot \vec{n})$.

Третьим постулатом является закон сохранения полной энергии

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) dV = \\ \int_V (\vec{J}_m \cdot \vec{F}) dV + \int \int_{\Sigma} (\vec{A} \cdot \vec{n}) d\Sigma - \int \int_{\Sigma} (\vec{q} \cdot \vec{n}) d\Sigma. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Первый интеграл в правой части (1.21) равен мощности внешних массовых сил, приложенных к объему V ; второй интерпретируется как мощность поверхностных сил давления и внутреннего вязкого трения. Последний член в (1.21) описывает приток энергии в единицу времени через поверхность Σ за счет процессов теплопроводности. Конкретные выражения для векторных полей $\vec{A} = \vec{A}(\vec{x}, t)$ и $\vec{q} = \vec{q}(\vec{x}, t)$ будут приведены ниже.

Следующий постулат выражает закон сохранения момента импульса:

$$\frac{d}{dt} \int_V [\vec{x} \times (\rho \vec{u})] dV = \int_V [\vec{x} \times \rho \vec{F}] dV + \int \int_{\Sigma} [\vec{x} \times (\vec{n} \cdot P)] d\Sigma. \quad (1.22)$$

Он представлен в классической форме. Внутренние моменты, а также распределенные массовые и поверхностные пары, не учитываются. Символ \times используется для обозначения векторного произведения двух векторов.

Второй закон термодинамики, являющийся нашим пятым постулатом, имеет вид

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho s) dV = - \int \int_{\Sigma} \frac{(\vec{q} \cdot \vec{n})}{T} d\Sigma + \int_V X dV. \quad (1.23)$$

Поверхностный интеграл в правой части (1.23) определяет скорость изменения энтропии в объеме V за счет теплового потока. Он может быть как положительным, так и отрицательным. Последний интеграл всегда неотрицателен и дает увеличение энтропии за счет внутренних необратимых процессов. Величина X называется производством энтропии.

1.3 Законы сохранения в дифференциальном виде

Чтобы перейти от интегральных соотношений (1.19)–(1.23) к соответствующим дифференциальным уравнениям, воспользуемся формулой Эйлера–Лиувилля (1.18) о дифференцировании интеграла, взятого по движущемуся материальному объему. При этом будем считать, что все основные макроскопические параметры среды являются достаточно гладкими функциями пространственных координат и времени.

Полагая $\varphi = \rho$, $\rho\vec{u}$, $\rho(\vec{u}^2/2 + \varepsilon)$, $[\vec{x} \times \rho\vec{u}]$ и ρs , и учитывая произвольность V , получим дифференциальные уравнения баланса массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0, \quad (1.24)$$

импульса

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) = \rho\vec{F} + \operatorname{div} P, \quad (1.25)$$

полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] = (\vec{j}_m \cdot \vec{F}) + \operatorname{div} \vec{A} - \operatorname{div} \vec{q}, \quad (1.26)$$

момента импульса

$$\frac{\partial}{\partial t} [\vec{x} \times \rho\vec{u}] + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes [\vec{x} \times \vec{u}]) = [\vec{x} \times \rho\vec{F}] + \frac{\partial}{\partial x_i} [\vec{x} \times P_{ij}\vec{e}_j] \quad (1.27)$$

и энтропии

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m s) = -\operatorname{div} \left(\frac{\vec{q}}{T} \right) + X. \quad (1.28)$$

Здесь $(\vec{j}_m \otimes \vec{u})$ – тензор второго ранга, полученный в результате прямого произведения векторов \vec{j}_m и \vec{u} . При вычислении дивергенции от тензора второго ранга свертка осуществляется по его первому индексу. В уравнении (1.27) символом P_{ij} обозначен портрет тензора P в базисе $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. По дважды повторяющимся индексам i и j идет суммирование.

Покажем, что полученная система уравнений (1.24)–(1.26) является диссипативной. Пусть все величины, входящие в эту систему, определены. Предположим, что течение газа происходит в замкнутом сосуде объема V_0 с непроводящей тепло твердой стенкой Σ_0 . Добавим к системе (1.24)–(1.26) начальные условия

$$\rho|_{t=0} = \rho_0, \quad \vec{u}|_{t=0} = \vec{u}_0, \quad T|_{t=0} = T_0, \quad \vec{x} \in V_0, \quad (1.29)$$

а также граничные условия

$$\vec{u}|_{\Sigma_0} = 0, \quad (\vec{j}_m \cdot \vec{n})|_{\Sigma_0} = 0, \quad (\vec{q} \cdot \vec{n})|_{\Sigma_0} = 0, \quad t \geq 0 \quad (1.30)$$

Здесь $\rho_0 = \rho_0(\vec{x}) > 0$, $\vec{u}_0 = \vec{u}_0(\vec{x})$, $T_0 = T_0(\vec{x}) > 0$ — заданные значения плотности, скорости и температуры в момент времени $t = 0$. Первое из условий (1.30) означает, что газ прилипает к стенкам сосуда; второе — обеспечивает отсутствие потока массы через границу; третье — влечет равенство нулю на Σ_0 нормальной составляющей теплового потока. Интегрируя (1.28) по объему V_0 и принимая во внимание (1.29), (1.30), приходим к неравенству

$$\frac{dS(t)}{dt} \geq 0 \quad (1.31)$$

для полной термодинамической энтропии $S(t) = \int_{V_0} \rho s d\vec{x}$. Из (1.31) следует, что величина $S(t)$ является неубывающей функцией времени.

Система (1.24)–(1.28) не является замкнутой. Необходимо представить величины \vec{j}_m , P , \vec{q} , \vec{A} , X как функции макроскопических параметров среды и их производных. Проблема замыкания может быть решена различными способами.

1.4 Уравнения Эйлера и Навье–Стокса

Изложим сначала классический подход, в котором для определения гидродинамических величин используются мгновенные пространственные средние [72, 79, 93]. В этом случае вектор плотности потока массы \vec{j}_m в любой точке (\vec{x}, t) совпадает со средним импульсом

единицы объема $\rho\vec{u}$, и первое замыкающее соотношение имеет вид

$$\vec{j}_m = \rho\vec{u}. \quad (1.32)$$

Далее вводится представление о силах давления и внутреннего вязкого трения, мгновенно действующих на поверхность материального объема. Закон движения последнего выбирают таким же, как и в механике твердого тела. Это допущение называют принципом отвердевания. Уравнение баланса момента импульса (1.27) является следствием закона сохранения импульса (1.25) при условии симметричности тензора напряжений P . В теории ньютоновских сред для $P = P_{NS}$ используется выражение

$$P_{NS} = \Pi_{NS} - pI, \quad (1.33)$$

где

$$\Pi_{NS} = \mu[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T - (2/3)I\text{div}\vec{u}] + \zeta I\text{div}\vec{u} \quad (1.34)$$

— тензор второго ранга, называемый навье–стоксовским тензором вязких напряжений, I — единичный тензор-инвариант второго ранга. Верхним индексом T обозначена операция транспонирования.

Тепловой поток $\vec{q} = \vec{q}_{NS}$ задается в соответствии с законом Фурье

$$\vec{q} = -\kappa\vec{\nabla}T. \quad (1.35)$$

Для идеальных одноатомных газов при малых числах Кнудсена гипотезы (1.34), (1.35) подтверждаются кинетическим расчетом.

Работу в единицу времени поверхностных сил давления и внутреннего вязкого трения вычисляют по той же формуле, что и в механике твердого тела, а именно

$$\vec{A} = (P_{NS} \cdot \vec{u}) = (\Pi_{NS} \cdot \vec{u}) - p\vec{u}. \quad (1.36)$$

Считают, что удельная термодинамическая энтропия подчиняется дифференциальному тождеству Гиббса

$$Tds = d\varepsilon + pd(1/\rho). \quad (1.37)$$

Уравнение баланса энтропии (1.28) может быть получено на основе тождества Гиббса с использованием законов сохранения массы, импульса и энергии (1.25)–(1.26). При этом производство энтропии $X = X_{NS}$ имеет вид

$$X = \varkappa \left(\frac{\vec{\nabla} T}{T} \right)^2 + \frac{(\Pi_{NS} : \Pi_{NS})}{2\mu T} = \varkappa \left(\frac{\vec{\nabla} T}{T} \right)^2 + \frac{\Phi}{T}, \quad (1.38)$$

где $(\Pi_{NS} : \Pi_{NS}) = \sum_{i,j=1}^3 (\Pi_{NS})_{ij} (\Pi_{NS})_{ij}$ – двойное скалярное произведение двух одинаковых тензоров. Величина Φ называется диссипативной функцией, величина которой определяет диссипацию энергии за счет сил вязкого трения. Заметим, что правая часть равенства (1.38) неотрицательна. Подстановка выражений (1.32)–(1.36) в уравнения (1.24)–(1.26) дает классическую систему Навье–Стокса для вязкой сжимаемой теплопроводной среды

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{u} = 0, \quad (1.39)$$

импульса

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \rho \vec{F} + \operatorname{div} \Pi_{NS}, \quad (1.40)$$

и полной энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho \vec{u} \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \operatorname{div} \vec{q}_{NS} = \\ = (\rho \vec{u} \cdot \vec{F}) + \operatorname{div}(\Pi_{NS} \cdot \vec{u}). \end{aligned} \quad (1.41)$$

Первое соотношение (1.39) называется уравнением баланса массы или уравнением неразрывности. Равенства (1.40) и (1.41) выражают законы сохранения импульса и полной энергии, соответственно.

Система становится замкнутой, если ее дополнить граничными и начальными условиями и уравнениями состояния

$$p = p(\rho, T), \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T), \quad (1.42)$$

а также выражениями для вычисления положительных коэффициентов динамической вязкости μ , второй вязкости ζ и теплопроводности \varkappa .

Для случая идеального политропного газа, состоящего из упругих шариков, зависимости (1.42) выбираются в виде

$$p = \rho \mathcal{R}T, \quad \varepsilon = c_v T. \quad (1.43)$$

Первое соотношение (1.43) называется уравнением Менделеева–Клапейрона, или уравнением состояния идеального газа. Второе соотношение характеризует газ как политропный. В этом случае удельная термодинамическая энтропия выражается формулой

$$s = c_v \ln \left(\frac{\mathcal{R}T}{\rho^{(\gamma-1)}} \right) + \text{const}. \quad (1.44)$$

Здесь $c_v = \mathcal{R}/(\gamma - 1)$, $c_p = \gamma \mathcal{R}/(\gamma - 1)$.

Зависимости $\mu = \mu(\rho, T)$ и $\varkappa = \varkappa(\rho, T)$ могут быть найдены либо экспериментально, либо методами кинетической теории газов. Для идеального политропного газа вязкость и теплопроводность зависят только от температуры и могут быть аппроксимированы функциями

$$\mu = \mu_1 \left(\frac{T}{T_1} \right)^\omega, \quad \varkappa = \frac{\mu c_p}{Pr}, \quad (1.45)$$

в которых μ_1 — известное значение коэффициента динамической вязкости при температуре T_1 , ω — заданный показатель температурной зависимости из промежутка $[0.5, 1]$, Pr — число Прандтля. Приблизненно коэффициент второй (объемной) вязкости можно аппроксимировать формулой

$$\zeta = \mu \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) \geq 0.$$

Этот коэффициент всегда положителен и связан с наличием внутренних степеней свободы молекулы. Для одноатомного газа $\gamma = 5/3$ и $\zeta = 0$. В противном случае $1 < \gamma < 5/3$, и $\zeta > 0$. Указанная формула была получена на основе кинетической теории в [193] для газа с вращательными степенями свободы. Эта же формула получается на основе анализа КГД уравнений для произвольного γ (см. с. 66). Влияние коэффициента второй вязкости на форму профиля плотности в ударной волне обсуждается в приложении В.

Для других сред (например, газа Ван-дер-Ваальса) зависимости (1.43) и (1.45) могут видоизменяться.

Уравнения (1.39)–(1.41) являются инвариантными относительно преобразований Галилея. Это соответствует принципу относительности Галилея об одинаковом виде законов движения в различных инерциальных системах отсчета.

Выписанная система уравнений удовлетворяет закону сохранения момента импульса и уравнению баланса энтропии в виде

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} s) = \operatorname{div}\left(\varkappa \frac{\vec{\nabla} T}{T}\right) + \varkappa \left(\frac{\vec{\nabla} T}{T}\right)^2 + \frac{\Phi}{T}, \quad (1.46)$$

где диссипативная функция

$$\Phi = \frac{(\Pi_{NS} : \Pi_{NS})}{2\mu}. \quad (1.47)$$

Вытекающий отсюда закон неубывания полной энтропии в замкнутом адиабатически изолированном объеме указывает на необратимый (диссипативный) характер системы Навье–Стокса.

Если в уравнениях (1.39)–(1.41) пренебречь эффектами вязкости и теплопроводности, то придем к классической системе уравнений Эйлера.

1.5 Квазигазодинамические и квазигидродинамические уравнения

Для мгновенных пространственных средних справедливо равенство (1.32). Для пространственно-временных средних это равенство в общем случае не выполняется (см. раздел 1.1.4). Возможный выбор величин \vec{j}_m , P , \vec{A} , \vec{q} , X в предположении, что \vec{j}_m , вообще говоря, не равен $\rho \vec{u}$, приведен далее.

По аналогии с выражениями (1.33), (1.36) будем полагать, что тензор напряжений и работа сил давления и вязкого трения связаны с тензором вязких напряжений соотношениями вида:

$$P = \Pi - pI, \quad \vec{A} = (\Pi \cdot \vec{u}) - p \frac{\vec{j}_m}{\rho}.$$

Для пространственно-временных средних было построено два варианта замыкания общей системы уравнений (1.24)–(1.28). Получающиеся в результате этой системы были названы квазигазодинамической и квазигидродинамической системами уравнений. Сокращенно обе системы именуются одинаково — КГД системы. Присутствующие в КГД уравнениях добавки, пропорциональные малому параметру τ , связаны с дополнительным осреднением (сглаживанием) по времени при определении газодинамических параметров.

Первая система описывает поведение идеального политропного газа. Первый вариант этой системы был получен на основе кинетической модели в 80-е годы [50, 51, 105]. Позднее эта система была представлена в виде законов сохранения [111, 114]. Вторая система была получена позднее Ю.В. Шеретовым на основе анализа уравнений сохранения в дифференциальном виде [110, 111]. Эта система описывает течение газа с более общим уравнением состояния, и в приближении $\rho = \text{const}$ может использоваться для моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости.

Там, где это не приводит к путанице, будем использовать аббревиатуру КГД. В специальных случаях будем называть эти системы полностью.

1.5.1 Квазигазодинамическая система

Пусть за некоторое физически бесконечно малое время мгновенные значения средней плотности, среднего импульса и энергии единицы объема успевают измениться. Для идеального политропного газа, то есть для газа с уравнением состояния

$$p = \rho \mathcal{R}T, \quad \varepsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}$$

был найден способ замыкания общей системы (1.24)–(1.28), который приводит к квазигазодинамической системе уравнений. Вариант построения этой системы на основе кинетической модели будет изложен в главе 3. Здесь приведем сразу замыкающие соотношения, которые имеют вид

$$\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w}), \quad (1.48)$$

$$P = -pI + \Pi = -pI + \Pi_{NS} + \tau \vec{u} \otimes \left[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla}p - \rho\vec{F} \right] + \\ + \tau I \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right], \quad (1.49)$$

$$\vec{q} = -\varkappa \vec{\nabla}T - \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + p(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\left(\frac{1}{\rho}\right) \right] = \\ = -\varkappa \vec{\nabla}T - \tau \rho T \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})s, \quad (1.50)$$

где

$$\vec{w} = \vec{w}_{QGD} = \frac{\tau}{\rho} [\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p - \rho \vec{F}], \quad (1.51)$$

τ – некоторый малый коэффициент размерности времени, который в дальнейшем будем называть параметром релаксации, или сглаживания. При $\tau = 0$ приведенные выше выражения для \vec{j}_m , P и \vec{q} вырождаются в соответствующие величины для уравнений Навье–Стокса. Способы нахождения τ будут обсуждаться далее.

Вектор \vec{A} и неотрицательная величина производства энтропии X записываются в виде

$$\vec{A} = (\Pi_{NS} \cdot \vec{u}) - p(\vec{u} - \vec{w}) \\ + \tau \vec{u} \left[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\left(\frac{\vec{u}^2}{2}\right) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p \right] + \tau \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right], \quad (1.52)$$

$$X = \varkappa \left(\frac{\vec{\nabla}T}{T} \right)^2 + \frac{(\Pi_{NS} : \Pi_{NS})}{2\mu T} + \frac{p\tau}{\rho^2 T} [\operatorname{div}(\rho \vec{u})]^2 \\ + \frac{\tau}{\rho T} \left[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla}p - \rho \vec{F} \right]^2 + \frac{\tau}{\rho \varepsilon T} \left[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + p \operatorname{div} \vec{u} \right]^2. \quad (1.53)$$

Заметим, что производство энтропии для КГД системы представляет собой производство энтропии для уравнений Навье–Стокса с дополнительными членами, которые являются квадратами левых частей классических уравнений Эйлера в стационарном случае с положительными коэффициентами. Для КГД уравнений производство энтропии неотрицательно.

Подставляя выписанные выше значения векторов и тензора вязких напряжений в общую систему уравнений (1.24)–(1.28) получим квазигазодинамическую систему в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0, \quad (1.54)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \rho_* \vec{F} + \operatorname{div} \Pi, \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \operatorname{div} \vec{q} = \\ (\vec{j}_m \cdot \vec{F}) + \operatorname{div}(\Pi \cdot \vec{u}). \end{aligned} \quad (1.56)$$

Здесь $\rho_* = \rho - \tau \operatorname{div}(\rho \vec{u})$ — приближенное значение плотности в точке $(\vec{x}, t + \tau)$. Величина ρ_* определяется выбором значения плотности в первом слагаемом правой части (1.20) в сдвинутой по времени точке с помощью соотношения $\rho_* = \rho + \tau \partial \rho / \partial t$, где $\partial \rho / \partial t + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0$.

Уравнение баланса энтропии было получено на основе недивергентного вида КГД системы в форме (1.28) в [115]

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m s) = -\operatorname{div} \left(\frac{\vec{q}}{T} \right) + X. \quad (1.57)$$

Вариант его построения для течений с внешними источниками энергии приведен в последнем параграфе главы 3.

1.5.2 Квазигидродинамическая система

Второй способ решение проблемы замыкания системы (1.24)–(1.28) был предложен Ю.В. Шеретовым в работах [111, 114].

Пусть за любое физически бесконечно малое время успевают измениться только мгновенное значение среднего импульса единицы объема, а изменениями мгновенных значений плотности и температуры можно пренебречь. В этом случае для газа с уравнениями состояния (1.16) и удовлетворяющему тождеству Гиббса (1.37) величины \vec{j}_m , P , \vec{q} , \vec{A} и X были построены в виде:

$$\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w}), \quad (1.58)$$

$$P = -pI + \Pi = -pI + \Pi_{NS} + \rho\vec{u} \otimes \vec{w}, \quad (1.59)$$

$$\vec{q} = -\varkappa\vec{\nabla}T, \quad (1.60)$$

$$\vec{A} = (\Pi_{NS} \cdot \vec{u}) + \rho\vec{u}(\vec{w} \cdot \vec{u}) - p(\vec{u} - \vec{w}), \quad (1.61)$$

$$X = \varkappa\left(\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right)^2 + \frac{(\Pi_{NS} : \Pi_{NS})}{2\mu T} + \frac{\rho\vec{w}^2}{\tau T}, \quad (1.62)$$

причем

$$\vec{w} = \vec{w}_{QHD} = \frac{\tau}{\rho}[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla}p - \rho\vec{F}]. \quad (1.63)$$

Подставив выражения (1.58), (1.59) и (1.61) вместо величин \vec{j}_m , P и \vec{A} в (1.24)–(1.26), получим квазигидродинамическую систему уравнений Шеретова

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}_m = 0, \quad (1.64)$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p = \rho\vec{F} + \operatorname{div}\Pi, \quad (1.65)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \operatorname{div}\vec{q} = \\ (\vec{j}_m \cdot \vec{F}) + \operatorname{div}(\Pi \cdot \vec{u}). \end{aligned} \quad (1.66)$$

КГД система (1.64)–(1.66) становится замкнутой, если дополнить ее уравнениями состояния (1.16), а коэффициенты μ , \varkappa и τ представить как функции макроскопических параметров среды.

Подстановка выражений (1.58), (1.60) и (1.62) в (1.28) дает уравнение баланса энтропии

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\vec{u}s) = \operatorname{div}(\rho\vec{w}s) + \operatorname{div}\left(\varkappa\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right) + \varkappa\left(\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right)^2 + \frac{\Phi_{QHD}}{T}, \quad (1.67)$$

в котором

$$\Phi_{QHD} = \frac{(\Pi_{NS} : \Pi_{NS})}{2\mu} + \frac{\rho\vec{w}^2}{\tau}$$

— неотрицательная диссипативная функция.

1.5.3 Вектор плотности потока массы и параметр τ

Формально во всех уравнениях КГД системы присутствуют дополнительные по сравнению с системой Навье–Стокса диссипативные слагаемые, представляющие собой вторые пространственные производные от плотности, скорости и давления, перед которыми стоит численный коэффициент τ . При $\tau \rightarrow 0$ КГД уравнения переходят в уравнения Навье–Стокса.

Коэффициент $\tau = \tau(\rho, T)$, названный параметром релаксации, или сглаживания, связан с включением в определение газодинамических величин осреднения по времени. Это дополнительное осреднение позволяет учесть влияние малых флуктуаций числа частиц в объеме ΔV , которым в классической гидродинамике пренебрегается. Величина параметра сглаживания может изменяться в широких пределах в зависимости от типа рассматриваемого течения.

Для определения величины параметра τ рассмотрим структуру вектора плотности потока массы. Для определенности остановимся на квазигазодинамической системе уравнений для стационарного течения идеального политропного газа. В этом случае плотность потока массы вычисляется согласно (1.48), (1.51)

$$\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w}) = \rho\vec{u} - \tau[\operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p - \rho\vec{F}]. \quad (1.68)$$

Преобразуем это выражение к виду

$$\vec{j}_m = \rho\vec{u} + \tau\rho\vec{F} - \tau\mathcal{R}T\vec{\nabla}\rho - \tau\mathcal{R}\rho\vec{\nabla}T - \tau\operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}). \quad (1.69)$$

Первый член в правой части описывает плотность потока массы, связанного с конвективным движением газа. Второе слагаемое — поток, определяемый движением частиц во внешнем поле. Третье слагаемое — поток массы за счет самодиффузии. Четвертое слагаемое — так называемый термодиффузионный поток. Последнее слагаемое — вклад в поток массы за счет градиента скорости. В реальных течениях все эти потоки тесно связаны между собой и не могут быть разделены.

Остановимся более подробно на третьем слагаемом. Плотность потока массы за счет самодиффузии имеет вид

$$\vec{j}_\rho = -D\vec{\nabla}\rho.$$

Коэффициент самодиффузии D для многих сред хорошо известен из экспериментов с изотопами. Согласно, например, [134] и [182], в политропном газе коэффициент самодиффузии связан с коэффициентом вязкости как

$$D = \frac{\mu}{\rho Sc}, \quad (1.70)$$

где Sc — число Шмидта. Согласно [134], число Шмидта в газе близко к единице и приближенно может быть получено как

$$Sc = \frac{5}{7 - \omega}. \quad (1.71)$$

Сравнивая коэффициент самодиффузии (1.70) и выражение для этого коэффициента в (1.69), получаем, что для газа с уравнением состояния $p = \rho \mathcal{R}T$ параметр релаксации равен

$$\tau = \frac{\mu}{p Sc}. \quad (1.72)$$

Таким образом, с точностью до числа Шмидта величина τ совпадает с так называемым максвелловским временем релаксации $\tau_m = \mu/p$, то есть близка к среднему времени свободного пробега частиц в газе.

Рассмотрим теперь второе слагаемое уравнения (1.69). Если рассматривать каждую молекулу как броуновскую частицу, то плотность потока массы этих частиц можно связать с массовой плотностью внешних сил соотношением

$$\vec{j}_F = \rho b m_0 \vec{F},$$

где коэффициент b называется подвижностью молекулы. Подвижность молекулы связана с коэффициентом самодиффузии соотношением Эйнштейна

$$D = b k_B T.$$

Подставляя в выражение для плотности потока массы во внешнем поле подвижность молекулы через соотношение Эйнштейна, вновь приходим в формуле (1.72) для коэффициента релаксации τ .

Термодиффузионный поток, который описывается четвертым слагаемым, согласно [72, 78] представляется в виде

$$\vec{j}_T = -\rho D \frac{k_T}{T} \vec{\nabla} T,$$

где k_T — безразмерная величина, называемая термодиффузионным отношением, которое определяет связь коэффициентов термодиффузии D_T и самодиффузии D в виде $D_T = D k_T$. Сопоставляя четвертое слагаемое в (1.69) и выражение для \vec{j}_T , опять приходим к уже полученному нами ранее выражению для параметра релаксации (1.72) с точностью до коэффициента k_T в виде $\tau = k_T \mu / (\rho S c)$.

В [114] для вычисления параметра релаксации была предложена более общая формула

$$\tau = \frac{\gamma}{S c} \frac{\mu}{\rho c^2}. \quad (1.73)$$

При учете формулы Лапласа для скорости звука в газе $c^2 = \gamma p / \rho$, выражение (1.73) преобразуется к виду (1.72).

Для плотных газов и жидкостей величина параметра сглаживания, выбранная в соответствии с (1.73), оказывается весьма малой, и влиянием членов в КГД уравнениях содержащих τ можно пренебречь. Например, для воздуха при температуре $T = 20^\circ$ $\gamma = 1.4$, $S c = 0.74$, $c = 3.4 \cdot 10^4$ см/сек, $\nu = \mu / \rho = 0.15$ см²/сек, и $\tau = 2.45 \cdot 10^{-10}$ сек. Для воды при аналогичных условиях $\gamma = 1$, $S c = 1$, $c = 1.45 \cdot 10^5$ см/сек, $\nu = 0.01$ см²/сек, и $\tau = 4.75 \cdot 10^{-13}$ сек.

Для течений разреженного газа параметр сглаживания может быть достаточно большим. Вариант его вычисления для разреженных течений в каналах рассматривается в Приложении С. При описании быстропеременных или турбулентных течений вклад дополнительных вязких членов также может оказаться существенным. Численное моделирование турбулентного течения за уступом в плоском канале и способ выбора параметра сглаживания в этой задаче рассматривается в Приложении D.

При проведении расчетов слагаемые с коэффициентом τ могут использоваться как удобные и эффективные регуляризаторы для нахождения численного решения. При этом величина параметра τ

уже не связывается с молекулярными свойствами газа, а определяется шагом пространственной сетки и выбирается из условий сходимости и точности разностного решения задачи.

Выражение для плотности потока массы (1.68) включает в себя пространственную производную от давления, что делает уравнение неразрывности для обеих КГД систем уравнением второго порядка. Поэтому при постановке начально-краевой задачи для КГД систем требуется дополнительное по сравнению с системой Навье–Стокса граничное условие. Это дополнительное условие может быть получено из условий для вектора плотности потока массы \vec{j}_m (1.48), (1.58) на границе.

Предположим, что граница представляет собой непроницаемую твердую стенку, и что внешняя сила равна нулю. Тогда условие непротекания для потока массы $(\vec{j}_m \cdot \vec{n}) = 0$ и условия непротекания для скорости $(\vec{u} \cdot \vec{n}) = 0$ приводят к условию для давления на границе в виде $\partial p / \partial n = 0$.

Из формул для вычисления тензора вязких напряжений и теплового потока для обеих КГД систем (1.49)–(1.51) и (1.59)–(1.60), (1.63) следует, что условие непротекания для скорости $(\vec{u} \cdot \vec{n}) = 0$ приводит к тому, что пропорциональные τ дополнительные слагаемые в тепловом потоке и тензоре вязких напряжений обращаются в нуль, и для КГД систем на стенке выполняется условие

$$\Pi = \Pi_{NS}, \quad \vec{q} = \vec{q}_{NS}.$$

Тем самым формулы для вычисления теплового потока и силы трения на твердой стенке для КГД уравнений совпадают с традиционными выражениями, полученными в рамках уравнений Навье–Стокса.

1.5.4 Сопоставление моделей и барометрическая формула

КГД системы отличаются от других систем, которые в разное время предлагались в работах [4, 15, 63, 64, 96, 122]. КГД уравнения принципиально отличаются от уравнений Барнетта [73, 104], добавочные

слагаемые в которых имеют вид третьих пространственных производных и носят не диссипативный, а дисперсионный характер.

Для целого ряда задач сравнение численных результатов, полученных на основе модели Навье–Стокса и КГД уравнений, приведено в последующих главах. Для расчета разреженных течений такое сопоставление проведено и с расчетами по кинетическим моделям.

Было выполнено детальное сравнение результатов, полученных в расчетах по квазигазодинамическим уравнениям, с данными, полученными на основе уравнений Навье–Стокса и кинетических подходов для задач о стационарных течениях в окрестности пластины [146], диска [140] и полого цилиндра [161]. В этих расчетах получено, что все три модели дают очень близкие результаты для течений достаточно плотных газов. При этом численный алгоритм, основанный на КГД уравнениях, оказывается существенно проще в численной реализации и обладает большим запасом устойчивости. С увеличением разреженности результаты расчетов начинают различаться. В этом случае данные КГД модели как правило, располагаются между данными, полученными с использованием кинетического подхода, и результатами расчета с использованием уравнений Навье–Стокса.

В качестве наглядного примера сопоставления КГД уравнений с моделью Навье–Стокса рассмотрим классическую задачу гидростатики о распределении давления в идеальном политропном газе, находящимся в однородном поле тяжести [72, 79]. В состоянии равновесия макроскопическая скорость \vec{u} равна нулю, и распределение параметров газа не зависит от времени. В поле тяжести Земли $\vec{F} = = \vec{g}$, где $g = 9.8 \cdot 10^2$ см/сек².

В этом случае обе КГД системы существенно упрощаются и принимают одинаковый вид

$$\operatorname{div} \left\{ \tau(\vec{\nabla}p - \rho\vec{g}) \right\} = 0,$$

$$\vec{\nabla}p = \rho\vec{g},$$

$$\operatorname{div} \left\{ \tau(\vec{\nabla}p - \rho\vec{g}) \left(\varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right\} + \operatorname{div}(\varkappa\vec{\nabla}T) = \tau\vec{g} \cdot (\vec{\nabla}p - \rho\vec{g}).$$

Отсюда непосредственно следуют условия механического равновесия, вытекающие из системы уравнений Навье–Стокса

$$\vec{\nabla} p = \rho \vec{g},$$

$$\operatorname{div}(\varkappa \vec{\nabla} T) = 0.$$

Пусть температура газа постоянна. Тогда приходим к классической формуле, определяющей распределение давления в газе

$$p = p_0 \exp\left(\frac{(\vec{g} \cdot \vec{x})}{\mathcal{R}T}\right), \quad (1.74)$$

где p_0 — заданное значение давления в точке $\vec{x} = 0$. Формула (1.74) называется барометрической формулой, или формулой Лапласа. Таким образом формула Лапласа является точным решением уравнений Навье–Стокса и обеих КГД систем.

Другим точным решением, общим для КГД систем и системы Навье–Стокса, является решение задачи о течении Куэтта, приведенное в монографии [114]. В этой же монографии рассмотрен ряд других точных решений задач гидродинамики и прослежена связь таких решений, построенных в рамках классической модели и КГД систем.

Исторические сведения

Отдельные экспериментальные факты течения жидкости и газа были установлены Архимедом (287–212 до н. э.), Паскалем (Blaise Pascal, 1588–1651), Торичелли (Evangelista Torricelli, 1608–1647) и Ньютоном (Isaac Newton, 1643–1727).

Основоположниками теоретической гидродинамики можно считать двух выходцев из Швейцарии, работавших в том числе и в России — Леонарда Эйлера и Даниила, или Даниеля Бернулли.

Термин "гидродинамика" был введен Бернулли (Daniel Bernoulli, 1700–1783). Даламбер (Jean le Rond D'Alembert, 1717–1783) ввел закон сохранения массы для жидкости в виде уравнения неразрывности.

Леонард Эйлер (Leonard Euler, 1707–1783) в 1755 г. выписал уравнения движения идеальной жидкости и развил их математическую теорию. Он вывел уравнение неразрывности, выражающее свойство сохранения массы в движущемся вместе с жидкостью материальном объеме. Он же получил уравнение баланса импульса в локальной форме без учета влияния вязкости. В те времена жидкость и газ рассматривали как сплошную среду в буквальном смысле слова. Молекулярный состав вещества в рассмотрение не принимался. Плотность определялась как формальный математический предел отношения массы жидкости в момент времени t в объеме к величине этого объема при его стремлении к нулю.

Работы Л. Эйлера продолжил Лагранж (Joseph Louis Lagrange, 1736–1813).

Клод Луи Навье (Claude Louis Navier, 1785–1836) вывел уравнения движения вязкой жидкости, пользуясь гипотезой взаимодействия молекул. История уравнений вязкой жидкости отсчитывается с того момента, когда Навье в 1822 г. сделал доклад об их простейшем варианте в несжимаемом случае. Соответствующая статья была опубликована через пять лет.

Джордж Стокс (George Gabriel Stokes, 1819–1903) получил уравнения движения вязкой жидкости на аксиоматической основе. По современным представлениям в качестве постулатов использовались интегральные законы сохранения массы, импульса и полной энергии в материальном объеме, движущемся вдоль интегральных кривых поля скорости. Его можно считать основателем современной гидродинамики.

Осборн Рейнольдс (Osborne Reynolds, 1842–1912), изучая движение вязкой жидкости, ввел понятия ламинарного и турбулентного течений и указал возможность резкого перехода от одного вида течения к другому.

Кинетическое обоснование уравнений гидродинамики было построено на основе уравнения Больцмана. Это уравнение для описания поведения функции распределения частиц моноатомного газа с бинарными столкновениями было выписано австрийским физиком Людвигом Больцманом (Ludwig Boltzmann, 1844–1906) в 1872 г. [97, 109].

Глава 2

Элементы кинетической теории газов

В этой главе излагаются некоторые аспекты кинетической теории. Эти сведения используются при выводе квазигазодинамических уравнений в главе 3, построении их обобщений (главы 8 и 9) и рассмотрении задач о структуре ударной волны и течения в микроканалах (приложения В и С). Приведено схематическое описание кинетического алгоритма DSMC, который в настоящее время широко применяется в численном моделировании течений разреженного газа. Расчеты в рамках этого подхода использовались для верификации КГД алгоритма при моделировании умеренно-разреженных течений. В последнем разделе изложен способ построения кинетически-согласованных разностных схем, дифференциальные аналоги которых послужили основой первых вариантов КГД уравнений. Изложение в этой главе опирается на работы [30, 31, 50–52] и [65, 68, 114, 120, 134, 182].

2.1 Уравнение Больцмана

В 1872 г. Л. Больцман предложил интегро-дифференциальное кинетическое уравнение, которому суждено было стать классической моделью в теории разреженных одноатомных газов [12, 62, 65, 73, 134]. Это уравнение имеет вид

$$f_t + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}})f + (\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{\xi}})f = \mathcal{I}(f, f) \quad (2.1)$$

и описывает эволюцию одночастичной функции распределения $f = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$. Здесь $\vec{\xi}$ — скорость отдельной частицы, которую будем рассматривать как атом-шарик массой m_0 , \vec{F} — действующая на частицы внешняя сила, отнесенная к единице массы, $\vec{\nabla}$ — оператор Гамильтона. Функция f нормирована так, чтобы равенство

$$m_0 dN = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{x} d\vec{\xi}$$

определяло вероятное, или ожидаемое, число dN частиц в элементе объема $d\vec{x} d\vec{\xi}$ около точки $(\vec{x}, \vec{\xi})$ фазового пространства координат и скоростей в фиксированный момент времени t .

Интеграл столкновений $\mathcal{I}(f, f)$ есть нелинейный функционал, определяющий изменение функции распределения в результате парных столкновений. Конкретный вид этого интеграла можно найти в книгах [12, 65, 73, 134].

Важным и нужным нам в дальнейшем свойством интеграла столкновений является его ортогональность любому из так называемых столкновительных, или сумматорных, инвариантов

$$h(\vec{\xi}) = 1, \vec{\xi}, \xi^2/2.$$

То есть можно записать

$$\int h(\vec{\xi}) \mathcal{I}(f, f) d\vec{\xi} = 0. \quad (2.2)$$

Это соотношение выражает законы сохранения массы, импульса и энергии частиц при их парном столкновении. Здесь и далее интегрирование выполняется по всему пространству скоростей частиц.

Зная функцию распределения f , можно определить гидродинамические величины — плотность ρ , скорость \vec{u} , давление p , температуру T , удельную внутреннюю энергию ε , тензор вязких напряжений Π и тепловой поток \vec{q} с помощью выражений

$$\begin{aligned} \rho &= \int f d\vec{\xi}, & \rho \vec{u} &= \int \vec{\xi} f d\vec{\xi}, & p &= \int \frac{\vec{c}^2}{3} f d\vec{\xi}, \\ \rho c_v T &= \rho \varepsilon = \int \frac{\vec{c}^2}{2} f d\vec{\xi}, & \vec{q} &= \int \frac{\vec{c}^2}{2} \vec{c} f d\vec{\xi}, \\ \Pi &= \int \left[I \frac{\vec{c}^2}{3} - \vec{c} \otimes \vec{c} \right] f d\vec{\xi}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Здесь $\vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u}$ — скорость хаотического движения частицы газа, или тепловая скорость, $c_v = 3\mathcal{R}/2$ — удельная теплоемкость при постоянном объеме для одноатомного газа.

Интегрируя (2.1) с весами $1, \vec{\xi}, \vec{\xi}^2/2$ и пользуясь свойством (2.2), получим систему уравнений для макроскопических параметров

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{u} = 0, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \rho \vec{F} + \operatorname{div} \Pi, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho \vec{u} \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \operatorname{div} \vec{q} = (\rho \vec{u} \cdot \vec{F}) + \operatorname{div}(\Pi \cdot \vec{u}), \quad (2.6)$$

которая, однако, не является замкнутой.

Для положительных решений $f = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ уравнения (2.1), в предположениях, что таковые существуют, обладают необходимыми свойствами гладкости и стремятся к нулю при $|\vec{\xi}| \rightarrow \infty$, Л. Больцман доказал свою знаменитую H -теорему.

Предположим, что одноатомный газ находится в ограниченном объеме V_0 с зеркально отражающей внутренней стенкой. Пусть заданы соответствующие начальные и краевые условия для функции распределения частиц в этом объеме. Тогда для функции Больцмана

$$H(t) = \int_{V_0} d\vec{x} \int f \ln f d\vec{\xi}$$

при всех $t \geq 0$ справедливо неравенство

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0. \quad (2.7)$$

Таким образом, рассматриваемое движение газа в сосуде сопровождается невозрастанием с течением времени величины $H(t)$, что указывает на его необратимый характер.

2.2 Равновесная функция распределения и система уравнений Эйлера

Точным решением уравнения Больцмана является функция распределения, называемая локально-максвелловской равновесной функцией, которая в размерных величинах имеет вид

$$f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \frac{\rho}{(2\pi\mathcal{R}T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{u} - \vec{\xi})^2}{2\mathcal{R}T}\right). \quad (2.8)$$

Для функции $f^{(0)}$ справедливо соотношение $\mathcal{I}(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$, и она связана с f соотношениями

$$\begin{aligned} \rho &= \int f d\vec{\xi} = \int f^{(0)} d\vec{\xi}, \\ \rho\vec{u} &= \int \vec{\xi} f d\vec{\xi} = \int \vec{\xi} f^{(0)} d\vec{\xi}, \\ \rho c_v T = \rho\varepsilon &= \int \frac{\vec{c}^2}{2} f d\vec{\xi} = \int \frac{\vec{c}^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Непосредственной подстановкой можно убедиться, что для локально-максвелловской функции распределения

$$\vec{q} = \int \frac{\vec{c}^2}{2} \vec{c} f^{(0)} d\vec{\xi} = 0, \quad \Pi = \int \left[I \frac{\vec{c}^2}{3} - \vec{c} \otimes \vec{c} \right] f^{(0)} d\vec{\xi} = 0.$$

Функция $f^{(0)}$ называется также локально-равновесной функцией распределения.

Интегрирование уравнения Больцмана с весами $1, \vec{\xi}, \vec{\xi}^2/2$ в нулевом приближении, то есть когда f считается равной $f^{(0)}$, позволяет замкнуть систему (2.4)–(2.6) и получить систему уравнений Эйлера.

2.3 Уравнения Навье–Стокса

В 1916–1917 годах С. Чепмен и Д. Энског предложили асимптотический метод решения уравнения Больцмана, позволяющий замкнуть систему (2.4)–(2.6) и получить систему уравнений первого приближения для описания течений вязкого теплопроводного газа — систему уравнений Навье–Стокса [65, 73, 134].

Суть метода заключается в том, что решение приведенного к безразмерному виду уравнения (2.1) ищется в виде формального асимптотического ряда по степеням малого положительного параметра — числа Кнудсена Kn , в виде

$$f = f^{(0)}(1 + Kn f^{(1)} + Kn^2 f^{(2)} + \dots),$$

где

$$Kn = \frac{\lambda}{L}. \quad (2.10)$$

Здесь λ — средняя длина свободного пробега частиц в невозмущенном потоке, L — характерный размер области течения. В качестве нулевого приближения используется локально-максвелловская функция (2.8).

В первом приближении по числу Kn вычисления с помощью метода Чепмена–Энскога приводят к так называемой локально-навье–стоксовской функции распределения

$$f_{NS} = f^{(0)} \left[1 - \frac{1}{p\mathcal{R}T} \left(1 - \frac{\bar{c}^2}{5\mathcal{R}T} \right) (\bar{c} \cdot \vec{q}_{NS}) - \frac{1}{2p\mathcal{R}T} \Pi_{NS} : (\bar{c} \otimes \bar{c}) \right]. \quad (2.11)$$

Величины Π_{NS} и \vec{q}_{NS} были выписаны ранее (см. (1.34) и (1.35)).

Последовательно интегрируя уравнение Больцмана с сумматорными инвариантами $1, \bar{\xi}, \bar{\xi}^2/2$ в предположении, что f совпадает с f_{NS} , получим систему уравнений Навье–Стокса, выписанную ранее в разделе 1.4. Процедура Чепмена–Энскога позволяет провести приближенный расчет коэффициентов вязкости и теплопроводности. Для газа твердых сфер приближенный расчет этих коэффициентов приводит к выражениям

$$\mu = \frac{5}{64} \frac{m_0}{r_0^2} \sqrt{\frac{\mathcal{R}T}{\pi}}, \quad \varkappa = \frac{c_p \mu}{Pr}, \quad (2.12)$$

где r_0 — радиус частицы. Число Pr в (2.12) оказывается равным $2/3$, а сами коэффициенты зависят только от температуры, что согласуется с известными экспериментальными данными.

Используя следующее приближение в разложении функции распределения по числу Кнудсена, можно получить уравнения Барнета. Эти уравнения включают в себя третьи пространственные производные, что вызывает существенные трудности при их численном решении и постановке граничных условий.

2.4 Уравнение Бхатнагара–Гросса–Крука

В работе П. Бхатнагара, Е. Гросса и М. Крука в 1954 году [132] было предложено приближенное кинетическое уравнение вида

$$f_t + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}})f + (\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{\xi}})f = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}, \quad (2.13)$$

то есть уравнение (2.1), в котором столкновительный интеграл $\mathcal{I}(f, f)$ аппроксимировался с помощью выражения

$$\mathcal{I}(f, f) = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}. \quad (2.14)$$

В настоящее время уравнение (2.13) называют модельным кинетическим уравнением Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК). Примерно в то же самое время уравнения (2.13), (2.14) независимо были опубликованы П. Веландером [73]. Положительный параметр τ в правой части равенства (2.14) интерпретируется как характерное время релаксации функции f к локально-максвелловскому распределению $f^{(0)}$, определяемому формулой (2.8), и считается заданной функцией плотности и температуры. Величина τ совпадает по порядку величины со средним временем свободного пробега молекул в газе. Макроскопические величины, входящие в формулу для вычисления τ , также являются квадратурами от f . Для модели БГК справедлив аналог H -теоремы Больцмана.

Применение метода Чепмена–Энскога к уравнению БГК также приводит к системе Навье–Стокса [65, 73, 134]. При этом коэффициент динамической вязкости μ и коэффициент теплопроводности \varkappa вычисляются по формулам

$$\mu = p\tau, \quad \varkappa = c_p p\tau. \quad (2.15)$$

Из приведенных формул следует, что в БГК приближении число Прандтля равно единице.

В настоящее время разработаны усовершенствованные модели типа БГК приближения. В частности, предложена S-модель Шахова, которая позволяет ввести в рассмотрение реальное значение

числа Прандтля. При этом вместо равновесной функции распределения в интеграле столкновений (2.14) выбирается функция распределения вида

$$f_S = f_0 \left(1 + (1 - Pr) \psi(\vec{c}, \rho, T, \vec{u}) \right),$$

где ψ - некоторая функция [108].

Имеются обобщения БГК приближения на случай, когда характерное время релаксации зависит от скорости частиц $\tau = \tau(\vec{\xi})$. Вариант релаксационного уравнения, учитывающий неравновесность по внутренним степеням свободы частиц [134], используется в главе 8 для построения газодинамических уравнений. Вариант БГК приближения для смеси газов и его использование для построения моментных уравнений обсуждается в главе 9.

2.5 Средние характеристики движения частиц

Приведем определения основных величин, характеризующих хаотическое движение частиц в газе с функцией распределения f . Полученные выражения будут использоваться в дальнейшем.

Средняя тепловая скорость частиц вычисляется как

$$\langle \bar{c} \rangle = \frac{1}{\rho} \int \bar{c} f d\vec{c}, \quad \text{где } \bar{c} = \sqrt{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}. \quad (2.16)$$

Средняя относительная скорость частиц определяется в виде

$$\langle \bar{c}_r \rangle = \frac{1}{\rho^2} \int \int \bar{c}_r f_1 f_2 d\vec{c}_1 d\vec{c}_2, \quad (2.17)$$

где $\vec{c}_r = \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}_2$ - величина относительной скорости двух сталкивающихся молекул, $\bar{c}_r = [(c_{x1} - c_{x2})^2 + (c_{y1} - c_{y2})^2 + (c_{z1} - c_{z2})^2]^{1/2}$, f_1 и f_2 - соответствующие функции распределения.

В случае равновесной функции распределения $f = f^{(0)}$, определенной согласно (2.8), интегралы (2.16) и (2.17) вычисляются аналитически и значения соответствующих средних определяются как

$$\langle \bar{c} \rangle = \sqrt{\frac{8}{\pi} \mathcal{R}T}, \quad \langle \bar{c}_r \rangle = 4 \sqrt{\frac{\mathcal{R}T}{\pi}}. \quad (2.18)$$

Наиболее вероятная скорость частиц определяется "шириной" функции распределения и в этом случае составляет

$$c_m = \sqrt{2\mathcal{R}T}.$$

Средняя частота между столкновениями ν определяется как

$$\nu = \frac{\rho}{m_0} \langle \sigma \vec{c}_r \rangle, \quad (2.19)$$

где σ - сечение столкновения молекул, или сечение рассеяния

$$\langle \sigma \vec{c}_r \rangle = \frac{1}{\rho^2} \int \int \sigma \vec{c}_r f_1 f_2 d\vec{c}_1 d\vec{c}_2.$$

Для газа с максвелловской функцией распределения $f_1 = f_1^{(0)}$, $f_2 = f_2^{(0)}$ в VHS приближении [134]

$$\langle \sigma \vec{c}_r \rangle = 4\sigma_{ref} \sqrt{\frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\pi}} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{1-\omega}, \quad (2.20)$$

где σ_{ref} - величина сечения столкновения σ при температуре T_{ref} . Для газа твердых сфер ($\sigma = \sigma_0$, $\omega = 0.5$), (2.20) принимает вид

$$\langle \sigma \vec{c}_r \rangle = \sigma_0 \langle \vec{c}_r \rangle = 4\sigma_0 \sqrt{\frac{\mathcal{R}T}{\pi}}. \quad (2.21)$$

Среднее время между столкновениями вычисляется через обратную частоту столкновений как

$$\tau_c = \frac{1}{\nu}. \quad (2.22)$$

Для газа твердых сфер

$$\tau_c = \frac{\sqrt{\pi} m_0}{4\rho\sigma_0\sqrt{\mathcal{R}T}}. \quad (2.23)$$

В VHS приближении максвелловское время релаксации связано со средним временем между столкновениями [134]

$$\tau = \frac{\mu}{p} = \Omega(\omega)\tau_c, \quad \text{где} \quad \Omega(\omega) = \frac{30}{(7-\omega)(5-\omega)}. \quad (2.24)$$

Для газа твердых сфер $\Omega(\omega = 1/2) = 5/4$.

Средняя длина свободного пробега частиц λ определяется средним временем свободного пробега τ_c и средней тепловой скоростью (2.16) в виде

$$\lambda = \tau_c \langle \bar{c} \rangle. \quad (2.25)$$

Для газа твердых сфер с максвелловской функцией распределения подстановка соотношений (2.18) и (2.23) приводит к выражению

$$\lambda = \frac{m_0}{\sqrt{2\rho\sigma_0}}. \quad (2.26)$$

Приведем некоторые оценки характерных параметров для воздуха: при атмосферном давлении на уровне моря число частиц составляет $n = 2.4 \cdot 10^{25} \text{ 1/м}^3$, среднее расстояние между частицами $r_* = n^{-1/3} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ м}$, $\lambda = 10^{-7} \text{ м}$, $\tau_c = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ сек}$, характерная скорость $\langle \bar{c} \rangle = 300 \text{ м/сек}$, $\sigma = 10^{-18} \text{ м}^2$.

На высоте 300 км от поверхности Земли концентрация частиц $n = \rho/m_0 \sim 10^{15} \text{ м}^{-3}$, среднее расстояние между молекулами $r_* \sim 3 \cdot 10^{-5} \text{ м}$, средняя длина свободного пробега $\lambda \sim 10^3 \text{ м}$, $\tau_c \sim 1 \text{ сек}$.

Из приведенных оценок наглядно видно, что значения средних величин в газе сильно меняются с изменением плотности частиц. В частности, это касается соотношения средней длины свободного пробега и среднего расстояния между молекулами. Это поясняет тот факт, что масштабы пространственного ΔV и временного Δt осреднения, введенные в рассмотрение в п. 1.1 первой главы, могут существенно изменяться в зависимости от конкретной рассматриваемой задачи.

2.6 Коэффициенты переноса в равновесном газе

Хаотическое перемещение частиц, рассматриваемое на микроскопическом уровне, сопровождается перераспределением их числа, а также переносом каждой частицей своего импульса и энергии. Тем самым на макроскопическом уровне описания движение молекул по-

рождает три взаимосвязанных процесса переноса – это диффузия или самодиффузия, вязкость и теплопроводность.

Эти три транспортных процесса тесно связаны между собой. Во всех трех случаях потоки пропорциональны градиенту соответствующей величины. Согласно [182], эти процессы могут быть единообразно описаны с использованием основных понятий кинетической теории – а именно, в терминах средней скорости частиц и средней длины свободного пробега.

Действительно, пусть длина свободного пробега λ много меньше характерного размера задачи, связанного с градиентами макроскопических величин – плотности, скорости и давления. Рассмотрим перенос некоторой скалярной величины A через площадку единичной площади, расположенную перпендикулярно оси z , за единицу времени. Тогда нормальная составляющая потока Γ_A , протекающего за счет хаотического движения частиц через эту площадку в единицу времени, определяется как

$$\Gamma_A = -\frac{1}{3}(n\bar{v}\lambda)\frac{dA}{dz}. \quad (2.27)$$

Здесь n – плотность частиц, \bar{v} – средняя скорость хаотического движения частиц, λ – средняя длина свободного пробега. Коэффициент $1/3$ выбирается из предположения, что все три координатных направления при хаотическом движении равноправны.

Связывая величину A с концентрацией $A = n_1/n$, найдем диффузионный поток через площадку

$$\Gamma_n = j_\rho = -\frac{1}{3}(n\bar{v}\lambda)\frac{dn_1/n}{dz} = -\frac{1}{3}(\bar{v}\lambda)\frac{dn_1}{dz}. \quad (2.28)$$

Отсюда получаем выражение для коэффициента диффузии в виде

$$D = \frac{1}{3}\bar{v}\lambda. \quad (2.29)$$

Для вычисления переноса импульса через единичную площадку представим величину A как $A = m_0 u$, где u – макроскопическая скорость течения газа вдоль площадки. Тогда поток величины A ,

переносимый при случайном блуждании частиц, будет соответствовать компоненте тензора вязких напряжений

$$\Gamma_A = \Pi = -\frac{1}{3}(n\bar{v}\lambda)\frac{m_0 du}{dz} = -\frac{1}{3}(\rho\bar{v}\lambda)\frac{du}{dz}. \quad (2.30)$$

Таким образом, получаем кинетическую оценку для коэффициента вязкости – формулу Максвелла

$$\mu = \frac{1}{3}\rho\bar{v}\lambda. \quad (2.31)$$

Связывая значение A с тепловой энергией частицы $A = m_0\bar{v}^2/2$ и заменяя v^2 на наиболее вероятную скорость $v^2 = c^2 = 2\mathcal{R}T$, получим выражение для потока тепла через площадку

$$\Gamma_A = q_z = -\frac{1}{3 \cdot 2}(n\bar{v}\lambda)\frac{d}{dz}m_0 2\mathcal{R}T = -\frac{1}{3}(n\bar{v}\lambda)k_B\frac{dT}{dz}. \quad (2.32)$$

То есть коэффициент теплопроводности имеет вид

$$\kappa = \frac{1}{3}n\bar{v}\lambda k_B = \frac{1}{9}\rho\bar{v}\lambda c_v, \quad (2.33)$$

где $c_v = 3k_B/m_0$ — теплоемкость единицы массы при постоянном объеме для одноатомного газа. Полученные на основе простых кинетических оценок значения коэффициентов диффузии, вязкости и теплопроводности оказываются связанными между собой и пропорциональны длине свободного пробега λ и средней скорости хаотического движения частиц \bar{v} . Определяя \bar{v} как среднюю тепловую скорость (2.18), получим известные выражения для всех трех коэффициентов переноса при $Sc = 1$ и $Pr = 1$, а также связь длины свободного пробега с коэффициентом вязкости, которая отличается от формулы Чепмена (см. раздел 3.4) численным коэффициентом порядка единицы.

Таким образом, упрощенное рассмотрение процессов переноса в равновесном газе позволяет получить качественно правильные выражения для коэффициентов диффузии, вязкости и теплопроводности. Все три процесса переноса представляются равноправными и все три явно присутствуют в КГД уравнениях. В систему Навье–Стокса входят только два из них — перенос импульса и тепловой энергии, связанные с коэффициентами вязкости и теплопроводности.

2.7 Численное моделирование течений разреженного газа

2.7.1 Общие замечания

Характеристикой степени разреженности газодинамического течения является число Кнудсена $Kn = \lambda/L$, представляющее собой отношение средней длины свободного пробега молекул λ к характерному линейному размеру задачи L . Обычно газ рассматривается как плотный, если $Kn \rightarrow 0$ (на практике $Kn < 0.01$). Условия, при которых $Kn \rightarrow \infty$ (на практике $Kn > 10$), характерны для свободно-молекулярных течений, когда столкновения между частицами практически отсутствуют. При промежуточных числах Kn газ считается разреженным.

Методы расчета свободномолекулярных режимов к настоящему времени достаточно хорошо разработаны. Для этих задач столкновениями частиц между собой можно пренебречь и учитывать только взаимодействие частиц со стенками. Распределение частиц по скоростям с большой точностью можно считать известным, например, равновесным с функцией распределения $f^{(0)}$. Основной проблемой при этом является описание взаимодействия частиц со стенками. Этот процесс можно приближенно описать с помощью коэффициента аккомодации, который обозначается через σ . Простейшими моделями здесь являются: полная аккомодация частиц на стенке, или так называемое диффузное отражение, которое соответствует значениям $\sigma = 1$, и модель зеркального отражения, в которой полагается $\sigma = 0$.

Под умеренно-разреженным течением газа понимают такие течения, когда число Кнудсена лежит в диапазоне порядка от 0.01 до 0.1, в зависимости от рассматриваемой задачи. Течения умеренно-разреженного газа представляют собой область, находящуюся на границе применимости кинетического подхода и подхода, связанного с решением моментных уравнений. Расчет таких течений методами кинетической теории требует неоправданно больших вычислительных ресурсов, что обусловлено высокой плотностью газа. В то же время уравнения Навье–Стокса, полученные в приближении

$Kn \rightarrow 0$, теряют свою точность при анализе указанных режимов.

Для расчета течений умеренно-разреженного газа в рамках моментных уравнений возникает необходимость учета отклонения от режима сплошной среды, в первую очередь вблизи обтекаемой поверхности. Для этого используются специальные граничные условия.

Для всех чисел Кнудсена, как бы малы они ни были, вблизи стенки существует слой газа, толщина которого имеет порядок средней длины свободного пробега молекул — так называемый слой Кнудсена. Для того, чтобы в рамках макроскопических уравнений учесть влияние этого слоя на поле течения, вводятся граничные условия, представляющие собой условия скольжения для скорости и скачка для температуры.

Первый вариант таких условий был выписан Максвеллом в предположении диффузного характера отражения молекул от стенки¹. В настоящее время в литературе имеется много вариантов таких условий, которые приведены, например, в книгах [65, 78, 134]. Все они имеют одинаковую структуру и отличаются между собой лишь численными коэффициентами порядка единицы. Приведем здесь условия в форме Смолуховского, где по сравнению с классическими условиями Максвелла учтено значение коэффициентов аккомодации для скорости σ_u и энергии σ_e , которые могут быть различными, а также учтено влияние градиента температуры вдоль стенки:

$$u_s = \frac{2 - \sigma_u}{\sigma_u} \lambda \left(\frac{\partial u_n}{\partial n} \right)_s + \frac{4}{3} \left(\frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial s} \right)_s,$$

$$T_s - T_w = \frac{2 - \sigma_e}{2\sigma_e} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{\lambda}{Pr} \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s,$$

где u_n и u_s — нормальная составляющая скорости газа вблизи стенки и скорость скольжения вдоль стенки, n и s — координаты вдоль внешней нормали к стенке и вдоль стенки, T_s — температура газа вблизи стенки и T_w — температура стенки.

Для большинства материалов в условиях сверхзвукового обтекания коэффициенты аккомодации для скорости и энергии можно

¹Maxwell J.C. Philos. Trans. R. Soc., London, 1879, v.170, p.231

полагать одинаковыми и близкими к единице. В формуле для скорости скольжения второе слагаемое начинает играть заметную роль лишь при числах Кнудсена, приближающихся к единице [19].

Течения газа в диапазоне чисел Кнудсена 0.1 – 10 представляют собой существенную сложность для аналитического исследования и численного моделирования, так как в этом диапазоне не удается выделить малый параметр по числу Кнудсена типа Kn или $1/Kn$. В этом диапазоне применяются методы кинетической теории. Численный анализ течений проводится либо путем непосредственного решения уравнения Больцмана или его упрощенных вариантов, либо на основе методов прямого численного моделирования – методов Монте–Карло, или DSMC методов [12], [134].

Сложности использования этих подходов связаны с большими затратами машинного времени при моделировании этапа столкновений частиц и большой размерностью задачи в целом, которая рассматривается в пространстве 7 измерений $(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$. Дополнительная сложность вызвана необходимостью вычисления осредненных характеристик для получения измеряемых газодинамических величин – скорости, плотности и давления. В рамках DSMC подхода дополнительные трудности представляют расчеты нестационарных течений и течений с малыми, то есть дозвуковыми скоростями, поскольку такие расчеты сопровождаются значительными флуктуациями вычисляемой плотности частиц.

2.7.2 Метод Монте-Карло

В широком смысле слова методами Монте–Карло называют основанные на моделировании случайных величин методы решения различных задач из таких областей, как статистическая физика, вычислительная математика, теория игр, математическая экономика и многие другие [56].

Метод прямого численного моделирования для расчета течений разреженного газа (DSMC – Direct Simulation Monte–Carlo, или ПММК – прямое моделирование Монте–Карло) был разработан в 1960-х годах австралийским ученым Г.А. Бердом (G.A. Bird) и усовершенствован впоследствии [12, 134].

В газовой динамике нашел применение вариант метода Монте–Карло, основанный на моделировании реального течения газа посредством относительно небольшого числа молекул. То есть проводится численный эксперимент, в котором прослеживается история ограниченного числа частиц, каждая из которых является представителем большого числа W реальных молекул. Величина W называется "весовым множителем" (weighting factor).

Для каждой из молекул запоминаются ее координаты, скорость и энергия. По этим величинам путем осреднения по всем частицам определяются газодинамические параметры течения.

Для стационарных задач расчет начинается с задания некоторого достаточно произвольного распределения частиц в расчетной области, которое с течением времени эволюционирует к своему равновесному состоянию. Далее перечислены основные этапы DSMC метода.

Дискретизация и моделирование движения частиц

Область течения разбивается на пространственные ячейки, причем такие, чтобы изменение газодинамических параметров течения в каждой ячейке было малым. Размер ячейки имеет порядок средней длины свободного пробега λ . Для эффективности счета число частиц в каждой пространственной ячейке не должно сильно различаться и составлять порядка нескольких десятков.

Моделирование физического движения молекул проводится посредством дискретных шагов по времени Δt , малых по сравнению со средним временем между столкновениями молекул, $\Delta t < \tau_c$. Движение молекул и межмолекулярные столкновения на временном интервале моделируются последовательно. На каждом шаге по времени Δt движение частиц разбивается на два этапа и описывается в рамках кинетической модели, которая представляет собой циклически-повторяющийся процесс бесстолкновительного разлета частиц и последующих столкновений, которые рассматриваются как мгновенные. Эта модель соответствует двум этапам расчета.

- **Перемещение**

На первом этапе все молекулы перемещаются на расстояние,

определяемое их скоростями $\vec{\xi}\Delta t$. Учитываются пересечения молекулами поверхностей твердых тел, линий и плоскостей симметрии и границ течения. При наличии потока внутрь области на соответствующих границах генерируются новые молекулы. Если молекула покидает область расчета, то она исчезает.

- **Столкновения**

На втором этапе моделируются столкновения между молекулами с последующей коррекцией молекулярных скоростей. Выбор очередной сталкивающейся пары частиц проводится в пределах одной ячейки и производится на основе данных генератора случайных чисел. Предполагается, что сталкиваются только те частицы, которые находятся в одной пространственной ячейке.

Важной частью метода прямого моделирования является вычисление числа столкновений. Частота столкновений ν определяется свойствами реального газа, для которого решается задача, и именно эта величина определяет диссипативные характеристики течения — коэффициенты вязкости μ и теплопроводности κ моделируемого газа.

Расчет макроскопических характеристик

Для вычисления макроскопических параметров газа ρ , \vec{u} , p , T — запоминаются и аккумулируются данные для всех молекул. Затем происходит дополнительное осреднение по последовательности расчетов, чтобы сгладить статистические флуктуации, возникающие в процессе вычислений.

2.8 Разностная аппроксимация уравнения Больцмана и кинетически-согласованные разностные схемы

Численное решение уравнения Больцмана (2.1) представляет собой существенные сложности, связанные с большой размерностью зада-

чи и проблемами аппроксимации и вычисления интеграла столкновений. Развитые для этой задачи численные алгоритмы приведены, в частности, в [9, 124].

Левая часть уравнения (2.1) имеет вид уравнения переноса функции f со скоростью $\vec{\xi}$, и может быть аппроксимирована с помощью разностной схемы первого порядка точности с направленными разностями — схемы Куранта–Исааксона–Рисса. При согласованном выборе шагов по времени и по пространству $h = |\xi|\Delta t$ эта разностная схема описывает перенос заданного возмущения функции f без искажений [87, 88].

Приведем вид соответствующей разностной схемы для одномерного пространственного течения в отсутствие внешних сил на равномерной пространственной сетке с шагом $h = x_{i+1} - x_i$ и шагом по времени $\Delta t = t^{j+1} - t^j$

$$\begin{aligned} \frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + \xi_x \frac{f_i - f_{i-1}}{h} &= \mathcal{I}(f, f)_{h,i}, \quad \xi_k > 0, \\ \frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + \xi_x \frac{f_{i+1} - f_i}{h} &= \mathcal{I}(f, f)_{h,i}, \quad \xi_k < 0. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Здесь ξ_k — компонента скорости частицы, $f = f^j = f(x_i, \vec{\xi}, t^j)$, $\mathcal{I}(f, f)_{h,i}$ — разностный аналог интеграла столкновений.

Разностная схема (2.34) тождественным образом преобразуется к эквивалентному виду

$$\begin{aligned} \frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + \xi_k \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \\ - \frac{h}{2} |\xi_k| \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} &= \mathcal{I}(f, f)_{h,i}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Пусть для разностного аналога интеграла столкновений $\mathcal{I}(f, f)_{h,i}$ выполняются условия ортогональности сумматорным инвариантам $h(\vec{\xi})$. Разностную схему (2.35) можно осреднить в пространстве скоростей, предполагая, что $f = f^{(0)}$. При этом все интегралы удается вычислить аналитически и сразу построить разностную схему для

газодинамических величин – плотности ρ , скорости \vec{u} и энергии E [30, 51, 105, 106, 114].

Полученная схема оказывается довольно громоздкой, поскольку она включает в себя интегралы ошибок, возникающие при осреднении модулей скоростей ξ_k . Тем не менее эта схема оказалась весьма эффективной для решения уравнений Эйлера и была использована при проведении расчетов как одномерных, так и некоторых двумерных сверхзвуковых газодинамических течений. Позднее близкие по структуре разностные уравнения были получены в работе [144].

Заменим в разностной схеме (2.35) коэффициент перед последним слагаемым, полагая $|\xi| \sim c$, где c – скорость звука. Вводя в рассмотрение время $\tau = h/2c$, характеризующее скорость пересечения частицей разностной ячейки, получим

$$\frac{h}{2}|\xi_k| = \frac{h\xi_k^2}{2|\xi_k|} = \frac{h}{2c}\xi_k^2 = \tau\xi_k^2. \quad (2.36)$$

Схема (2.35) примет вид

$$\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + \xi_k \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \tau\xi_k^2 \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = \mathcal{I}(f, f)_{h,i}. \quad (2.37)$$

Выражение (2.37) в случае $f = f^{(0)}$ также допускает аналитическое осреднение с сумматорными инвариантами $h(\vec{\xi})$ и приводит к построению более изящной по сравнению с предыдущим случаем системы разностных уравнений для описания макроскопических величин в газе. Полученные таким образом схемы были названы кинетически-согласованными разностными схемами – КСРС.

С использованием принятых в [92] обозначений для центрально-разностных производных первого и второго порядка по пространству, перепишем разностную схему (2.37) в виде

$$\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} + (f\xi_k)_{\hat{x}} - \tau(f\xi_k\xi_k)_{\bar{x}x} = \mathcal{I}(f, f)_{h,i}. \quad (2.38)$$

Здесь $f_{\hat{x}} = (f_{i+1} - f_{i-1})/h$ – центральная разностная производная первого порядка, $f_x = (f_{i+1} - f_i)/h$ и $f_{\bar{x}} = (f_i - f_{i-1})/h$ – левая и правая разностные производные, $f_{\bar{x}x} = (f_x - f_{\bar{x}})/h$ – центральная разностная производная второго порядка.

Применяя введенные обозначения, запишем КСРС для случая плоского одномерного течения в виде

$$\begin{aligned} \frac{\rho_i^{j+1} - \rho_i^j}{\Delta t} + (\rho u)_{\bar{x}} &= \tau(\rho u^2 + p)_{\bar{x}x}, \quad (2.39) \\ \frac{(\rho u)_i^{j+1} - (\rho u)_i^j}{\Delta t} + (\rho u^2 + p)_{\bar{x}} &= \tau(\rho u^3 + 3pu)_{\bar{x}x}, \\ \frac{E_i^{j+1} - E_i^j}{\Delta t} + (u(E + p))_{\bar{x}} &= \tau(u^2(E + 2p))_{\bar{x}x} + \tau\left(\frac{p}{\rho}(E + p)\right)_{\bar{x}x}. \end{aligned}$$

Модифицированные позднее КСРС оказались очень эффективными при численном моделировании широкого круга газодинамических течений [6–8, 24, 25, 30, 31, 50–52, 105, 106].

Дифференциальные аналоги этих схем легли в основу первых вариантов КГД уравнений.

Глава 3

Квазигазодинамические уравнения

В этой главе приведено два варианта построения квазигазодинамической системы уравнений, которые позволяют получить конкретный вид выписанных ранее без вывода выражений для векторов плотности потока массы \vec{j}_m , тензора вязких напряжений Π и вектора теплового потока \vec{q} .

Первый вариант основан на использовании достаточно простой кинетической модели движения частиц. Эта модель представляет собой циклически-повторяющийся процесс бесстолкновительного разлета и последующих столкновений частиц с установлением максвелловского равновесия. Изложенный вывод КГД уравнений устанавливает связь параметра сглаживания τ с максвелловским временем релаксации. Построенные таким образом КГД уравнения представляются затем в виде законов сохранения. При этом выражения для \vec{j}_m , Π и \vec{q} записываются как соответствующие выражения для уравнений Навье–Стокса с добавками, пропорциональными τ . Показано, что для стационарных течений эти дополнительные слагаемые имеют второй порядок малости по τ . На основе этого рассмотрения получен вид диссипативных коэффициентов и выписаны их обобщения.

Второй вариант базируется на рассмотрении законов сохранения массы, импульса и энергии для малого, но конечного неподвижного объема, где при выполнении осреднения учитывается нестационарность газодинамических величин во времени. Этот подход позволяет построить КГД систему для течений в присутствии внешних сил и источников тепла. Здесь же приведен вывод уравнения баланса энтропии. Это уравнение демонстрирует диссипативный характер возникающих дополнительных слагаемых.

Изложение этих результатов приведено в соответствии с работами [43, 49–53, 114, 115, 146, 158].

3.1 Регуляризованное кинетическое уравнение

Решение интегро-дифференциального уравнения Больцмана является сложной задачей, поэтому к настоящему времени развиты упрощенные кинетических модели, которые позволяют находить приближенные решения отдельных задач. Многие модели основаны на идее расщепления задачи по физическим процессам, которая иначе называется принцип суммарной аппроксимации. Именно такой подход лежит в основе DSMC метода, описанного в п. 2.7.2.

Рассмотрим кинетическую модель, которая использовалась в [9] для численного моделирования разреженных течений в рамках уравнения Больцмана, и на основе которой впервые была получена система квазигазодинамических уравнений.

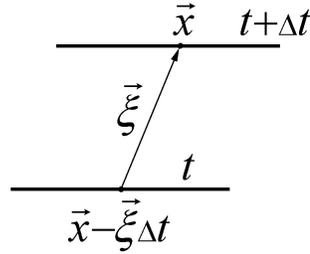


Рис. 3.1. Схема, поясняющая кинетическую модель

Эта модель представляет движение газа как циклически повторяющийся процесс, состоящий из двух этапов: это бесстолкновительный разлет молекул газа и последующее мгновенное установление термодинамического равновесия за счет столкновения частиц — этап мгновенной максвеллизации. Схематическое изображение этой модели приведено на рис. 3.1. Детальный анализ этой модели и вариантов полученных на ее основе модельных кинетических уравнений приведен в [51, 52, 105, 106] и здесь не обсуждается.

Пусть в некоторый момент времени $t = t_1$ функция распределения имеет локально-максвелловский вид:

$$f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \frac{\rho}{(2\pi\mathcal{R}T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2\mathcal{R}T}\right). \quad (3.1)$$

Затем в течение времени Δt происходит бесстолкновительный раз-

лет молекул, который описывается уравнением Больцмана для свободномолекулярного течения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})f = 0.$$

Это уравнение представляет собой линейное уравнение переноса и имеет точное решение

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f_0(\vec{x} - \vec{\xi}t, \vec{\xi}), \quad (3.2)$$

где $f_0 = f_0(\vec{x}, \vec{\xi})$ — известная функция распределения в момент времени $t = 0$.

Далее, в момент времени $t = t_2 = t_1 + \Delta t$ функция распределения f мгновенно вновь становится локально-максвелловской (3.1), но уже с новыми значениями макроскопических параметров ρ , \vec{u} и T . Мгновенная максвеллизация имитирует этап столкновения молекул, который в уравнении Больцмана описывается интегралом столкновений $\mathcal{I}(f, f)$. Затем оба этапа циклически повторяются.

Считая время бесстолкновительного разлета Δt достаточно малым, разложим функцию распределения (3.2) в ряд Тейлора, полагая функцию f_0 максвелловской $f_0 = f^{(0)}$. Ограничиваясь членами второго порядка малости по Δt , получим:

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f^{(0)} - \Delta t (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) f^{(0)} + \frac{\Delta t^2}{2} (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) f^{(0)}. \quad (3.3)$$

Параметр разложения $\Delta t \cdot \vec{\xi}$ при больших значениях скоростей $\vec{\xi}$ нельзя считать малым, и отбрасываемые при таком разложении члены могут оказаться существенными. Однако в данном случае их вкладом при $|\vec{\xi}| \gg \sqrt{2\mathcal{R}T}$ можно пренебречь, так как сама функция распределения $f^{(0)}$ и все ее производные экспоненциально убывают с ростом $\vec{\xi}$.

В равенстве (3.3) перенесем все слагаемые в левую часть и разделим обе части уравнения на Δt , заменяя разностную производную по времени в первом слагаемом на дифференциальную. В результате получим уравнение для функции распределения в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) f^{(0)} - (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\Delta t}{2} (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) f^{(0)} = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}.$$

Здесь в правую часть полученного уравнения добавлен интеграл столкновений в БГК приближении, обеспечивающий релаксацию функции распределения на новом временном слое к максвелловскому распределению.

Отождествляя временной интервал $\Delta t/2$ с максвелловским временем релаксации τ , получим окончательный вид регуляризованного кинетического уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})f^{(0)} - (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})\tau(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})f^{(0)} = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}. \quad (3.4)$$

Заметим, что это уравнение представляет собой дифференциальный аналог разностной схемы Куранта–Иссаксона–Рисса для БГК уравнения, выписанной в виде (2.38) для случая $\tau = \text{const}$.

При осреднении уравнения (3.4) с сумматорными инвариантами, как будет показано далее, получается система КГД уравнений для $\gamma = 5/3$, $Pr = 1$, $Sc = 1$.

Уравнение (3.4) формально можно выписать исходя из уравнения Больцмана в БГК приближении:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})f = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}, \quad (3.5)$$

заменяя функцию распределения в конвективном слагаемом уравнения (3.5) на ее приближенное значение вида

$$f = f^{(0)} - \tau(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})f^{(0)}. \quad (3.6)$$

Заметим, что формальная замена функции распределения f в конвективном слагаемом (3.5) на функцию распределения Навье–Стокса (2.11) позволяет, после осреднения с сумматорными инвариантами, получить систему уравнений Навье–Стокса.

В [158] было показано, что соотношения (2.11) и (3.6) могут быть представлены в идентичном виде как

$$f = f^{(0)}(1 + \tau\mathcal{P}^3(\xi_i)),$$

где $\mathcal{P}^3(\xi_i)$ — полином третьей степени. При этом коэффициенты полиномов для обеих функции распределения оказываются близкими.

Регуляризованное кинетическое уравнение (3.4) построено здесь с использованием большого числа допущений, однако оно имеет целый ряд свойств, сходных со свойствами БГК уравнения. В частности, для стационарных течений показано, что если функция распределения f удовлетворяет БГК уравнению (3.5), то она удовлетворяет и уравнению (3.4) с точностью $O(\tau^2)$. И наоборот, если функция распределения f удовлетворяет регуляризованному кинетическому уравнению, то с точностью $O(\tau^2)$ она удовлетворяет и стационарному уравнению БГК. Таким образом, решения этих уравнений должны быть близки. Для уравнения (3.4) доказан аналог Н-теоремы Больцмана [114].

На основе регуляризованного кинетического уравнения (3.4) удастся построить КГД систему уравнений и родственные ей моментные уравнения для описания слабо-неравновесных газодинамических течений (главы 8 и 9).

3.2 Кинетический вывод КГД уравнений

Приведем способ построения квазигазодинамической системы уравнений на основе регуляризованного кинетического уравнения, описанного в предыдущем параграфе.

Последовательно интегрируя кинетическое уравнение (3.4) с весами 1, $\vec{\xi}$, $\xi^2/2$ и используя выражения

$$\begin{aligned} \rho &= \int f d\vec{\xi} = \int f^{(0)} d\vec{\xi}, \\ \rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) &= \int \frac{\vec{\xi}^2}{2} f d\vec{\xi} = \int \frac{\vec{\xi}^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi}, \quad \vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u}, \\ \frac{3}{2} \rho RT &= \int \frac{\vec{c}^2}{2} f d\vec{\xi} = \int \frac{\vec{c}^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi}, \quad Ip = \int (\vec{c} \otimes \vec{c}) f^{(0)} d\vec{\xi}, \\ \int \vec{c} f^{(0)} d\vec{\xi} &= 0, \quad \int (\vec{c} \otimes \vec{c} \otimes \vec{c}) f^{(0)} d\vec{\xi} = 0, \\ \int \vec{c} \vec{c}^2 f^{(0)} d\vec{\xi} &= 0, \quad \int (\vec{c} \otimes \vec{c}) \frac{c^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{5}{2} I \frac{p^2}{\rho}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

получим систему КГД уравнений в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = \operatorname{div} \left\{ \tau \left[\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p \right] \right\}, \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \operatorname{div} \left\{ \tau \left[\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} \otimes \vec{u}) + \right. \right. \\ \left. \left. + (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u})^T \right] \right\} + \vec{\nabla} \left\{ \tau [\operatorname{div}(p \vec{u})] \right\}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho \vec{u} \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) + p \vec{u} \right] = \\ = \operatorname{div} \left\{ \tau \left\{ \operatorname{div} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + 2 \frac{p}{\rho} \right) \vec{u} \otimes \vec{u} \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + \vec{\nabla} \left[p \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Замыкание вида (3.7), основанное на локально-максвелловской функции распределения, автоматически приводит к построению системы моментных уравнений для газа твердых сфер, то есть для $\gamma = 5/3$. Обобщение на случай произвольных молекул проводится путем выделения слагаемых с удельной внутренней энергией в предположении $\gamma = 5/3$, и затем обобщения этого выражения на случай произвольного значения γ .

Система (3.8)–(3.10), выведенная для случая произвольных криволинейных эйлеровых координат, замыкается уравнениями состояния идеального политропного газа

$$p = \rho \mathcal{R} T, \quad \varepsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}.$$

При записи уравнения энергии в последнем слагаемом имеются члены, не содержащие операций дивергенции от скорости. Из этого слагаемого можно сразу выделить слагаемые в форме теплового

потока Навье–Стокса \vec{q}_{NS} и ввести число Прандтля $Pr \neq 1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i u^i (E + p) &= \nabla_i \tau (\nabla_j (E + 2p) u^i u^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p) + \\ \frac{\gamma}{\gamma - 1} \vec{\nabla} \left(\tau \frac{p}{\rho} \vec{\nabla} p \right) + Pr^{-1} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \vec{\nabla} \left(\tau p \vec{\nabla} \frac{p}{\rho} \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Пример построения КГД уравнений для плоского одномерного течения газа детально выписан в Приложении А, где наглядно прослежены все использованные преобразования.

На основе осреднения регуляризованного кинетического уравнения с учетом внешней силы \vec{F}

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + [(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}_x) + (\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi)] f^{(0)} - \\ - [(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) + (\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi)] \tau [(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) + (\vec{F} \cdot \vec{\nabla}_\xi)] f^{(0)} = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Ю.В. Шеретов построил КГД уравнения для описания течений газа в поле внешних сил [113, 114].

Левые части системы (3.8)–(3.10) представляют собой левые части уравнений Эйлера. Правые части имеют дивергентный вид и пропорциональны малому параметру τ . При этом построенные уравнения (3.8)–(3.10) не имеют вид законов сохранения, то есть в них в явном виде не выделены тензор вязких напряжений и векторы плотности потока массы и теплового потока. Диссипативные слагаемые входящие в уравнение Навье–Стокса также явно не выделены. Преобразование построенной выше КГД системы к форме законов сохранения проведена в следующем разделе.

3.3 КГД уравнения в форме законов сохранения

Представим КГД систему в виде законов сохранения (1.54)–(1.56), которые для случая $\vec{F} = 0$ имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j}_m = 0, \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p = \operatorname{div} \Pi, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] = \operatorname{div} \vec{A} - \operatorname{div} \vec{q}. \quad (3.15)$$

Уравнение неразрывности и вектор плотности потока массы

Сравнивая уравнения переноса массы (3.8) и (3.13), найдем вектор плотности потока массы

$$\vec{j}_m = \rho\vec{u} - \tau \left(\operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p \right).$$

Или, обозначив добавку к скорости через

$$\vec{w} = \frac{\tau}{\rho} \left(\operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p \right), \quad (3.16)$$

представим \vec{j}_m в виде, предложенном ранее в первой главе, и удобном для дальнейшего анализа уравнений

$$\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w}).$$

Уравнение импульса и тензор вязких напряжений

Сопоставляя уравнения импульса (3.9) и (3.14), найдем вид тензора вязких напряжений Π . Для этого представим

$$\operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) = \operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) - \operatorname{div}(\tau \operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) \otimes \vec{u}) - \operatorname{div}(\tau \vec{\nabla}p \otimes \vec{u}).$$

Тогда (3.9) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p = & - \operatorname{div}(\tau \operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) \otimes \vec{u}) - \\ & - \operatorname{div}(\tau \vec{\nabla}p \otimes \vec{u}) + \operatorname{div} \left\{ \tau \left[\operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u} \otimes \vec{u}) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (\vec{\nabla} \otimes p\vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes p\vec{u})^T \right] \right\} + \operatorname{div} \{ I\tau \operatorname{div}(p\vec{u}) \}, \quad (3.17) \end{aligned}$$

где использовано тождество

$$\operatorname{div} \{ I\tau \operatorname{div}(p\vec{u}) \} = \vec{\nabla} \{ \tau \operatorname{div}(p\vec{u}) \}. \quad (3.18)$$

Из (3.17) и (3.14) следует, что тензор вязких напряжений Π имеет вид

$$\begin{aligned} \Pi = & -\tau \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) \otimes \vec{u} - \tau(\vec{\nabla} p \otimes \vec{u}) + \tau [\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} \otimes \vec{u}) + \\ & + (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u})^T] + I\tau \operatorname{div}(p \vec{u}). \end{aligned}$$

Представим этот тензор в виде суммы тензора вязких напряжений Навье–Стокса

$$\Pi_{NS} = \mu[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T - (2/3) I \operatorname{div} \vec{u}] + \zeta I \operatorname{div} \vec{u} \quad (3.19)$$

и некоторой добавки. Для определения вида этой добавки воспользуемся тождествами

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u}) &= p(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{u} \otimes \vec{\nabla} p), \\ (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u})^T &= p(\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T + (\vec{\nabla} p \otimes \vec{u}), \\ \operatorname{div}(p \vec{u}) &= (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + p \operatorname{div} \vec{u}, \\ \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} \otimes \vec{u}) &= \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) \otimes \vec{u} + \rho \vec{u} \otimes [(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u}]. \end{aligned}$$

Тогда Π примет вид

$$\begin{aligned} \Pi = & \tau p [(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T] + \tau \vec{u} \otimes [\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} p] + \\ & + \tau I [(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + p \operatorname{div} \vec{u}]. \end{aligned}$$

Преобразуем полученное выражение, прибавляя и вычитая величины $\tau I \gamma p \operatorname{div} \vec{u}$ и $(2/3)\tau p I \operatorname{div} \vec{u}$

$$\begin{aligned} \Pi = & \tau p [(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T - (2/3)I \operatorname{div} \vec{u}] + \\ & + \tau \vec{u} \otimes [\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} p] + \tau I [(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u}] + \\ & + \tau I p \operatorname{div} \vec{u} - \tau I \gamma p \operatorname{div} \vec{u} + (2/3)\tau p I \operatorname{div} \vec{u}. \quad (3.20) \end{aligned}$$

Группируя слагаемые, получаем:

$$\begin{aligned}
\Pi = \tau p \left[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T - (2/3)I \operatorname{div} \vec{u} \right] + \\
+ \tau p I (5/3 - \gamma) \operatorname{div} \vec{u} + \tau \vec{u} \otimes \left[\rho (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \vec{\nabla} p \right] + \\
+ \tau I \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right]. \quad (3.21)
\end{aligned}$$

Сравнивая (3.21) с видом тензора Навье–Стокса (3.19), увидим, что

$$\mu = \tau p, \quad (3.22)$$

$$\zeta = \tau p \left(\frac{5}{3} - \gamma \right).$$

Из первого соотношения сразу следует, что τ имеет смысл максвелловского времени релаксации [134].

Из полученной формулы для коэффициента объемной (второй) вязкости ζ следует, что коэффициент ζ неотрицателен и связан с наличием внутренних степеней свободы молекулы, что соответствует теоретическим представлениям, изложенным в [18, 57, 72, 78]. Действительно, для одноатомного газа $\gamma = 5/3$ и $\zeta = 0$, в противном случае, при наличии колебательных или вращательных степеней свободы молекулы, $\gamma < 5/3$ и $\zeta > 0$.

В результате этих преобразований получаем, что тензор вязких напряжений в КГД системе уравнений представляется в виде тензора вязких напряжений Навье–Стокса Π_{NS} , (3.19) и добавки, которая пропорциональна τ и обращается в нуль при $\vec{u} = 0$

$$\Pi = \Pi_{NS} + \tau \vec{u} \otimes \left[\rho (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \vec{\nabla} p \right] + \tau I \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right]. \quad (3.23)$$

Уравнение полной энергии и вектор теплового потока

В заключение рассмотрим третью пару уравнений (3.10), (3.15), из которых определим вид векторов \vec{A} и \vec{q} . Для этого запишем (3.10) в

виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] = \\ = - \operatorname{div} \left[\rho \vec{w} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \\ + \operatorname{div} \tau \left\{ \operatorname{div} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2 \frac{p}{\rho} \right) \vec{u} \otimes \vec{u} \right] + \right. \\ \left. + \vec{\nabla} \left[p \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

а (3.15) перепишем в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] = \\ = \operatorname{div} \left(\vec{j}_m \frac{p}{\rho} \right) + \operatorname{div} \vec{A} - \operatorname{div} \vec{q}. \end{aligned}$$

Сравнивая последние два выражения, найдем

$$\begin{aligned} \vec{A} - \vec{q} = - \vec{j}_m \frac{p}{\rho} - \left[\tau \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p \right] \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) + \\ + \tau \operatorname{div} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2 \frac{p}{\rho} \right) \vec{u} \otimes \vec{u} \right] + \tau p \vec{\nabla} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) + \\ + \tau \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \vec{\nabla} p, \end{aligned}$$

здесь для \vec{w} использовано представление (3.16). Приводя подобные члены, получим

$$\begin{aligned} \vec{A} - \vec{q} = - \vec{j}_m \frac{p}{\rho} - \tau \left[\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right] \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \\ + \tau \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2 \frac{p}{\rho} \right) \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \\ + \tau \vec{u}(\rho \vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2 \frac{p}{\rho} \right) + \tau p \vec{\nabla} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right), \end{aligned}$$

где мы воспользовались тождеством

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2\frac{p}{\rho} \right) \vec{u} \otimes \vec{u} \right] &= \\ &= \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2\frac{p}{\rho} \right) \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{u}(\rho \vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2\frac{p}{\rho} \right). \end{aligned}$$

Приведем подобные слагаемые

$$\begin{aligned} \vec{A} - \vec{q} &= -\vec{j}_m \frac{p}{\rho} + \tau \left[\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2\frac{p}{\rho} - \frac{u^2}{2} - \varepsilon - \frac{p}{\rho} \right] \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \\ &+ \tau \vec{u}(\rho \vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2\frac{p}{\rho} \right) + \tau p \vec{\nabla} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right). \end{aligned}$$

Применяя тождество

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) &= \vec{u} \operatorname{div}(\rho \vec{u}) + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} = \\ &= \rho \vec{u} \operatorname{div} \vec{u} + \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u}, \quad (3.24) \end{aligned}$$

получим

$$\begin{aligned} \vec{A} - \vec{q} &= -\vec{j}_m \frac{p}{\rho} + \tau p \vec{u} \operatorname{div} \vec{u} + \tau \frac{p}{\rho} \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho + \tau p(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \\ &+ \tau \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{u^2}{2} \right) + \tau \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + 2\tau p \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) + \\ &+ 2\tau \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + \tau p \vec{\nabla} \left(\frac{u^2}{2} \right) + \tau p \vec{\nabla} \varepsilon + \tau p \vec{\nabla} \left(\frac{p}{\rho} \right). \end{aligned}$$

Сгруппируем слагаемые

$$\begin{aligned} \vec{A} - \vec{q} &= -\vec{j}_m \frac{p}{\rho} + \tau p \left[\vec{\nabla} \left(\frac{u^2}{2} \right) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} \right] + \\ &+ \tau \vec{u} \left[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{u^2}{2} \right) + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p \right] + \tau \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + \\ &+ \tau p \vec{u} \operatorname{div} \vec{u} + \tau \frac{p}{\rho} \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho + \tau p \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) + \\ &+ \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + p(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right] + \tau p \vec{\nabla} \left[\frac{p}{\rho} + \varepsilon \right]. \end{aligned}$$

Применив тождества

$$\begin{aligned}(\vec{\nabla} \otimes \vec{u})\vec{u} &= \vec{\nabla} \left(\frac{u^2}{2} \right), \\(\vec{\nabla} \otimes \vec{u})\vec{u} &= (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u},\end{aligned}$$

получим

$$\begin{aligned}\vec{A} - \vec{q} &= -\vec{j}_m \frac{p}{\rho} + \tau p \left[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) - 2/3 I \operatorname{div} \vec{u} \right] \vec{u} + \\&+ \tau \vec{u} \left(\vec{u} \cdot \left[\rho (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \vec{\nabla} p \right] \right) + \tau \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right] + \\&+ \tau p \vec{u} (5/3 - \gamma) \operatorname{div} \vec{u} + \tau p \vec{\nabla} \left[\frac{p}{\rho} + \varepsilon \right] + \\&+ \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \varepsilon + p (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right] + \\&+ \tau \frac{p}{\rho} \vec{u} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \rho - \tau \rho \vec{u} p \frac{1}{\rho^2} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \rho.\end{aligned}$$

Из полученного выражения выделим тензор Π в виде (3.21)

$$\begin{aligned}\vec{A} - \vec{q} &= \Pi \vec{u} - \vec{j}_m \frac{p}{\rho} + \tau p \vec{\nabla} \left[\frac{p}{\rho} + \varepsilon \right] + \\&+ \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \varepsilon + p (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right]. \quad (3.25)\end{aligned}$$

В теории Навье–Стокса [72]

$$\vec{A}_{NS} = \Pi_{NS} \vec{u} - p \vec{u}$$

представляет собой работу поверхностных сил давления и внутреннего вязкого трения в единицу времени. По аналогии положим

$$\vec{A} = \Pi \vec{u} - p \frac{\vec{j}_m}{\rho}.$$

Остальные слагаемые в (3.25) представим как тепловой поток и обозначим через

$$\vec{q} = -\tau p \vec{\nabla} \left[\frac{p}{\rho} + \varepsilon \right] - \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \varepsilon + p (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right].$$

Выделим в тепловом потоке \vec{q} часть, связанную с потоком Навье–Стокса

$$\vec{q}_{NS} = -\varkappa \vec{\nabla} T.$$

Примем в качестве уравнений состояния — уравнения состояния идеального политропного газа

$$p = \rho \mathcal{R} T, \quad \varepsilon = \frac{\mathcal{R} T}{\gamma - 1},$$

представим формулу для теплового потока в виде

$$\vec{q} = -\tau p \frac{\gamma \mathcal{R}}{\gamma - 1} \vec{\nabla} T - \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \varepsilon + p (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right].$$

Сопоставляя формулу для \vec{q} и \vec{q}_{NS} , получим, что коэффициент теплопроводности в КГД модели определяется как

$$\varkappa = \tau p \frac{\gamma \mathcal{R}}{\gamma - 1},$$

и выражение для теплового потока \vec{q} в КГД уравнениях имеет вид

$$\vec{q} = \vec{q}_{NS} - \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \varepsilon + p (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right]. \quad (3.26)$$

Таким образом, полученная на основе кинетического уравнения (3.4) КГД система вида (3.8)–(3.10) представлена в виде законов сохранения (3.13)–(3.15). При этом вектор плотности потока массы, тензор вязких напряжений и вектор теплового потока представляются в виде суммы соответствующих величин в форме Навье–Стокса и малых добавок существенно нелинейного вида, пропорциональных коэффициенту τ (3.16, 3.23, 3.26).

3.4 Коэффициенты диссипации

3.4.1 Формулы для диссипативных коэффициентов и их обобщения

На основании кинетического вывода КГД уравнений и представления их в виде законов сохранения удается получить вид диссипативных коэффициентов μ , ζ и \varkappa . Эти коэффициенты связаны между собой через параметр τ и выражаются как

$$\mu = \tau p, \quad \zeta = \tau p \left(\frac{5}{3} - \gamma \right), \quad \varkappa = \tau p \frac{\gamma \mathcal{R}}{\gamma - 1}. \quad (3.27)$$

Именно в таком виде коэффициенты вязкости μ и теплопроводности \varkappa получаются при выводе системы уравнений Навье–Стокса методами Чепмена–Энскога из уравнения БГК. Коэффициент объемной вязкости ζ , совпадающий с формулой (3.27), был получен в [193] на основе БГК приближения для моноатомного газа, обладающего вращательными степенями свободы. Действительно, приведенная в [193] формула для этого коэффициента имеет вид

$$\zeta = \mu \frac{2i}{3(i+3)},$$

где i — число вращательных степеней свободы. Выражая общее число степеней свободы $n = i + 3$ через γ как $n = i + 3 = 2/(\gamma - 1)$, получим коэффициент объемной вязкости вида (3.27).

Вводя число Прандтля $Pr \neq 1$, запишем коэффициент теплопроводности в виде

$$\varkappa = \mu \frac{\gamma \mathcal{R}}{\gamma - 1} \frac{1}{Pr}.$$

В п. 1.5.3 с точностью до численного коэффициента была найдена связь релаксационного параметра τ и коэффициента динамической вязкости μ в виде

$$\tau = \frac{\mu}{pSc},$$

где Sc — число Шмидта. Для газа его величина близка к единице.

Уточнение коэффициента объемной вязкости для газа, обладающего вращательными степенями свободы, приведено в следующем разделе.

3.4.2 Коэффициент объемной вязкости

Диссипативные эффекты, связанные с релаксацией внутренних степеней свободы в газе, могут оказывать заметное влияние на течения с ударными волнами и на быстропеременные по времени процессы. В гидродинамических моделях эти диссипативные эффекты наиболее просто описываются в терминах так называемой второй, или объемной, вязкости. Это описание является достаточно приближенным, и его использование ограничено течениями, в которых характерные времена релаксации внутренних степеней свободы малы по сравнению с характерными гидродинамическими временами задачи [57, 72].

Как уже отмечалось ранее, коэффициент объемной вязкости ζ существенно связан с наличием внутренних степеней свободы молекул и обращается в нуль для одноатомных газов. Между тем величина этого коэффициента в ряде случаев может быть сопоставима с величиной коэффициента динамической вязкости μ .

Способы вычисления коэффициентов второй вязкости и получающиеся при этом выражения в общем случае достаточно сложны (см., например, [18, 78, 102]).

Относительно простые выражения для коэффициента второй вязкости имеются только в приближении, когда внутренние степени свободы в газе являются вращательными степенями свободы. Пример такого выражения для ζ приведен в предыдущем разделе.

Более точное выражение для коэффициента второй вязкости, зависящей от вращательных степеней свободы, предложено в [57] в виде:

$$\zeta = \frac{p\mathcal{R}}{c_V} \gamma_{rot} \tau_{rot}, \quad (3.28)$$

здесь γ_{rot} — доля внутренней энергии, содержащейся во вращательных степенях свободы.

Покажем, что это выражение отличается от полученной на основе КГД уравнений формулы для ζ (3.27) только численным коэффициентом. Для этого выразим γ_{rot} через γ :

$$\gamma_{rot} = \frac{i}{n},$$

где i — число вращательных степеней свободы, n — общее число степеней свободы. Если принять во внимание, что $n = i + 3$, где 3 — число поступательных степеней свободы, то формулу для γ_{rot} можно переписать в виде

$$\gamma_{rot} = \frac{n - 3}{n}.$$

Учитывая связь числа степеней свободы с показателем адиабаты γ

$$n = \frac{2}{\gamma - 1}$$

получим, что

$$\gamma_{rot} = \frac{3}{2} \left(\frac{5}{3} - \gamma \right). \quad (3.29)$$

Время релаксации вращательных степеней свободы τ_{rot} выражается следующим образом:

$$\tau_{rot} = Z_{rot} \tau_c,$$

где τ_c — среднее время свободного пробега молекул; Z_{rot} — коэффициент обмена энергией между вращательными и поступательными степенями свободы, который равен среднему числу межмолекулярных столкновений, необходимых для релаксации к равновесному состоянию вращательной моды. Выражения для Z_{rot} приведены, например, в [57, 134]. Эти выражения для Z_{rot} использовались для расчетов неравновесных течений в струях CO_2 [172] и N_2 [159], а также для численного моделирования структуры ударной волны в азоте [55]. Например, для азота

$$Z_{rot} = Z^\infty / [1 + (\pi^{3/2}/2)(T^*/T)^{1/2} + (\pi + \pi^2/4)(T^*/T)],$$

где $Z^\infty = 23$, $T^* = 91.5K$, если температура газа в невозмущенном потоке составляет $273K$ [57]. В этом случае значение Z_{rot} изменяется в пределах $\sim 5 - 16$ в области температур от 300 до 6000 К (рис. 3.2).

Выразим τ_c через динамическую вязкость газа μ . Средняя длина свободного пробега частиц в газе λ определяется средним временем свободного пробега частиц и средней тепловой скоростью $\langle \bar{c} \rangle$ как

$$\lambda = \tau_c \langle \bar{c} \rangle. \quad (3.30)$$

Величина средней тепловой скорости частиц в равновесном газе составляет (п. 2.5) $\langle \bar{c} \rangle = \sqrt{8\mathcal{R}T/\pi}$. Таким образом,

$$\tau_c = \frac{\lambda}{\sqrt{8\mathcal{R}T/\pi}}. \quad (3.31)$$

Средняя длина свободного пробега может быть связана с вязкостью газа как

$$\lambda = A \frac{\mu}{p} \sqrt{\mathcal{R}T}, \quad (3.32)$$

где

$$A = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

— формула Чепмена [3] или

$$A = \frac{2(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)}{15\sqrt{2\pi}}$$

— формула Берда [134]. Здесь ω — показатель степени в законе вязкости $\mu \sim T^\omega$.

Соотношения (3.31) и (3.32) позволяют выразить τ_c через динамическую вязкость газа μ в виде

$$\tau_c = A \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi}{8}}. \quad (3.33)$$

Подставив выражения для c_v , γ_{rot} (3.29) и τ_c (3.33) в (3.28), запишем исходную формулу для второй вязкости (3.28) в виде

$$\zeta = \mu \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) (\gamma - 1) A \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{8}} Z_{rot} = \mu \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) B. \quad (3.34)$$

Последняя формула (3.34) с точностью до численного множителя

$$B = (\gamma - 1) A \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{8}} Z_{rot}$$

совпадает с формулой для коэффициента второй вязкости (3.27), полученной ранее при анализе КГД уравнений. На рис. 3.2 приведены значения B (пунктир) и Z_{rot} (сплошная линия) в зависимости

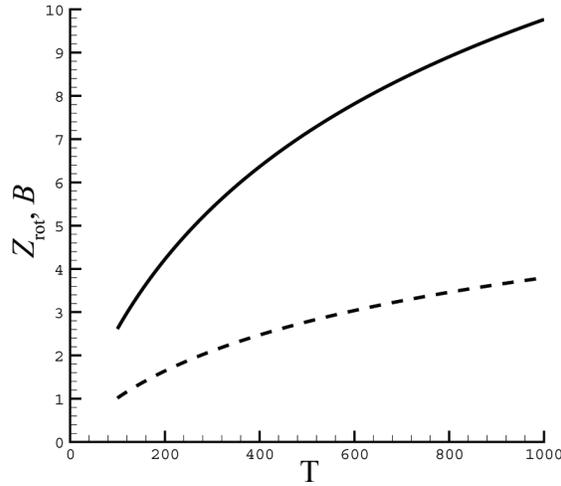


Рис. 3.2. Коэффициенты B (пунктир) и Z_{rot} (сплошная линия) для азота

от температуры для азота. Видно, что коэффициент B изменяется в пределах от 1 до 4.

Определяющую роль коэффициента объемной вязкости демонстрируют приведенные в приложении В расчеты структуры ударной волны в азоте.

3.5 Система Навье–Стокса как асимптотика КГД системы

Диссипативные слагаемые Π_{NS} и \vec{q}_{NS} , входящие в КГД уравнения, при условии достаточной гладкости соответствующих производных, имеют порядок малости $O(\mu) \sim O(\tau)$, или, в безразмерном виде, $O(Kn)$. Добавки к тензору вязких напряжений и векторам плотности потока массы и теплового потока, выписанные в п. 3.3, имеют такой же порядок малости. Покажем, что для стационарных течений эти КГД добавки имеют уже не первый, а второй порядок малости

по τ , то есть $\sim O(\tau^2)$.

В п. 3.3 величины \vec{j}_m , Π , \vec{A} и \vec{q} в КГД системе были выписаны в виде суммы соответствующих слагаемых типа Навье–Стокса и КГД добавок. Для удобства изложения приведем отдельно вид этих добавок:

$$\vec{j}_{QGD} = \tau \left[\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p \right], \quad (3.35)$$

$$\Pi_{QGD} = \tau \vec{u} \otimes \left[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \vec{\nabla} p \right] + \tau \hat{I} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right], \quad (3.36)$$

$$\vec{A}_{QGD} = \Pi_{QGD} \vec{u} - \frac{p}{\rho} \vec{j}_{QGD}, \quad (3.37)$$

$$\vec{q}_{QGD} = \tau \rho \vec{u} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \varepsilon + p(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) \right]. \quad (3.38)$$

Здесь \hat{I} — единичный тензор.

Покажем, что в стационарном случае выписанные величины формально имеют второй порядок малости $O(\tau^2)$.

Для доказательства используем подход, изложенный в [114]. Запишем систему (3.8)–(3.10) в стационарном случае:

$$\operatorname{div}(\rho \vec{u}) = M, \quad (3.39)$$

$$\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \vec{I}, \quad (3.40)$$

$$\operatorname{div} \left[\rho \vec{u} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + p \vec{u} \right] = E. \quad (3.41)$$

Здесь правые части соответствующих уравнений обозначены как

$$\begin{aligned} M &= \operatorname{div} \left\{ \tau \left[\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p \right] \right\}, \\ \vec{I} &= \operatorname{div} \left\{ \tau \left[\operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes p \vec{u})^T \right] \right\} + \\ &\quad + \vec{\nabla} \left\{ \tau [\operatorname{div}(p \vec{u})] \right\}, \\ E &= \operatorname{div} \left\{ \tau \left\{ \operatorname{div} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + 2 \frac{p}{\rho} \right) \vec{u} \otimes \vec{u} \right] + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \vec{\nabla} \left[p \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] \right\} \right\}. \end{aligned}$$

Сразу заметим, что

$$M \sim O(\tau), \quad \vec{I} \sim O(\tau), \quad E \sim O(\tau). \quad (3.42)$$

КГД добавка к вектору потока массы

Из (3.35), (3.40) и (3.42) следует, что

$$\vec{j}_{QGD} = \tau \vec{I} \sim O(\tau^2).$$

КГД добавка к тензору вязких напряжений

Применяя тождество (3.24), преобразуем (3.40)

$$\vec{u} \operatorname{div}(\rho \vec{u}) + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} p = \vec{I}. \quad (3.43)$$

Тогда первое слагаемое в Π_{QGD} запишется в виде

$$\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} p = \vec{I} - \vec{u} \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = \vec{I} - \vec{u} M. \quad (3.44)$$

Раскроем дивергенцию в (3.41), учитывая $\varepsilon = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}$

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \left[\rho \vec{u} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + p \vec{u} \right] &= \frac{u^2}{2} \operatorname{div}(\rho \vec{u}) + \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \\ &+ \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + p \operatorname{div} \vec{u} \right]. \end{aligned}$$

Откуда следует, что

$$\gamma \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + p \operatorname{div} \vec{u} \right] = (\gamma - 1) \left(E - \frac{u^2}{2} M - \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} \right).$$

Далее прибавим и вычтем $(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p$

$$\begin{aligned} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} &= (\gamma - 1) \times \\ &\times \left(E - \frac{u^2}{2} M - \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p \right). \end{aligned} \quad (3.45)$$

Преобразуем выражение $(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p$. Для этого умножим скалярно (3.43) на \vec{u} . В результате получим

$$(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p = (\vec{u} \cdot \vec{I}) - u^2 M - \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u}.$$

Итак, учитывая (3.5), запишем (3.45) следующим образом

$$(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + p \operatorname{div} \vec{u} = (\gamma - 1) \left(E - \frac{u^2}{2} M - (\vec{u} \cdot \vec{I}) \right).$$

Преобразуя (3.44) с учетом (3.45), окончательно получим

$$\Pi_{QGD} = \tau \vec{u} \otimes (\vec{I} - \vec{u}M) + \tau I (\gamma - 1) \left(E - \frac{u^2}{2} M - (\vec{u} \cdot \vec{I}) \right).$$

Из последнего равенства следует, что $\Pi_{QGD} \sim O(\tau^2)$.

КГД добавка к вектору работы сил давления и вязкого трения

Из (3.35), (3.36) и (3.37) вытекает, что $A_{QGD} \sim O(\tau^2)$.

КГД добавка к вектору теплового потока

Преобразуем левую часть выражения (3.41)

$$E = \frac{u^2}{2} M + \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \varepsilon M + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p + p \operatorname{div} \vec{u}$$

и выразим

$$\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + p \operatorname{div} \vec{u} = E - M \left(\varepsilon + \frac{u^2}{2} \right) - \rho \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})p.$$

Из (3.39) выразим $\operatorname{div} \vec{u}$ как

$$\operatorname{div} \vec{u} = \frac{M - (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\rho}{\rho} = \frac{M}{\rho} + \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right). \quad (3.46)$$

Учитывая (3.5) и (3.46), получим

$$\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\varepsilon + p \rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{\rho} \right) = E - M \left(\varepsilon - \frac{u^2}{2} - \frac{p}{\rho} \right) - (\vec{u} \cdot \vec{I}). \quad (3.47)$$

Из (3.47) и (3.38) следует, что

$$\vec{q}_{QGD} = \tau \vec{u} \left[E - M \left(\varepsilon - \frac{u^2}{2} - \frac{p}{\rho} \right) - (\vec{u} \cdot \vec{T}) \right].$$

Из последнего соотношения заключаем, что $\vec{q}_{QGD} \sim O(\tau^2)$.

Результаты, полученные в этом разделе, означают, что для стационарных течений КГД уравнения аппроксимируют систему Навье–Стокса с точностью $O(\tau^2)$, или, в безразмерном виде, с точностью $O(Kn^2)$ при достаточной гладкости соответствующих пространственных производных. Таким образом, можно полагать, что при стремлении величины τ к нулю, решение КГД уравнений с соответствующим порядком сходится к решению системы уравнений Навье–Стокса. Заметим, что для нестационарных течений аппроксимацию второго порядка доказать не удастся.

Другой важной асимптотикой уравнений гидродинамики является приближение пограничного слоя [72, 79]. Было показано (см., например, [51, 105, 114]) что приближением пограничного слоя для КГД уравнений, так же как и для уравнений Навье–Стокса, служат уравнения Прандтля. Вид уравнений Прандтля для двумерных течений приведен в приложении В.

3.6 КГД уравнения для течений газа при наличии внешних сил и тепловых источников

В этом разделе приведен другой способ построения КГД системы. С его помощью построены уравнения для описания течений в присутствии внешних сил и источников тепла. Полученные системы можно использовать для численного моделирования целого ряда актуальных задач, например, задачи горения, исследования возможностей управления потоками с помощью энерговложения, расчетов активных сред в резонаторах газовых лазеров, течений излучающего или поглощающего газа [105].

Для построения КГД системы следуя методике, изложенной в [114], выпишем систему уравнений Эйлера для идеального политропного газа

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i = 0, \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_i u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} p = \rho F_i, \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) = \rho u_i F_i + Q \quad (3.50)$$

с уравнениями состояния

$$p = \rho \mathcal{R} T, \quad \varepsilon = \frac{\mathcal{R}}{\gamma - 1} T, \quad (3.51)$$

и следующие из нее дифференциальные тождества

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\rho} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i = 0, \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_i + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} p - F_i = 0, \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \varepsilon + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon + \frac{p}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i - \frac{Q}{\rho} = 0, \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p + \gamma p \frac{\partial}{\partial x_i} u_i - (\gamma - 1) Q = 0. \quad (3.55)$$

Здесь и далее использованы обычные обозначения: ρ — удельная плотность, u_i — компонента скорости, p — давление, F_i — компонента внешней силы, ε — удельная внутренняя энергия, Q — мощность тепловых источников. В формулах подразумевается суммирование по повторяющимся индексам. Справедливость тождеств (3.52)–(3.55) можно проверить непосредственной подстановкой в них выражений для производных по времени из уравнений Эйлера (3.48)–(3.50) с последующим приведением подобных слагаемых.

Запишем интегральные законы сохранения для малого неподвижного объема V в конечно-разностном виде, заменяя производные по времени разностным отношением для моментов t и $t + \Delta t$, где

Δt — малый промежуток времени. Тогда законы сохранения массы, импульса и полной энергии можно представить, соответственно, в виде:

$$\int_V \frac{\hat{\rho} - \rho}{\Delta t} d^3x + \iint_{\Sigma} \rho^* u_i^* d\sigma_i = 0, \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\hat{\rho} \hat{u}_i - \rho u_i}{\Delta t} d^3x + \iint_{\Sigma} \rho^* u_i^* u_j^* d\sigma_j + \iint_{\Sigma} p^* d\sigma_i = \\ = \int_V \rho^* F_i d^3x + \iint_{\Sigma} \Pi_{\text{NS}ij}^* d\sigma_j, \end{aligned} \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\hat{\rho}(\hat{u}^2/2 + \hat{\varepsilon}) - \rho(u^2/2 + \varepsilon)}{\Delta t} d^3x + \\ \iint_{\Sigma} \rho^* u_i^* \left(\frac{(u^*)^2}{2} + \varepsilon^* + \frac{p^*}{\rho^*} \right) d\sigma_i + \iint_{\Sigma} q_{\text{NS}i}^* d\sigma_i = \\ = \int_V \rho^* u_i^* F_i d^3x + \iint_{\Sigma} \Pi_{\text{NS}ij}^* u_i^* d\sigma_j + \int_V Q^* d^3x. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Здесь вектор теплового потока и тензор вязких напряжений вычисляются как:

$$q_{\text{NS}i} = -\varkappa \frac{\partial}{\partial x_i} T, \quad (3.59)$$

$$\Pi_{\text{NS}ij} = \mu \left(\frac{\partial}{\partial x_i} u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} u_k \right), \quad (3.60)$$

μ и \varkappa — коэффициенты вязкости и теплопроводности. Величинами со звездочками в (3.56)–(3.58) обозначены значения газодинамических параметров в момент времени t^* , где $t < t^* < t + \Delta t$. Обозначим $\Delta t/2 = \tau$, и определим параметры газа в средней точке $t = t^*$, ограничиваясь первым порядком малости по τ :

$$\begin{aligned} \rho^* &= \rho + \tau \frac{\partial \rho}{\partial t}, \\ u_i^* &= u_i + \tau \frac{\partial u_i}{\partial t}, \\ p^* &= p + \tau \frac{\partial p}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Подставим эти выражения в формулы (3.56) – (3.58). Величины F_i и Q считаем мало меняющимися за время τ , поэтому звездочки возле них опустим. В получающихся формулах пренебрежем также слагаемыми порядка $O(\tau^2)$, $O(\tau \cdot \mu)$ и $O(\tau \cdot \varkappa)$. Возвращаясь вновь к дифференциальному виду производной по времени в интегралах по объему, получим

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho d^3x + \iint_{\Sigma} \left(\rho u_i + \tau \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i \right) d\sigma_i = 0, \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} & \int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i d^3x + \iint_{\Sigma} \left(\rho u_i + \tau \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i \right) u_j d\sigma_j + \\ & + \iint_{\Sigma} \tau \rho u_i \frac{\partial}{\partial t} u_j d\sigma_j + \iint_{\Sigma} \left(p + \tau \frac{\partial}{\partial t} p \right) d\sigma_i = \\ & = \int_V \left(\rho + \tau \frac{\partial}{\partial t} \rho \right) F_i d^3x + \iint_{\Sigma} \Pi_{NS\,ij} d\sigma_j, \quad (3.63) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) d^3x + \\ & + \iint_{\Sigma} \left(\rho u_i + \tau \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i \right) \cdot \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) d\sigma_i + \\ & + \iint_{\Sigma} \tau \rho u_i \left(u_j \frac{\partial}{\partial t} u_j + \frac{\partial}{\partial t} \varepsilon + p \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial t} p \right) d\sigma_i + \\ & + \iint_{\Sigma} q_{NS\,i} d\sigma_i = \int_V \left(\rho u_i + \tau \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i \right) F_i d^3x + \\ & + \iint_{\Sigma} \Pi_{NS\,ij} u_i d\sigma_j + \int_V Q d^3x. \quad (3.64) \end{aligned}$$

Считаем, что в нулевом по τ приближении для рассматриваемого газа справедливы уравнения Эйлера (3.48) – (3.50). Используем эти уравнения и следующие из них тождества (3.52) – (3.55) для того, чтобы исключить производные по времени в слагаемых, линейных по τ . Приведем подобные члены, сгруппируем однотипные слагаемые и используем произвольность объёма V , чтобы перейти от интегральной формы уравнений (3.62) – (3.64) к дифференциальной.

В результате получим систему квазигазодинамических уравнений в виде законов сохранения с учетом влияния внешних сил и тепловых источников:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} = 0, \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_j} j_{mj} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} p = \rho_* F_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji}, \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} q_i = \\ = j_{mi} F_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \Pi_{ij} u_j + Q, \end{aligned} \quad (3.67)$$

где введены обозначения:

$$j_{mi} = \rho(u_i - w_i), \quad (3.68)$$

$$w_i = \frac{\tau}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_i u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} p - \rho F_i \right), \quad (3.69)$$

$$\rho_* = \left(\rho - \tau \frac{\partial}{\partial x_k} \rho u_k \right), \quad (3.70)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = \Pi_{NSij} + \tau \rho u_i \left(u_k \frac{\partial}{\partial x_k} u_j + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} p - F_j \right) + \\ + \tau \delta_{ij} \left(u_k \frac{\partial}{\partial x_k} p + \gamma p \frac{\partial}{\partial x_k} u_k - (\gamma - 1) Q \right), \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$q_i = q_{NSi} - \tau \rho u_i \left(u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon + p u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{\rho} - \frac{Q}{\rho} \right). \quad (3.72)$$

3.7 Уравнение баланса энтропии

В работе [114] было показано, что в случае $Q = 0$ производство энтропии для системы (3.65) – (3.67) является неотрицательным. Обобщим этот результат на случай $Q \neq 0$.

Обозначим полную производную по времени оператором

$$D \cdot = \rho \frac{\partial}{\partial t} \cdot + \rho \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i - w_i) \cdot = \frac{\partial}{\partial t} \rho \cdot + \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \cdot$$

Будем считать, что параметры рассматриваемого нами газа удовлетворяют тождеству Гиббса

$$TDs = D\varepsilon + pD\frac{1}{\rho}.$$

Используя систему (3.65) – (3.67), получим из этого равенства уравнение для энтропии s . Перенесем в уравнении (3.66) все слагаемые в левую часть и домножим его на u_i :

$$\begin{aligned} 0 &= u_i \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_j} j_{mj} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} p - \rho_* F_i - \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji} \right) = \\ &= D\frac{u^2}{2} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p - \rho_* F_i u_i - u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji}. \end{aligned}$$

Отсюда следует соотношение

$$D\frac{u^2}{2} = -u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p + \rho_* F_i u_i + u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji}.$$

Уравнение (3.67) можно записать в виде

$$D \left(\frac{u^2}{2} + \varepsilon \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \frac{p}{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_i} q_i = j_{mi} F_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \Pi_{ij} u_j + Q,$$

откуда, используя предыдущее равенство, получаем

$$\begin{aligned}
D\varepsilon = & j_{mi}F_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji}u_i - \frac{\partial}{\partial x_i} q_i - \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \frac{p}{\rho} - \\
& - \rho_{\star} F_i u_i - u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ji} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p = (j_{mi} - \rho_{\star} u_i) F_i + \\
& + \Pi_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{\partial}{\partial x_i} q_i - \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \frac{p}{\rho} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p + Q.
\end{aligned}$$

Заметим, что

$$D \frac{1}{\rho} = \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i - w_i),$$

поэтому

$$\begin{aligned}
Ds = & \frac{1}{T} D\varepsilon + \frac{p}{T} D \frac{1}{\rho} = \\
= & \frac{1}{T} \left((j_{mi} - \rho_{\star} u_i) F_i + \Pi_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{\partial}{\partial x_i} q_i - \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \frac{p}{\rho} + \right. \\
& \left. + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p + Q \right) + \frac{p}{T} \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i - w_i) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{q_i}{T} + q_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{T} + \\
& + \frac{1}{T} \left((j_{mi} - \rho_{\star} u_i) F_i + \Pi_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \right. \\
& \left. - \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \frac{p}{\rho} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p + Q + p \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i - w_i) \right).
\end{aligned}$$

Последнее соотношение представляет собой уравнение баланса энтропии вида

$$Ds = - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{q_i}{T} + X,$$

где производство энтропии X представлено выражением

$$\begin{aligned}
X = & q_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \left((j_{mi} - \rho_{\star} u_i) F_i + \Pi_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \right. \\
& \left. - \frac{\partial}{\partial x_i} j_{mi} \frac{p}{\rho} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} p + Q + p \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i - w_i) \right). \quad (3.73)
\end{aligned}$$

Критерием физической корректности гидродинамической модели является неотрицательность производства энтропии $X \geq 0$ при $Q \geq 0$. Покажем, что указанное свойство для КГД модели выполняется. Для этого преобразуем выражение (3.73), учитывая (3.68) – (3.72). Рассмотрим отдельно каждое слагаемое, выделяя, где это возможно, неотрицательные комбинации величин.

Для первого слагаемого получим:

$$\begin{aligned} q_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{T} &= \left(-\varkappa \frac{\partial}{\partial x_i} T - \tau \rho u_i \left(u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \rho u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{\rho} - \frac{Q}{\rho} \right) \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{T} = \varkappa \left(\frac{\nabla T}{T} \right)^2 + \\ &\quad + \tau \rho u_i \left(u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon + \rho u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{\rho} - \frac{Q}{\rho} \right) \frac{1}{T^2} \frac{\partial}{\partial x_i} T = \\ &= \varkappa \left(\frac{\nabla T}{T} \right)^2 + \tau \rho \frac{u_i u_j}{T \varepsilon} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon \right) - \\ &\quad - \frac{\tau u_i u_j p}{T \varepsilon \rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \rho \right) - \frac{\tau u_i Q}{T \varepsilon} \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon. \end{aligned}$$

Преобразуем второе слагаемое

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} ((j_{mi} - \rho \star u_i) F_i) &= \frac{1}{T} \left(j_{mi} - \left(\rho - \tau \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j \right) u_i \right) F_i = \\ &= \frac{F_i}{T} \left(-\rho u_i + \tau u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j \right) = \\ &= \frac{F_i \tau}{T} \left(u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_i u_j - \frac{\partial}{\partial x_i} p + \rho F_i \right) = \\ &= \frac{\tau \rho}{T} F_i F_i - \frac{\tau \rho F_i}{T} u_j \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{\tau F_i}{T} \frac{\partial}{\partial x_i} p. \end{aligned}$$

Заметив, что

$$\frac{\Pi_{NS\ ij} \Pi_{NS\ ij}}{2\mu T} = \frac{\mu}{T} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \frac{\partial u_m}{\partial x_m} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

преобразуем следующий фрагмент в формуле для X :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{T}\Pi_{ji}\frac{\partial}{\partial x_j}u_i &= \frac{1}{T}\left(\mu\left(\frac{\partial}{\partial x_j}u_i + \frac{\partial}{\partial x_i}u_j - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial}{\partial x_k}u_k\right) + \right. \\
&\quad \left. + \tau\rho u_j\left(u_k\frac{\partial}{\partial x_k}u_i + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}p - F_i\right) + \right. \\
&\quad \left. + \tau\delta_{ij}\left(u_k\frac{\partial}{\partial x_k}p + \gamma p\frac{\partial}{\partial x_k}u_k - (\gamma-1)Q\right)\right)\frac{\partial}{\partial x_j}u_i = \\
&= \frac{\Pi_{NSij}\Pi_{NSij}}{2\mu T} + \frac{\tau\rho u_j}{T}\left(u_k\frac{\partial}{\partial x_k}u_i + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}p - F_i\right)\frac{\partial}{\partial x_j}u_i + \\
&\quad + \frac{\tau}{T}\left(u_k\frac{\partial}{\partial x_k}p + \gamma p\frac{\partial}{\partial x_k}u_k - (\gamma-1)Q\right)\frac{\partial}{\partial x_i}u_i.
\end{aligned}$$

Наконец, рассмотрим оставшиеся слагаемые:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{T}\frac{\partial}{\partial x_i}j_{mi}\frac{p}{\rho} + \frac{1}{T}u_i\frac{\partial}{\partial x_i}p + \frac{p}{T}\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i - w_i) &= \\
&= \frac{\tau}{\rho T}\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\rho u_i u_j + \frac{\partial}{\partial x_i}p - \rho F_i\right)\frac{\partial}{\partial x_i}p.
\end{aligned}$$

Собирая все фрагменты исходной формулы вместе, получаем:

$$\begin{aligned}
X &= \varkappa\left(\frac{\nabla T}{T}\right)^2 + \frac{\Pi_{NSij}\Pi_{NSij}}{2\mu T} + \frac{\tau\rho}{T}\left(u_k\frac{\partial}{\partial x_k}u_i + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}p - F_i\right)^2 + \\
&\quad + \frac{\tau\rho u_i u_j}{T\varepsilon}\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\varepsilon\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\varepsilon\right) - \frac{\tau\rho u_i u_j}{T\varepsilon\rho}\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\varepsilon\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\rho\right) - \\
&\quad - \frac{\tau u_i Q}{T\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x_i}\varepsilon + \frac{\tau}{T}\left(u_k\frac{\partial}{\partial x_k}p + \gamma p\frac{\partial}{\partial x_k}u_k - (\gamma-1)Q\right)\frac{\partial}{\partial x_i}u_i + \\
&\quad + \frac{\tau}{T}u_i\left(\frac{\partial}{\partial x_i}p\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_j}u_j\right) + \frac{\tau}{\rho T}u_i u_j\left(\frac{\partial}{\partial x_i}p\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\rho\right) + \frac{Q}{T}.
\end{aligned}$$

Для краткости здесь и далее использовано обозначение $(a_i)^2 \equiv \equiv \delta_{ij}a_i a_j$.

Используя соотношение

$$p = (\gamma - 1)\varepsilon\rho,$$

можно записать предыдущее равенство в виде

$$X = \varkappa \left(\frac{\nabla T}{T} \right)^2 + \frac{\Pi_{NS\,ij} \Pi_{NS\,ij}}{2\mu T} + \frac{\tau\rho}{T} \left(u_k \frac{\partial}{\partial x_k} u_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} p - F_i \right)^2 + \\ + \frac{\tau\rho}{T\varepsilon} \left(u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon + \frac{p}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i - \frac{Q}{\rho} \right)^2 + \frac{\tau p}{\rho^2 T} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i \right)^2 + \frac{Q}{T_\star}, \quad (3.74)$$

где

$$T_\star = T \cdot \left(1 + \tau \left(\frac{1}{\varepsilon} u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon + (\gamma - 1) \frac{\partial}{\partial x_i} u_i - \frac{Q}{\varepsilon \rho} \right) \right)^{-1}.$$

Два слагаемых равенства (3.74), содержащих величину Q , можно переписать в виде¹

$$\frac{\tau\rho}{T\varepsilon} \left(u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \varepsilon + \frac{p}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i - \frac{1}{2} \frac{Q}{\rho} \right)^2 + \frac{Q}{T} \left(1 - \frac{(\gamma - 1)\tau Q}{4\rho} \right).$$

Как видно из полученного выражения, при $Q > 0$ (при $Q < 0$ энтропия может убывать), производство энтропии является неотрицательным, если величина τ является достаточно малой

$$\frac{(\gamma - 1)Q\tau}{4\rho} \leq 1.$$

При $\tau = 0$ производство энтропии (3.74) совпадает с соответствующей величиной, вычисленной для уравнений Навье–Стокса.

¹Это преобразование было выполнено А.А.Злотником

Глава 4

КГД уравнения и системы координат

В этой главе квазигазодинамические уравнения выписаны в тензорно-индексном представлении в произвольных ортогональных координатах, что позволяет использовать КГД систему в удобной для решения задачи системе координат. Выписанный вид уравнений расширяет класс решаемых задач на сложные, в том числе трехмерные, расчетные области, в которых координатная сетка может задаваться как аналитически, так и численно. Это позволяет строить однородные разностные схемы на квазиортогональных пространственных сетках в преобразованном пространстве координат [100]. В двух последних параграфах КГД уравнения выписаны в декартовой и цилиндрической системах координат [45].

4.1 КГД уравнения в произвольной системе координат

В соответствии с [29, 66, 81] приведем формулы тензорного анализа, которые понадобятся для дальнейших выкладок.

Рассмотрим в евклидовом пространстве некоторый базис \vec{e}_j , любой вектор в котором задается координатами (x^1, x^2, x^3) . Пусть \vec{r}_i — новый базис, любой вектор в котором задается координатами $(\hat{x}^1, \hat{x}^2, \hat{x}^3)$.

Определим переход от базиса \vec{e}_j к новому базису \vec{r}_i с помощью следующего преобразования (здесь и далее подразумевается суммирование по повторяющимся индексам):

$$\vec{r}_i = b_i^j \vec{e}_j, \quad b_i^j = \frac{\partial x^j}{\partial \hat{x}^i}, \quad (4.1)$$

где b_i^j — матрица перехода от базиса \vec{e}_j к базису \vec{r}_i .

В дифференциальной геометрии и тензорном анализе вводится понятие метрического тензора, который отражает дифференциальные свойства внутренней геометрии области. Компоненты метрического тензора определяются как:

$$g_{ij} = \frac{\partial x^k}{\partial \hat{x}^i} \frac{\partial x^k}{\partial \hat{x}^j}, \quad (4.2)$$

$g \equiv \det(g_{ij})$ — определитель метрического тензора.

Рассмотрим некоторый вектор $\vec{U} = U^i \vec{e}_i$ в базисе \vec{e}_i , где U^i — координаты вектора в данном базисе. При переходе к новому нормированному базису ($\hat{e}_i = \vec{r}_i / \sqrt{|g_{ii}|}$) координаты вектора \vec{U} преобразуются по следующей формуле:

$$\hat{U}^j = U^i \bar{b}_i^j \sqrt{|g_{jj}|}, \quad U^i = \frac{\hat{U}^j}{\sqrt{|g_{jj}|}} b_j^i, \quad (4.3)$$

где $\bar{b} = b^{-1}$ — матрица обратного перехода от базиса \vec{r}_i к базису \vec{e}_j .

Координаты вектора \hat{U}^i в нормированном базисе \hat{e}_j связаны с координатами вектора U^i в базисе \vec{r}_i следующим соотношением:

$$\hat{U}^i = \sqrt{|g_{ii}|} U^i. \quad (4.4)$$

Аналогичная формула для компонент тензора Π^{ik} имеет вид:

$$\hat{\Pi}^{ik} = \sqrt{|g_{ii}| |g_{kk}|} \Pi^{ik}. \quad (4.5)$$

В формулах (4.4) и (4.5) суммирование по повторяющимся индексам не производится.

Теперь выпишем формулы тензорного анализа, необходимые для представления КГД системы уравнений в тензорно-индексном виде.

Скалярное произведение векторов:

$$(\vec{A} \cdot \vec{B}) = g_{kl} A^k B^l. \quad (4.6)$$

Ковариантная и контравариантная производная скалярной функции:

$$\nabla_i A = \frac{\partial A}{\partial x^i}, \quad \nabla^i A = g^{ij} \nabla_j A. \quad (4.7)$$

Ковариантная производная тензора первого и второго ранга:

$$\nabla_j U^i = \frac{\partial U^i}{\partial x^j} + U^m \Gamma_{mj}^i, \quad (4.8)$$

$$\nabla_i A^{ij} = \frac{\partial A^{ij}}{\partial x^i} + \Gamma_{li}^i A^{lj} + \Gamma_{mi}^j A^{im}, \quad (4.9)$$

где

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{lj}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{il}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l} \right) \quad (4.10)$$

— символы Кристоффеля второго рода.

Дивергенция вектора (частный случай (4.8) при $i = j$):

$$\nabla_i A^i = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial(\sqrt{|g|} A^i)}{\partial x^i}. \quad (4.11)$$

В дальнейшем мы рассматриваем ортогональные системы координат, в которых элементы метрических тензоров подчиняются условию $g_{ik} = g_{ii} \delta_k^i$, где δ_k^i — символ Кронекера, для которого

$$\delta_k^i = \begin{cases} 1, & \text{если } i = k \\ 0, & \text{если } i \neq k \end{cases}.$$

В системе ортогональных координат для вычисления символов Кристоффеля Γ_{ij}^k справедливы следующие соотношения:

$$\Gamma_{ij}^k = 0 \quad (i \neq j, j \neq k, k \neq i), \quad (4.12)$$

$$\Gamma_{ii}^k = -\frac{1}{2g_{kk}} \frac{\partial g_{ii}}{\partial x^k} \quad (i \neq k), \quad (4.13)$$

$$\Gamma_{ik}^k = \Gamma_{ki}^k = \frac{1}{2g_{kk}} \frac{\partial g_{kk}}{\partial x^i} = \frac{1}{2} \frac{\partial(\ln g_{kk})}{\partial x^i}. \quad (4.14)$$

Выпишем систему КГД уравнений в тензорно-индексном представлении.

Уравнение баланса массы имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{|g|} J_m^i) = 0, \quad (4.15)$$

где вектор плотности потока массы определяется как

$$j_m^i = \rho \left(\frac{\widehat{U}^i}{\sqrt{|g_{ii}|}} - w^i \right),$$

$$w^i = \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x^j} \left(\rho \frac{\widehat{U}^j}{\sqrt{|g_{jj}|}} \frac{\widehat{U}^i}{\sqrt{|g_{ii}|}} \right) + \Gamma_{lj}^j \rho \frac{\widehat{U}^l}{\sqrt{|g_{ll}|}} \frac{\widehat{U}^i}{\sqrt{|g_{ii}|}} \right] + \frac{\tau}{\rho} \left[\Gamma_{mj}^i \rho \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \frac{\widehat{U}^j}{\sqrt{|g_{jj}|}} + g^{ij} \frac{\partial p}{\partial x^j} \right].$$

Уравнение баланса импульса записывается следующим образом

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{\widehat{U}^i}{\sqrt{|g_{ii}|}} \right) + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(j_m^j \frac{\widehat{U}^i}{\sqrt{|g_{ii}|}} \right) + \Gamma_{lj}^j \left(j_m^l \frac{\widehat{U}^i}{\sqrt{|g_{ii}|}} \right) + \\ & \Gamma_{mj}^i \left(j_m^j \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \right) + g^{ij} \frac{\partial p}{\partial x^j} = \frac{\partial \Pi^{ji}}{\partial x^j} + \Gamma_{lj}^j \Pi^{li} + \Gamma_{mj}^i \Pi^{jm}, \quad (4.16) \end{aligned}$$

а компоненты тензора вязких напряжений определяются по формулам

$$\begin{aligned} \Pi^{ji} &= \tau \frac{\widehat{U}^j}{\sqrt{|g_{jj}|}} \left\{ \rho \frac{\widehat{U}^k}{\sqrt{|g_{kk}|}} \left[\frac{\partial(\widehat{U}^i/\sqrt{|g_{ii}|})}{\partial x^k} + \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \Gamma_{mk}^i \right] + g^{ik} \frac{\partial p}{\partial x^k} \right\} + \\ & \tau g^{ji} \left[\frac{\widehat{U}^k}{\sqrt{|g_{kk}|}} \frac{\partial p}{\partial x^k} + \gamma p \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^m} \left(\sqrt{|g|} \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \right) \right] + \Pi_{NS}^{ji}, \\ \Pi_{NS}^{ji} &= \mu \left\{ g^{jk} \left[\frac{\partial(\widehat{U}^i/\sqrt{|g_{ii}|})}{\partial x^k} + \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \Gamma_{mk}^i \right] \right\} + \\ & \mu \left\{ g^{ik} \left[\frac{\partial(\widehat{U}^j/\sqrt{|g_{jj}|})}{\partial x^k} + \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \Gamma_{mk}^j \right] - \right. \\ & \left. 2/3 g^{ji} \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^m} \left(\sqrt{|g|} \frac{\widehat{U}^m}{\sqrt{|g_{mm}|}} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Уравнение баланса энергии имеет вид:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{|g|} j_m^j \left(\frac{E+p}{\rho} \right) \right) + \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{|g|} q^j \right) = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{|g|} g_{kl} \Pi^{jk} \frac{\hat{U}^l}{\sqrt{|g_{ul}|}} \right), \quad (4.17)$$

где энергия и тепловой поток записываются как

$$E = \rho \left(\frac{g_{kl}}{2} \frac{\hat{U}^k}{\sqrt{|g_{kk}|}} \frac{\hat{U}^l}{\sqrt{|g_{ul}|}} + \frac{1}{\gamma-1} \frac{p}{\rho} \right),$$

$$q^j = - \frac{\mu}{Pr} \frac{\gamma}{\gamma-1} g^{jk} \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{p}{\rho} \right) - \tau \rho \frac{\hat{U}^j}{\sqrt{|g_{jj}|}} \left[\frac{1}{\gamma-1} \frac{\hat{U}^k}{\sqrt{|g_{kk}|}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{p}{\rho} \right) + p \frac{\hat{U}^k}{\sqrt{|g_{kk}|}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right].$$

Тензорно-индексный вид (4.15)–(4.17) позволяет адаптировать КГД систему уравнений к произвольным ортогональным системам координат: декартовым, цилиндрическим, сферическим, эллипсоидальным, а также к координатным системам, построенным численно.

4.2 Декартова система координат

В декартовой системе координат положим

$$\hat{x}^1 = x, \quad \hat{x}^2 = y, \quad \hat{x}^3 = z.$$

Метрический тензор имеет диагональный вид:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad g \equiv \det g_{ij} = 1. \quad (4.18)$$

Формулы (4.6)–(4.11) принимают более простой вид:

Скалярное произведение векторов:

$$(\vec{A} \cdot \vec{B}) = A^i B_i. \quad (4.19)$$

Прямое тензорное произведение векторов:

$$(\vec{A} \otimes \vec{B}) = A^i B^j. \quad (4.20)$$

Производная скалярной функции (градиент):

$$\text{grad } p = \nabla_i p = \nabla^i p = \frac{\partial p}{\partial \hat{x}^i}. \quad (4.21)$$

Производная тензора первого и второго ранга:

$$\nabla_j A^i = \frac{\partial A^i}{\partial \hat{x}^j}, \quad (4.22)$$

$$\nabla_i \Pi^{ij} = \frac{\partial \Pi^{ij}}{\partial \hat{x}^i}. \quad (4.23)$$

Дивергенция:

$$\text{div } \vec{A} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) = \nabla_i A^i = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}, \quad (4.24)$$

$$\text{div } \Pi = (\vec{\nabla} \cdot \Pi) = \nabla_i \Pi^{ij}. \quad (4.25)$$

Дивергенция от прямого тензорного произведения:

$$\text{div}(\vec{A} \otimes \vec{B}) = \nabla_i (A^i B^j). \quad (4.26)$$

Дивергенция от скалярного произведения тензора и вектора:

$$\text{div}(\Pi \cdot \vec{A}) = (\vec{\nabla} \cdot (\Pi \cdot \vec{A})) = \nabla_i (\Pi^{ij} A_j). \quad (4.27)$$

Система КГД уравнений (4.15)–(4.17) запишется в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i j_m^i = 0, \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u^j) + \nabla_i (j_m^i u^j) + \nabla^j p = \nabla_i \Pi^{ij}, \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \nabla_i \left\{ j_m^i \left[\left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) + \frac{p}{\rho} \right] \right\} + \nabla_i q^i = \nabla_i (\Pi^{ij} u_j). \quad (4.30)$$

Выражения (4.4) для искомым компонент векторов j_m^i и q^i будут вычисляться как:

$$\begin{aligned} j_{mx} &= j_m^1, & j_{my} &= j_m^2, & j_{mz} &= j_m^3, \\ q_x &= q^1, & q_y &= q^2, & q_z &= q^3. \end{aligned}$$

Система уравнений (4.28)–(4.30) в переменных x, y, z записывается как

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx}}{\partial x} + \frac{\partial j_{my}}{\partial y} + \frac{\partial j_{mz}}{\partial z} = 0, \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx} u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my} u_x)}{\partial y} + \frac{\partial(j_{mz} u_x)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial x} = \\ = \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \Pi_{zx}}{\partial z}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx} u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my} u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(j_{mz} u_y)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial y} = \\ = \frac{\partial \Pi_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \Pi_{zy}}{\partial z}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx} u_z)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my} u_z)}{\partial y} + \frac{\partial(j_{mz} u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} = \\ = \frac{\partial \Pi_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \Pi_{zz}}{\partial z}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx} H)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my} H)}{\partial y} + \frac{\partial(j_{mz} H)}{\partial z} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} (\Pi_{xx} u_x + \Pi_{xy} u_y + \Pi_{xz} u_z) + \frac{\partial}{\partial y} (\Pi_{yx} u_x + \Pi_{yy} u_y + \Pi_{yz} u_z) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} (\Pi_{zx} u_x + \Pi_{zy} u_y + \Pi_{zz} u_z). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Здесь компоненты вектора плотности потока массы \vec{j}_m имеют вид:

$$\begin{aligned} j_{mx} &= j_m^1 = \rho u_x - \tau \left(\frac{\partial(\rho u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_x u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial x} \right), \\ j_{my} &= j_m^2 = \rho u_y - \tau \left(\frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_y u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$j_{mz} = j_m^3 = \rho u_z - \tau \left(\frac{\partial(\rho u_x u_z)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y u_z)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z^2)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \right).$$

В формулах (4.36) первые слагаемые соответствуют вектору плотности потока массы Навье–Стокса, а последующие (с множителем τ в качестве коэффициента) представляют собой КГД добавки.

Элементы тензора вязких напряжений Π имеют вид:

$$\begin{aligned} \Pi_{xx} &= \Pi^{11}, & \Pi_{xy} &= \Pi^{12}, & \Pi_{xz} &= \Pi^{13}, \\ \Pi_{yx} &= \Pi^{21}, & \Pi_{yy} &= \Pi^{22}, & \Pi_{yz} &= \Pi^{23}, \\ \Pi_{zx} &= \Pi^{31}, & \Pi_{zy} &= \Pi^{32}, & \Pi_{zz} &= \Pi^{33}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{xx} &= \mu \left(2 \frac{\partial u_x}{\partial x} - \left[\frac{2}{3} - \frac{\zeta}{\mu} \right] \operatorname{div} \vec{u} \right) + \tau \gamma p \operatorname{div} \vec{u} + \\ &+ \tau \rho u_x \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) + \tau \left(2u_x \frac{\partial p}{\partial x} + u_y \frac{\partial p}{\partial y} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} \right), \end{aligned}$$

$$\Pi_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) + \tau \rho u_x \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \right),$$

$$\Pi_{xz} = \mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) + \tau \rho u_x \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right),$$

$$\Pi_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \tau \rho u_y \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right),$$

$$\begin{aligned} \Pi_{yy} &= \mu \left(2 \frac{\partial u_y}{\partial y} - \left[\frac{2}{3} - \frac{\zeta}{\mu} \right] \operatorname{div} \vec{u} \right) + \tau \gamma p \operatorname{div} \vec{u} + \\ &+ \tau \rho u_y \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) + \tau \left(u_x \frac{\partial p}{\partial x} + 2u_y \frac{\partial p}{\partial y} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} \right), \end{aligned}$$

$$\Pi_{yz} = \mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) + \tau \rho u_y \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right),$$

$$\Pi_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \tau \rho u_z \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right),$$

$$\Pi_{zy} = \mu \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) + \tau \rho u_z \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \right),$$

$$\begin{aligned} \Pi_{zz} &= \mu \left(2 \frac{\partial u_z}{\partial z} - \left[\frac{2}{3} - \frac{\zeta}{\mu} \right] \operatorname{div} \vec{u} \right) + \tau \gamma p \operatorname{div} \vec{u} + \\ &+ \tau \rho u_z \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \tau \left(u_x \frac{\partial p}{\partial x} + u_y \frac{\partial p}{\partial y} + 2u_z \frac{\partial p}{\partial z} \right). \end{aligned}$$

В выражениях для компонент тензора вязких напряжений (4.37) слагаемые с множителем μ соответствуют тензору Навье–Стокса, а слагаемые с множителем τ представляют собой КГД добавки.

Приведем далее более удобный и экономичный в численной реализации вариант записи компонент вектора плотности потока и тензора вязких напряжений для случая $\zeta = 0$:

$$j_{mx} = \rho(u_x - w_x), \quad j_{my} = \rho(u_y - w_y), \quad j_{mz} = \rho(u_z - w_z),$$

где

$$w_x = \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{\partial(\rho u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_x u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial x} \right], \quad (4.38)$$

$$w_y = \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_y u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial y} \right], \quad (4.39)$$

$$w_z = \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{\partial(\rho u_x u_z)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y u_z)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z^2)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \right]. \quad (4.40)$$

Компоненты тензора вязких напряжений Π выписаны с помощью вспомогательных величин, обозначенных индексом (*) в виде:

$$\begin{aligned} \Pi_{xx} &= \Pi_{xx}^{NS} + u_x \cdot w_x^* + R^*, & \Pi_{xx}^{NS} &= 2\mu \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \cdot \operatorname{div} \vec{u}, \\ \Pi_{xy} &= \Pi_{xy}^{NS} + u_x \cdot w_y^*, & \Pi_{xy}^{NS} &= \Pi_{yx}^{NS} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right), \\ \Pi_{xz} &= \Pi_{xz}^{NS} + u_x \cdot w_z^*, & \Pi_{xz}^{NS} &= \Pi_{zx}^{NS} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right), \\ \Pi_{yx} &= \Pi_{yx}^{NS} + u_y \cdot w_x^*, \\ \Pi_{yy} &= \Pi_{yy}^{NS} + u_y \cdot w_y^* + R^*, & \Pi_{yy}^{NS} &= 2\mu \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \cdot \operatorname{div} \vec{u}, \\ \Pi_{yz} &= \Pi_{yz}^{NS} + u_y \cdot w_z^*, & \Pi_{yz}^{NS} &= \Pi_{zy}^{NS} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right), \\ \Pi_{zx} &= \Pi_{zx}^{NS} + u_z \cdot w_x^*, \\ \Pi_{zy} &= \Pi_{zy}^{NS} + u_z \cdot w_y^*, \\ \Pi_{zz} &= \Pi_{zz}^{NS} + u_z \cdot w_z^* + R^*, & \Pi_{zz}^{NS} &= 2\mu \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \cdot \operatorname{div} \vec{u}, \end{aligned}$$

а выражения для вспомогательных величин w_x^* , w_y^* , w_z^* и R^* задаются формулами:

$$\begin{aligned} w_x^* &= \tau \left[\rho \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} \right], \\ w_y^* &= \tau \left[\rho \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} \right], \\ w_z^* &= \tau \left[\rho \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial z} \right], \\ R^* &= \tau \left[u_x \frac{\partial p}{\partial x} + u_y \frac{\partial p}{\partial y} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma \cdot p \cdot \operatorname{div} \vec{u} \right]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Компоненты вектора теплового потока \vec{q} вычисляются как:

$$\begin{aligned} q_x &= q^1 = q_x^{NS} - u_x \cdot R^q, \\ q_y &= q^2 = q_y^{NS} - u_y \cdot R^q, \\ q_z &= q^3 = q_z^{NS} - u_z \cdot R^q, \end{aligned} \quad (4.42)$$

где

$$\begin{aligned} R^q &= \tau \rho \frac{1}{\gamma - 1} \left[u_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho} \right) + u_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{p}{\rho} \right) + u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p}{\rho} \right) \right] \\ &\quad + \tau \rho p \left[u_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \right) + u_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \right) + u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.43)$$

Слагаемые Навье–Стокса q_x^{NS} , q_y^{NS} и q_z^{NS} определяются по формулам:

$$q_x^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial y}, \quad q_z^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial z}.$$

4.3 Цилиндрическая система координат

В цилиндрической системе координат положим

$$\hat{x}^1 = r, \quad \hat{x}^2 = \varphi, \quad \hat{x}^3 = z.$$

Метрический тензор имеет диагональный вид:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

а его определитель равен $g \equiv \det g_{ij} = r^2$.

Воспользуемся приведенными выше формулами тензорного анализа (4.4)–(4.11) и выпишем r , φ , z – компоненты вектора плотности потока массы \vec{j}_m , тензора вязких напряжений Π и вектора теплового потока \vec{q} .

Компоненты вектора плотности потока массы \vec{j}_m :

$$\begin{aligned}
j_{mr} &= j_m^1 = \rho u_r - \tau \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho u_r^2)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_r u_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial(\rho u_r u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial r} \right), \\
j_{m\varphi} &= r j_m^2 = \frac{\rho u_\varphi}{r} - \tau \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho u_\varphi u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(\rho u_\varphi^2)}{\partial \varphi} + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_\varphi u_z)}{\partial z} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial p}{\partial \varphi} \right), \quad (4.45) \\
j_{mz} &= j_m^3 = \rho u_z - \tau \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho u_z u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_z u_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial(\rho u_z^2)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \right).
\end{aligned}$$

В каждой из вышеприведенных формул первое слагаемое правой части соответствует вектору потока массы Навье–Стокса \vec{j}_m^{NS} , а последующие (с множителем τ в качестве коэффициента) представляют собой КГД добавки \vec{j}_m^{QGD} .

Элементы тензора вязких напряжений Π имеют вид:

$$\begin{aligned}
\Pi_{rr} &= \Pi^{11} = \mu \left(2 \frac{\partial u_r}{\partial r} - \left[\frac{2}{3} - \frac{\zeta}{\mu} \right] \operatorname{div} \vec{u} \right) + \\
&\quad + \tau \rho u_r \left(u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \\
&\quad + \tau \left(u_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r^3} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right), \\
\Pi_{r\varphi} &= r \Pi^{12} = \mu \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} \right) + \\
&\quad + \tau \rho \frac{u_r}{r} \left(r u_r \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - r^2 u_r u_\varphi + u_\varphi \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + r u_z \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \varphi} \right), \\
\Pi_{rz} &= \Pi^{13} = \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \\
&\quad + \tau \rho u_r \left(u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Pi_{\varphi r} = r\Pi^{21} &= \mu \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} \right) + \\ &+ \tau \rho u_\varphi \left(u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Pi_{\varphi\varphi} = r^2\Pi^{22} &= \frac{\mu}{r^2} \left(2\frac{u_r}{r} + 2\frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - \left[\frac{2}{3} - \zeta \frac{r^2}{\mu} \right] \operatorname{div} \vec{u} \right) + \\ &+ \tau \rho \frac{u_\varphi}{r} \left(r u_r \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} + u_\varphi \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + u_r u_\varphi + r u_z \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \varphi} \right) + \\ &+ \tau \left(u_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r^3} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Pi_{\varphi z} = r\Pi^{23} &= \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} \right) + \\ &+ \tau \rho u_\varphi \left(u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Pi_{zr} = \Pi^{31} &= \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \\ &+ \tau \rho u_z \left(u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Pi_{z\varphi} = r\Pi^{32} &= \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} \right) + \\ &+ \tau \rho \frac{u_z}{r} \left(r u_r \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} + u_\varphi \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + u_r u_\varphi + r u_z \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \varphi} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Pi_{zz} = \Pi^{33} = & \mu \left(2 \frac{\partial u_z}{\partial z} - \left[\frac{2}{3} - \frac{\zeta}{\mu} \right] \operatorname{div} \vec{u} \right) + \\ & + \tau \rho u_z \left(u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right) \\ & + \tau \left(u_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right), \end{aligned}$$

В выражениях для компонент тензора вязких напряжений слагаемые с множителем μ соответствуют тензору Навье–Стокса, а слагаемые с множителем τ являются КГД добавками.

И, наконец, выпишем компоненты вектора теплового потока \vec{q} :

$$\begin{aligned} q_r = q^1 &= q_r^{NS} - u_r \cdot R^q, \\ q_z = q^2 &= q_z^{NS} - u_z \cdot R^q, \\ q_\varphi = q^3 &= q_\varphi^{NS} - u_\varphi \cdot R^q, \end{aligned} \quad (4.46)$$

где

$$\begin{aligned} R^q = & \tau \rho \frac{1}{\gamma - 1} \left[u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{p}{\rho} \right) + u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p}{\rho} \right) + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{p}{\rho} \right) \right] \\ & + \tau \rho p \left[u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\rho} \right) + u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho} \right) + \frac{u_\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.47)$$

Слагаемые Навье–Стокса q_r^{NS} , q_z^{NS} и q_φ^{NS} определяются по формулам:

$$q_r^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial r}, \quad q_z^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial z}, \quad q_\varphi^{NS} = -\frac{\varkappa}{r^2} \frac{\partial T}{\partial \varphi}.$$

Глава 5

Численные алгоритмы решения задач газовой динамики

В этой главе приведены численные алгоритмы решения задач газовой динамики, основанные на квазигазодинамических уравнениях.

Разностные аппроксимации строятся в потоковой форме непосредственно для векторов плотности потока массы \vec{j}_m , вектора теплового потока \vec{q} и тензора вязких напряжений Π . Это соответствует записи уравнений газовой динамики в виде законов сохранения и делает алгоритм достаточно компактным и экономичным. Устойчивость разностного алгоритма обеспечивается присутствием искусственной диссипации, вид которой определяется КГД добавками. Для ясности изложения алгоритмы строятся на прямоугольных расчетных сетках. Рассматриваются одномерные и двумерные течения.

Алгоритм может использоваться для расчета как вязких, так и невязких сверхзвуковых нестационарных течений. Описана модификация численного алгоритма для расчета дозвуковых течений.

Для иллюстрации работы численных алгоритмов приведены результаты расчетов одномерной задачи о распаде сильного разрыва, и двумерных задач об осесимметричном течении в окрестности цилиндра и плоском течении в канале с прямой и обратной ступенькой. Последняя задача описана в приложении D.

В основу этого раздела положены материалы [44, 46, 53, 114, 116].

5.1 Система уравнений для плоских двумерных течений

Приведем систему квазигазодинамических уравнений в декартовых координатах для двумерных течений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx}}{\partial x} + \frac{\partial j_{my}}{\partial y} = 0, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx}u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my}u_x)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{yx}}{\partial y}, \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx}u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my}u_y)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial \Pi_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \Pi_{yy}}{\partial y}, \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(j_{mx}H)}{\partial x} + \frac{\partial(j_{my}H)}{\partial y} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} (\Pi_{xx}u_x + \Pi_{xy}u_y) + \frac{\partial}{\partial y} (\Pi_{yx}u_x + \Pi_{yy}u_y), \end{aligned} \quad (5.4)$$

где E — полная энергия единицы объема и H — полная удельная энтальпия:

$$E = \rho \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1}, \quad H = \frac{(E + p)}{\rho}, \quad p = \rho \mathcal{R}T. \quad (5.5)$$

Компоненты вектора плотности потока массы \vec{j}_m вычисляются по формулам:

$$j_{mx} = \rho(u_x - w_x), \quad j_{my} = \rho(u_y - w_y), \quad (5.6)$$

где

$$\begin{aligned} w_x &= \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{\partial(\rho u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right], \\ w_y &= \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y^2)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Компоненты тензора вязких напряжений Π определяются с помощью выражений, экономичных с точки зрения программной реализации:

$$\begin{aligned} \Pi_{xx} &= \Pi_{xx}^{NS} + u_x w_x^* + R^*, & \Pi_{xx}^{NS} &= 2\mu \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \vec{u}, \\ \Pi_{xy} &= \Pi_{xy}^{NS} + u_x w_y^*, & \Pi_{xy}^{NS} &= \Pi_{yx}^{NS} = \mu \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right), \\ \Pi_{yx} &= \Pi_{yx}^{NS} + u_y w_x^*, & & \\ \Pi_{yy} &= \Pi_{yy}^{NS} + u_y w_y^* + R^*, & \Pi_{yy}^{NS} &= 2\mu \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \vec{u}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

здесь Π_{xx}^{NS} , Π_{xy}^{NS} , Π_{yx}^{NS} , Π_{yy}^{NS} — компоненты навье-стоксовского тензора вязких напряжений.

Величины w_x^* , w_y^* , R^* вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} w_x^* &= \tau \left[\rho u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right], \\ w_y^* &= \tau \left[\rho u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} \right], \\ R^* &= \tau \left[u_x \frac{\partial p}{\partial x} + u_y \frac{\partial p}{\partial y} + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right], \end{aligned} \quad (5.9)$$

а дивергенция вектора скорости $\operatorname{div} \vec{u}$ равна:

$$\operatorname{div} \vec{u} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y}. \quad (5.10)$$

Компоненты вектора теплового потока \vec{q} имеют вид:

$$\begin{aligned} q_x &= q_x^{NS} - u_x R^q, & q_y &= q_y^{NS} - u_y R^q, \\ R^q &= \tau \rho \left[\frac{u_x}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho} \right) + \frac{u_y}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{p}{\rho} \right) + p u_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \right) + p u_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.11)$$

где навье-стоксовские слагаемые q_x^{NS} и q_y^{NS} вычисляются как:

$$q_x^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial y}. \quad (5.12)$$

Зависимость коэффициента динамической вязкости μ от температуры выберем в следующем виде

$$\mu = \mu_\infty \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^\omega, \quad (5.13)$$

где $\mu_\infty = \mu(T_\infty)$ — известное значение μ при температуре T_∞ .

Коэффициент теплопроводности \varkappa и релаксационный параметр τ связаны с коэффициентом динамической вязкости μ соотношениями:

$$\varkappa = \frac{\gamma \mathcal{R}}{(\gamma - 1) Pr} \mu, \quad \tau = \frac{1}{p Sc} \mu, \quad (5.14)$$

где Pr — число Прандтля, Sc — число Шмидта.

5.2 Система уравнений в цилиндрической геометрии

В цилиндрических координатах в двумерном случае система КГД уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rj_{mr})}{\partial r} + \frac{\partial j_{mz}}{\partial z} = 0, \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial(\rho u_r)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rj_{mr}u_r)}{\partial r} + \frac{\partial(j_{mz}u_r)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial(r\Pi_{rr})}{\partial r} + \frac{\partial \Pi_{zr}}{\partial z} - \frac{\Pi_{\phi\phi}}{r}, \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rj_{mr}u_z)}{\partial r} + \frac{\partial(j_{mz}u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial(r\Pi_{rz})}{\partial r} + \frac{\partial \Pi_{zz}}{\partial z}, \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rj_{mr}H)}{\partial r} + \frac{\partial(j_{mz}H)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rq_r)}{\partial r} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = \\ = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r(\Pi_{rr}u_r + \Pi_{rz}u_z)] + \frac{\partial}{\partial z} (\Pi_{zr}u_r + \Pi_{zz}u_z), \end{aligned} \quad (5.18)$$

где E — полная энергия единицы объема и H — полная удельная энтальпия:

$$E = \rho \frac{u_r^2 + u_z^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1}, \quad H = \frac{(E + p)}{\rho}, \quad p = \rho RT. \quad (5.19)$$

Здесь u_r и u_z — проекции вектора скорости \vec{u} на оси r и z . Влияние внешних сил не учитывается.

Компоненты вектора плотности потока массы \vec{j}_m вычисляются по формулам:

$$j_{mr} = \rho(u_r - w_r), \quad j_{mz} = \rho(u_z - w_z), \quad (5.20)$$

где

$$\begin{aligned} w_r &= \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\rho u_r^2) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_r u_z) + \frac{\partial p}{\partial r} \right], \\ w_z &= \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\rho u_r u_z) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z^2) + \frac{\partial p}{\partial z} \right]. \end{aligned}$$

Компоненты тензора вязких напряжений Π выпишем в виде, удобном для программной реализации:

$$\begin{aligned}
\Pi_{rr} &= \Pi_{rr}^{NS} + u_r w_r^* + R^*, & \Pi_{rr}^{NS} &= 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \vec{u}, \\
\Pi_{rz} &= \Pi_{rz}^{NS} + u_r w_z^*, & \Pi_{rz}^{NS} &= \Pi_{zr}^{NS} = \mu \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right), \\
\Pi_{zr} &= \Pi_{zr}^{NS} + u_z w_r^*, & & \\
\Pi_{\phi\phi} &= \Pi_{\phi\phi}^{NS} + R^*, & \Pi_{\phi\phi}^{NS} &= 2\mu \frac{u_r}{r} - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \vec{u}, \\
\Pi_{zz} &= \Pi_{zz}^{NS} + u_z w_z^* + R^*, & \Pi_{zz}^{NS} &= 2\mu \frac{\partial u_z}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \vec{u},
\end{aligned} \tag{5.21}$$

здесь Π_{rr}^{NS} , Π_{rz}^{NS} , Π_{zr}^{NS} , $\Pi_{\phi\phi}^{NS}$, Π_{zz}^{NS} — компоненты навье-стоксовского тензора вязких напряжений.

Величины w_r^* , w_z^* , R^* вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned}
w_r^* &= \tau \left[\rho u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \rho u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial r} \right], \\
w_z^* &= \tau \left[\rho u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \rho u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \right], \\
R^* &= \tau \left[u_r \frac{\partial p}{\partial r} + u_z \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma p \operatorname{div} \vec{u} \right],
\end{aligned}$$

а дивергенция вектора скорости $\operatorname{div} \vec{u}$ равна:

$$\operatorname{div} \vec{u} = \frac{1}{r} \frac{\partial(r u_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}.$$

Компоненты вектора теплового потока \vec{q} находятся по формулам:

$$q_r = q_r^{NS} - u_r R^q, \quad q_z = q_z^{NS} - u_z R^q, \tag{5.22}$$

$$R^q = \tau \rho \left[\frac{u_r}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{p}{\rho} \right) + \frac{u_z}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p}{\rho} \right) + p u_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\rho} \right) + p u_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right],$$

где навье-стоксовские слагаемые q_r^{NS} и q_z^{NS} задаются формулами:

$$q_r^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial r}, \quad q_z^{NS} = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial z}. \tag{5.23}$$

5.3 Граничные условия

Приведенные системы уравнений следует дополнить начальными и граничными условиями. Постановка этих условий определяется конкретной решаемой задачей. В качестве примера приведем вариант постановки граничных условий для задачи о сверхзвуковом течении газа в окрестности цилиндра в осесимметричной геометрии. Схема расчетной области для этого течения приведена на рис. 5.7.

Профиль течения на входной границе, расположенной в плоскости $z = L$ (вертикальная граница), зададим в виде

$$\rho = \rho_\infty, \quad u_z = u_{z\infty}, \quad u_r = 0, \quad p = p_\infty. \quad (5.24)$$

На оси симметрии, совпадающей с осью z , поставим условия симметрии:

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \quad u_r = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0. \quad (5.25)$$

На свободных границах, где предполагается, что газ вытекает из рассматриваемой области, поставим так называемые "мягкие" граничные условия, или условия "сноса". В этих условиях предполагается равенство нулю нормальных производных плотности, давления и компонент скорости. Например, если граница находится в плоскости $z = 0$, то такие условия запишутся как:

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial z} = 0. \quad (5.26)$$

Пусть одной из границ является непроницаемая твердая стенка. На твердой стенке можно поставить условия непротекания $u_n = 0$ и прилипания $u_t = 0$ или скольжения $\partial u_t / \partial n = 0$ для скорости, где u_n и u_t — соответственно нормальная и тангенциальная компоненты скорости течения. Эти условия следует дополнить граничным условием для температуры, которое определяется физическими условиями на твердой стенке.

В КГД системе уравнений вектор плотности потока массы вычисляется как

$$\vec{J}_m^{QGD} = \rho \vec{u} - \rho \vec{w} = \rho \vec{u} - \tau \left(\text{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p \right). \quad (5.27)$$

Для того, чтобы нормальная составляющая потока массы, протекающая через твердую границу и вычисляемая по формуле (5.27), была равна нулю, условия непротекания для скорости необходимо дополнить условием для давления вида $\partial p / \partial n = 0$. Это соотношение представляет собой дополнительное условие, необходимое для замыкания КГД уравнений и отличающее постановку задачи в рамках КГД системы от постановки этой же задачи в рамках модели Навье–Стокса.

Для определенности на боковой поверхности $r = R_c$ цилиндра (рис. 5.7) в качестве граничных условий поставим условия прилипания для скорости, зададим постоянную температуру и будем полагать, что поверхность непроницаема. Тогда граничные условия запишутся следующим образом

$$u_z = 0, \quad u_r = 0, \quad T = T_0, \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0. \quad (5.28)$$

Выпишем выражения для теплового потока и силы трения на границе с условием непротекания $u_n = 0$. Пусть граница расположена в плоскости $z = L_c$ (торец цилиндра). Сила трения на этой границе определяется компонентой тензора вязких напряжений Π_{zr} , а тепловой поток q_z равен:

$$q_z = q_z^{NS} - u_z R^q, \\ \Pi_{zr} = \Pi_{zr}^{NS} + \tau u_z \left[\rho u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \rho u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial p}{\partial r} \right]. \quad (5.29)$$

С учетом условия непротекания на стенке ($u_z = 0$), сразу получаем выражение для теплового потока и коэффициента трения на стенке в виде:

$$q_z = q_z^{NS} = -\kappa \frac{\partial T}{\partial z}, \\ \Pi_{zr} = \Pi_{zr}^{NS} = \mu \frac{\partial u_r}{\partial z}. \quad (5.30)$$

То есть для КГД уравнений выражения для теплового потока и силы трения на твердой стенке (5.30) совпадают с соответствующими величинами для уравнений Навье–Стокса.

5.4 Безразмерный вид уравнений

Для численного решения уравнений газовой динамики бывает удобно представить их в безразмерном виде. Это позволяет, во-первых, оперировать при расчетах с величинами порядка единицы, во-вторых, позволяет выделить в уравнениях безразмерные коэффициенты, от которых зависит решение задачи — так называемые параметры подобия.

Выберем в качестве основных размерных параметров характерный линейный размер R_c (например, радиус цилиндра), плотность ρ_∞ и скорость звука c_∞ в набегающем невозмущенном потоке.

Запишем соотношения между размерными и безразмерными величинами, обозначая безразмерные величины знаком "тильда~" :

$$\begin{aligned} \rho &= \tilde{\rho} \rho_\infty, & u &= \tilde{u} c_\infty, & c &= \tilde{c} c_\infty, & p &= \tilde{p} \rho_\infty c_\infty^2, \\ x &= \tilde{x} R_c, & t &= \tilde{t} \frac{R_c}{c_\infty}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$T = \frac{p}{\mathcal{R}\rho} = \frac{\tilde{p} \rho_\infty c_\infty^2}{\mathcal{R} \tilde{\rho} \rho_\infty} = \frac{\tilde{p}\gamma}{\tilde{\rho}} \frac{1}{\mathcal{R}\gamma} c_\infty^2 = \tilde{T} \frac{c_\infty^2}{\gamma\mathcal{R}}.$$

Введем числа Маха и Рейнольдса:

$$Ma_\infty = \frac{u_\infty}{c_\infty}, \quad Re_\infty = \frac{\rho_\infty u_\infty R_c}{\mu_\infty}. \quad (5.32)$$

Уравнение полной энергии не изменяет своего вида:

$$E = \frac{\rho u^2}{2} + \frac{p}{(\gamma-1)}, \quad \Rightarrow \quad \tilde{E} = \frac{\tilde{\rho} \tilde{u}^2}{2} + \frac{\tilde{p}}{(\gamma-1)}. \quad (5.33)$$

При обезразмеривании скорость звука преобразуется как

$$c = \sqrt{\gamma\mathcal{R}T}, \quad \Rightarrow \quad \tilde{c} = \sqrt{\tilde{T}}. \quad (5.34)$$

Уравнение состояния:

$$p = \rho\mathcal{R}T, \quad \tilde{p} \rho_\infty c_\infty^2 = \tilde{\rho} \rho_\infty \tilde{T} \frac{c_\infty^2}{\gamma\mathcal{R}} \quad \Rightarrow \quad \tilde{p} = \frac{\tilde{\rho}\tilde{T}}{\gamma}. \quad (5.35)$$

Таким образом, уравнения связи (5.34) и (5.35) после обезразмеривания изменили свой вид.

Подставляя соотношения (5.31) в уравнения КГД системы, можно убедиться, что приведение к безразмерному виду не меняет вида исходных уравнений. При этом безразмерные коэффициенты вязкости, теплопроводности и параметр τ вычисляются как

$$\tilde{\mu} = \frac{Ma}{Re} \tilde{T}^\omega, \quad (5.36)$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{1}{(\gamma - 1)Pr} \frac{Ma}{Re} \tilde{T}^\omega. \quad (5.37)$$

$$\tilde{\tau} = \frac{Ma}{ReSc} \frac{\tilde{T}^\omega}{\tilde{p}}. \quad (5.38)$$

Далее, используя безразмерные КГД уравнения и уравнения связи, знак "тильда"~ будем опускать.

5.5 Разностная аппроксимация

Рассмотрим, для определенности, аппроксимацию уравнений в цилиндрической геометрии. Обозначим символом ω_h множество узлов (i, j) пространственной сетки. Для простоты рассмотрим равномерную сетку, в которой обозначим шаги по пространству как h_z и h_r .

Все газодинамические величины (плотность ρ , компоненты скоростей u_z и u_r , давление p) будем относить к узлам сетки ω_h . Значение газодинамических величин в полуцелых узлах

$$(z_{i\pm 0.5}, r_j), \quad (z_i, r_{j\pm 0.5}), \quad (z_{i\pm 0.5}, r_{j\pm 0.5}) \quad (5.39)$$

будем вычислять как среднее арифметическое их значений в прилегающих узлах. То есть значение функции ψ из множества $\{\rho, u_r, u_z, p\}$ в полуцелых узлах вычисляется как

$$\begin{aligned} \psi_{i\pm 0.5, j} &= 0.5(\psi_{i\pm 1, j} + \psi_{i, j}), \\ \psi_{i, j\pm 0.5} &= 0.5(\psi_{i, j\pm 1} + \psi_{i, j}), \\ \psi_{i\pm 0.5, j\pm 0.5} &= 0.25(\psi_{i\pm 1, j\pm 1} + \psi_{i, j\pm 1} + \psi_{i\pm 1, j} + \psi_{i, j}). \end{aligned} \quad (5.40)$$

Таким образом, для вычисления пространственных производных используется девятиточечный шаблон (рис. 5.1).

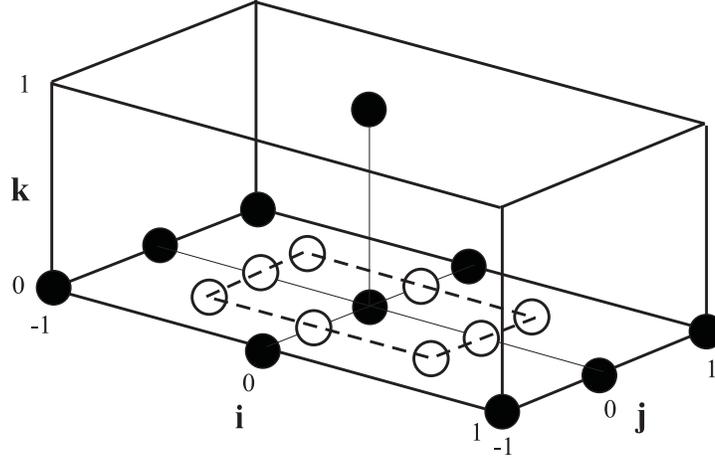


Рис. 5.1. Шаблон для аппроксимации разностных производных

Для функций газодинамических параметров $f = f(\rho, u_z, u_r, p)$ положим

$$\begin{aligned} f_{i,j} &= f(\rho_{i,j}, (u_r)_{i,j}, (u_z)_{i,j}, p_{i,j}), \\ f_{i\pm 0.5,j} &= f(\rho_{i\pm 0.5,j}, (u_r)_{i\pm 0.5,j}, (u_z)_{i\pm 0.5,j}, p_{i\pm 0.5,j}), \\ f_{i,j\pm 0.5} &= f(\rho_{i,j\pm 0.5}, (u_r)_{i,j\pm 0.5}, (u_z)_{i,j\pm 0.5}, p_{i,j\pm 0.5}), \text{ и т.д.} \end{aligned} \quad (5.41)$$

Для численного решения системы (5.15)–(5.18) используем явную по времени разностную схему. Производные по времени аппроксимируются разностями вперед с первым порядком точности. Пространственные производные аппроксимируем центральными разностями со вторым порядком точности.

Аппроксимируем дифференциальное уравнение (5.15) разностным:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\rho}_{ij} - \rho_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{r_j h_r} [(r j_{mr})_{i,j+0.5} - (r j_{mr})_{i,j-0.5}] + \\ + \frac{1}{h_z} [(j_{mz})_{i+0.5,j} - (j_{mz})_{i-0.5,j}] = 0, \end{aligned} \quad (5.42)$$

где Δt — шаг по времени. Величина, помеченная верхним индексом $\widehat{\rho}_{i,j}$, вычисляется на следующем временном слое.

Остальные уравнения системы (5.15)–(5.18) аппроксимируются аналогично:

$$\begin{aligned}
& \frac{(\widehat{\rho}u_r)_{ij} - (\rho u_r)_{ij}}{\Delta t} + \\
& + \frac{1}{r_j h_r} [(rj_{mr})_{i,j+0.5}(u_r)_{i,j+0.5} - (rj_{mr})_{i,j-0.5}(u_r)_{i,j-0.5}] + \\
& + \frac{1}{h_z} [(j_{mz}u_r)_{i+0.5,j} - (j_{mz}u_r)_{i-0.5,j}] + \frac{1}{h_r} [p_{i,j+0.5} - p_{i,j-0.5}] = \\
& = \frac{1}{r_j h_r} [(r\Pi_{rr})_{i,j+0.5} - (r\Pi_{rr})_{i,j-0.5}] + \\
& + \frac{1}{h_z} [(\Pi_{zr})_{i+0.5,j} - (\Pi_{zr})_{i-0.5,j}] - \frac{(\Pi_{\varphi\varphi})_{ij}}{r_j}, \quad (5.43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{(\widehat{\rho}u_z)_{ij} - (\rho u_z)_{ij}}{\Delta t} + \\
& + \frac{1}{r_j h_r} [(rj_{mr})_{i,j+0.5}(u_z)_{i,j+0.5} - (rj_{mr})_{i,j-0.5}(u_z)_{i,j-0.5}] + \\
& + \frac{1}{h_z} [(j_{mz}u_z)_{i+0.5,j} - (j_{mz}u_z)_{i-0.5,j}] + \frac{1}{h_z} [p_{i+0.5,j} - p_{i-0.5,j}] = \\
& = \frac{1}{r_j h_r} [r_{j+0.5}(\Pi_{rz})_{i,j+0.5} - r_{j-0.5}(\Pi_{rz})_{i,j-0.5}] + \\
& + \frac{1}{h_z} [(\Pi_{zz})_{i+0.5,j} - (\Pi_{zz})_{i-0.5,j}], \quad (5.44)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\widehat{E}_{ij} - E_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{r_j h_r} [(rj_{mr})_{i,j+0.5}H_{i,j+0.5} - (rj_{mr})_{i,j-0.5}H_{i,j-0.5}] + \\
& + \frac{1}{h_z} [(j_{mz}H)_{i+0.5,j} - (j_{mz}H)_{i-0.5,j}] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{r_j h_r} [r_{j+0.5}(q_r)_{i,j+0.5} - r_{j-0.5}(q_r)_{i,j-0.5}] + \\
& \quad + \frac{1}{h_z} [(q_z)_{i+0.5,j} - (q_z)_{i-0.5,j}] = \\
& = \frac{1}{r_j h_r} [(r\Pi_{rr})_{i,j+0.5}(u_r)_{i,j+0.5} - (r\Pi_{rr})_{i,j-0.5}(u_r)_{i,j-0.5}] + \\
& \quad + \frac{1}{r_j h_r} [r_{j+0.5}(\Pi_{rz}u_z)_{i,j+0.5} - r_{j-0.5}(\Pi_{rz}u_z)_{i,j-0.5}] + \\
& \quad + \frac{1}{h_z} [(\Pi_{zr}u_r)_{i+0.5,j} - (\Pi_{zr}u_r)_{i-0.5,j}] + \\
& \quad + \frac{1}{h_z} [(\Pi_{zz}u_z)_{i+0.5,j} - (\Pi_{zz}u_z)_{i-0.5,j}], \quad (z_i, r_j) \in \omega_h. \quad (5.45)
\end{aligned}$$

Далее строятся разностные аппроксимации непосредственно для компонент векторов плотности потока массы \vec{j}_m , теплового потока \vec{q} и для компонент тензора вязких напряжений Π , записанных в виде (5.20)–(5.23). Эти величины аппроксимируются в полуцелых точках. Например, величины, входящие в уравнение (5.42), аппроксимируются следующим образом:

$$\begin{aligned}
(rj_{mr})_{i,j\pm 0.5} &= \rho_{i,j\pm 0.5} [r_{j\pm 0.5}(u_r)_{i,j\pm 0.5} - (rw_r)_{i,j\pm 0.5}], \\
(j_{mz})_{i\pm 0.5,j} &= \rho_{i\pm 0.5,j} [(u_z)_{i\pm 0.5,j} - (w_z)_{i\pm 0.5,j}].
\end{aligned}$$

Аналогично строятся разностные аппроксимации для остальных слагаемых, входящих в уравнения.

Численное решение системы разностных уравнений (5.42)–(5.45) на каждом временном слое осуществляется в следующей последовательности. По известным с предыдущего временного слоя газодинамическим параметрам ρ , u_z , u_r и p вычисляются значения величин в полуцелых точках (5.40). Затем вычисляются значения потоков \vec{j}_m , \vec{q} и Π в соответствующих полуцелых точках сетки, после чего эти значения подставляются в разностные выражения (5.42)–(5.45).

К системе разностных уравнений (5.42)–(5.45) добавляются начальные и граничные условия.

Для единообразного вычисления газодинамических величин во всех внутренних точках расчетной области, включая приграничные

узлы, вводится система фиктивных ячеек, примыкающих к каждой из границ. При этом граница области располагается в полуцелых точках (см. рис. 5.8). Значения плотности, компонент скорости и давления в фиктивных ячейках задаются таким образом, чтобы аппроксимировать соответствующее граничное условие.

Например, пусть на границе, расположенной в точке $i = 1/2$, задано значение функции f_w . Точка $i = 0$ является фиктивной, а точка $i = 1$ является ближайшей прилегающей к границе внутренней точкой, значение в которой вычисляется на каждом временном слое. Тогда f_0 в фиктивной точке выбирается из условия

$$f_w = \frac{f_0 + f_1}{2} \quad \rightarrow \quad f_0 = 2f_w - f_1.$$

Если на границе задано условие на производную вида $\partial f / \partial n = 0$, то f_0 в фиктивной точке равно

$$\frac{f_0 - f_1}{h} = 0 \quad \rightarrow \quad f_0 = f_1.$$

Таким образом, алгоритм нахождения плотности, компонент скорости и давления на каждом временном слое состоит из двух этапов. Сначала, на основе вычисленных значений заполняются фиктивные ячейки по указанному выше правилу, затем вычисляются значения $\hat{\rho}_{ij}$, $(\hat{u}_r)_{ij}$, $(\hat{u}_z)_{ij}$ и \hat{E}_{ij} во всех внутренних точках на следующем временном слое.

Стационарное решение находится методом установления и считается достигнутым при выполнении следующего критерия:

$$\frac{1}{N_r N_z} \sum_{(z_i, r_j) \in \omega_h} \left| \frac{\hat{\rho}_{ij} - \rho_{ij}}{\rho_{ij} \Delta t} \right| \leq \epsilon, \quad (5.46)$$

в котором невязка ϵ может варьироваться в зависимости от требований к точности решения. Здесь N_r и N_z — число узлов сетки по r и z . В приведенных далее расчетах значение ϵ выбиралось в диапазоне от 10^{-3} до 10^{-7} .

Возможны и другие критерии установления стационарного решения, например:

$$\max_{(z_i, r_j) \in \omega_h} \left| \frac{\hat{\rho}_{ij} - \rho_{ij}}{\Delta t} \right| \leq \epsilon.$$

5.6 Введение искусственной диссипации

При численном моделировании газодинамических течений возникают различные особенности решения, например, разрывы решения — ударные волны и контактные разрывы, пограничные слои и другие зоны с большими градиентами параметров. В этих случаях оказывается невозможным провести расчет непосредственно по разностным схемам, полученным центрально-разностными аппроксимациями исходных уравнений.

Известным способом расчета ударной волны без явного выделения на сетке ее фронта является метод "размывания" фронта за счет введения в систему разностных уравнений некоторых диссипативных членов, называемых псевдовязкостью или искусственной вязкостью. Такие подходы к решению задач газовой динамики детально разработаны и изложены, например, в монографиях [5, 70, 87, 88, 91].

Вводимые добавки моделируют действие реальной вязкости, то есть приводят к диссипации кинетической энергии. Например, хорошо известны добавки к давлению вида

$$p \rightarrow p + \omega,$$

где величина ω интерпретируется как искусственная вязкость. Наиболее часто рассматривается линейная вязкость

$$\omega = -\nu\rho \frac{\partial u}{\partial x},$$

или квадратичная вязкость

$$\omega = -\nu\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2.$$

Здесь ν — некоторый коэффициент, пропорциональный шагу пространственной сетки h . При решении задач газовой динамики для политропного газа, теплопроводность которого равна нулю, используют вязкость Неймана–Рихтмайера (см., например, [87]), где

$$\nu = \rho h \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|.$$

Таким образом, искусственная вязкость представляет собой некоторый регуляризатор, позволяющий осуществить сквозной расчет ударных волн или других особенностей решения без явного их выделения на сетке. Под областью фронта в этом случае понимается зона резкого изменения параметров течения. При расчете ударных волн ширина ударного перехода, обусловленная действием псевдовязкости, пропорциональна h и не имеет никакого отношения к реальной ширине фронта волны, которая составляет несколько длин свободного пробега молекул (см. приложение С).

В алгоритмах, основанных на КГД уравнениях, в качестве регуляризатора выступают слагаемые, пропорциональные коэффициенту τ .

Для обеспечения устойчивости КГД алгоритма в формулу (5.38) для вычисления релаксационного параметра τ вводится добавка, пропорциональная шагу пространственной сетки. Эта добавка определяет дополнительную искусственную диссипацию. Безразмерный коэффициент τ вычисляется как:

$$\tau = \frac{Ma}{Re} \frac{T^\omega}{p Sc} + \alpha \frac{h}{c}, \quad (5.47)$$

где α — численный коэффициент порядка единицы, который определяется подбором. Для выписанной выше разностной схемы $h = \sqrt{h_z^2 + h_r^2}$. Коэффициенты динамической вязкости μ и теплопроводности \varkappa вычисляются через релаксационный параметр τ как:

$$\mu = \tau p Sc, \quad \varkappa = \tau \frac{p Sc}{Pr(\gamma - 1)}. \quad (5.48)$$

Таким образом, стабилизирующая добавка $\alpha h/c$ включается в μ и \varkappa , а следовательно, и в выражения для теплового потока и силы трения на границе (5.30).

Исходя из формулы (5.47) сеточную вязкость формально можно считать малой, когда

$$\alpha h < \frac{Ma T^{\omega+1/2}}{Re p}. \quad (5.49)$$

Введение искусственной диссипации, пропорциональной шагу сетки h , делает результирующую разностную схему схемой первого порядка точности по пространству.

Таким образом, разностные схемы на основе КГД уравнений типа (5.42)–(5.45) аппроксимируют начально-краевую задачу с первым порядком точности по времени и по пространству. Схема является явной, однородной и консервативной. Дополнительные слагаемые, пропорциональные $\alpha h/c$, интерпретируются как искусственные регуляризаторы.

5.7 Задача о распаде сильного разрыва

В качестве примера использования построенного выше алгоритма рассмотрим одномерную задачу о распаде сильного разрыва в приближении невязкого нетеплопроводного газа. То есть будем решать задачу в рамках уравнений Эйлера. Эта задача является известным тестом для оценки устойчивости и точности численных алгоритмов, и различные подходы к рассмотрению этого течения приведены, в частности, в [23, 87, 98].

В этом случае параметр τ в (5.47) определяет величину искусственной диссипации и вычисляется как

$$\tau = \alpha \frac{h}{c}. \quad (5.50)$$

КГД уравнения для одномерного плоского течения имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_m}{\partial x} = 0, \quad (5.51)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(j_m u)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x}, \quad (5.52)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(j_m H)}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial(\Pi_{xx} u)}{\partial x}. \quad (5.53)$$

Здесь E и H — полная энергия единицы объема и полная удельная энтальпия, которые вычисляются по формулам: $E = \rho u^2/2 + p/(\gamma - 1)$ и $H = (E + p)/\rho$. Вектор плотности потока массы вычисляется

как

$$j_m = \rho(u - w),$$

где

$$w = \frac{\tau}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p).$$

Компонента тензора вязких напряжений, входящая в систему уравнений (5.51)–(5.53), определяется как

$$\Pi_{xx} = \frac{4}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x} + u \tau \left(\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \tau \left(u \frac{\partial p}{\partial x} + \gamma p \frac{\partial u}{\partial x} \right).$$

Вектор теплового потока q равен

$$q = -\varkappa \frac{\partial T}{\partial x} - \tau \rho u \left[\frac{u}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho} \right) + p u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right].$$

Обезразмеривание не изменяет вида уравнений. Релаксационный параметр и коэффициенты вязкости и теплопроводности в безразмерном виде вычисляются как

$$\tau = \alpha \frac{h}{c}, \quad \mu = \tau \cdot p \cdot Sc, \quad \varkappa = \frac{\tau \cdot p \cdot Sc}{Pr(\gamma - 1)}.$$

Введем равномерную сетку по координате x с шагом h , координатами узлов x_i и значениями индекса $i = 0 \dots N_x - 1$, а также сетку по времени с шагом Δt . Значения всех газодинамических величин — скорости, плотности, давления — определяются в узлах сетки. Значения потоков определяются в полуцелых узлах. Для решения задачи (5.51)–(5.53) используем явную по времени схему следующего вида:

$$\begin{aligned} \widehat{\rho}_i &= \rho_i - \frac{\Delta t}{h} (j_{m,i+1/2} - j_{m,i-1/2}), \\ \widehat{\rho}_i \widehat{u}_i &= \rho_i u_i + \frac{\Delta t}{h} [(\Pi_{xx,i+1/2} - \Pi_{xx,i-1/2}) - (p_{i+1/2} - p_{i-1/2}) - \\ &\quad - (j_{m,i+1/2} u_{i+1/2} - j_{m,i-1/2} u_{i-1/2})], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{E}_i = E_i + \frac{\Delta t}{h} [& (\Pi_{xx,i+1/2} u_{i+1/2} - \Pi_{xx,i-1/2} u_{i-1/2}) - \\ & - (q_{i+1/2} - q_{i-1/2}) - \left(\frac{j_{m,i+1/2}}{\rho_{i+1/2}} (E_{i+1/2} + p_{i+1/2}) - \right. \\ & \left. - \frac{j_{m,i-1/2}}{\rho_{i-1/2}} (E_{i-1/2} + p_{i-1/2}) \right)], \quad p_i = (\gamma - 1) \left(E_i - \frac{\rho_i u_i^2}{2} \right). \end{aligned}$$

Дискретный аналог потока массы j_m имеет вид

$$\begin{aligned} j_{m,i+1/2} &= \rho_{i+1/2} (u_{i+1/2} - w_{i+1/2}), \\ w_{i+1/2} &= \frac{\tau_{i+1/2}}{\rho_{i+1/2}} \frac{1}{h} (\rho_{i+1} u_{i+1}^2 + p_{i+1} - \rho_i u_i^2 - p_i). \end{aligned}$$

Дискретные выражения для Π_{xx} и q выписываются аналогично.

Задача решается на отрезке $0 \leq x \leq 200$. Начальные условия представляют собой разрыв в точке $x = 100$. Значения газодинамических параметров справа и слева от разрыва составляют

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} 8, & x \leq 99 \\ 1, & x > 99 \end{cases}, \quad p(x, 0) = \begin{cases} 480, & x \leq 99 \\ 1, & x > 99 \end{cases}, \quad u(x, 0) = 0.$$

Эта задача, несмотря на простоту постановки, отражает основные особенности нестационарных газодинамических течений, поскольку в области течения формируются ударная волна, контактный разрыв, волна разрежения, и часто используется для отладки численных алгоритмов расчета сверхзвуковых течений.

Расчеты проведены для $\gamma = 5/3$, $Pr = 2/3$, $Sc = 1$. Параметры проведенных расчетов систематизированы в табл. 5.1, где указан номер варианта расчета, величина пространственного шага h , число точек сетки N_x , шаг по времени Δt , число шагов по времени N_t , необходимое для достижения безразмерного времени $t_0 = 4$. Этот момент времени соответствует целому ряду тестов, приведенных, например, в [23, 52, 59].

№ варианта	h	N_x	Δt	N_t	t_0
1	1	200	$2 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^3$	4
2	0.5	400	$2 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^3$	4
3	0.25	800	$2 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^3$	4
4	0.125	1600	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^4$	4
5	0.0625	3200	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^4$	4
6	0.03125	6400	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^4$	4

Таблица 5.1. Варианты расчета задачи о распаде разрыва, $\alpha = 0.5$

Результаты расчетов на момент времени $t_0 = 4$ представлены на рис. 5.2–5.6. На рис. 5.2–5.4 показаны распределения плотности, давления и скорости, проведенных на сгущающихся пространственных сетках. Там же сплошной линией приведено автомодельное решение этой задачи согласно [87]. Приведены распределения газодинамических величин во всей области расчета, а также представлены фрагменты решения в зоне ударной волны. Пунктирные линии соответствуют вариантам с 1 по 6, соответственно таблице. Варианту 1 соответствует пунктирная кривая, которая больше всего сглаживает решение. Из приведенных рисунков наглядно видна сходимость численного решения к автомодельному при сгущении пространственной сетки.

На рис. 5.5–5.6 показано влияние выбора коэффициента α , определяющего величину параметра регуляризации, на точность численного решения для $h = 0.03125$. Видно, что с уменьшением α точность численного решения возрастает. Однако при слишком малых значениях $\alpha = 0.02$ и 0.1 в области фронта ударной волны появляются осцилляции, величина которых неограниченно возрастает при уменьшении α . В ряде случаев подавление этой неустойчивости возможно при уменьшении шага по времени Δt .

Для уточнения влияния коэффициента α на рис. 5.6 изображен фрагмент графика плотности в зависимости от величины α при $\alpha = 0.5, 0.4, 0.3$ и 0.2 для $h = 0.03125$ ($h/c = 0.003125$). Видна быстрая сходимость решения с уменьшением коэффициента α .

При $\alpha = 0.2$ ударная волна размывается примерно на 4 шага сетки, что соответствует алгоритмам сквозного счета повышенного

порядка точности для таких задач. Однако для $\alpha = 0.1$ уменьшение шага по времени даже в 100 раз приводило к осциллирующему решению. Оптимальное значение параметра регуляризации, обеспечивающее максимальный шаг по времени и наилучшую точность в этой задаче, достигается при $\alpha = 0.2 - 0.3$ (см. параграф 5.11).

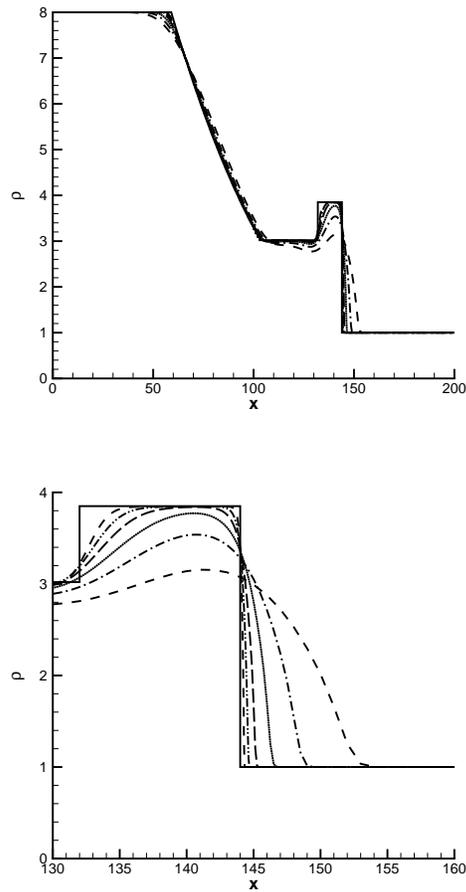


Рис. 5.2. Распределение плотности вдоль оси x (внизу — в увеличенном масштабе)

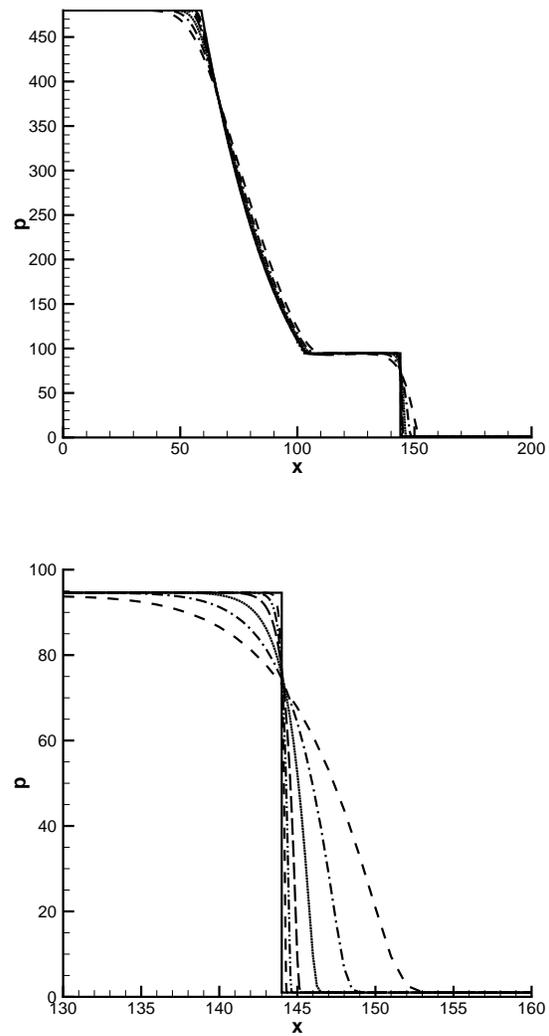


Рис. 5.3. Распределение давления вдоль оси x (внизу — в увеличенном масштабе)

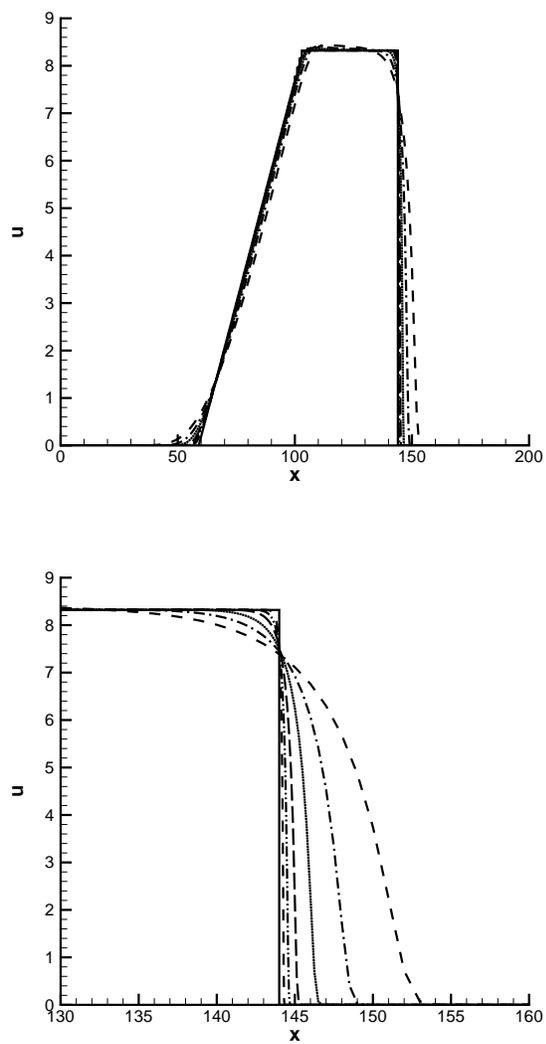


Рис. 5.4. Распределение скорости вдоль оси x (внизу — в увеличенном масштабе)

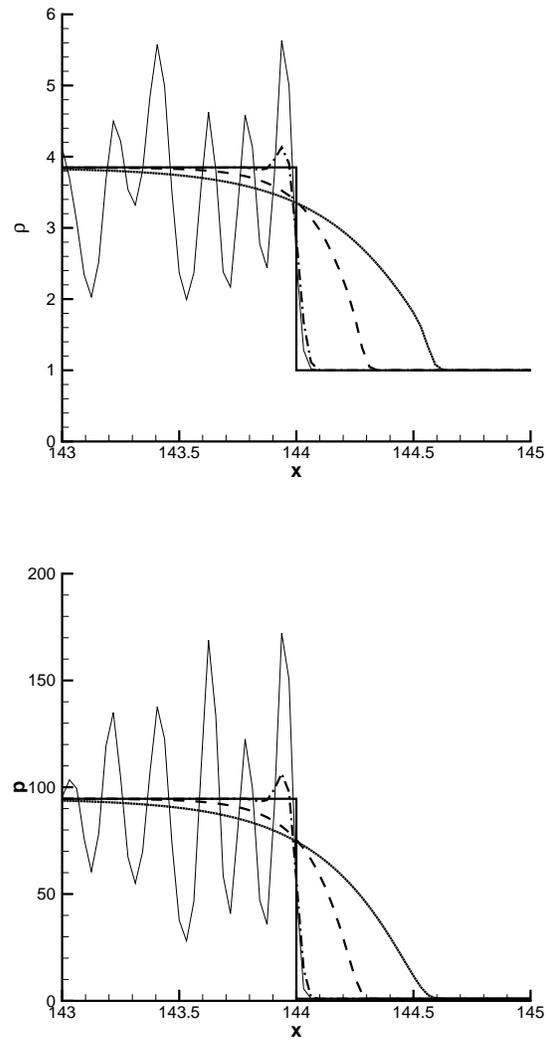


Рис. 5.5. Графики плотности (вверху) и давления (внизу) при $\alpha = 0.02$ – тонкая линия, 0.1 – штрих-пунктир, 0.5 – пунктир, 1 – сплошная линия

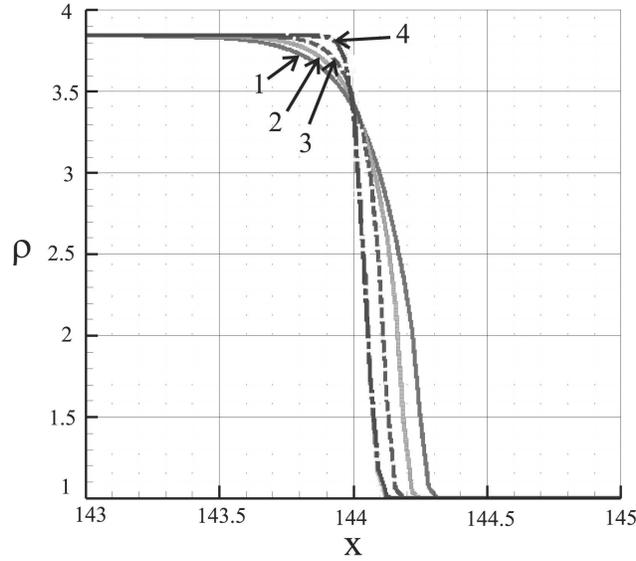


Рис. 5.6. $\alpha = 0.5$ соответствует линия 1, $\alpha = 0.4$ – линия 2, $\alpha = 0.3$ – линия 3, $\alpha = 0.2$ – линия 4.

5.8 Задача о течении в окрестности цилиндра

Постановка задачи и численный алгоритм

В качестве примера реализации двумерного разностного алгоритма приведем результаты расчета задачи о течении в окрестности цилиндрического торца радиуса R_c , который помещен в однородный сверхзвуковой поток вязкого сжимаемого теплопроводного газа, параллельный оси цилиндра. Расчетная область для этой задачи приведена на рис. 5.7.

Введем цилиндрическую систему координат, направив ось z вдоль оси цилиндра, а ось r вдоль поверхности торца (рис. 5.7). Размеры области расчета $L \times H$, размеры цилиндра $L_c \times R_c$, где R_c – радиус цилиндра.

Рассматриваем течение одноатомного газа твердых сфер со следующими параметрами: $\gamma = 5/3$, $Pr = 2/3$, $Re = 1000$, $Sc = 0.77$, $\omega = 0.5$. В качестве начальных условий для системы (5.15)–(5.18)

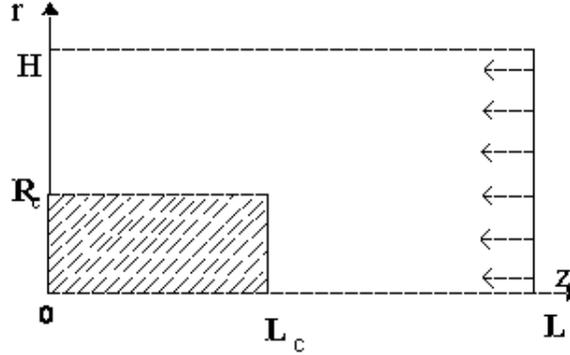


Рис. 5.7. Схема расчетной области в задаче об обтекании цилиндрического торца

используем параметры набегающего потока:

$$\rho|_{t=0} = \rho_\infty, \quad u_z|_{t=0} = -U_\infty, \quad u_r|_{t=0} = 0, \quad p|_{t=0} = p_\infty. \quad (5.54)$$

После введения безразмерных величин, эти параметры равны $\rho_\infty = 1$, $U_\infty = -Ma$ и $p_\infty = 1/\gamma$.

На правой входной границе ($z = L$, $0 < r < H$) задаются параметры набегающего потока (5.54):

$$\rho = 1, \quad u_z = -Ma, \quad u_r = 0, \quad p = \frac{1}{\gamma}, \quad (5.55)$$

на оси симметрии ($L_c < z < L$, $r = 0$) — "условия симметрии":

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \quad u_r = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \quad (5.56)$$

на торце цилиндра ($z = L_c$, $0 < r < R_c$) — "условия скольжения" для скорости:

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = 0, \quad u_z = 0, \quad \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \quad (5.57)$$

на боковой поверхности цилиндра ($0 < z < L_c$, $r = R_c$) — "условия прилипания" для скорости:

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = 0, \quad u_z = 0, \quad u_r = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0. \quad (5.58)$$

Поверхность цилиндра предполагается адиабатической.

На левой выходной и верхней свободной границах ставятся так называемые "мягкие" граничные условия, то есть предполагается равенство нулю нормальных производных плотности, давления и компонент скорости.

Выходная граница ($z = 0$, $R_c < r < H$):

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \quad (5.59)$$

свободная граница ($0 < z < L$, $r = H$):

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial u_r}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0. \quad (5.60)$$

При аппроксимации граничных условий с помощью фиктивных узлов ячейка, соответствующая угловой точке с координатами L_c, R_c , оказывается неоднозначной (рис. 5.7). А именно, при вычислении значения функций в фиктивном узле $(i-1, j-1)$ в одном случае требуется использовать значение функции в узле $(i-1, j)$, а в другом — значение в расчетном узле $(i, j-1)$ на предыдущем временном слое (рис. 5.8).

В приведенных далее расчетах для решения этой проблемы численный алгоритм был модифицирован следующим образом. Разобьем расчетную область $L \times H$ на две подобласти Π_1 и Π_2 :

$$\begin{aligned} \Pi_1 &= \{(z, r) : L_c < z < L, 0 < r < H\}, \\ \Pi_2 &= \{(z, r) : 0 < z < L_c, R_c < r < H\}, \end{aligned}$$

и будем искать численное решение в области $G = \Pi_1 \cup \Pi_2$.

Алгоритм нахождения основных газодинамических величин ρ , u_z , u_r , p на каждом временном слое включает два этапа. На первом этапе мы заполняем все фиктивные ячейки, используя граничные

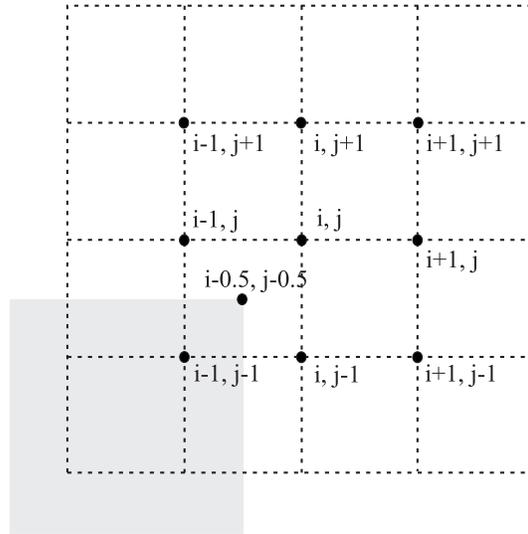


Рис. 5.8. Структура сетки в окрестности угловой точки

условия. На втором этапе вычисляем параметры течения на следующем временном слое $\hat{\rho}, \hat{u}_z, \hat{u}_r, \hat{p}$ во всех внутренних точках области по одним и тем же формулам. Система уравнений на каждом временном шаге решается поочередно: сначала в правой области Π_1 , а затем в левой области Π_2 (для данной задачи, когда поток втекает справа). После этого происходит переход на следующий шаг по времени.

Результаты расчета

В данной задаче число Рейнольдса выбрано достаточно большим, поэтому точность приведенных далее расчетов можно оценивать путем сопоставления параметров газа на торце цилиндра с параметрами торможения.

Параметры торможения — это значения плотности ρ_s , давления p_s и температуры T_s в точке торможения, вычисленные с использо-

ванием теоремы Бернулли (см, например, [72]):

$$p_s = p_2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \frac{u_{z2}^2}{c_2^2} \right)^{\gamma/(\gamma-1)},$$

$$T_s = T_2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} \frac{u_{z2}^2}{c_2^2} \right), \rho_s = \frac{\gamma p_s}{T_s}, \quad (5.61)$$

где p_2 , u_{z2} , T_2 , c_2 — давление, скорость, температура и скорость звука за ударной волной, которые получены из условий Рэнкина-Гюгонно [72]:

$$\rho_2 = \rho_1 \frac{(\gamma + 1)Ma_1^2}{2 + (\gamma - 1)Ma_1^2}, \quad p_2 = p_1 \frac{2\gamma Ma_1^2 - (\gamma - 1)}{\gamma + 1},$$

$$u_{z2} = u_{z1} \frac{2 + (\gamma - 1)Ma_1^2}{(\gamma + 1)Ma_1^2}, \quad T_2 = \gamma \frac{p_2}{\rho_2}, \quad c_2 = \sqrt{T_2}, \quad (5.62)$$

здесь ρ_1 , u_{z1} , p_1 , T_1 — известные параметры набегающего потока. Максимальное значение плотности в ударной волне, согласно (5.62), определяется как $\rho_{max} = (\gamma + 1)/(\gamma - 1)$, и для $\gamma = 5/3$ составляет $\rho_{max} = 4$.

Ma	1.5	2	3	5	50
S	1.03	0.84	0.69	0.62	0.58

Таблица 5.2. Положение ударной волны

Расстояние S между ударной волной и торцом цилиндра можно оценить на основе аппроксимационной формулы Лунева [10].

$$S = R_c \sqrt{k} (1 + 0.6 k), \quad k = \frac{\rho_1}{\rho_2}, \quad (5.63)$$

где $\rho_1 = \rho_\infty$ — плотность на входной границе, ρ_2 — плотность за ударной волной, рассчитанная по условиям Рэнкина-Гюгонно (5.62). Вычисленные таким образом значения S помещены в табл. 5.2. Положение ударной волны в расчете можно определять по положению звуковой линии, то есть линии, на которой локальное число Маха $Ma = 1$.

Таблица 5.3. Расчет сверхзвукового осесимметричного течения

Ma	α	Сетка	$h_r = h_z$	Δt	Невязка ϵ	Число шагов	Параметры торможения		
							ρ_s	p_s	T_s
Теоретические значения для $Ma = 1.5^*)$							2.172	2.280	1.750
1.5	1.0	120 × 120	0.05	10^{-3}	10^{-5}	28 034	2.112	2.248	1.774
1.5	0.5	120 × 120	0.05	10^{-3}	10^{-5}	27 363	2.156	2.280	1.763
1.5	0.5	160 × 120	0.025	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	126 000	2.186	2.305	1.757
1.5	0.2	120 × 120	0.05	10^{-3}	10^{-5}	27 637	2.189	2.303	1.753
Теоретические значения для $Ma = 2^*)$							2.719	3.807	2.333
2	1.0	80 × 60	0.05	10^{-3}	10^{-5}	16 255	2.648	3.704	2.331
2	0.5	80 × 60	0.05	10^{-3}	10^{-5}	15 473	2.720	3.781	2.317
2	0.2	80 × 60	0.05	10^{-3}	10^{-5}	15 961	2.781	3.843	2.303
2	1.0	160 × 120	0.025	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}	30 903	2.717	3.777	2.317
2	0.5	160 × 120	0.025	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}	30 774	2.760	3.818	2.306
2	0.2	160 × 120	0.025	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-5}	31 494	2.791	3.848	2.298
Теоретические значения для $Ma = 3^*)$							3.418	8.204	4.000
3	1.0	160 × 120	0.025	10^{-4}	10^{-5}	90 107	3.457	8.089	3.900
3	0.5	160 × 120	0.025	10^{-4}	10^{-5}	91 504	3.525	8.204	3.879
Теоретические значения для $Ma = 5^*)$							3.982	22.330	9.333
5	1.0	160 × 120	0.025	10^{-4}	10^{-5}	57 436	4.076	21.914	8.961
5	0.5	160 × 120	0.025	10^{-4}	10^{-5}	57 505	4.167	22.287	8.914
Теоретические значения для $Ma = 50^*)$							4.402	2203.6	834.33
50	1.0	80 × 60	0.05	10^{-6}	10^{-4}	125 000	4.756	2181.1	764.35
50	0.5	80 × 60	0.05	$5 \cdot 10^{-6}$	10^{-4}	119 637	4.739	2211.8	777.87

*) – теоретические значения рассчитаны по формулам (5.62)

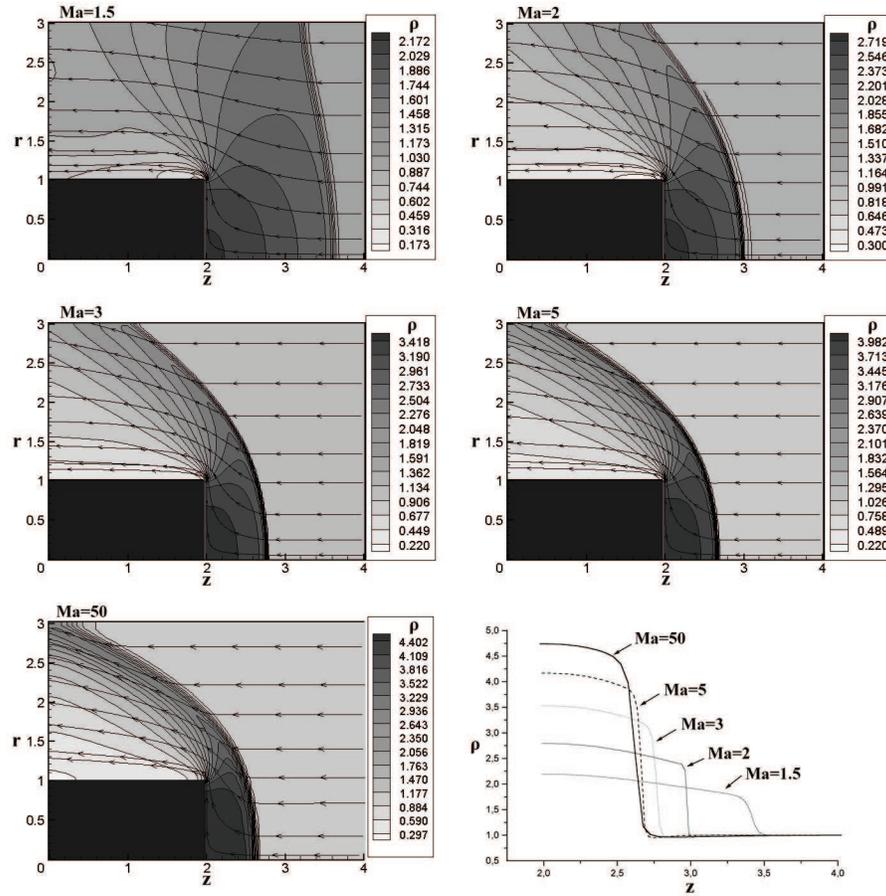


Рис. 5.9. Распределение плотности в осесимметричном течении

Расчеты проведены на равномерных пространственных сетках с шагами $h_r = h_z = 0.05$ и 0.025 для чисел Маха $Ma = 1.5, 2, 3, 5, 50$ и различных значений параметра α . В Таблице 5.3 приведены характеристики расчетов и сопоставление полученных в расчетах параметров торможения с теоретическими значениями (выделены жирным шрифтом).

Для всех чисел Маха, включая $Ma = 50$, полученные в расче-

те значения параметров торможения соответствуют теоретическим значениям, рассчитанным по формулам (5.62).

Распределение плотности и линии тока на момент установления стационарного течения для вариантов с числами Маха 1.5, 2, 3, 5 и 50 ($\alpha = 0.5$) приведены на рис. 5.9. Там же показано изменение формы и положения ударной волны и структуры течения с ростом скорости набегающего потока (числа Маха). Полученные в расчетах значения положения ударных волн качественно совпадают с теоретическими значениями из табл. 5.2.

На приведенных графиках видна высокая точность расчета скачков уплотнения и отсутствие осцилляций решения при больших числах Ma . Оптимальным с точки зрения точности и эффективности алгоритма значением численного коэффициента является $\alpha = 0.5$. Скорость сходимости в этих расчетах практически не зависит от параметра α . При больших числах Ma сгущение пространственной сетки приводит к увеличению точности численного решения.

5.9 Задача о течении в канале с уступом

Приведем пример расчета невязкого сверхзвукового течения в плоском канале со ступенькой. Сложная конфигурация ударных волн, формирующихся с течением времени в канале, служит известным тестом для оценки работоспособности методов высокого порядка точности для решения уравнений Эйлера и Навье–Стокса [21, 196].

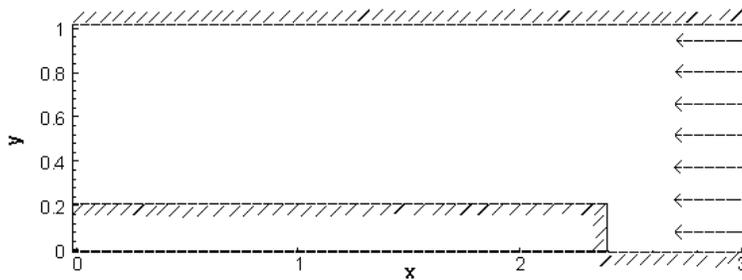


Рис. 5.10. Схема расчетной области в задаче о течении в канале с уступом

Сетка	$h_x = h_y$	Δt	Число шагов	t	Время расчета	ρ_{min}	ρ_{max}
120×40	0.025	0.001	4000	4	4 мин	0.551	4.464
240×80	0.0125	0.0005	8000	4	40 мин	0.377	4.553
480×160	0.00625	0.0001	40000	4	14 ч	0.247	4.595

Таблица 5.4. Расчет течения в канале с уступом

Задача решается в безразмерном виде в следующей постановке: длина канала — 3, ширина — 1, высота ступеньки, расположенной на расстоянии 0.6 от начала канала, равна 0.2. Рассматривается течение невязкого нетеплопроводного газа ($1/Re = 0$) с показателем адиабаты $\gamma = 1.4$, $Ma = 3$. Газ втекает справа (рис. 5.10).

Течение описывается КГД системой, записанной в декартовой системе координат (5.1)–(5.4). В качестве начальных условий используются параметры набегающего потока.

Граничные условия задаются следующим образом. На входной границе значения газодинамических параметров полагаются равными значениям набегающего потока, то есть $\rho = 1$, $u_x = -Ma$, $u_y = 0$ и $p = 1/\gamma$.

На выходной границе задаются "мягкие" граничные условия $\partial f / \partial x = 0$, где $f = (\rho, p, u_x, u_y)$. На твердых стенках канала и ступеньки задаются граничные условия "симметрии":

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial u_s}{\partial n} = 0, \quad u_n = 0,$$

где n — нормаль и s — касательная к соответствующей границе. Основные параметры расчетов представлены в табл. 5.4. При вычислении релаксационного параметра τ коэффициент $\alpha = 0.3$.

На рис. 5.11 приведены распределение плотности на момент времени $t = 4$ (50 изолиний расположены эквидистантно), полученные при расчетах на последовательно сгущающихся равномерных сетках: 120×40 , 240×80 и 480×160 .

Отчетливо прослеживается образование вторичных волн отражения от верхней стенки канала и верхней поверхности ступеньки. За волной разрежения над углом ступеньки плотность газа минимальна, вблизи контактного разрыва за тройной точкой над усту-

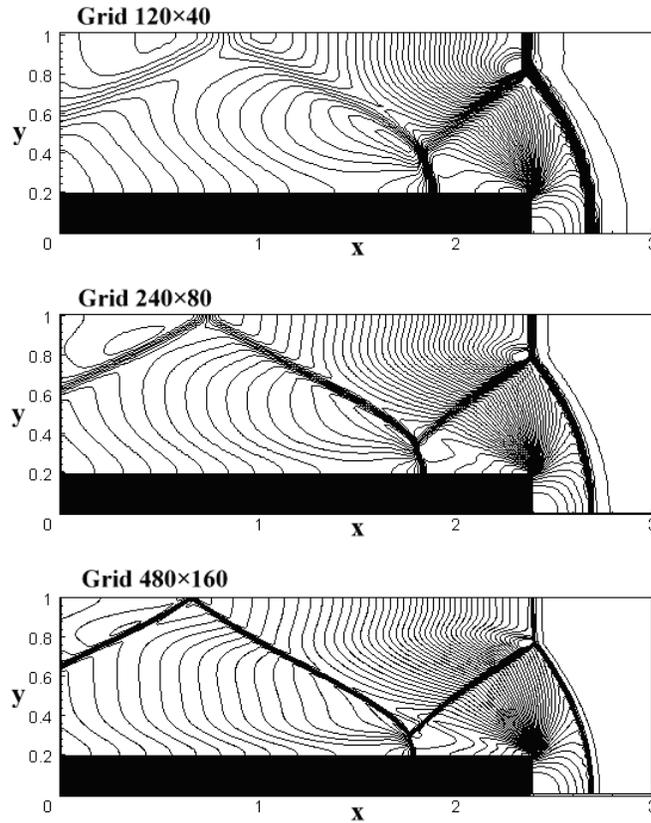


Рис. 5.11. Распределения плотности для течения в канале на момент времени $t = 4$. Расчеты на трех сгущающихся сетках

пом плотность газа максимальна. Приведенные рисунки наглядно демонстрируют сходимость численного решения при сгущении пространственной сетки.

Картина течения, образуемая на момент времени $t = 4$, соответствует данным [196], полученным с использованием кусочно-параболических схем третьего порядка точности по пространству, и результатам [21], где применяются методы расщепления первого, второго и третьего порядка точности.

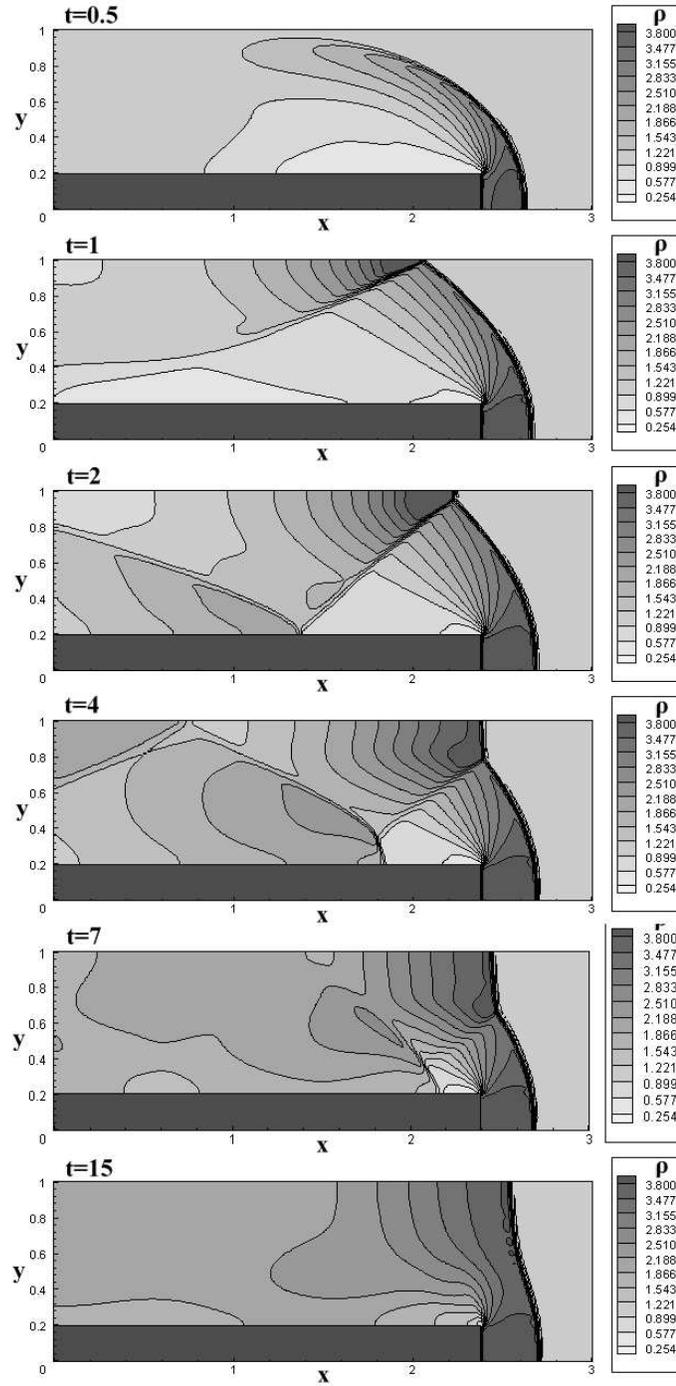


Рис. 5.12. Процесс установления поля плотности в задаче о течении в канале с уступом

Полученные в расчетах минимальное и максимальное значения плотности на разных сетках приведены в табл. 5.4. Согласно работе [196], которая для этой задачи считается эталонной, $\rho_{max}/\rho_{\infty} = 4.541$, $\rho_{min}/\rho_{\infty} = 0.181$. Видно, что максимальные значения плотности хорошо совпадают. При сгущении пространственной сетки величина ρ_{min} уточняется.

На рис. 5.12 приведен процесс установления течения. Изображено распределение плотности, полученное на моменты времени $t = 0.5, 1, 2, 4, 7, 15$ на сетке 240×80 .

5.10 Численный алгоритм расчета дозвуковых течений

Если скорость газа в интересующей нас задаче не превосходит скорость звука, то такие течения не сопровождаются формированием сильных ударных волн, хотя и в этих течениях могут существовать локальные сверхзвуковые зоны. Численное моделирование таких дозвуковых течений имеет свои особенности, которые касаются способа регуляризации численного решения и постановки условий на свободных границах. В отличие от сверхзвуковых течений, постановка неотражающих граничных условий здесь вызывает дополнительные сложности.

Далее изложены особенности численного алгоритма расчета дозвуковых течений, отличающие этот метод от описанных выше алгоритмов расчета сверхзвуковых течений.

Безразмерный вид уравнений и введение регуляризации

При расчете вязких дозвуковых течений, в отличие от сверхзвуковых задач, в качестве единицы скорости будем выбирать скорость набегающего потока u_{∞} . То есть основными размерными параметрами будут плотность набегающего потока ρ_{∞} , скорость набегающего потока u_{∞} и характерный размер — обозначим его через H .

Соотношения между размерными и безразмерными величинами

(знак " \sim " над переменной относится к безразмерным параметрам) имеют вид:

$$\begin{aligned} \rho &= \tilde{\rho} \rho_\infty, & u &= \tilde{u} u_\infty, & p &= \tilde{p} \rho_\infty u_\infty^2, \\ x &= \tilde{x} H, & t &= \tilde{t} \frac{H}{u_\infty}, & T &= \tilde{T} \frac{u_\infty^2}{\gamma R}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

При этом безразмерные коэффициенты вязкости, теплопроводности и параметр τ вычисляются как

$$\mu = \frac{1}{Re} (Ma^2 T)^\omega, \quad \varkappa = \frac{\mu}{Pr(\gamma - 1)}, \quad \tau = \frac{\mu}{p Sc}. \quad (5.65)$$

Здесь, в отличие от алгоритма расчета сверхзвуковых течений, искусственную добавку, пропорциональную шагу пространственной сетки h , достаточно ввести только в дополнительные КГД слагаемые в виде:

$$\tau = \frac{1}{Re} \cdot \frac{1}{p \cdot Sc} \cdot (Ma^2 \cdot T)^\omega + \frac{\alpha h}{c}, \quad (5.66)$$

где α — численный коэффициент порядка единицы, который определяется подбором.

Безразмерные значения давления и температуры можно оценить как

$$\begin{aligned} T &\sim T_\infty = c_\infty^2 = \left(\frac{u_\infty}{Ma}\right)^2 = \frac{1}{Ma^2}, \\ p &\sim \frac{\rho_\infty \cdot T_\infty}{\gamma} = \frac{1}{\gamma \cdot Ma^2}, \end{aligned}$$

где безразмерные параметры набегающего потока равны единице ($\rho_\infty = 1, u_\infty = 1$).

В результате оценочная формула для τ имеет вид:

$$\tau = \frac{1}{Re} \cdot \frac{\gamma \cdot Ma^2}{Sc} + \alpha \cdot h \cdot Ma.$$

Формально сеточную добавку можно считать малой, если

$$\alpha \cdot h < \frac{Ma}{Re}.$$

Подчеркнем, что здесь, в отличие от алгоритма расчета сверхзвуковых течений, дополнительная диссипация, пропорциональная $\alpha h/c$, включена только в выражение для τ и не входит в выражения для коэффициентов μ и κ , а следовательно, не входит в формулы вычисления теплового потока и силы трения на стенке.

Постановка неотражающих граничных условий

В расчетах дозвуковых течений возникает проблема построения и численной реализации граничных условий на свободных границах расчетной области – так называемых "неотражающих" условий. Эти условия не должны искажать поле течения внутри расчетной области, обеспечивая поглощение или пропускание проходящих на границу возмущений, которые возникают внутри области расчета.

В качестве условий на свободной границе, как правило, используются граничные условия, основанные на инвариантах Римана для уравнений Эйлера, или характеристические граничные условия. Эти условия применяются в расчетах как вязких, так и невязких течений с дозвуковыми скоростями на границах. Предложены многочисленные варианты постановки и численной реализации условий такого типа ([17, 28, 60] и др.). Однако их использование связано с серьезными трудностями, которые обусловлены как многочисленными вариантами их построения в дифференциальном и разностном виде, так и недостаточным математическим обоснованием этих условий для течений вязкого газа.

В отличие от алгоритмов, основанных на уравнениях Навье–Стокса, в КГД алгоритмах для постановки условий на свободных дозвуковых границах в ряде задач удается использовать простые граничные условия, аналогичные условиям для течений вязкой несжимаемой жидкости [38, 88]. Такие условия для входящего и выходящего потоков имеют следующий вид: на входной границе задаются компоненты скорости, плотность и градиент давления

$$\frac{\partial p}{\partial n} = \alpha_p, \quad \vec{u} = \vec{u}_\infty, \quad \rho = \rho_\infty, \quad (5.67)$$

где $\alpha_p \sim 1/Re$ – некоторая константа, n – внешняя нормаль к границе. На выходной границе поставим так называемые "мягкие" гра-

ничные условия, за исключением давления, которое поддерживаем постоянным:

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \vec{u}}{\partial n} = 0, \quad p = p_{\infty}. \quad (5.68)$$

Описанный алгоритм использовался в расчетах течения воздушного потока в канале с внезапным расширением и сужением. Результаты расчетов приведены в приложении D.В результате численных экспериментов получено, что оптимальный диапазон значений для регуляризирующего параметра составляет $0.2 < \alpha < 0.4$. Этот диапазон соответствует наилучшей точности решения и минимальному числу шагов до сходимости.

С уменьшением числа Маха скорость сходимости построенного метода замедляется, что является естественным при использовании полных уравнений газовой динамики для расчета дозвуковых течений. Для численного моделирования течений с низкими числами Маха, так называемых слабосжимаемых течений, существуют специальные методы [74].

5.11 Устойчивость и точность КГД алгоритмов

Описанные выше алгоритмы, основанные на КГД уравнениях, представляют собой условно-устойчивые, явные по времени разностные схемы. Как показывает практика численных расчетов и теоретические оценки, ограничение на временной шаг для КГД алгоритмов определяется условием Куранта, которое имеет вид:

$$\Delta t \leq \beta \left(\frac{h}{c} \right)_{min}, \quad (5.69)$$

где $\beta = \beta(\alpha)$ – числовой коэффициент, h – минимальный шаг пространственной сетки, c – максимальная скорость звука в области расчета.

В работе Ю.В.Шеретова [119] методом энергетических неравенств было получено достаточное условие устойчивости Куранта для КГД алгоритма и доказаны соответствующие теоремы. Рассматривалось одномерное течение в рамках уравнений Эйлера

в акустическом приближении. Для одномерной по пространству разностной схемы с постоянным шагом по пространству (п. 5.7) полученное условие устойчивости имеет вид

$$\Delta t \leq \beta \frac{h}{c_*}, \quad (5.70)$$

где $c_* = \sqrt{\gamma \mathcal{RT}_*}$ – средняя по пространству скорость звука в начальный момент времени. Коэффициент β равен

$$\beta = \min(\beta_A, \beta_B, \beta_C), \quad \text{где} \quad \beta_A = \frac{A}{A^*}, \beta_B = \frac{B}{B^*}, \beta_C = \frac{C}{C^*}. \quad (5.71)$$

Значения A, B, C и A^*, B^*, C^* определяются величинами γ, Pr и значением коэффициента α , входящим в формулу для вычисления искусственной диссипации (5.50)

$$A = \frac{\alpha}{\gamma}, \quad B = \frac{\alpha}{\gamma} \left(\frac{4}{3} + \gamma \right), \quad C = \frac{\alpha}{Pr(\gamma - 1)}, \quad (5.72)$$

$$A^* = 2\gamma A^2 + 2(\gamma - 1)AC + \gamma A + B + \frac{1}{2\gamma}, \quad (5.73)$$

$$B^* = 2B^2 + A + \frac{B}{\gamma} + \frac{(\gamma - 1)C}{\gamma} + \frac{1}{2}, \quad (5.74)$$

$$C^* = (\gamma - 1)C(2A + 2C + 1). \quad (5.75)$$

На рис. 5.13 приведены графики β_A – пунктир, β_B – штрихпунктир, и β_C – точки для воздуха ($Pr = 0.74, \gamma = 1.4$), в зависимости от величины α . Видно, что наиболее жестким условием является ограничение, связанное с величиной β_A . Для $\alpha = 0.5$, например, разностный алгоритм устойчив при $\beta < 0.15$. На том же графике приведены две зависимости коэффициента $\beta(\alpha)$, полученные непосредственно в численных экспериментах. Графики получены следующим образом: при каждом заданном α определялось максимальное значение коэффициента β , которое обеспечивает устойчивое решение задачи. Линия 1 соответствует расчету дозвукового течения в плоском канале для $Re = 1000, Ma = 0.1, h = 0.075$ (см. приложение D). Линия 2 – расчет задачи о распаде сильного разрыва (п. 5.7), при $h = 0.03125$.

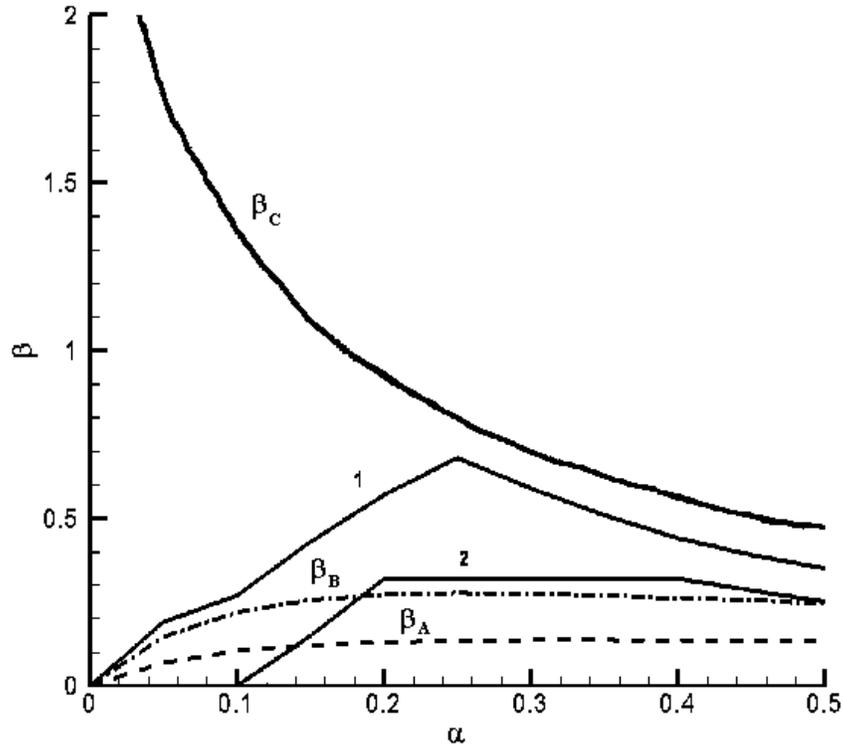


Рис. 5.13. Зависимость $\beta(\alpha)$. Пунктир, штрих-пунктир и точки — теоретические значения, соответствующие β_A , β_B и β_C . Линия 1 — расчет течения в канале при $Ma=0.1$ (Приложение D), 2 — задача о распаде сильного разрыва (п. 5.7)

В обоих случаях величина β превосходит теоретическую оценку, полученную как достаточное условие для линеаризованной системы уравнений. Для задачи о течении в канале коэффициент вязкости выбирается в виде (5.66), и при малых α условие на коэффициент β оказывается более мягким, чем для сверхзвукового течения в задаче о распаде разрыва. Экспериментальные кривые достигают максимума в области $\alpha \sim 0.2-0.4$, что соответствует максимально возможно-

му значению шага по времени. Именно эти значения коэффициента α наиболее эффективны для численных расчетов.

Без использования искусственной вязкости ($\alpha = 0$) КГД алгоритмы представляют собой разностные схемы второго порядка точности по пространству. Для численного моделирования течений с небольшими числами Рейнольдса такая аппроксимация КГД уравнений оказывается устойчивой. В этом случае шаг по времени, обеспечивающий устойчивость КГД алгоритмов, на порядок превышает временной шаг, необходимый для устойчивого расчета этих же течений на основе модели Навье–Стокса с такой же аппроксимацией по пространству и времени. Сопоставление указанных моделей для задачи течения в ударной волне приведено в приложении С.

При введении искусственной вязкости вида (5.47) или (5.66) построенные выше КГД схемы формально становятся схемами первого порядка. При этом точность получающегося численного решения быстро возрастает с уменьшением шага пространственной сетки и с уменьшением коэффициента α . Это наглядно продемонстрировано в п. 5.7 (задача о распаде разрыва) и п. 5.9 (задача о течении в канале с уступом).

Таким образом, несмотря на достаточно сложный вид добавок, высокая точность и быстрая сходимость делает КГД алгоритмы конкурентноспособными по сравнению с имеющимися методами решения уравнений Навье–Стокса.

Как и уравнения Навье–Стокса, КГД уравнения позволяют строить и другие, отличные от описанных выше, разностные алгоритмы. Построение неявного разностного КГД алгоритма приведено в [20]. Примеры схем, построенных с использованием метода расщепления потока, приведены в [22, 23]. Алгоритмы второго и третьего порядка точности для КГД уравнений изучались в [21]. В этих работах отмечается, что в рассмотренных примерах уменьшение коэффициента α в формуле для вычисления τ эквивалентно повышению порядка точности схемы.

Глава 6

Алгоритмы решения КГД уравнений на неструктурированных сетках

В этой главе предложенные численные алгоритмы обобщаются на случай неструктурированных или нерегулярных двумерных пространственных сеток. Использование нерегулярных сеток представляется перспективным для расчета течений в областях со сложной границей. Кроме того, свобода вычислителя в выборе расположения узлов пространственной сетки позволяет детально аппроксимировать зоны течения с сильными градиентами и уменьшает зависимость численного решения от заданного априори направления линий сетки. Эта глава опирается на результаты [42].

6.1 Выбор сетки и построение контрольного объема

При численном моделировании течений в областях со сложными границами не всегда удобно использовать прямоугольные пространственные расчетные сетки. Более общим видом сеток являются так называемые неструктурированные, или нерегулярные сетки, в которых расчетные узлы можно располагать произвольным образом. Топология регулярных сеток однозначно определяется индексами точек сетки. Для нерегулярных сеток такое соответствие не имеет места. Нерегулярные сетки позволяют с нужной точностью аппроксимировать границы области расчета и характерные особенности течения. Для двумерных областей расчета нерегулярную сетку можно связать с треугольниками, а для трехмерных областей — с тетраэдрами. Далее, для простоты изложения, мы ограничимся рассмотрением двумерных расчетных областей.

Зададим сетку с помощью совокупностью узлов $M = \{M_i \in R^2, i = 1, \dots, n\}$. Тогда сетку можно представить как систему

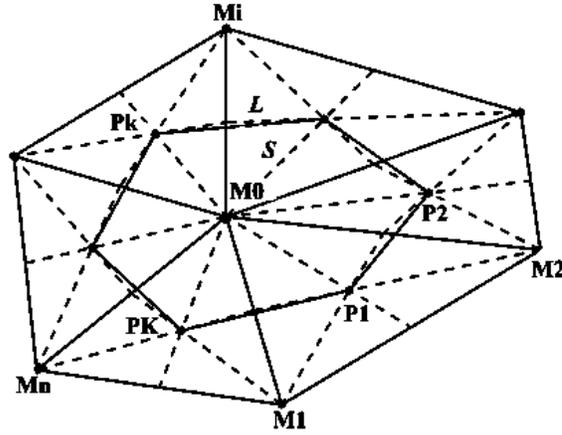


Рис. 6.1. Выбор контрольного объема

треугольников с вершинами M_0, M_1, \dots, M_n (рис. 6.1).

Для построения разностной схемы будем использовать интегроинтерполяционный метод, или метод конечного объема [92]. Этот метод подразумевает, что разностная аппроксимация уравнений строится на основе приближенного интегрирования уравнений, записанных в потоковом виде, по некоторому объему, который называется контрольным. Контрольный объем строится вокруг точек, в которых производится расчет газодинамических величин. Для прямоугольных сеток естественно выбрать контрольный объем в виде прямоугольника, что приводит к построению разностных аппроксимаций, выписанных в предыдущей главе.

На сетке, состоящей из треугольников, контрольный объем можно выбрать различными способами. Точность полученной разностной схемы в значительной мере определяется формой треугольников и способом выбора контрольного объема. В частности, на сетках, состоящих из равносторонних треугольников, можно строить схемы высокого порядка точности. При построении разностных аппроксимаций оказывается удобным использовать сетки, удовлетворяющие принципу триангуляции Делоне [82, 83]. В этих сетках треугольники

выбраны таким образом, что в круг, описанный около любого треугольника, не попадает ни одного узла, отличного от вершин указанного треугольника.

Если газодинамические величины \vec{u} , ρ , p , E заданы в центрах вписанных окружностей, связанных с выбранными треугольниками, то в качестве контрольных объемов можно использовать сами треугольники.

Пусть газодинамические величины \vec{u} , ρ , p , E заданы в узлах сетки M_i . Тогда контрольные объемы удобно выбрать в виде многоугольников, которые можно строить различными способами. Приведем два способа построения контрольного объема, которые обеспечивают высокую точность разностной аппроксимации уравнений для достаточно регулярной треугольной сетки [2, 82, 105, 180].

Для каждого узла M_i треугольной сетки построим контур L , состоящий из точек P_k пересечения медиан треугольников, содержащий данный узел. Эти точки обозначим P_0, P_1, \dots, P_K (см. рис. 6.1). Обозначим число узлов контура через K . Область, ограниченная этим контуром, представляет собой расчетную ячейку — контрольный объем. Расчетная сетка является нерегулярной, поэтому число узлов контура K не фиксировано. Соседние узлы образуют шаблон точки M_0 , на котором производится аппроксимация уравнений. На рис. 6.1 приведен контрольный объем с центром в точке M_0 и границей L .

Выбранный выше способ построения контрольного объема накладывает ряд ограничений на структуру сетки. А именно, узел, для которого строится контрольный объем, не должен выходить за границы контура L . Если сетка не удовлетворяет этому условию, то точность аппроксимации пространственных производных падает.

Второй вариант выбора контрольного объема, в виде так называемой ячейки Дирихле, помогает избежать данной проблемы. Ячейка Дирихле для точки M_0 определяется как множество точек из области расчета, расположенных к узлу M_0 ближе, чем к любому другому узлу из M_i [84]. Для ячейки Дирихле контур L представляет собой ломаную, соединяющую точки пересечения серединных перпендикуляров соответствующих треугольников.

Далее при построении разностного алгоритма для КГД уравне-

ний будет использоваться контрольный объем, построенный на основе точек пересечения медиан.

6.2 Аппроксимация системы уравнений

Для удобства дальнейшего изложения запишем систему квазигазодинамических уравнений (3.13)–(3.15) для плоского двумерного течения в виде одного векторного уравнения:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} - \operatorname{div} \vec{W} = 0, \quad (6.1)$$

где введены обозначения:

$$\vec{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_y \\ E \end{pmatrix}, \quad \vec{W} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \\ W_4 \end{pmatrix},$$

$$W_1 = -\vec{j}_m, \quad \begin{pmatrix} W_2 \\ W_3 \end{pmatrix} = \Pi - \vec{j}_m \otimes \vec{u} - p\vec{e}, \quad W_4 = \Pi\vec{u} - \vec{q} - \frac{E + p}{\rho}\vec{j}_m,$$

$$\operatorname{div} \vec{W} = \begin{pmatrix} \operatorname{div} W_1 \\ \operatorname{div} W_2 \\ \operatorname{div} W_3 \\ \operatorname{div} W_4 \end{pmatrix}.$$

Здесь $E = \frac{\rho u^2}{2} + \varepsilon\rho$ — полная энергия. Далее все операции с \vec{W} также осуществляются покомпонентно.

В соответствии с методом конечного объема, проинтегрируем (6.1) по контрольному объему, или ячейке S :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_S \vec{U} dS - \oint_L (\vec{W} \cdot \vec{n}) dl = 0. \quad (6.2)$$

Здесь для интеграла от \vec{W} использована формула Остроградского–Гаусса, связывающая интеграл по объему с интегралом по поверхности в трехмерном случае, или формула Грина в двумерном случае [69]; S — площадь ячейки, L — контур ячейки, \vec{n} — внешняя нормаль к контуру.

Далее, применяя формулу среднего значения к первому слагаемому в (6.2), получим

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} = \frac{1}{S} \oint_L (\vec{W} \cdot \vec{n}) dl, \quad (6.3)$$

где $\vec{U} = S^{-1} \int_S \vec{U} dS$ — среднее значение вектора скорости \vec{U} , отнесенное к центру расчетной ячейки S . Далее обозначим \vec{U} через \vec{U} .

Аппроксимируем контурный интеграл следующим образом:

$$\begin{aligned} & \oint_L (\vec{W} \cdot \vec{n}) dl \\ &= \sum_k (W_x(P_{k+1/2})n_x(P_{k+1/2}) + W_y(P_{k+1/2})n_y(P_{k+1/2})) L_k. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Здесь значения потоков W_x, W_y и проекций нормалей n_x, n_y вычисляются в серединах $P_{k+1/2}$ отрезков $L_k = L(P_k, P_{k+1})$, составляющих контур L .

Итак, получим разностную формулу для метода конечного объема:

$$\begin{aligned} \hat{U}_i &= U_i \\ &+ \frac{\Delta t}{S} \sum_k (W_x(P_{k+1/2})n_x(P_{k+1/2}) + W_y(P_{k+1/2})n_y(P_{k+1/2})) L_k. \end{aligned} \quad (6.5)$$

При расчете по формуле (6.5) потребуются значения частных производных по x и y от плотности, скорости и давления в серединах отрезков L_k . Значения газодинамических величин в серединах отрезков определяются как среднеарифметическое между значениями на концах.

Для аппроксимации уравнений (6.5) потребуются также значения газодинамических величин в центрах треугольников — точках пересечения медиан (точки P_1, P_2, \dots, P_K , рис. 6.1). Газодинамические величины в центре треугольников определим как среднее арифметическое величин в вершинах треугольников.

В цилиндрической геометрии из-за отсутствия зависимости от угла ϕ внешний вид интеграла (6.5) не изменится и потребуются только замена координат (x, y) на координаты (r, z) .

6.3 Аппроксимация частных производных

Рассмотрим способы вычисления частных производных, необходимых для вычисления контурного интеграла. Для этого выпишем формулу Грина:

$$\iint_G \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) dx dy = \int_{\partial G} P dx + Q dy, \quad (6.6)$$

где $P = P(x, y)$ и $Q = Q(x, y)$ — некоторые скалярные функции, заданные в области G , ∂G — граница этой области. Приведем также формулу, связывающую криволинейные интегралы второго и первого рода:

$$\int_{\partial G} P dx + Q dy = \int_{\partial G} (P \cos \alpha + Q \cos \beta) dl. \quad (6.7)$$

Связь углов между касательной l и нормалью n к контуру ∂G представлена на рис. 6.2 и поясняется следующими формулами:

$$\vec{n} = \{n_x, n_y\} = \{\cos \alpha_x, \cos \alpha_y\}, \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial x}{\partial l} = \cos \beta = \sin \gamma = -\cos \alpha_y = -n_y, \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial y}{\partial l} = \cos \gamma = \sin \beta = \cos \alpha_x = n_x. \quad (6.10)$$

Пользуясь этими двумя формулами, найдем частные производные $\frac{\partial P}{\partial x}$ и $\frac{\partial Q}{\partial y}$. Для этого рассмотрим дивергенцию вектора $\vec{A} = \{P, Q\}$.

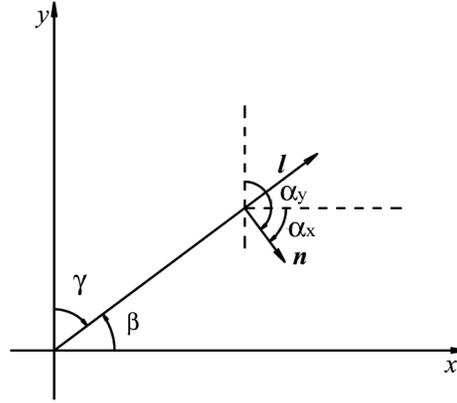


Рис. 6.2. Соотношение углов между касательной и нормалью

Используя формулы (6.6)–(6.10), получим

$$\begin{aligned}
 \iint_G \left(\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} \right) dx dy &= \int_{\partial G} -Q dx + P dy \\
 &= \int_{\partial G} (-Q \cos \beta + P \cos \gamma) dl \\
 &= \int_{\partial G} (Q n_y + P n_x) dl = \int_{\partial G} (\vec{A} \cdot \vec{n}) dl. \quad (6.11)
 \end{aligned}$$

Далее

$$\iint_G \frac{\partial P}{\partial x} dx dy = \int_{\partial G} P n_x dl, \quad (6.12)$$

$$\iint_G \frac{\partial Q}{\partial y} dx dy = \int_{\partial G} Q n_y dl, \quad (6.13)$$

или, используя формулу о среднем, получим

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{1}{S} \int_{\partial G} P n_x dl \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial y} = \frac{1}{S} \int_{\partial G} Q n_y dl, \quad (6.15)$$

где S — площадь области G .

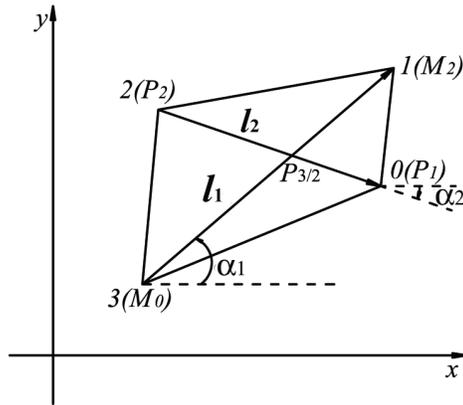


Рис. 6.3. Контур ∂G для вычисления частных производных

Пусть область G представляет собой четырехугольник с вершинами M_0, P_2, M_2, P_1 (рис. 6.1, 6.3). Рассмотрим способы для выражения производных. Рассмотрим величину f , определенную в вершинах четырехугольника, и найдем ее частные производные $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}$ в точке $P_{3/2}$.

Частные производные можно искать двумя способами: используя формулы Грина (6.14)–(6.15), то есть через интеграл по контуру

0123:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{S} \int_{\partial G} f n_x dl, \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{1}{S} \int_{\partial G} f n_y dl, \quad (6.17)$$

или используя производные по направлениям l_1, l_2 :

$$\frac{\partial f}{\partial l_1} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial l_1} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial l_1}, \quad (6.18)$$

$$\frac{\partial f}{\partial l_2} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial l_2} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial l_2}. \quad (6.19)$$

Покажем, что оба способа вычисления разностных производных приводят к одному и тому же результату.

Воспользуемся первым способом. Для этого раскроем интегралы в формулах (6.16)–(6.17) по аналогии с (6.5). Компоненты единичного вектора нормали можно выразить через координаты точек следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{n}(x_1, y_1, x_2, y_2) &= \{\cos \alpha, \sin \alpha\} \\ &= \{y_2 - y_1, x_1 - x_2\} \cdot \frac{1}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}}, \end{aligned} \quad (6.20)$$

а площадь

$$S = \frac{1}{2} [(x_3 - x_1)(y_0 - y_2) + (x_0 - x_2)(y_1 - y_3)]. \quad (6.21)$$

Далее:

$$\begin{aligned}
S \frac{\partial f}{\partial x} &= \int_{0123} f n_x dl = \sum_{i=0}^3 \frac{f_{i+1} + f_i}{2} (y_{i+1} - y_i) \\
&= \frac{f_1 + f_0}{2} (y_1 - y_0) + \frac{f_2 + f_1}{2} (y_2 - y_1) \\
&\quad + \frac{f_3 + f_2}{2} (y_3 - y_2) + \frac{f_0 + f_3}{2} (y_0 - y_3) \\
&= \frac{1}{2} [y_1(f_0 - f_2) + y_0(f_3 - f_1) + y_2(f_1 - f_3) + y_3(f_2 - f_0)] \\
&= \frac{1}{2} [(f_2 - f_0)(y_3 - y_1) + (f_1 - f_3)(y_2 - y_0)].
\end{aligned}$$

Итак, в результате получим формулу, выражающую производную в $P_{3/2}$ через координаты узлов контура 0123 и значения функции в этих узлах

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{(f_2 - f_0)(y_3 - y_1) + (f_1 - f_3)(y_2 - y_0)}{2S}. \quad (6.22)$$

Аналогично,

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{(f_2 - f_0)(x_1 - x_3) + (f_1 - f_3)(x_0 - x_2)}{2S}. \quad (6.23)$$

Приведем второй способ вычисления частных производных. Для этого выразим эти частные производные через производные по направлению и решим систему (6.18)–(6.19) относительно $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial l_1} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial l_1} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial l_1} \\ \frac{\partial f}{\partial l_2} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial l_2} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial l_2}, \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial l_1} = \frac{\partial f}{\partial x} \cos \alpha_1 + \frac{\partial f}{\partial y} \sin \alpha_1 \\ \frac{\partial f}{\partial l_2} = \frac{\partial f}{\partial x} \cos \alpha_2 + \frac{\partial f}{\partial y} \sin \alpha_2, \end{cases}$$

откуда

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} \sin \alpha_2 - \frac{\partial f}{\partial l_2} \sin \alpha_1}{\sin \alpha_2 \cos \alpha_1 - \sin \alpha_1 \cos \alpha_2}, \quad (6.24)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} \cos \alpha_2 - \frac{\partial f}{\partial l_2} \cos \alpha_1}{\sin \alpha_1 \cos \alpha_2 - \sin \alpha_2 \cos \alpha_1}. \quad (6.25)$$

Используя формулы (6.8)–(6.10), получим

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -\frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} \sin \alpha_2 - \frac{\partial f}{\partial l_2} \sin \alpha_1}{\sin \alpha_2 \cos \alpha_1 - \sin \alpha_1 \cos \alpha_2}, \quad (6.26)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} \cos \alpha_2 - \frac{\partial f}{\partial l_2} \cos \alpha_1}{\sin \alpha_1 \cos \alpha_2 - \sin \alpha_2 \cos \alpha_1}. \quad (6.27)$$

Преобразуя последнее выражение получим:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} n_{2x} - \frac{\partial f}{\partial l_2} n_{1x}}{-n_{2x} n_{1y} + n_{1x} n_{2y}}, \quad (6.28)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = -\frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} n_{2y} + \frac{\partial f}{\partial l_2} n_{1y}}{-n_{1x} n_{2y} + n_{2x} n_{1y}}. \quad (6.29)$$

Применяя (6.20), имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\frac{f_1 - f_3}{L_{13}} \frac{y_0 - y_2}{L_{20}} - \frac{f_0 - f_2}{L_{20}} \frac{y_1 - y_3}{L_{13}}}{-\frac{y_0 - y_2}{L_{20}} \frac{x_3 - x_1}{L_{13}} + \frac{y_1 - y_3}{L_{13}} \frac{x_2 - x_0}{L_{20}}} \\ &= \frac{-(f_1 - f_3)(y_2 - y_0) + (f_2 - f_0)(y_1 - y_3)}{-(y_2 - y_0)(x_1 - x_3) + (y_1 - y_3)(x_2 - x_0)} \\ &= \frac{(f_2 - f_0)(y_1 - y_3) - (f_1 - f_3)(y_2 - y_0)}{-2S} \\ &= \frac{(f_2 - f_0)(y_3 - y_1) + (f_1 - f_3)(y_2 - y_0)}{2S}, \end{aligned}$$

что совпадает с (6.22). Аналогично выписывается выражение для $\partial f/\partial y$. Таким образом, оба способа вычисления частных производных приводят к одному и тому же результату.

Выразим компоненты вектора \vec{W} через газодинамические величины ρ , \vec{u} , p и вычисленные выше частные производные, подставим эти выражения в аппроксимацию (6.5) и выпишем разностный алгоритм расчета течения на неструктурированной сетке.

6.4 Разностные схемы для двумерных течений

Приведем разностную схему для расчета сверхзвуковых двумерных плоских течений.

Уравнения для вычисления плотности, компонент скорости, энергии и выражение для пересчета давления имеют вид:

$$\hat{\rho}_i = \rho_i - \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(j_{m,k+1/2}^x n_{k+1/2}^x + j_{m,k+1/2}^y n_{k+1/2}^y \right) L_k,$$

$$\begin{aligned} \hat{u}_i^x = \frac{1}{\hat{\rho}_i} \left(\rho_i u_i^x + \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(\left[\Pi_{k+1/2}^{xx} - j_{m,k+1/2}^x u_{k+1/2}^x - p \right] n_{k+1/2}^x + \right. \right. \\ \left. \left. + \left[\Pi_{k+1/2}^{yx} - j_{m,k+1/2}^y u_{k+1/2}^x \right] n_{k+1/2}^y \right) L_k \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{u}_i^y = \frac{1}{\hat{\rho}_i} \left(\rho_i u_i^y + \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(\left[\Pi_{k+1/2}^{xy} - j_{m,k+1/2}^x u_{k+1/2}^y \right] n_{k+1/2}^x + \right. \right. \\ \left. \left. + \left[\Pi_{k+1/2}^{yy} - j_{m,k+1/2}^y u_{k+1/2}^y - p \right] n_{k+1/2}^y \right) L_k \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_i = E_i + \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(\left[\Pi_{k+1/2}^{xx} u_{k+1/2}^x + \Pi_{k+1/2}^{xy} u_{k+1/2}^y - \right. \right. \\ \left. \left. - q_{k+1/2}^x - \frac{E_{k+1/2} + p_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} j_{m,k+1/2}^x \right] n_{k+1/2}^x + \right. \end{aligned}$$

$$+ \left[\Pi_{k+1/2}^{yx} u_{k+1/2}^x + \Pi_{k+1/2}^{yy} u_{k+1/2}^y - q_{k+1/2}^y - \frac{E_{k+1/2} + p_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} j_{m,k+1/2}^y \right] n_{k+1/2}^y \Big) L_k,$$

$$\hat{p}_i = (\gamma - 1) \left(\hat{E}_i - \hat{\rho}_i \frac{(\hat{u}_i^x)^2 + (\hat{u}_i^y)^2}{2} \right).$$

Индекс i — номер узла сетки, k — номер узла контура L . Релаксационный параметр и коэффициент вязкости вычисляются как

$$\tau_k = \alpha \frac{\sum_{k=0}^K L_k}{K} \left(\gamma \frac{p_k}{\rho_k} \right)^{-1/2} + \frac{Ma}{Re} \left(\frac{p_k \gamma}{\rho_k} \right)^\omega \frac{1}{p_k Sc}, \quad \mu_k = p_k Sc \tau_k,$$

$$\mu_{k+1/2} = \frac{\mu_k + \mu_{k+1}}{2}, \quad \tau_{k+1/2} = \frac{\tau_k + \tau_{k+1}}{2}.$$

Здесь K — число узлов в контуре L , Pr — число Прандтля, Sc — число Шмидта, γ — показатель адиабаты, α — численный коэффициент $[0, 1]$.

Газодинамические параметры в полуцелых точках равны:

$$\rho_{k+1/2} = \frac{\rho_k + \rho_{k+1}}{2}, \quad p_{k+1/2} = \frac{p_k + p_{k+1}}{2}, \quad \vec{u}_{k+1/2} = \frac{\vec{u}_k + \vec{u}_{k+1}}{2},$$

$$E_{k+1/2} = \rho_{k+1/2} \frac{(u_{k+1/2}^x)^2 + (u_{k+1/2}^y)^2}{2} + \frac{1}{\gamma - 1} p_{k+1/2},$$

Входящие в систему разностных уравнений потоки в полуцелых точках аппроксимируются как

$$j_{m,k+1/2}^x = \rho(u_{k+1/2}^x - w_{k+1/2}^x),$$

$$j_{m,k+1/2}^y = \rho(u_{k+1/2}^y - w_{k+1/2}^y),$$

$$w_{k+1/2}^x = \frac{\tau_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \rho (u^x)^2 \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} \rho u^x u^y \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$w_{k+1/2}^y = \frac{\tau_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \rho u^x u^y \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} \rho (u^y)^2 \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsk+1/2}^{xx} = \mu_{k+1/2} \left[\frac{4}{3} \left(\frac{\partial u^x}{\partial x} \right)_{k+1/2} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u^y}{\partial y} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsk+1/2}^{xy} = \Pi_{nsk+1/2}^{yx} = \mu_{k+1/2} \left[\left(\frac{\partial u^x}{\partial y} \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial u^y}{\partial x} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsk+1/2}^{yy} = \mu_{k+1/2} \left[\frac{4}{3} \left(\frac{\partial u^y}{\partial y} \right)_{k+1/2} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u^x}{\partial x} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{k+1/2}^{xx} = \Pi_{nsk+1/2}^{xx} + u_{k+1/2}^x w_{k+1/2}^{x*} + R_{k+1/2}^*,$$

$$\Pi_{k+1/2}^{xy} = \Pi_{nsk+1/2}^{xy} + u_{k+1/2}^x w_{k+1/2}^{y*},$$

$$\Pi_{k+1/2}^{yx} = \Pi_{nsk+1/2}^{yx} + u_{k+1/2}^y w_{k+1/2}^{x*},$$

$$\Pi_{k+1/2}^{yy} = \Pi_{nsk+1/2}^{yy} + u_{k+1/2}^y w_{k+1/2}^{y*} + R_{k+1/2}^*,$$

Вспомогательные величины $w_{k+1/2}^{x*}$, $w_{k+1/2}^{y*}$, $R_{k+1/2}^*$ вычисляются по формулам:

$$w_{k+1/2}^{x*} = \tau_{k+1/2} \left[\rho_{k+1/2} \left(u_{k+1/2}^x \left(\frac{\partial u^x}{\partial x} \right)_{k+1/2} + u_{k+1/2}^y \left(\frac{\partial u^x}{\partial y} \right)_{k+1/2} \right) + \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{k+1/2} \right]$$

$$w_{k+1/2}^{y*} = \tau_{k+1/2} \left[\rho_{k+1/2} \left(u_{k+1/2}^x \left(\frac{\partial u^y}{\partial x} \right)_{k+1/2} + u_{k+1/2}^y \left(\frac{\partial u^y}{\partial y} \right)_{k+1/2} \right) + \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_{k+1/2} \right]$$

$$R_{k+1/2}^* = \tau_{k+1/2} \left[u_{k+1/2}^x \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{k+1/2} + u_{k+1/2}^y \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)_{k+1/2} + \gamma p_{k+1/2} \left(\left(\frac{\partial u^x}{\partial x} \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial u^y}{\partial y} \right)_{k+1/2} \right) \right]$$

$$q_{nsk+1/2}^x = -\frac{\mu_{k+1/2}}{Pr} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \frac{p}{\rho} \right)_{k+1/2},$$

Компоненты теплового потока вычисляются следующим образом:

$$q_{nsk+1/2}^y = -\frac{\mu_{k+1/2}}{Pr} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{\partial p}{\partial y} \frac{p}{\rho} \right)_{k+1/2},$$

$$q_{k+1/2}^x = q_{ns}^x - u_{k+1/2}^x R_{k+1/2}^q, \quad q_{k+1/2}^y = q_{ns}^y - u_{k+1/2}^y R_{k+1/2}^q,$$

где вспомогательная величина равна

$$R_{k+1/2}^q = \tau_{k+1/2} \rho_{k+1/2} \left[\frac{1}{\gamma - 1} \left(u_{k+1/2}^x \left(\frac{\partial p}{\partial x \rho} \right)_{k+1/2} + \right. \right. \\ \left. \left. u_{k+1/2}^y \left(\frac{\partial p}{\partial y \rho} \right)_{k+1/2} \right) + p_{k+1/2} \left(u_{k+1/2}^x \left(\frac{\partial 1}{\partial x \rho} \right)_{k+1/2} + \right. \right. \\ \left. \left. u_{k+1/2}^y \left(\frac{\partial 1}{\partial y \rho} \right)_{k+1/2} \right) \right]$$

Приведенная здесь разностная аппроксимация КГД уравнений построена для плоских двумерных течений на основе записи этих уравнений в виде (5.1)–(5.4). Разностная аппроксимация уравнений в цилиндрической геометрии строится аналогичным образом на основе записи уравнений в виде (5.15)–(5.18):

$$\hat{\rho}_i = \rho_i - \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(j_{m,k+1/2}^r n_{k+1/2}^r + j_{m,k+1/2}^z n_{k+1/2}^z \right) L_k, \\ \hat{u}_i^r = \frac{1}{\hat{\rho}_i} \left(\rho_i u_i^r + \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(\left[\Pi_{k+1/2}^{rr} - j_{m,k+1/2}^r u_{k+1/2}^r - p \right] n_{k+1/2}^r + \right. \right. \\ \left. \left. + \left[\Pi_{k+1/2}^{zr} - j_{m,k+1/2}^z u_{k+1/2}^r \right] n_{k+1/2}^z \right) L_k - \frac{\Pi_i^{\phi\phi}}{r_i} \right), \\ \hat{u}_i^z = \frac{1}{\hat{\rho}_i} \left(\rho_i u_i^z + \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(\left[\Pi_{k+1/2}^{rz} - j_{m,k+1/2}^r u_{k+1/2}^z \right] n_{k+1/2}^r + \right. \right. \\ \left. \left. + \left[\Pi_{k+1/2}^{zz} - j_{m,k+1/2}^z u_{k+1/2}^z - p \right] n_{k+1/2}^z \right) L_k \right), \\ \hat{E}_i = E_i + \frac{\Delta t}{S} \sum_k \left(\left[\Pi_{k+1/2}^{rr} u_{k+1/2}^r + \Pi_{k+1/2}^{rz} u_{k+1/2}^z - q_{k+1/2}^r - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{E_{k+1/2} + p_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} j_{m,k+1/2}^r \right] n_{k+1/2}^r + \left[\Pi_{k+1/2}^{zr} u_{k+1/2}^r + \right. \right. \\ \left. \left. + \Pi_{k+1/2}^{zz} u_{k+1/2}^z - q_{k+1/2}^z - \frac{E_{k+1/2} + p_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} j_{m,k+1/2}^z \right] n_{k+1/2}^z \right) L_k,$$

$$\hat{p}_i = (\gamma - 1) \left(\hat{E}_i - \hat{\rho}_i \frac{(\hat{u}^r_i)^2 + (\hat{u}^z_i)^2}{2} \right).$$

Здесь индекс i — номер узла сетки, k — номер узла контура L .

Параметр релаксации и коэффициент вязкости рассчитываются в виде

$$\tau_k = \alpha \frac{\sum_{k=0}^K L_{k,k+1}}{K} \left(\gamma \frac{p_k}{\rho_k} \right)^{-1/2} + \frac{Ma}{Re} \left(\frac{p_k \gamma}{\rho_k} \right)^\omega \frac{1}{p_k Sc},$$

$$\mu_k = p_k Sc \tau_k,$$

Величины в полуцелых точках вычисляются как средние арифметические значения в ближайших узлах

$$\mu_{k+1/2} = \frac{\mu_k + \mu_{k+1}}{2}, \quad \tau_{k+1/2} = \frac{\tau_k + \tau_{k+1}}{2},$$

$$\rho_{k+1/2} = \frac{\rho_k + \rho_{k+1}}{2}, \quad p_{k+1/2} = \frac{p_k + p_{k+1}}{2}, \quad \vec{u}_{k+1/2} = \frac{\vec{u}_k + \vec{u}_{k+1}}{2},$$

$$E_{k+1/2} = \rho_{k+1/2} \frac{(u_{k+1/2}^r)^2 + (u_{k+1/2}^z)^2}{2} + \frac{1}{\gamma - 1} p_{k+1/2},$$

Входящие в уравнения основной системы потоки рассчитываются по формулам

$$w_{k+1/2}^r = \frac{\tau_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial r} \rho (u^r)^2 \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\rho (u^r)^2}{r} \right)_{k+1/2} + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial}{\partial z} \rho u^r u^z \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$w_{k+1/2}^z = \frac{\tau_{k+1/2}}{\rho_{k+1/2}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial r} \rho u^r u^z \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\rho u^r u^z}{r} \right)_{k+1/2} + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial}{\partial z} \rho (u^z)^2 \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$j_{m,k+1/2}^r = \rho (u_{k+1/2}^r - w_{k+1/2}^r), \quad j_{m,k+1/2}^z = \rho (u_{k+1/2}^z - w_{k+1/2}^z),$$

Компоненты тензора вязких напряжений имеют вид

$$\Pi_{nsk+1/2}^{rr} = \mu_{k+1/2} \left[\frac{4}{3} \left(\frac{\partial u^r}{\partial r} \right)_{k+1/2} - \frac{2}{3} \left(\frac{u^r}{r} \right)_{k+1/2} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsk+1/2}^{rz} = \mu_{k+1/2} \left[\left(\frac{\partial u^r}{\partial z} \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial u^z}{\partial r} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsk+1/2}^{zr} = \mu_{k+1/2} \left[\left(\frac{\partial u^z}{\partial r} \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial u^r}{\partial z} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsk+1/2}^{zz} = \mu_{k+1/2} \left[\frac{4}{3} \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)_{k+1/2} - \frac{2}{3} \left(\frac{u^r}{r} \right)_{k+1/2} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u^r}{\partial r} \right)_{k+1/2} \right],$$

$$\Pi_{nsi}^{\phi\phi} = \mu_i \left[\frac{4}{3} \left(\frac{u^r}{r} \right)_i - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u^r}{\partial r} \right)_i - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)_i \right],$$

$$\Pi_{k+1/2}^{rr} = \Pi_{nsk+1/2}^{rr} + u_{k+1/2}^r w_{k+1/2}^{*r} + R^*,$$

$$\Pi_{k+1/2}^{rz} = \Pi_{nsk+1/2}^{rz} + u_{k+1/2}^r w_{k+1/2}^{*z},$$

$$\Pi_{k+1/2}^{zr} = \Pi_{nsk+1/2}^{zr} + u_{k+1/2}^z w_{k+1/2}^{*r},$$

$$\Pi_{k+1/2}^{zz} = \Pi_{nsk+1/2}^{zz} + u_{k+1/2}^z w_{k+1/2}^{*z} + R^*,$$

$$\Pi_{si}^{\phi\phi} = \Pi_{nsi}^{\phi\phi} + R^*,$$

Вспомогательные величины аппроксимируются в виде

$$w_{k+1/2}^{*r} = \tau_{k+1/2} \left(\rho_{k+1/2} u_{k+1/2}^z \left(\frac{\partial u^r}{\partial z} \right)_{k+1/2} + \rho_{k+1/2} u_{k+1/2}^r \left(\frac{\partial u^r}{\partial r} \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right)_{k+1/2} \right),$$

$$w_{k+1/2}^{*z} = \tau_{k+1/2} \left(\rho_{k+1/2} u_{k+1/2}^z \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)_{k+1/2} + \right. \\ \left. + \rho_{k+1/2} u_{k+1/2}^r \left(\frac{\partial u^z}{\partial r} \right)_{k+1/2} + \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{k+1/2} \right),$$

$$R^* = \tau_{k+1/2} \left[u_{k+1/2}^z \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{k+1/2} + u_{k+1/2}^r \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right)_{k+1/2} + \right. \\ \left. + \gamma p_{k+1/2} \left(\left(\frac{\partial u^r}{\partial r} \right)_{k+1/2} + \frac{u_{k+1/2}^r}{r} + \left(\frac{\partial u^z}{\partial z} \right)_{k+1/2} \right) \right].$$

Радиальная и осевая компоненты теплового потока вычисляются согласно формулам

$$q_{k+1/2}^r = q_{ns}^r - u_{k+1/2}^r R_{k+1/2}^q, \quad q_{k+1/2}^z = q_{ns}^z - u_{k+1/2}^z R_{k+1/2}^q,$$

где

$$R_{k+1/2}^q = \tau_{k+1/2} \rho_{k+1/2} \left[\frac{1}{\gamma - 1} \left(u_{k+1/2}^r \left(\frac{\partial p}{\partial r \rho} \right)_{k+1/2} + \right. \right. \\ \left. \left. + u_{k+1/2}^z \left(\frac{\partial p}{\partial z \rho} \right)_{k+1/2} \right) + p_{k+1/2} \left(u_{k+1/2}^r \left(\frac{\partial 1}{\partial r \rho} \right)_{k+1/2} + \right. \right. \\ \left. \left. + u_{k+1/2}^z \left(\frac{\partial 1}{\partial z \rho} \right)_{k+1/2} \right) \right].$$

6.5 Аппроксимация граничных условий

Для замыкания разностной формы системы КГД построим аппроксимацию граничных условий.

Пусть пространственная сетка выбрана таким образом, что ее узлы попадают на границу расчетной области. Обратимся к рис. 6.4.

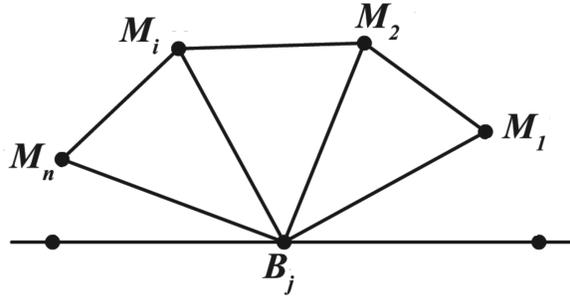


Рис. 6.4. Аппроксимация граничных условий.

Здесь B_j — граничный узел, M_i — внутренние узлы сетки. Рассмотрим аппроксимацию граничных условий для некоторой газодинамической величины $f = (\vec{u}, \rho, p, T)$ в узле B_j . Для остальных граничных узлов аппроксимация производится аналогичным образом.

Граничное условие Дирихле

$$f|_{\Gamma} = f_0$$

будем аппроксимировать следующим образом:

$$f(B_j) = f_0,$$

где Γ — граница области.

Граничные условия второго и третьего рода будем аппроксимировать с использованием внутренних узлов сетки.

Пусть в результате расчета по разностной схеме (6.5) на некотором шаге по времени определены значения величины f во внутренних узлах сетки. Определим значения на границе через средневзвешенные значения f во внутренних узлах, треугольники которых содержат данный граничный узел в качестве вершины. Для граничного узла B_j это будут внутренние узлы: M_1, M_2, \dots, M_n .

Граничное условие Неймана

$$\left. \frac{\partial f}{\partial n} \right|_{\Gamma} = q_0$$

запишем в виде:

$$f(B_j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} f(M_i) + \frac{q_0}{N} \sum_{i=1}^{i=N} L(B_j, M_i).$$

Здесь $L(B_j, M_i)$ — проекция отрезка $B_j - M_i$ на внутреннюю нормаль к границе. Граничное условие III рода

$$\left[\frac{\partial f}{\partial n} + \beta f \right] \Big|_{\Gamma} = q_0$$

аппроксимируем в виде:

$$f(B_j) = \frac{\sum_{i=1}^{i=N} f(M_i) + q_0 \sum_{i=1}^{i=N} L(B_j, M_i)}{N + \beta \sum_{i=1}^{i=N} L(B_j, M_i)}.$$

6.6 Расчет течения в окрестности цилиндра

В качестве примера использования выписанного выше алгоритма приведем решение задачи о поперечном обтекании кругового цилиндра дозвуковым потоком вязкого газа. Эта задача является объектом исследований многих авторов [11, 16, 77, 107, 183, 197]. Интерес к ней вызван существованием различных режимов течения в следе за цилиндром, отвечающих одним и тем же краевым условиям задачи. Рассматриваемая задача является известным тестом для проверки эффективности численных алгоритмов [61].

Структура течения в следе для вязких несжимаемых течений определяется числом Рейнольдса

$$Re = \frac{D\rho_0 u_0}{\mu_0}, \quad (6.30)$$

где D — диаметр цилиндра, u_0 — скорость набегающего потока, μ_0 , ρ_0 — динамическая вязкость и плотность жидкости в набегающем невозмущенном потоке. Экспериментально установлено, что при $1 < Re < Re_1$ ($Re_1 \approx 40$) режим стационарного вязкого обтекания устойчив, и представляет собой систему двух симметричных вихревых структур за цилиндром; при $Re_1 < Re < Re_2$ ($Re_2 \approx 150$)

за цилиндром возникают регулярные периодические срывы вихрей которые в следе за цилиндром образуют так называемую дорожку Кармана. Число Re_1 является критическим числом Рейнольдса. Для характеристики частоты возникающих колебаний вводят безразмерную величину — число Струхала

$$Sh = \frac{D}{Tu_0}, \quad (6.31)$$

где T — период колебаний.

Релеем ¹ была предложена эмпирическая зависимость частоты колебаний от числа Рейнольдса в интервале (Re_1, Re_2) в виде

$$Sh = a \left(1 - \frac{b}{Re} \right). \quad (6.32)$$

Согласно исследованиям Релея, численные коэффициенты равны $a = 0.195$, $b = 16.3$. Более поздние уточненные данные [107, 183] определяют эти коэффициенты как $a = 0.212$, $b = 21.2$.

Рассматриваем задачу об обтекании цилиндра в двумерной постановке в декартовой системе координат. Расчет проводится на неструктурированной сетке, пример которой приведен на рис. 6.5.

Приведение задачи к безразмерному виду и выбор граничных условий выполнены в соответствии с процедурой, описанной в разделе 5.10, где в качестве характерного линейного размера выбран диаметр цилиндра D .

Начальные условия представляют собой равномерный поток газа с плотностью $\rho_0 = 1$, давлением $p_0 = 1/(\gamma Ma^2)$, числом Маха $Ma = 0.1$, скоростью вдоль оси x $u_{0x} = 1$ и скоростью вдоль оси y $u_{0y} = 0$. Условия на верхней и нижней границах области расчета имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad u_x = 1, \quad u_y = 0,$$

на левой границе

$$\rho = 1, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = -0.1, \quad u_x = 1, \quad u_y = 0,$$

¹L.Rayleigh. "Aeolian tones Philos.Mag. 29, 433, (1915).

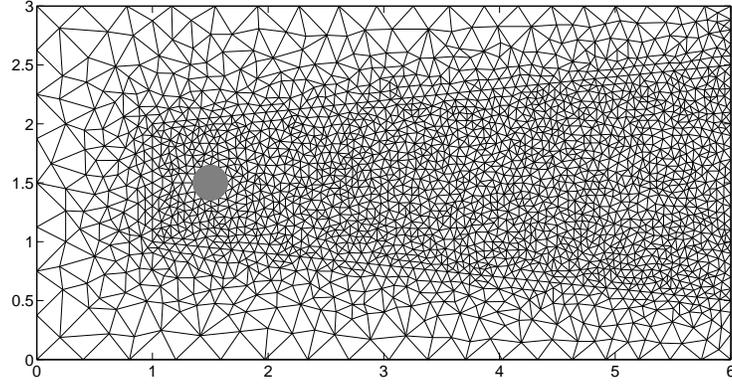
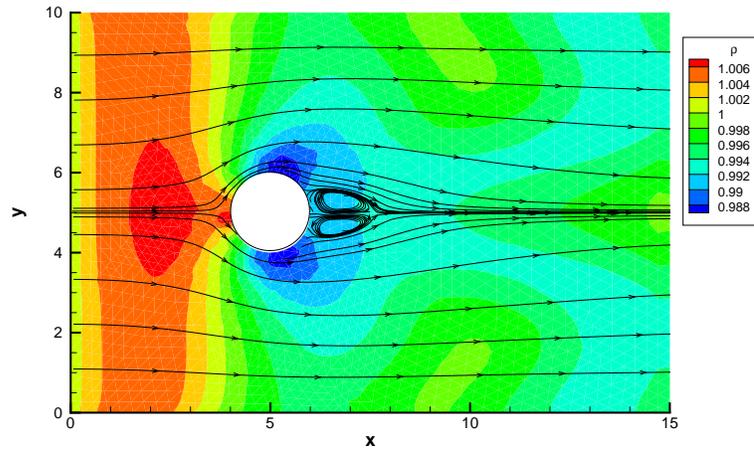
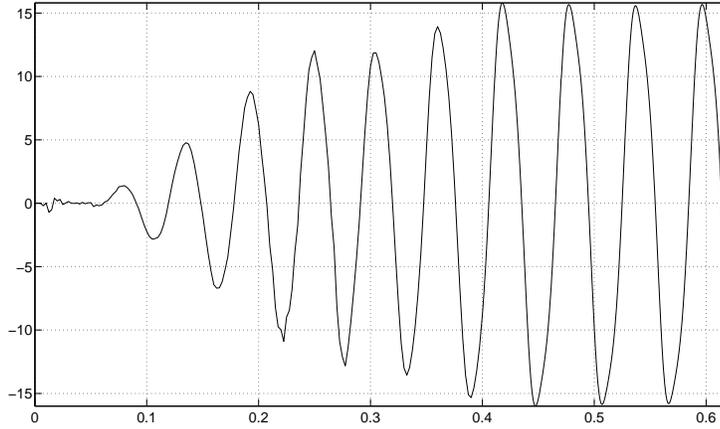


Рис. 6.5. Расчетная область и распределение узлов сетки

Рис. 6.6. Распределение плотности ρ и линий тока для числа Рейнольдса $Re = 20$. Фрагмент

на правой границе

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0, \quad p = \frac{1}{\gamma Ma^2}, \quad \frac{\partial u_x}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial u_y}{\partial n} = 0.$$

Рис. 6.7. Временная зависимость составляющей скорости u_y для $Re = 90$

На боковой поверхности цилиндра полагаем

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad u_x = 0, \quad u_y = 0.$$

Расчет проводится для чисел Рейнольдса, отвечающий двум режимам течения, а именно, для $Re = 20$, что соответствует стационарному случаю, и $Re = 90$ и 100 , что соответствует автоколебательному режиму. Эффекты, связанные со сжимаемостью среды, имеют порядок $O(Ma^2)$ и в данной задаче их можно считать несущественными.

На рис. 6.6 приведено распределение плотности и линии тока для стационарного режима обтекания, $Re = 20$. Расчет проведен на сетке с числом узлов 2018 и числом треугольных элементов – 3840.

Результаты расчета для колебательного режима обтекания при $Re = 90$ выполнены в размерном виде². Рассматривалось обтекание цилиндра $D = 0.3$ м. воздухом, находящимся при нормальных условиях, со скоростью $u_0 = 35.31$ м/сек. Использовалась сетка, состоящая из 2191 узлов и 4307 треугольников (рис. 6.5).

²Результаты получены А.А. Хохловым

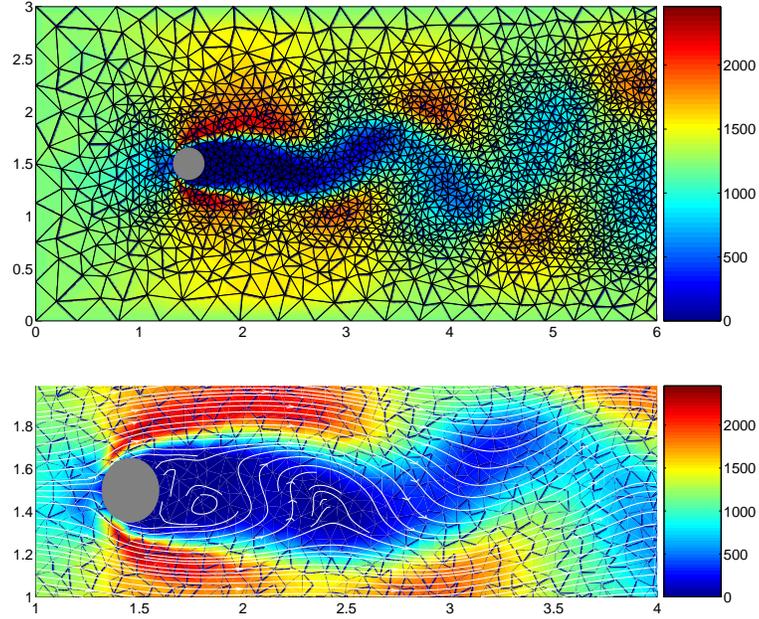


Рис. 6.8. Линии тока и сетка в автоколебательном процессе для числа Рейнольдса $Re = 90$ для $t=0.5$ сек.

На рис. 6.7 представлена зависимость скорости u_x от времени t для случая автоколебательного режима для $Re = 90$ в точке с координатами $(3, 1.5)$.

Согласно рис. 6.7 период колебаний составляет $T = 0.059$ сек., что соответствует $Sh = 0.147$. Период колебаний и безразмерная частота, вычисленные по формуле Релея (6.32) для несжимаемого течения с коэффициентами $a = 0.212$, $b = 21.2$, составляют $T = 0.0524$ сек, $Sh = 0.162$. Последние значения достаточно близки к величинам, полученным в численном расчете. При сгущении пространственной сетки вблизи границы цилиндра (3472 узла, 6839 треугольников) точность расчета увеличивается.

Линии тока и изоповерхности квадрата скорости \vec{u}^2 на момент времени $t = 0.5$ сек. представлены на рис. 6.8 для полной области

расчета (верхний рисунок) и ее фрагмента (нижний рисунок). На верхнем рисунке дополнительно показана структура сетки, на нижнем — линии тока.

Данный расчет показывает, что КГД алгоритм адекватно описывает особенности и частотные характеристики нестационарного течения вязкого сжимаемого газа.

В заключение обратим внимание на то, что во всех рассмотренных выше задачах численного моделирования газодинамических течений — как одномерных, так и двумерных, как стационарных так и нестационарных, с использованием прямоугольных или неструктурированных сеток, применялся, фактически, один и тот же КГД алгоритм. Единственным параметром настройки являлся параметр τ , изменение которого от расчета к расчету было минимальным. Такая универсальность алгоритма является неоспоримым достоинством КГД подхода. Другим достоинством КГД алгоритмов является простота его построения и численной реализации, что особенно важно при построении численных алгоритмов с использованием сложных пространственных сеток и применении параллельных вычислений.

Глава 7

Квазигидродинамические уравнения и течения вязкой несжимаемой жидкости

Эта глава целиком посвящена второй КГД системе — системе квазигидродинамических уравнений. Эти уравнения были построены в работах Ю.В. Шеретова, среди которых укажем [110–112, 114]. Им же было проведено детальное исследование этих уравнений, выписан их вид для течения вязкой несжимаемой жидкости в приближении Обербека–Буссинеска и построена серия точных решений, которые были сопоставлены с соответствующими решениями уравнений Навье–Стокса. Для квазигидродинамической системы уравнений будем в этой главе вновь использовать сокращение КГД.

В данной главе описаны алгоритмы расчета течений вязкой несжимаемой жидкости, основанные на КГД уравнениях, и приведены примеры их использования для моделирования двумерных и трехмерных нестационарных течений. При изложении использованы результаты работ [27, 35–38, 40, 94, 149, 151].

7.1 Квазигидродинамическая система уравнений

Квазигидродинамическая система уравнений Шеретова была выписана в первой главе в следующем виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0, \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \rho \vec{F} + \operatorname{div} \Pi, \quad (7.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \operatorname{div} \vec{q} = \\ = (\vec{j}_m \cdot \vec{F}) + \operatorname{div}(\Pi \cdot \vec{u}). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Замыкающие соотношения для этой системы имеют вид

$$\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w}), \quad (7.4)$$

$$\Pi = \Pi_{NS} + \rho\vec{u} \otimes \vec{w}, \quad (7.5)$$

$$\vec{q} = -\kappa\vec{\nabla}T, \quad (7.6)$$

$$\vec{w} = \frac{\tau}{\rho}[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla}p - \rho\vec{F}], \quad (7.7)$$

где

$$\Pi_{NS} = \mu[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T - \frac{2}{3}I \operatorname{div} \vec{u}].$$

В последнем выражении опущено выражение для второй вязкости.

Величина \vec{j}_m интерпретируется как пространственно-временной вектор плотности потока массы, $\rho\vec{u}$ — как пространственно-временной импульс единицы объема жидкости.

Подставив выражения (7.4), (7.5) и (7.6) в (7.1)–(7.3), получим следующий вид квазигидродинамической системы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\vec{u}) = \operatorname{div}(\rho\vec{w}), \quad (7.8)$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla}p = \rho\vec{F} + \operatorname{div}\Pi_{NS} + \operatorname{div}[(\rho\vec{w} \otimes \vec{u}) + (\rho\vec{u} \otimes \vec{w})], \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\rho\vec{u} \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) + p\vec{u} \right] + \operatorname{div}\vec{q} = \rho\vec{F} \cdot (\vec{u} - \vec{w}) + \\ + \operatorname{div}(\Pi_{NS} \cdot \vec{u}) + \operatorname{div} \left[\rho\vec{w} \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) + p\vec{w} + \rho\vec{u}(\vec{w} \cdot \vec{u}) \right]. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Приведенная система уравнений дополняется уравнениями состояния (1.16). Уравнение баланса энтропии имеет вид (1.67).

Система уравнений (7.8)–(7.10) была выписана в [110] и детально исследована в последующих работах [111, 112, 114]. Эта система была построена на основе законов сохранения с помощью методики, изложенной в п.3.6. При этом в выражениях (3.61) следует положить $\rho^* = \rho$, $p^* = p$.

Для многих гидродинамических течений изменением плотности жидкости можно пренебречь. Считая величину ρ постоянной, и учитывая ее изменение только в слагаемом с выталкивающей силой, запишем систему (7.8)–(7.10) в приближении Обербека–Буссинеска

$$\operatorname{div} \vec{u} = \operatorname{div} \vec{w}, \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{u} \otimes \vec{u}) + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p = \\ & = \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \Pi_{NS} + \operatorname{div}[(\vec{w} \otimes \vec{u}) + (\vec{u} \otimes \vec{w})] - \beta \vec{g} T, \end{aligned} \quad (7.12)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{u} T) = \operatorname{div}(\vec{w} T) + \chi \Delta T. \quad (7.13)$$

Здесь $\rho = \operatorname{const} > 0$ — среднее значение плотности, $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x}, t)$ — гидродинамическая скорость, $p = p(\vec{x}, t)$ — давление, отсчитываемое от гидростатического, $T = T(\vec{x}, t)$ — отклонение температуры от ее среднего значения T_0 . Здесь мы полагаем $F = -\beta g T$, \vec{g} — ускорение свободного падения и β — температурный коэффициент расширения жидкости. Навье-стоксовский тензор вязких напряжений и вектор \vec{w} вычисляются как

$$\Pi_{NS} = \mu[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T], \quad (7.14)$$

$$\vec{w} = \tau \left[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p + \beta \vec{g} T \right]. \quad (7.15)$$

В уравнениях (7.17)–(7.19), а также в выражениях (7.14)–(7.15) коэффициенты динамической вязкости μ , температуропроводности $\chi = \kappa/(c_p \rho)$ и параметр τ считаются положительными постоянными. Параметр τ может быть вычислен по формуле

$$\tau = \frac{\mu}{\rho c^2} = \frac{\nu}{c^2}, \quad (7.16)$$

где c — скорость звука в жидкости при температуре T_0 , ν — коэффициент кинематической вязкости.

При $\tau \rightarrow 0$ КГД система уравнений переходит в классическую систему уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска [72].

В [112] была построена серия точных решений КГД уравнений, соответствующая ряду известных решений классической системы уравнений Навье–Стокса. В частности, это закон Архимеда, течения Куэтта и Пуазейля, решения нестационарных задач Стокса и Рэлея, решение задачи о течении в плоском вертикальном и горизонтальном слое.

КГД система в приближении Обербека–Буссинеска может быть приведена к эквивалентному недивергентному виду

$$\operatorname{div}(\vec{u} - \vec{w}) = 0, \quad (7.17)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} - \vec{w}) \cdot \vec{\nabla} \vec{u} + \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p = \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \Pi - \beta \vec{g} T \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{u} - \vec{w}) \cdot \vec{\nabla} T = \chi \Delta T. \quad (7.19)$$

Система КГД уравнений (7.17)–(7.19) является диссипативной. Для нее справедливо уравнение, описывающее изменение во времени кинетической энергии с неотрицательной диссипативной функцией в правой части. В случае отсутствия внешних сил, умножая уравнение (7.18) скалярно на $\rho \vec{u}$ и преобразуя полученное равенство с учетом (7.17), получим уравнение баланса кинетической энергии в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{\vec{u}^2}{2} \right) + \operatorname{div} \left[(\vec{u} - \vec{w}) \left(\rho \frac{\vec{u}^2}{2} + p \right) - \rho \vec{u} (\vec{w} \cdot \vec{u}) - (\Pi_{NS} \cdot \vec{u}) \right] = -\Phi_{QHD},$$

где Φ_{QHD} — диссипативная функция (1.67). Из этого уравнения следует теорема о невозрастании полной кинетической энергии системы в виде

$$\frac{dE}{dt} = - \int_{V_0} \Phi_{QHD} d\vec{x},$$

где $E(t) = \int_{V_0} (\rho \vec{u}^2)/2 d\vec{x}$ — полная кинетическая энергия жидкости в объеме V_0 . Аналогичный закон изменения кинетической энергии справедлив и для системы уравнений Навье–Стокса.

При исследовании течений в замкнутых областях для КГД системы используются традиционные граничные условия, принятые в теории Навье–Стокса, дополненные условием непротекания массы в виде $(\vec{j}_m \cdot \vec{n}) = 0$, где \vec{n} — поле внешних единичных нормалей к поверхности.

КГД уравнения для течения вязкой несжимаемой жидкости в отсутствии внешних сил для случая плоских ($k = 0$) и осесимметричных ($k = 1$) течений можно записать в следующем виде

$$\frac{1}{r^k} \frac{\partial(r^k u_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = \frac{1}{r^k} \frac{\partial(r^k w_r)}{\partial r} + \frac{\partial w_z}{\partial z},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_r}{\partial t} + \frac{1}{r^k} \frac{\partial(r^k u_r^2)}{\partial r} + \frac{\partial(u_z u_r)}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \\ = \frac{2}{r^k} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^k \nu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\nu \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) \right] - k \frac{2\nu u_r}{r^2} \\ + \frac{2}{r^k} \frac{\partial(r^k u_r w_r)}{\partial r} + \frac{\partial(u_r w_z)}{\partial z} + \frac{\partial(u_z w_r)}{\partial z}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_z}{\partial t} + \frac{1}{r^k} \frac{\partial(r^k u_r u_z)}{\partial r} + \frac{\partial(u_z^2)}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \\ = \frac{1}{r^k} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^k \nu \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) \right] + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \\ + \frac{1}{r^k} \frac{\partial(r^k u_z w_r)}{\partial r} + 2 \frac{\partial(u_z w_z)}{\partial z} + \frac{1}{r^k} \frac{\partial(r^k u_r w_z)}{\partial r}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r^k} \frac{\partial}{\partial r} (r^k u_r T) + \frac{\partial}{\partial z} (u_z T) = \frac{1}{r^k} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^k \chi \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ + \frac{1}{r^k} \frac{\partial}{\partial r} (r^k w_r T) + \frac{\partial}{\partial z} (w_z T), \end{aligned}$$

где поправки к скорости имеют вид

$$w_r = \tau \left(u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \right),$$

$$w_z = \tau \left(u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right).$$

7.2 Вычислительный алгоритм

КГД уравнения для описания вязких несжимаемых течений позволяют строить эффективные численные алгоритмы решения уравнений гидродинамики в переменных скорость–давление. Эти новые алгоритмы имеют целый ряд преимуществ по сравнению с традиционными численными методами, построенными на основе уравнений Навье–Стокса.

КГД алгоритмы для расчета вязких несжимаемых течений обладают следующими особенностями, отличающими их от алгоритмов, основанных на системе Навье–Стокса:

- Дополнительные диссипативные слагаемые, присутствующие в системе КГД уравнений, служат эффективным регуляризатором численного алгоритма. Это позволяет использовать центрально-разностные аппроксимации для всех пространственных производных, включая конвективные слагаемые. В алгоритмах на основе системы Навье–Стокса, как правило, используются более сложные аппроксимации конвективных слагаемых.
- В рамках КГД подхода уравнение Пуассона для давления непосредственно следует из уравнения неразрывности. В модели Навье–Стокса уравнение для давления является следствием уравнений движения и уравнения неразрывности, что усложняет процедуру численного решения системы в целом.
- В отличие от системы Навье–Стокса, в КГД модели естественным образом выписываются граничные условия для давления, необходимые для решения уравнения Пуассона. Эти условия непосредственно следуют из задаваемых условий для вектора плотности потока массы \vec{j}_m на границе.

Последний факт упрощает численное решение уравнения Пуассона. В частности, это дает возможность определять значения давления и компонент скорости в одних и тех же узлах разностной сетки, что позволяет избежать введения так называемых разнесенных пространственных сеток. Использование таких сеток особенно затруд-

нительно для расчетов на неструктурированных или трехмерных сетках.

Приведем пример разностного алгоритма, основанного на КГД уравнениях. Для этого выпишем систему (7.11)–(7.13) в приближении Обербека–Буссинеска в безразмерном виде для случая плоских нестационарных течений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \tau \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) \\ + \tau \frac{\partial}{\partial y} \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - GrT \right), \end{aligned} \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u^2) + \frac{\partial}{\partial y}(uv) + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{2}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2\tau \frac{\partial}{\partial x} u \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (7.21)$$

$$\begin{aligned} + \tau \frac{\partial}{\partial y} v \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \tau \frac{\partial}{\partial y} u \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - GrT \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(v^2) + \frac{\partial}{\partial x}(uv) + \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{2}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2\tau \frac{\partial}{\partial y} v \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - GrT \right) \\ + \tau \frac{\partial}{\partial x} u \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - GrT \right) + \tau \frac{\partial}{\partial x} v \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) + GrT, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uT) + \frac{\partial}{\partial y}(vT) = Pr^{-1} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \end{aligned} \quad (7.22)$$

$$\begin{aligned} + \tau \frac{\partial}{\partial x} \left(T \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right) \\ + \tau \frac{\partial}{\partial y} \left(T \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - GrT \right) \right). \end{aligned} \quad (7.23)$$

Здесь u и v — компоненты скорости, $g = (0, g)$ — ускорение силы тяжести, направленное вдоль оси y , Re , Pr , Gr — числа Рейнольдса, Прандтля и Грасгофа соответственно, τ — характерное время (7.16), также записанное в безразмерном виде. Способ обезразмеривания

системы уравнений (7.11)–(7.13) и условия на границе определяются конкретной задачей и будут описаны ниже.

Для численного решения системы (7.20)–(7.23) используется метод конечных разностей. Система уравнений аппроксимируется таким же образом, как и система квазигазодинамических уравнений для описания течений вязкого сжимаемого газа (главы 5, 6).

Все гидродинамические величины (компоненты скорости, давление и температура) относятся к узлам разностной сетки. Значения величин в полуцелых узлах определяются как полусуммы их значений в ближайших узлах с целыми индексами. Смешанные производные аппроксимируются с использованием значений величин в центрах ячеек, которые вычисляются как среднее арифметическое значений этих величин в прилегающих узлах. Пространственные производные в системе (7.20)–(7.23) аппроксимируются на пространственной сетке центральными разностями.

Граница расчетной области располагается в полуцелых узлах сетки. Аппроксимация граничных условий для скорости и температуры осуществляется путем вычисления соответствующих производных со вторым порядком точности и обеспечивается введением дополнительных слоев фиктивных узлов по внешним границам расчетной области.

Производные по времени аппроксимируются разностями вперед с первым порядком. Поля скорости и температуры на следующем временном шаге определяются по явной схеме из разностных аналогов уравнений (7.21)–(7.23). Устойчивость численного алгоритма определяется величиной параметра τ . Его величина связывается либо с шагом пространственной сетки [94, 95], либо со значениями безразмерных параметров задачи – числами Рейнольдса, Грасгофа или Марангони. В первом случае величина τ вычисляется как

$$\tau = \alpha \sqrt{h_i^2 + h_j^2}, \quad (7.24)$$

где α – численный коэффициент, выбираемый в процессе вычислений для обеспечения устойчивости счета. Во втором случае, например, $\tau = \alpha/Re$, где $0 < \alpha < 1$.

Течение считается установившимся при выполнении условия

$$\varepsilon_u = \max_{ij} \left| \frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n}{\Delta t} \right| \leq 0.001, \quad (7.25)$$

где n — номер шага по времени.

На каждом временном шаге поле давления находится по полю скорости и температуры путем решения уравнения неразрывности КГД системы, например, в форме уравнения Пуассона

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - GrT \right), \quad (7.26)$$

которое является эквивалентным представлением (7.20) при $\tau = \text{const}$. Заметим, что правая часть уравнения (7.26) отличается от правой части уравнения Пуассона в модели Навье–Стокса только слагаемым с коэффициентом $1/\tau$.

Разностная аппроксимация этого уравнения строится так же, как и для уравнений движения. Граничные условия для давления следуют из условий для скорости и плотности потока массы на границе. Условия для давления аппроксимируются со вторым порядком точности путем введения слоя фиктивных узлов вдоль границы. Скорость сходимости итераций при решении уравнения (7.26), как правило, определяет эффективность всего алгоритма в целом.

Для решения (7.26) могут использоваться как точные, так и итерационные методы решения. В частности, в [95] применялся метод наискорейшего градиентного спуска. Для решения задач тепловой конвекции применялся предобусловленный обобщенный метод сопряженных градиентов, где предобуславливатель строится при помощи поточечного неполного разложения матрицы системы линейных уравнений $A\vec{x} = \vec{B}$ [13]. Использовались также методы типа прогонки [121] и методы неполного разложения Холецкого [40]. Условие прекращения итераций для задач, описанных ниже, имело вид

$$\varepsilon_p = \left[\sum_{ij} (p_{\bar{x},ij} + p_{\bar{y},ij} + f_{ij})^2 h^2 \right]^{1/2} \leq 10^{-5}, \quad (7.27)$$

где f_{ij} — правая часть разностного аналога уравнения (7.26).

Анализ и визуализацию результатов расчета двумерных течений удобно проводить с использованием функции тока ψ и вихря скорости Ω . Функция тока ψ для КГД уравнений строится на основе векторного поля $\vec{u} - \vec{w}$, для которого выполнено условие соленоидальности $div(\vec{u} - \vec{w}) = 0$

$$u - w_1 = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v - w_2 = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (7.28)$$

где $\vec{w} = (w_1, w_2)^T$. При малых значениях параметра τ векторы \vec{u} и $\vec{u} - \vec{w}$ близки. $\Omega = rot \vec{w}$.

В следующих параграфах приведены примеры численного решения задач о течении в канале, каверне, и задач тепловой конвекции, выполненные с помощью КГД алгоритма.

7.3 Отрывное течение за обратным уступом

Для ламинарных течений размер отрывной зоны за уступом является чувствительной характеристикой, которая существенно зависит от скорости потока и геометрии задачи. Зависимость размера отрывной зоны от числа Рейнольдса и относительной высоты уступа приведено, например, в [190]. Длина зоны отрыва растет почти линейно с увеличением числа Рейнольдса. Ламинарные течения за обратным уступом хорошо моделируются численно, и для небольших чисел Рейнольдса результаты расчетов в двумерной постановке у различных авторов соответствуют между собой и экспериментальным данным [162, 190]. Это позволяет использовать данную задачу в качестве теста для апробации новых численных алгоритмов.

Приведенные далее результаты основаны на работах [38] и [149].

Постановка задачи

Рассмотрим плоское двумерное движение изотермической жидкости в канале высоты H и длины L . Во входном сечении канала имеется сужение, величина которого определяется высотой уступа h . Схема расчетной области и образующегося течения приведена на рис. 7.1

Приведем КГД систему к безразмерному виду с помощью соотношений

$$x = \tilde{x}h, \quad y = \tilde{y}h, \quad u = \tilde{u}U_0, \quad v = \tilde{v}U_0, \\ p = \tilde{p}\rho U_0^2, \quad t = (\tilde{t}h)/U_0, \quad Re = (U_0h)/\nu,$$

где

$$U_0 = \frac{1}{H-h} \int_h^H u_0(y) dy$$

— средняя по сечению скорость жидкости в канале, ν — коэффициент кинематической вязкости, $u_0(y)$ — заданный профиль скорости во входном сечении. Записанную в безразмерной форме систему дополним граничными условиями:

- нижняя твердая стенка

$$y = 0, \quad 0 < x < L, \quad u = v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0;$$

- верхняя твердая стенка

$$y = H, \quad 0 < x < L, \quad u = v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0;$$

- левая твердая стенка

$$x = 0, \quad 0 < y < h, \quad u = v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = 0;$$

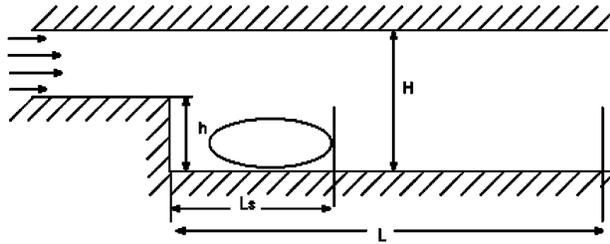


Рис. 7.1. Схема расчетной области

- участок втекания на левой границе

$$x = 0, \quad h < y < H, \quad u = u_0(y), \quad v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = \text{const};$$

- правая граница

$$x = L, \quad 0 < y < H, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad p = 0.$$

Граничные условия для давления на твердых стенках следуют из условий прилипания для компонент скорости $u = 0$, $v = 0$, и условия непротекания для вектора плотности потока массы (7.4). Следствием последнего условия являются соотношения $w_x = 0$, $w_y = 0$, которые выполняются на стенках.

Градиент давления на входе в канал может быть задан достаточно произвольно. Один из возможных способов вычисления этой величины заключается в следующем. Зададим профиль скорости на входе в канал в виде параболы Пуазейля [72, 79]:

$$u_0(y) = \frac{Re}{2} \frac{\partial p}{\partial x} (H - y)(h - y). \quad (7.29)$$

Расход жидкости во входном сечении вычисляется по формуле

$$J = \int_h^H [u(0, y) - w_x(0, y)] dy = -\frac{Re}{12} (H - h)^3 \frac{\partial p}{\partial x} - \tau (H - h) \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (7.30)$$

Из (7.30) находим величину градиента давления на входе

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{12J}{Re(H - h)^3} \left[1 + \frac{12\tau}{Re(H - h)^2} \right]^{-1}. \quad (7.31)$$

В качестве начального условия выбиралось состояние покоя: $u = v = 0$. Градиент давления в начальный момент считался постоянным во всем поле течения.

Согласно (7.16), для ламинарных течений безразмерный параметр сглаживания τ вычисляется как

$$\tau = \frac{Ma}{Re_s} = \frac{Ma^2}{Re}, \quad \text{где} \quad Ma = \frac{U_0}{c}, \quad Re_s = \frac{ch}{\nu}, \quad (7.32)$$

Ma — число Маха, Re — число Рейнольдса, Re_s — число Рейнольдса, вычисленное по скорости звука. Например, для воздуха при нормальной температуре $c = 3.4 \cdot 10^4$ см/сек, $\nu = 0.15$ см²/сек. Пусть $h = 10$ см, тогда $Re_s = 2 \cdot 10^6$. Для течений несжимаемой или слабосжимаемой жидкости $Ma \ll 1$ и параметр сглаживания оказывается малым.

Для обеспечения устойчивости вычислений величина параметра сглаживания τ подбирается в процессе вычислений и рассматривается как малая величина, $0 < \tau < 1/Re$. Поскольку число Маха в жидкостях весьма мало, для обеспечения устойчивости счета приходится использовать искусственные регуляризаторы с завышенным значением τ . Подстановка истинного значения τ приводит к резкому сокращению шага по времени. В данной задаче параметр сглаживания выбирался в виде $\tau = \alpha/Re$, где α — численный коэффициент.

Результаты численного моделирования

Задача о течении за обратным уступом решалась для чисел $Re=100, 200, 300, 400$; $h/H = 1/2$. Профиль скорости во входном сечении представлял собой параболу Пуазейля (7.29). Безразмерная величина расхода J полагалась равной единице, что соответствовало выбору градиента давления на входе в канал в виде

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{12}{Re} \left[1 + \frac{12\tau}{Re} \right]^{-1}.$$

При малых τ и больших Re можно считать, что

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{12}{Re}.$$

Рассчитанная длина отрывной зоны за уступом сравнивалась с данными [164, 190] и [162], а также с графиками из [126].

Полученные результаты систематизированы в табл. 7.1. Здесь L — безразмерная длина расчетной области, N_x, N_y — число расчетных точек по обоим направлениям, L_s — длина отрывной зоны, N_t — число шагов по времени до сходимости. Расчеты проведены на равномерной по обоим направлениям пространственной сетке с

одинаковыми шагами $h_x = h_y = 0.025$. Известно, что использование одинаковых h_x и h_y улучшает точность описания отрывного течения.

Re	100	200	300	400
L	7.5	5.0	7.5	10
$N_x \times N_y$	300×40	200×40	300×40	400×40
τ	0.005	0.0025	0.00166	0.00125
N_t	19800	~ 20000	~ 60000	~ 110000
L_s/h КГД расчет	5.0	8.2	10.1	14.8
L_s/h расчет [190]	4.43	7.5	10.0	-
L_s/h расчет [164]	5	8.3	10.5	12
L_s/h расчет [162]	5	8.5	12	-
L_s/h расчет [126]	5.0	8.3	8.4	7.8
L_s/h эксперимент [126]	5.0	8.5	11.3	14.2

Таблица 7.1. Сопоставление КГД расчетов с известными данными

В расчетах, перечисленных в таблице 7.1, значение параметра сглаживания (7.32) составляло $\tau = 0.5/Re$. Шаг интегрирования по времени Δt был одинаков и составлял 10^{-4} .

Расчет прекращался при выполнении условия $\delta p < 10^{-3}$, где

$$\delta p = \max \left| \frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} \right|,$$

n — номер шага интегрирования по времени.

Во всех вариантах течение выходит на стационарный режим. Длина отрывной зоны L_s определялась по положению нулевой линии тока и указана с точностью порядка 0.2. Сравнение КГД расчетов с расчетами на основе системы Навье–Стокса, а также с данными эксперимента [126], показывает хорошее соответствие длины отрывной зоны и общей картины течения. В расчетах наблюдается почти линейный рост значений L_s с ростом числа Re . Видно, что для $Re = 400$ данные КГД расчета хорошо соответствуют данным эксперимента [126]. Очень близкие результаты были получены при численном расчете течения газа за уступом при малых числах Маха и Рейнольдса. Эти расчеты приведены в Приложении D.

Для $Re = 100$ и $Re = 200$ процесс установления течения представляет собой зарождение и последующий рост одного вихревого образования за уступом. Для $Re = 300$ и $Re = 400$ процесс установления носит колебательный характер и сопровождается зарождением и отрывом вихревых образований, но в отличие от рассмотренных далее режимов течений при больших числах Re , этот колебательный процесс затухает, приводя к образованию одного стационарного вихря за уступом. Изолинии функции тока ψ , построенные в соответствии с (7.28) и иллюстрирующие процесс установления течения по времени для вариантов $Re = 100$ и $Re = 400$, приведены на рис. 7.2 и 7.3. Изолинии расположены эквидистантно.

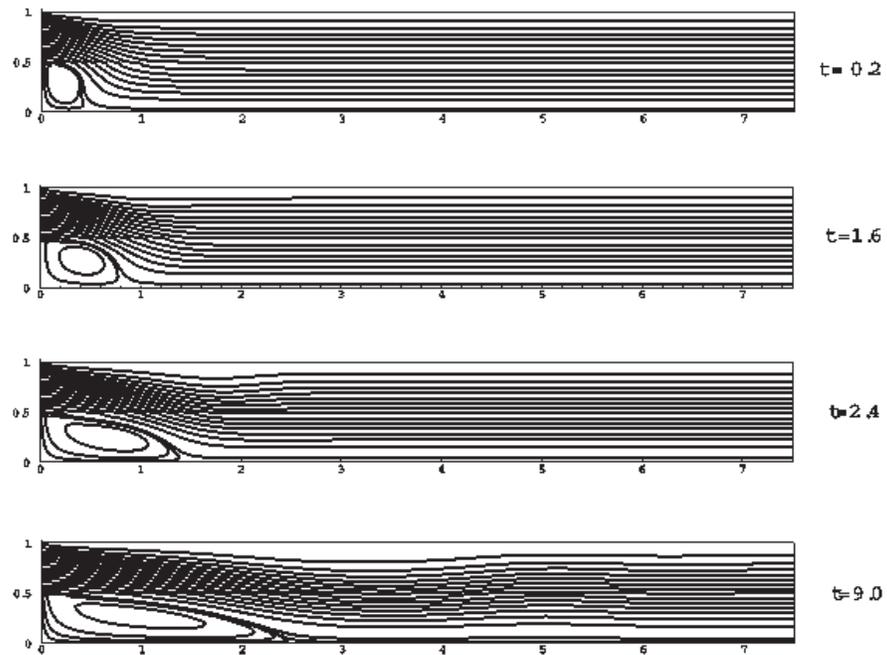
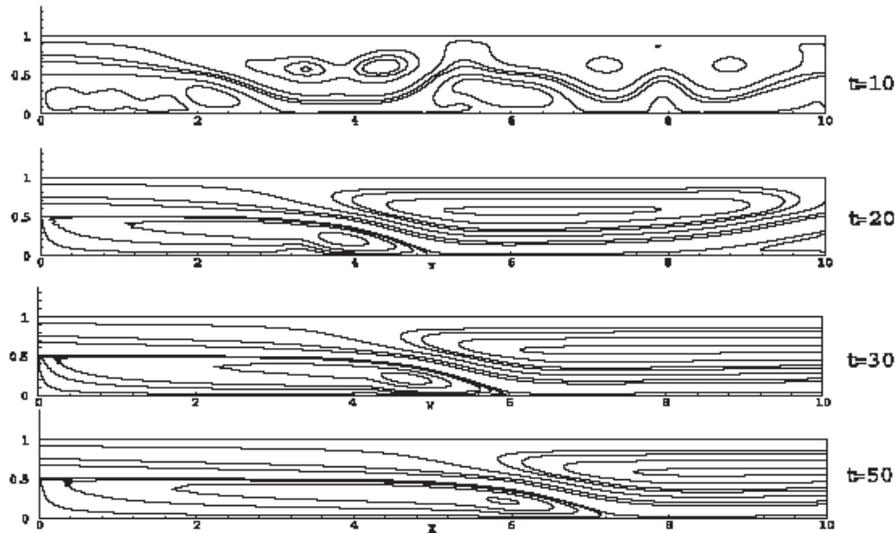


Рис. 7.2. Изолинии функции тока для $Re=100$ при установлении течения

При дальнейшем увеличении числа Рейнольдса стационарное решение получить не удастся, и течение приобретает турбулентный характер [153, 155].

Рис. 7.3. Изолинии функции тока для $Re=400$ при установлении течения

Для варианта $Re = 100$ исследовались влияние параметра регуляризации τ и сходимость численного решения по сетке. Получено, что длина отрывной зоны и общая картина течения практически не зависит ни от величины параметра регуляризации τ , ни от величины шага по пространству. Увеличение τ приводит к сглаживанию картины течения и позволяет увеличить шаг интегрирования системы по времени. Уменьшение пространственного шага позволило более детально разрешить картину течения. При неизменном расходе решение мало чувствительно к выбору градиента давления во входном сечении.

Эти результаты согласуются с теоретическими оценками, согласно которым для стационарных течений дополнительные КГД слагаемые малы и решение КГД уравнений близко к решению уравнений Навье–Стокса. При этом добавочные члены выполняют роль регуляризаторов, позволяющих использовать достаточно простой, устойчивый и точный численный алгоритм.

7.4 Тепловая конвекция в квадратной области

Решается задача о течении теплопроводной вязкой несжимаемой жидкости в квадратной полости с двумя вертикальными изотермическими стенками. Течение возникает благодаря разности температур этих стенок. Горизонтальные стенки являются адиабатическими. Течение описывается системой уравнений (7.20)–(7.23) при $Re = 1$ и следующих граничных условиях:

- нижняя стенка: $y = 0, \quad 0 < x < 1, \quad u = 0, \quad v = 0, \quad \partial p / \partial y = GrT, \quad \partial T / \partial y = 0;$
- верхняя стенка: $y = 1, \quad 0 < x < 1, \quad u = 0, \quad v = 0, \quad \partial p / \partial y = -GrT, \quad \partial T / \partial y = 0;$
- левая боковая стенка: $x = 0, \quad 0 < y < 1, \quad u = 0, \quad v = 0, \quad \partial p / \partial x = 0, \quad T = 1;$
- правая боковая стенка: $x = 1, \quad 0 < y < 1, \quad u = 0, \quad v = 0, \quad \partial p / \partial x = 0, \quad T = 0.$

Так же как и в предыдущей задаче, граничные условия для давления следуют из условия непротекания для потока массы на границе, которое приводит к условию $w_x = 0, w_y = 0$ в (7.15).

В качестве начального условия используется невозмущенное поле скорости и температуры $u = v = T = 0$. Система уравнений (7.20)–(7.23) приведена к безразмерному виду с помощью соотношений:

$$\begin{aligned} x = \tilde{x}H, \quad y = \tilde{y}H, \quad u = \tilde{u}\frac{\nu}{H}, \quad v = \tilde{v}\frac{\nu}{H}, \\ t = \tilde{t}\frac{H^2}{\nu}, \quad p = \tilde{p}\rho\left(\frac{\nu}{H}\right)^2, \quad T = \tilde{T}\Delta T, \end{aligned} \quad (7.33)$$

где ν — кинематический коэффициент вязкости, $\Delta T = T_1 - T_2$ — разность температур между левой и правой стенками области, H — размер полости. При выбранном обезразмеривании число Грасгофа $Gr = \beta g \Delta T H^3 / \nu^2$.

Безразмерный параметр τ имеет вид

$$\tau = \frac{\nu^2}{H^2 c^2} = Ma_s^2, \quad \text{где} \quad Ma_s = \frac{U}{c}, \quad U = \frac{\nu}{H}.$$

Для рассматриваемой задачи величина параметра сглаживания очень мала, и поэтому при проведении расчетов τ выбирался из интервала $0 < \tau < 1$.

Задача о тепловой конвекции в замкнутой полости, подогреваемой слева, решается для умеренных чисел Грасгофа $Gr = 10^2$, $Gr = 10^4$ и 10^5 , числа Прандтля $Pr = 1$ и параметра τ в интервале 10^{-5} – 10^{-2} на равномерных сетках 21×21 , 41×41 , 81×81 .

Результаты расчетов представлены в табл. 7.2 и 7.3, где они сопоставлены с данными [14] и [143]. В первой работе задача о тепло-массопереносе при конвекции Буссинеска рассчитывается на основе системы уравнений Навье–Стокса в переменных "функция тока–вихрь скорости" на подробных сетках, и результаты сравниваются с данными эксперимента [143]. Результаты этих работ для умеренных чисел Грасгофа можно считать эталонными.

τ	сетка	$ \psi _{max}$	u_{max}	v_{max}	Nu_0	Nu_{max}	Nu_{min}
10^{-4}	21×21	5.044	15.938	19.513	2.306	3.939	0.579
	[14]	5.277	16.144	19.363	2.253	3.615	0.591
10^{-4}	41×41	5.099	16.005	19.663	2.281	3.708	0.591
	[14]	5.125	16.262	19.602	2.249	3.563	0.586
10^{-4}	81×81	5.113	16.070	19.663	2.275	3.649	0.581
	[14]	5.086	16.219	19.648	2.247	3.541	0.585
	[143]	5.071	16.178	19.617	2.238	3.528	0.586
10^{-3}	21×21	5.195	15.587	18.565	2.431	4.318	0.529
10^{-2}	21×21	6.723	13.182	11.542	3.850	9.268	0.352

Таблица 7.2. Результаты расчетов и их сравнение с данными расчета [14] и эксперимента [143], $Gr = 10^4$, $Pr = 1$.

В таблицах использованы следующие обозначения:

$|\psi|_{mid}$ — абсолютная величина функции тока в центре полости,
 $|\psi|_{max}$ — максимум модуля функции тока в расчетной области,
 u_{max} — максимум горизонтальной скорости в среднем вертикальном сечении,

τ	сетка	$ \psi _{mid}$	$ \psi _{max}$	u_{max}	v_{max}	Nu_0	Nu_{max}	Nu_{min}
10^{-5}	21×21	9.264	9.666	32.33	67.70	4.86	9.777	0.204
	[14]	10.259	10.86	40.30	65.07	4.53	8.123	0.762
10^{-5}	41×41	9.502	9.909	33.24	70.91	4.68	8.733	0.729
	[14]	9.388	9.918	36.63	68.11	4.55	7.968	0.730
	[143]	9.111	9.612	34.73	68.59	4.51	7.717	0.729
10^{-4}	21×21	9.358	9.754	32.20	66.71	4.91	9.931	-0.033
10^{-3}	21×21	10.400	10.74	33.12	57.86	5.73	12.091	-0.611

Таблица 7.3. Результаты расчетов и их сравнение с данными расчета [14] и эксперимента [143], $Gr = 10^5$, $Pr = 1$.

v_{max} — максимум вертикальной скорости в среднем горизонтальном сечении,

Nu_0 — среднее число Нуссельта на левой грани полости,

Nu_{max} — максимальное значение числа Нуссельта на этой грани,

Nu_{min} — минимальное значение числа Нуссельта на этой грани.

Для расчета безразмерного теплового потока на левую боковую грань (числа Нуссельта Nu) использовалось выражение

$$Nu(y) = -\frac{\partial T(0, y)}{\partial x},$$

среднее число Нуссельта вычислялось как

$$Nu_0 = \int_0^1 Nu(y) dy.$$

Для приближенного вычисления локальных тепловых потоков используются правые разностные производные, а для среднего числа Нуссельта — квадратурная формула трапеций.

Из таблиц следует, что при малых τ даже на сетке 21×21 решение хорошо совпадает с эталонным, то есть малые τ соответствуют режиму конвекции в тестовой задаче [14]. При измельчении шага пространственной сетки точность решения увеличивается, что определяется возможностью разрешения пограничных слоев.

На рис. 7.4 представлены изолинии функции тока, изотермы и изобары при числе Грасгофа $Gr = 10^4$, $Pr = 1$ (сетка 41×41).

Из представленных рисунков наглядно видно хорошее соответствие линий тока и изотерм результатам [14]. Увеличение τ приводит к усилению нелинейного взаимодействия в среде, и как следствие — к искажению изолиний функции тока и изотерм (рис. 7.5–7.6).

При уменьшении τ для обеспечения устойчивости счета необходимо уменьшать шаг по времени.

Из представленных результатов следует, что численные решения системы КГД уравнений хорошо совпадают с эталонными решениями системы Навье–Стокса для умеренных чисел Gr при $\tau \leq Gr^{-1}$. Совпадение улучшается при сгущении пространственной сетки.

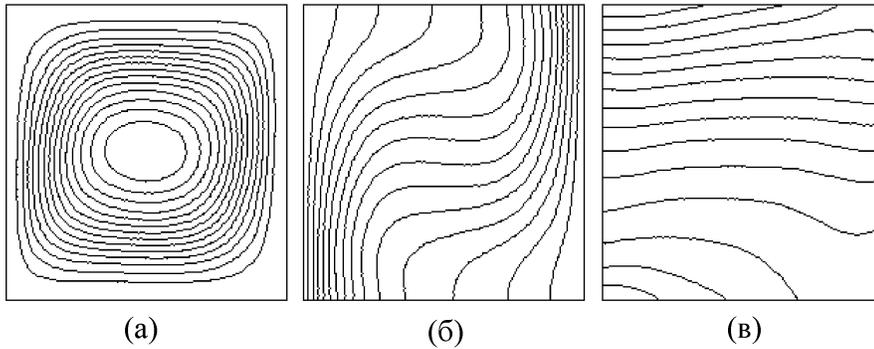


Рис. 7.4. Линии тока (а), изотермы (б) и изобары (в) для $Gr = 10^4$, $Pr = 1$, $\tau = 10^{-4}$

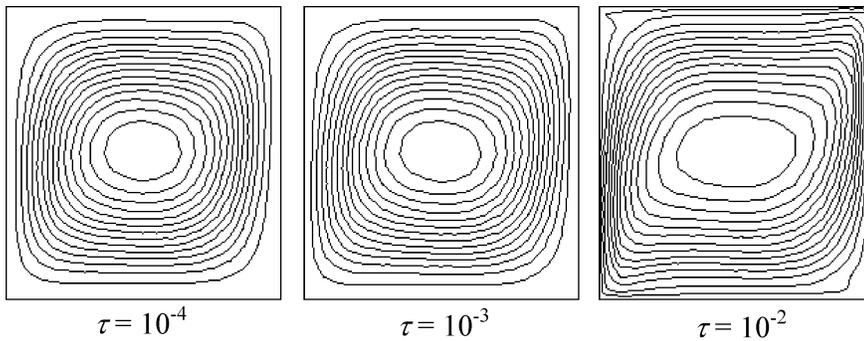


Рис. 7.5. Линии тока при различных значениях параметра τ для $Gr = 10^4$, $Pr = 1$

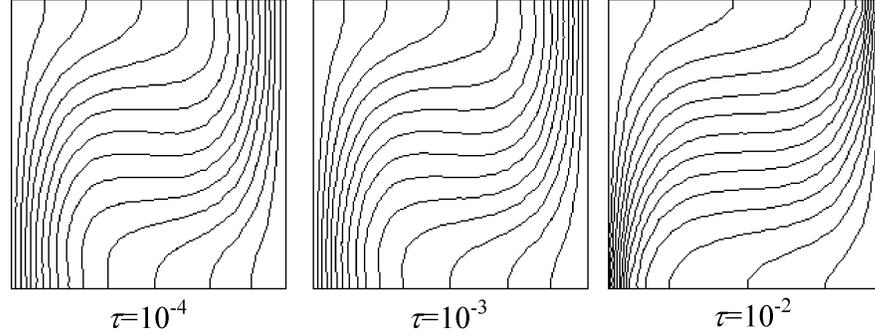


Рис. 7.6. Изотермы при различных значениях параметра τ для $Gr = 10^4$, $Pr = 1$

7.5 Тепловая конвекция при низких числах Прандтля

Рассмотрим пример математического моделирования тепловой гравитационной конвекции несжимаемой жидкости в прямоугольной полости высоты H и длины L при низких числах Pr [36]. Эта задача представляет собой известный тест, предложенный в 1987 году для анализа численных методик расчета конвективных течений в расплавах. Практическая необходимость таких расчетов связана с тем, что периодические колебания температуры в металлических расплавах (жидкостях с малым числом Прандтля) создают серьезные проблемы при выращивании полупроводниковых кристаллов (см. [130]).

Течение описывается системой уравнений (7.20)–(7.23), которая может быть приведена к безразмерному виду с помощью соотношений

$$\begin{aligned} x &= \tilde{x}H, & y &= \tilde{y}H, & u &= \tilde{u}\frac{\nu}{H}, & v &= \tilde{v}\frac{\nu}{H}, \\ t &= \tilde{t}\frac{H^2}{\nu}, & p &= \tilde{p}\rho\left(\frac{\nu}{H}\right)^2, & T &= \tilde{T}\frac{\Delta T}{A}, \end{aligned} \quad (7.34)$$

где $A = L/H$, $\Delta T = T_1 - T_2$ — разность температур между левой и правой стенками, ν — коэффициент кинематической вязкости. При выбранном обезразмеривании имеем $Gr = \beta g \Delta T H^4 / L \nu^2$, $Re = 1$, $Pr = \nu/\chi$, $\tau = Ma^2$, где $Ma = \nu/(Hc)$ — число Маха.

Полость имеет твердую нижнюю стенку, а ее верхняя граница может быть либо твердой (R-R случай), либо свободной (R-F случай).

К системе уравнений (7.20)–(7.23) добавим следующие граничные условия:

- нижняя стенка: $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial y = GrT$, $T(x) = A - x$;
- верхняя граница:
 $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial y = GrT$, $T(x) = A - x$ для R-R случая;
 $\partial u/\partial y = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial y = GrT$, $T(x) = A - x$ для R-F случая;
- левая боковая стенка: $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial x = 0$, $T = A$;
- правая боковая стенка: $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial x = 0$, $T = 0$.

Безразмерный параметр τ можно связать с числом Грасгофа соотношением

$$\tau = \frac{1}{Gr} \frac{\beta g \Delta T H^2}{Lc^2} = \alpha/Gr, \quad (7.35)$$

где величина α весьма мала. Так, например, для тепловой конвекции воздуха при $\Delta T = 100^\circ C$ в квадратной полости высотой $H = 1$ м величина $\alpha \sim 3 \cdot 10^{-5}$. При проведении расчетов параметр α следует выбирать из интервала $0 < \alpha \leq 1$.

В большинстве расчетов α выбирался равным единице. Как показали численные эксперименты, уменьшение параметра α приводит к незначительному уточнению результатов расчета, но в то же время приводит к ухудшению устойчивости численного алгоритма, что требует уменьшения временного шага интегрирования Δt .

Задача о тепловой конвекции в прямоугольной каверне ($A = 4$), подогреваемой слева, решалась для умеренных чисел Грасгофа и при низком числе Прандтля $Pr = 0.015$ на равномерной пространственной сетке 22×82 с шагом $h = 1/20$. Во всех вариантах шаг по времени выбирался равным 10^{-6} .

Для R-R случая при $Gr = 4 \cdot 10^4$ в качестве начальных условий использовались поля скорости и температуры, полученные в расчете с $Gr = 3 \cdot 10^4$. Во всех остальных расчетах в качестве начальных условий использовались невозмущенные поля скорости и температуры.

7.5.1 Результаты расчетов для R-R случая.

Расчеты проведены для умеренных чисел Грасгофа: $Gr = 2 \cdot 10^4$, $3 \cdot 10^4$ и $4 \cdot 10^4$.

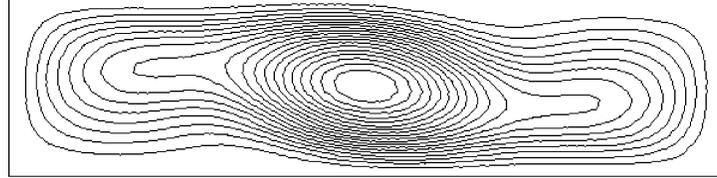


Рис. 7.7. Линии тока для $Gr = 2 \cdot 10^4$

При $Gr = 2 \cdot 10^4$ получен стационарный режим течения (рис. 7.7). Линии тока представляют собой один вытянутый в длину вихрь. Полученные результаты как качественно, так и количественно хорошо соответствуют данным из [129, 130], в которых расчеты проведены на очень подробных пространственных сетках (в [129] — на сетке 81×321). В табл. 7.4 характерные значения функции тока и компонент скорости даны в сравнении с аналогичными величинами из [130], причем они оказываются весьма близкими. Так как в [130] обезразмеривание скорости было иным, чем в настоящей работе, а именно: $u = \tilde{u}\nu Gr^{0.5}/H$, $v = \tilde{v}\nu Gr^{0.5}/H$, то для сравнения с результатами [130] в табл. 7.4 приведены значения следующих величин:

$$\Psi^* = \max_{xy} |\Psi|/Gr^{0.5}, \quad U^* = \max_y |u(y)|/Gr^{0.5} \quad \text{при } x = 3A/4,$$

$$V^* = \max_x |v(x)|/Gr^{0.5} \quad \text{при } y = 1/2,$$

	V^*	U^*	ψ^*
КГД алгоритм	0.448	0.672	0.409
[130]	0.452 – 0.482	0.669 – 0.704	0.406 – 0.409

Таблица 7.4. Характерные (нормализованные) значения функции тока и компонент скорости

При $Gr = 3 \cdot 10^4$ получен стационарный режим течения (рис. 7.8–7.9), процесс установления которого имеет вид затухающих колебаний. На рис. 7.8 проведено сравнение эволюционных кривых

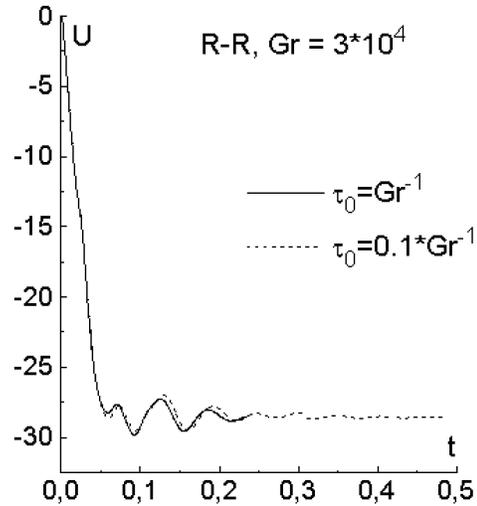


Рис. 7.8. Эволюционные кривые горизонтальной компоненты скорости в центре области для $Gr = 3 \cdot 10^4$

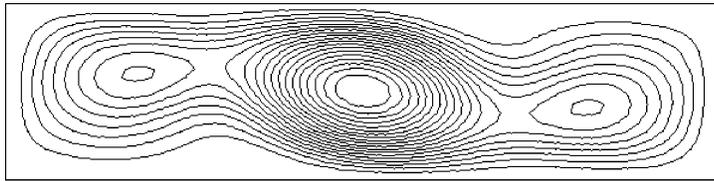


Рис. 7.9. Линии тока для $Gr = 3 \cdot 10^4$

горизонтальной компоненты скорости в центре области, полученных в расчетах при $\alpha = 1$ (сплошная линия) и $\alpha = 0.1$ (штриховая линия). Полученные кривые практически совпадают, что свидетельствует о слабой зависимости решения от параметра регуляризации в выбранной области его значений. В большинстве работ в данном случае получен колебательный режим течения, однако, как показано в [131, 135], возможен и стационарный режим. Установившееся течение представляет собой основной вихрь, расположенный вблизи центра, и два дополнительных вихря в правой и левой частях

каверны. В [135] для этого случая получено стационарное решение, причем сравнение приведенных в этой работе результатов с результатами расчетов авторов показывает их хорошее соответствие. В частности, сравнивались профили горизонтальной скорости вдоль вертикального сечения, расположенного на расстоянии $x = 3A/4$ от левой стенки, и распределения вертикальной скорости в сечении $y = 1/2$, а также линии тока.

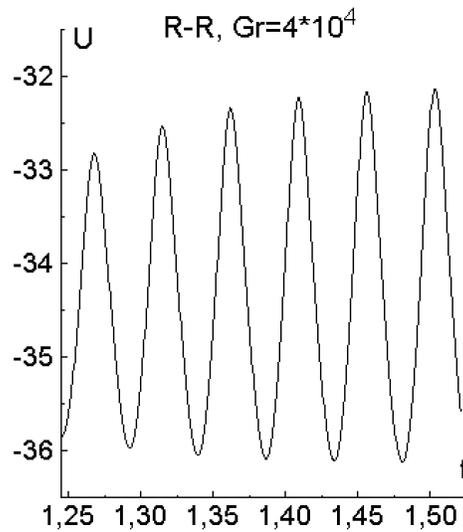


Рис. 7.10. Эволюционные кривые горизонтальной компоненты скорости в центре области для $Gr = 4 \cdot 10^4$

При $Gr = 4 \cdot 10^4$ получен колебательный режим течения (рис. 7.10–7.11), период колебаний которого можно оценить как $T_{vib} = 0,047$ (рис. 7.10), что соответствует частоте $f_1 = 1/T_{vib} = 21,28$. Данный результат очень близок к приведенным в [130], где суммируются данные расчетов многих авторов. Частота колебаний для данного случая составляет у различных авторов от 21,186 до 22,35. Течение в этой задаче представляет собой структуру, аналогичную предыдущему варианту, причем процесс колебаний заключается в

изменении интенсивности вихревых образований и хорошо соответствует результатам [135].

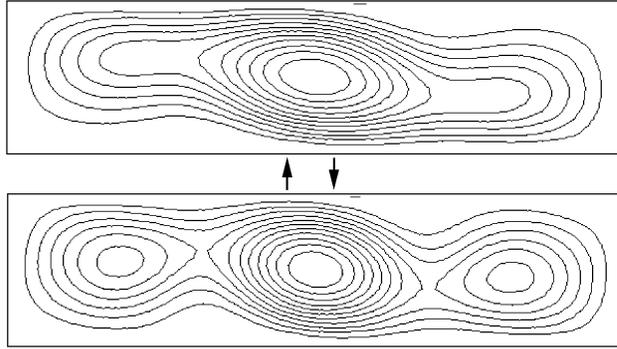


Рис. 7.11. Линии тока для $Gr = 4 \cdot 10^4$

7.5.2 Результаты расчетов для R-F случая

В отличие от предыдущего случая, в этих вариантах на верхней стенке ставится условие скольжения для тангенциальной составляющей скорости, что облегчает процесс зарождения колебаний.

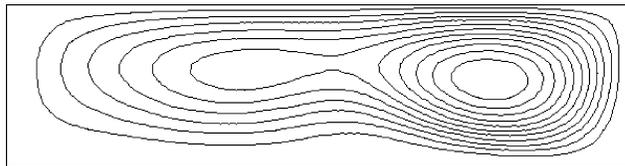


Рис. 7.12. Линии тока для $Gr = 10^4$

При $Gr = 10^4$ получен стационарный режим течения (рис. 7.12), в котором образуется асимметричная структура, состоящая из двух ячеек. Большая из них располагается возле холодной стенки, другая, меньшая по величине, находится между центром полости и горячей левой стенкой. Приведенные рисунки близко соответствуют аналогичным рисункам из [179].

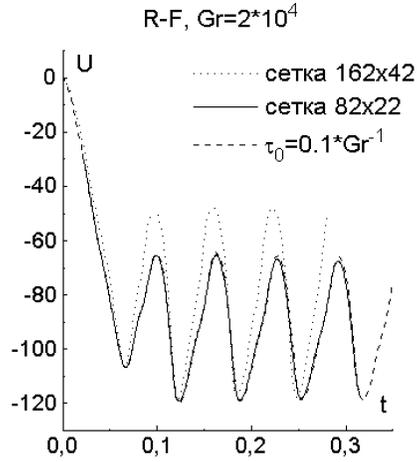
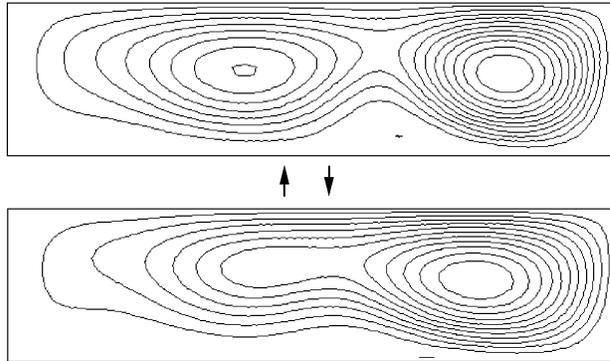


Рис. 7.13. Эволюционных кривые горизонтальной компоненты скорости в центре области для $Gr = 2 \cdot 10^4$

При $Gr = 2 \cdot 10^4$ получен колебательный режим течения (рис. 7.13–7.14), период колебаний которого можно оценить как $T_{vib} = 0.0646$ (рис. 7.13), что соответствует частоте $f_1 = 15.84$. В обзоре [130] частота колебаний в этом случае варьируется у разных авторов от 15.580 до 17.2. Течение в этой задаче представляет собой вихрь, смещенный к правой (холодной) стенке каверны. В левой части каверны формируется второй, более слабый по интенсивности вихрь (рис. 7.14). Процесс колебаний заключается в изменении интенсивности этих образований. В этом случае явно видна временная эволюция вторичных вихрей, картина которой хорошо соответствует аналогичным фигурам, приведенным в [179].

Для выяснения влияния параметра α этот вариант был рассчитан с $\alpha = 1$ (сплошная линия) и $\alpha = 0.1$ (штриховая линия), а для проверки точности вариант с $\alpha = 1$ пересчитан на вдвое более подробной сетке 42×162 (пунктир). Сравнение временной эволюции скорости для этих вариантов приведено на рис. 7.13. Видно, что уменьшение α не изменяет ни период, ни амплитуду колебаний, соответствующие кривые практически неразличимы. Сгущение сетки

Рис. 7.14. Линии тока для $Gr = 2 \cdot 10^4$

не влияет на частоту колебаний, несколько изменяя их амплитуду.

Таким образом, результаты расчета задач течения вязкой несжимаемой жидкости при малых числах Прандтля на основе КГД системы полностью совпадают с аналогичными расчетами с использованием системы уравнений Навье – Стокса. При этом наряду со стационарными режимами течений удастся рассчитать и вторичные, т.е. нестационарные режимы. Показано, что период колебаний не зависит от шага сетки и параметра регуляризации.

7.6 Конвекция Марангони в невесомости

Ниже рассматривается задача о термокапиллярной конвекции вязкой несжимаемой жидкости при отсутствии гравитации (см. [178, 184]). Данной проблеме посвящено большое количество исследований, так как во многих процессах космической технологии (направленная кристаллизация, безтигельная зонная плавка) поверхность жидкости (расплава) является свободной, и именно термокапиллярный эффект приводит к возникновению конвективного движения в расплаве.

Конвективное течение обусловлено только силами поверхностного натяжения, что записывается в виде следующего условия равновесия сил поверхностного натяжения и вязкого трения на верхней

свободной границе $\Pi_{yx} = (\partial\sigma/\partial T) \cdot (\partial T/\partial x)$, где $\sigma = \sigma(T)$ — коэффициент поверхностного натяжения жидкости.

В двумерном случае, согласно (7.5) имеем

$$\Pi = \mu \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} + \\ + \tau \begin{pmatrix} u \left(\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} \right) & u \left(\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} \right) \\ v \left(\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} \right) & v \left(\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} \right) \end{pmatrix}.$$

Так как на верхней границе $\partial p/\partial y = 0$, $v = 0$, то $\partial v/\partial x = 0$, и тензор Π упрощается:

$$\Pi = \mu \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} + \tau \begin{pmatrix} u \left(\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Окончательно получаем условие на верхней границе в размерном виде: $\mu(\partial u/\partial y) = (\partial\sigma/\partial T) \cdot (\partial T/\partial x)$, которое совпадает с традиционным граничным условием в задаче о термокапиллярной конвекции для уравнений Навье–Стокса. Заметим, что для большинства жидкостей $\partial\sigma/\partial T < 0$.

Рассматривается течение в прямоугольной полости высоты H и длины L . Течение описывается системой уравнений (7.17)–(7.19), в которой внешняя сила отсутствует ($g = 0$). Система уравнений в двумерном случае записывается в виде (7.20)–(7.23) при $Gr = 0$. Переход к безразмерным величинам осуществляется по формулам

$$x = \tilde{x}H, \quad y = \tilde{y}H, \quad u = \tilde{u}\frac{\nu}{H}, \quad v = \tilde{v}\frac{\nu}{H}, \quad t = \tilde{t}\frac{H^2}{\nu}, \\ p = \tilde{p}\rho \left(\frac{\nu}{H} \right)^2, \quad T = \tilde{T}\frac{\Delta T}{A}.$$

При выбранном обезразмеривании число Марангони $Ma = -(\partial\sigma/\partial T) \cdot (\Delta T/A) \cdot (H/\mu\chi)$, а также $Re = 1$, $Pr = \nu/\chi$, $\tau = M^2$, $M = \nu/(Hc)$ — число Маха, которое для рассматриваемых задач является малой величиной.

Система (7.20)–(7.23) замыкается следующими граничными условиями:

- нижняя стенка: $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial y = 0$, $\partial T/\partial y = 0$;
- верхняя граница:
 $\partial u/\partial y = -(Ma \cdot A/Pr) \cdot (\partial T/\partial x)$, $v = 0$, $\partial p/\partial y = 0$, $\partial T/\partial y = 0$;
- левая боковая стенка: $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial x = 0$, $T = 1$;
- правая боковая стенка: $u = 0$, $v = 0$, $\partial p/\partial x = 0$, $T = 0$.

Как и в задаче о тепловой конвекции, безразмерный параметр τ можно связать с безразмерными параметрами задачи соотношением

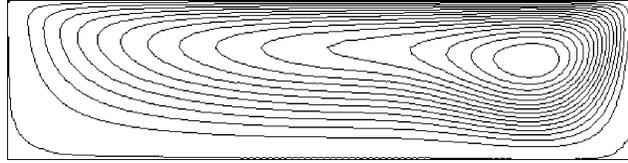
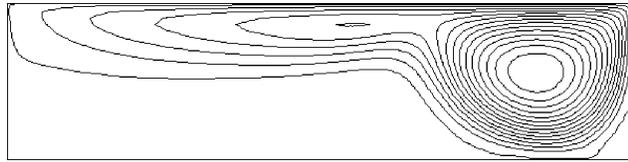
$$\tau = \alpha \frac{Pr}{Ma \cdot A}, \quad \text{где} \quad \alpha = \left| \frac{\partial\sigma}{\partial T} \right| \Delta T \cdot \frac{1}{Hc^2}.$$

Величина α оказывается весьма малой. Так, например, для кремния при $\Delta T = 1000^\circ \text{C}$ и кюветы высотой $H = 1$ см имеем $\alpha \sim 10^{-9}$. В численных расчетах величину этого параметра следует выбирать в интервале $0 < \alpha \leq 1$. При проведении расчетов данной задачи параметр α выбирался равным единице и, соответственно, члены с τ рассматривались как регуляризаторы.

Задача о конвекции Марангони в прямоугольной каверне ($A = 4$), подогреваемой слева, решалась для $Ma = 5, 10, 20, 100$ и 400 и $Pr = 0.015$ на равномерной пространственной сетке 27×102 . Шаг по времени выбирался равным $5 \cdot 10^{-6}$. В качестве начальных условий использовались невозмущенные поля скорости и температуры.

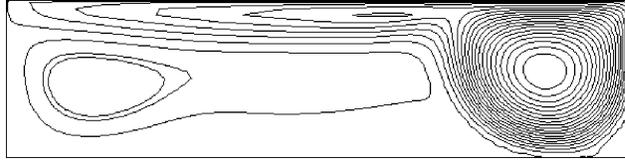
Для $Ma = 400$ результаты расчетов сопоставлены с данными [178], а для $Ma \leq 400$ с данными [184].

На рис. 7.15–7.17 приведены линии тока для $Ma = 5$, $Ma = 100$ и $Ma = 400$. Так как числа Марангони положительны, жидкость вдоль верхней границы движется от горячей стенки к холодной. Образуется вихревое течение, центр которого смещен к правой стенке.

Рис. 7.15. Линии тока для $Ma = 5$ Рис. 7.16. Линии тока для $Ma = 100$

С ростом Ma скорость движения увеличивается, и изотермы начинают искажаться. При $Ma = 100$ появляются дополнительные вихри, вращающиеся в том же направлении, что и основной вихрь. В [184] приведены аналогичные графики для тех же чисел Марангони, причем видно их хорошее соответствие результатам настоящей работы. При $Ma = 400$ в левой нижней части области образуется вихрь, вращающийся в противоположном направлении. Аналогичная картина имеет место в [178]. Профили горизонтальной скорости в сечении $x = A/2$ при различных числах Марангони сравнивались с соответствующими профилями из [184]. При этом для сопоставления результатов скорость вычислялась как $U(y) = Pr/Ma \cdot u(y)$, что соответствует обезразмериванию, использованному в [184]. Полученные графики практически совпадают с аналогичными кривыми из указанной работы.

Таким образом, полученные результаты для $Ma \leq 100$ хорошо соответствуют данным [184], а для $Ma = 400$ — результатам [178].

Рис. 7.17. Линии тока для $Ma = 400$

7.7 Течение в кубической каверне с подвижной крышкой

Задача о течении жидкости в каверне с подвижной верхней крышкой является известным и достаточно сложным тестом для оценки эффективности численных методов. Первой задачей, на которой была проверена работоспособность КГД алгоритма для расчета вязких несжимаемых течений, был расчет двумерного течения жидкости в каверне [27]. Здесь, в соответствии с [40] и [151], излагаются результаты численного моделирования трехмерного течения вязкой несжимаемой изотермической жидкости в кубической каверне с подвижной крышкой.

Для невысоких чисел Рейнольдса $Re < 1000$ течение является ламинарным и стационарным, и представляет собой практически один большой вихрь с центром вблизи центра области. Течение в плоскости симметрии каверны является практически двумерным и хорошо описывается существующими двумерными моделями. В этом случае распределения скорости, полученные в расчетах по различным методикам, хорошо согласуются между собой и с данными натуральных экспериментов [67]. С ростом числа Рейнольдса структура течения быстро усложняется, стратифицируется, оно становится нестационарным, а затем и турбулентным.

Расчет пространственных течений является трудоемкой вычислительной задачей, для реализации которой необходимо использовать мощные вычислительные комплексы. Описанный вычислительный алгоритм реализован для многопроцессорной вычислительной системы кластерного типа с распределенной памятью MVS1000M, в которой интерфейс обмена данными организован по принципу MPI

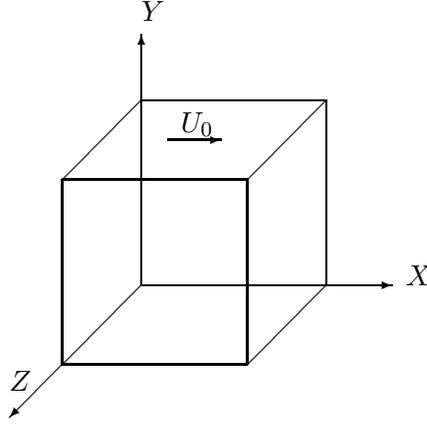


Рис. 7.18. Схема расчетной области и система координат

(Message Passing Interface) [101].

Рассматривается течение изотермической жидкости в кубической камере с ребром H . Верхняя крышка камеры движется с постоянной скоростью U_0 . Схема расчетной области и используемая система координат приведена на рис. 7.18.

Введем безразмерные величины с помощью соотношений

$$x = \tilde{x}H, \quad y = \tilde{y}H, \quad z = \tilde{z}H, \quad u_x = \tilde{u}_x U_0, \quad u_y = \tilde{u}_y U_0, \quad u_z = \tilde{u}_z U_0,$$

$$p = \tilde{p} \rho U_0^2, \quad t = (\tilde{t}H)/U_0, \quad Re = (U_0 H)/\nu.$$

После приведения к безразмерному виду система КГД уравнений для плоских трехмерных изотермических течений имеет вид

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z}, \quad (7.36)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u_x}{\partial t} + \frac{\partial(u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(u_x u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(u_x u_z)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial x} \\ &= \frac{2}{Re} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \\ &+ 2 \frac{\partial(u_x w_x)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y w_x)}{\partial y} + \frac{\partial(u_x w_y)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z w_x)}{\partial z} + \frac{\partial(u_x w_z)}{\partial z}, \end{aligned} \quad (7.37)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial u_y}{\partial t} + \frac{\partial(u_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y^2)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z u_y)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial y} \\
&= \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \frac{2}{Re} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \\
&+ \frac{\partial(u_x w_y)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y w_x)}{\partial x} + 2 \frac{\partial(u_y w_y)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z w_y)}{\partial z} + \frac{\partial(u_y w_z)}{\partial z}, \quad (7.38)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial u_z}{\partial t} + \frac{\partial(u_x u_z)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y u_z)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z^2)}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \\
&= \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) + \frac{2}{Re} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \\
&+ \frac{\partial(u_x w_z)}{\partial x} + \frac{\partial(u_z w_x)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y w_z)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z w_y)}{\partial y} + 2 \frac{\partial(u_z w_z)}{\partial z}, \quad (7.39)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
w_x &= \tau \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial x} \right), \\
w_y &= \tau \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial y} \right), \\
w_z &= \tau \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \right). \quad (7.40)
\end{aligned}$$

Неизвестными величинами являются компоненты вектора скорости $u_x = u_x(x, y, z, t)$, $u_y = u_y(x, y, z, t)$, $u_z = u_z(x, y, z, t)$ и давление $p = p(x, y, t)$.

Поле давления находится по уже известному полю скорости путем решения уравнения Пуассона

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \\
& - \frac{\partial}{\partial x} \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left(u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right), \quad (7.41)
\end{aligned}$$

являющегося эквивалентным представлением (7.36) при $\tau = \text{const}$.

Систему (7.37)–(7.41) дополним граничными условиями. На неподвижной твердой поверхности для скорости используются условия прилипания $\vec{u} = 0$. На поверхности $y = 1$ задаются условия $u_x = U_0, u_y = 0, u_z = 0$. Граничные условия для давления следуют из условия непротекания и имеют вид

$$\partial p / \partial n = 0, \quad (7.42)$$

где \vec{n} — нормаль к поверхности. Так, например, на грани $x = 0$ имеем $\partial p / \partial x = 0$, на ребре $x = 0, y = 0$ условие (7.42) приводит к равенствам $\partial p / \partial x = 0, \partial p / \partial y = 0$. В вершине $x = 0, y = 0, z = 0$ имеем $\partial p / \partial x = 0, \partial p / \partial y = 0, \partial p / \partial z = 0$.

В качестве начального условия выбиралось состояние покоя $u_x = u_y = u_z = 0$. Давление в начальный момент считалось постоянным во всем поле течения: $p = 0$. Для устранения неоднозначности при вычислении давления его значение во время расчета в вершине куба поддерживалось постоянным.

Для решения трехмерного разностного уравнения для давления $\Delta u = f$ использовался метод сопряженных градиентов с предобусловливанием модифицированного неполного разложения Холецкого без заполнения.

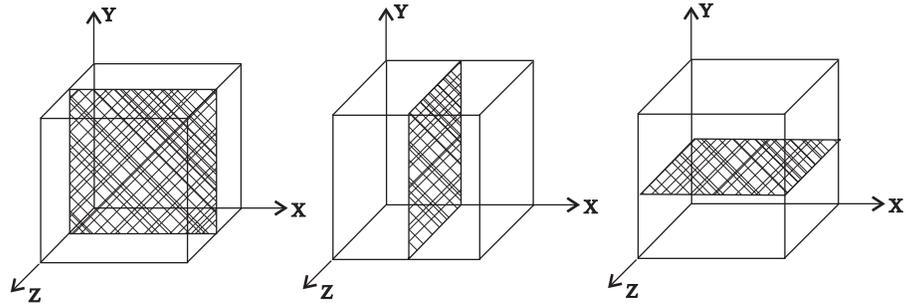


Рис. 7.19. Схема сечений расчетной области.

В численных расчетах значение параметра τ выбиралось, исходя из условий точности и устойчивости алгоритма в виде $\tau = 1/Re$. Такой выбор параметра регуляризации, как показывает практика двумерных расчетов течений жидкости в каверне [27] и течений за

обратным уступом (п. 7.3), обеспечивает достаточную устойчивость и точность вычислительного алгоритма.

Задача решалась при числах Рейнольдса $Re = 100, 1000$ и 2000 на равномерных пространственных сетках с одинаковым числом узлов по всем трем направлениям N_h . При $Re = 100$ использовались сетки с числом узлов $N_h = 22$ и 42 , при $Re = 1000$ число вычислительных узлов сетки по пространству составляло $N_h = 42, 82$ и 162 . При $Re = 2000$ $N_h = 162$. Шаги по времени варьировались в пределах $\Delta t = 0.02 \dots 0.001$.

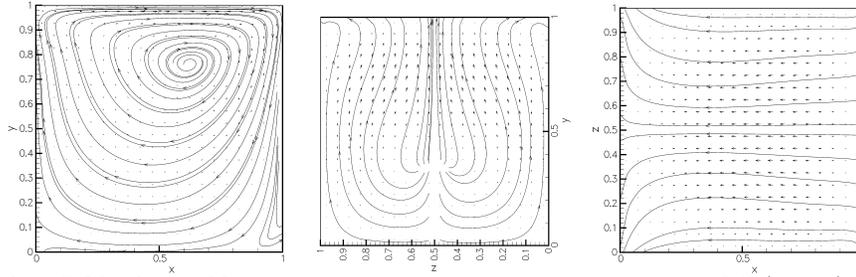


Рис. 7.20. $Re = 100$; линии тока для u_x, u_y в плоскости $z = 0.5$ (слева); u_y, u_z в плоскости $x = 0.5$ (в центре); u_x, u_z в плоскости $y = 0.5$ (справа)

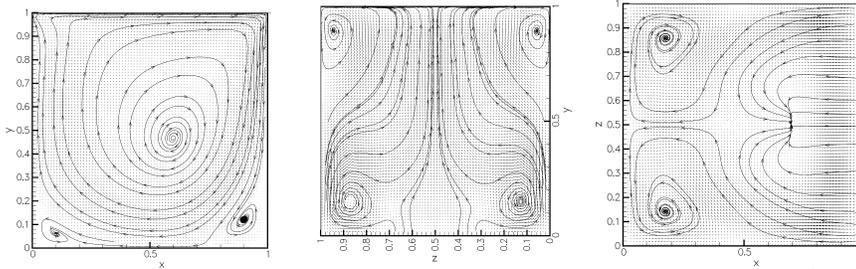


Рис. 7.21. $Re = 1000$; линии тока для u_x, u_y в плоскости $z = 0.5$ (слева); u_y, u_z в плоскости $x = 0.5$ (в центре); u_x, u_z в плоскости $y = 0.5$ (справа)

На рис. 7.20–7.22 показаны линии тока в трех центральных сечениях камеры с координатами $z = 0.5, x = 0.5$ и $y = 0.5$. Схема сечений приведена на рис. 7.19. В данной задаче сечение $z = 0.5$ представляет собой плоскость симметрии. Показаны картины для

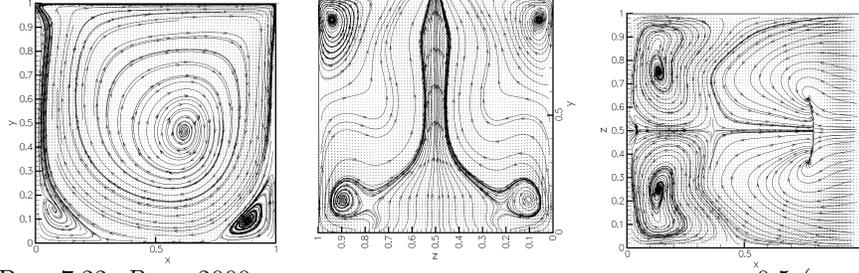


Рис. 7.22. $Re = 2000$; линии тока для u_x, u_y в плоскости $z = 0.5$ (слева); u_y, u_z в плоскости $x = 0.5$ (в центре); u_x, u_z в плоскости $y = 0.5$ (справа)

$Re = 100$, сетка $22 \times 22 \times 22$, $Re = 1000$ и $Re = 2000$, сетки $82 \times 82 \times 82$. На двух последних рисунках виден существенно трехмерный характер течения, что сопровождается образованием в этих плоскостях источников и стоков. В плоскости симметрии компоненты скорости в направлении z малы, и течение здесь близко к двумерному [27].

Рис. 7.23 показывает одномерные распределения компонент скорости вдоль оси z для $Re = 1000$ и $Re = 2000$.

На рис. 7.24–7.25 для $Re = 1000$ представлены одномерные распределения компонент скоростей, рассчитанные на последовательности сгущающихся сеток. Линии 1 (сплошные) соответствуют расчетам с $N_h = 162$, линии 2 (пунктир) — расчетам с $N_h = 82$, линии 3 (штрих-пунктир) — расчетам с $N_h = 42$. Наглядно прослеживается сходимость численного решения при сгущении пространственной сетки.

Представленные в этой главе результаты подтверждают универсальность построенного КГД алгоритма и демонстрируют его эффективность для численного моделирования широкого класса течений вязкой жидкости.

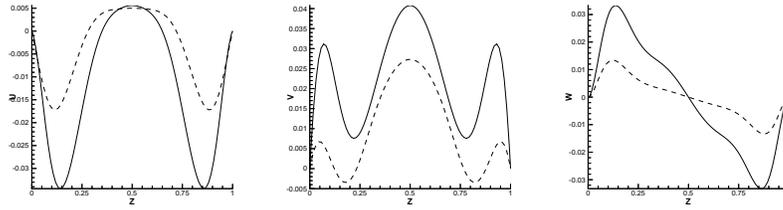


Рис. 7.23. Сплошная линия $Re = 1000$, пунктирная линия $Re = 2000$; $u_x(0.5, 0.5, z)$ (слева), $u_y(0.5, 0.5, z)$ (в центре), $u_z(0.5, 0.5, z)$ (справа)

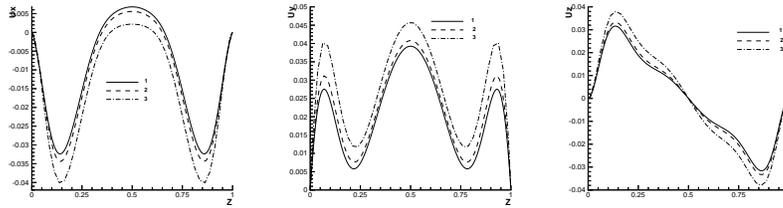


Рис. 7.24. $Re = 1000$; сплошная линия $N_h = 162$, пунктирная линия $N_h = 82$, штрихпунктирная линия $N_h = 42$; $u_x(0.5, 0.5, z)$ (слева), $u_y(0.5, 0.5, z)$ (в центре), $u_z(0.5, 0.5, z)$ (справа)

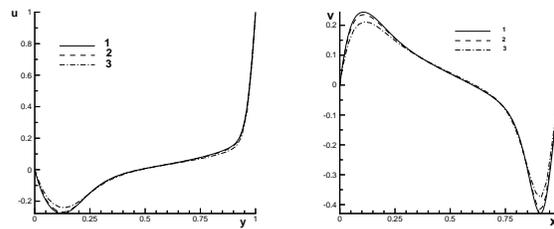


Рис. 7.25. $Re = 1000$; сплошная линия $N_h = 162$, пунктирная линия $N_h = 82$, штрихпунктирная линия $N_h = 42$; $u_x(0.5, y, 0.5)$ (слева), $u_y(x, 0.5, 0.5)$ (справа)

Глава 8

КГД уравнения для течений неравновесного газа

В настоящей главе проводится обобщение КГД уравнений на случай течений газа с поступательно-вращательной температурной неравновесностью. Такая неравновесность характерна для умеренно-разреженных газов, состоящих из двухатомных или полиатомных молекул [12, 57, 65, 76, 89, 90, 133, 134].

В построенной здесь модели молекула рассматривается как твердое тело, обладающее только трансляционными и вращательными степенями свободы. Такое описание правомочно, если температура газа не слишком высока (колебательные степени свободы не возбуждены), и не слишком низка (вращательные степени свободы могут рассматриваться классически). Для большинства молекулярных газов второе условие удовлетворяется при обычных температурах, поскольку в этом случае расстояние между вращательными уровнями $\hbar^2/2I^0$, где \hbar — постоянная Планка, I^0 — момент инерции молекулы, мало по сравнению с kT [57, 76, 89, 90].

Материал этой главы основан на работах [54] и [139].

8.1 Молекулярная модель и функции распределения

Предположим, что все молекулы одинаковы и представляют собой твердые ротаторы. В этом случае полная энергия молекулы совпадает с ее кинетической энергией и может быть записана как

$$E_m = \frac{m_0}{2} \vec{\xi}^2 + E_{rot},$$

где E_{rot} — вращательная энергия, m_0 — масса молекулы, $\vec{\xi} = \vec{u} + \vec{c}$ — скорость ее центра масс, которая представляется как сумма

макроскопической скорости \vec{u} и тепловой скорости \vec{c} .

Энергия вращения для случая полиатомной молекулы равна

$$E_{rot}^{(3)} = \frac{1}{2}(I_1^0\omega_1^2 + I_2^0\omega_2^2 + I_3^0\omega_3^2), \quad (8.1)$$

где I_1^0, I_2^0, I_3^0 — главные моменты инерции молекулы, и $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ — угловые скорости относительно трех главных осей ([71], с.128). В этом случае молекула имеет шесть степеней свободы — три поступательные и три вращательные (число внутренних степеней свободы $\zeta = 3$). В дальнейшем при ссылках на такую систему будем использовать обозначение "3R".

В случае линейных (в частности, двухатомных) молекул, обладающих двумя вращательными степенями свободы ($\zeta = 2$), вращательная энергия записывается следующим образом:

$$E_{rot}^{(2)} = \frac{I^0}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2), \quad (8.2)$$

где I^0 — главный момент инерции относительно оси, перпендикулярной оси симметрии молекулы. При ссылках на эту модель будем использовать обозначение "2R".

Состояние газа из твердых ротаторов может быть описано одночастичной функцией распределения $f(t, \vec{R}, \vec{\xi}, \vec{\omega})$, зависящей от времени t , координаты \vec{R} , скорости центра масс $\vec{\xi}$ и вектора угловых скоростей $\vec{\omega}$. Будем нормировать эту функцию распределения соотношением

$$d\rho = f d\vec{\xi} d\vec{\omega},$$

где ρ — массовая плотность газа.

Рассмотрим локально-равновесную двухтемпературную функцию распределения Максвелла–Больцмана ([57], с.109):

$$f_{0r} = f_0 \cdot f_{rot},$$

которая является произведением максвелловской функции распределения по поступательным степеням свободы

$$f_0 = \rho \left(2\pi \frac{\mathcal{R}_*}{\mathcal{M}} T_{tr}\right)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\vec{c}^2}{2(\mathcal{R}_*/\mathcal{M})T_{tr}}\right)$$

и функции распределения Хиншельвуда (Hinshelwood) по вращательным степеням свободы ([134], с.104)

$$f_{rot} = \mathcal{A} \exp\left(-\frac{E_{rot}}{kT_{rot}}\right),$$

где \mathcal{A} — нормировочный множитель. Для газа с двумя вращательными степенями свободы (2R) это распределение имеет вид

$$f_{rot}^{2R} = \left(2\pi \frac{\mathcal{R}_*}{I} T_{rot}\right)^{-1} \exp\left(-\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2(\mathcal{R}_*/I)T_{rot}}\right),$$

для газа с тремя вращательными степенями свободы (3R)

$$f_{rot}^{3R} = \left(2\pi \mathcal{R}_* T_{rot}\right)^{-1} (I_1 I_2 I_3)^{1/2} \exp\left(-\frac{\omega_1^2}{2(\mathcal{R}_*/I_1)T_{rot}} - \frac{\omega_2^2}{2(\mathcal{R}_*/I_2)T_{rot}} - \frac{\omega_3^2}{2(\mathcal{R}_*/I_3)T_{rot}}\right).$$

Здесь \mathcal{R}_* — универсальная газовая постоянная, M — молярная масса рассматриваемого газа, $I = I^0 N_A$, $I_\alpha = I_\alpha^0 N_A$, $\alpha = 1, 2, 3$, N_A — постоянная Авогадро, $k = \mathcal{R}_*/N_A$ — постоянная Больцмана, $\mathcal{R}_*/M = \mathcal{R}$ — газовая постоянная, T_{tr} — трансляционная температура, одинаковая для всех трансляционных степеней свободы молекулы, T_{rot} — вращательная температура, одинаковая для всех вращательных степеней свободы молекулы.

Нормировочный множитель \mathcal{A} выбран из условия

$$\int f_{rot} d\vec{\omega} = 1,$$

где интегрирование проводится по всему пространству угловых скоростей (см. следующий параграф). Такое представление для функции распределения правомерно в том случае, когда температура газа не слишком высока, значит колебательные степени свободы не возбуждены, но и не слишком мала, то есть вращательные степени свободы могут рассматриваться в классическом приближении [57, 76, 89, 90].

8.2 Системы координат и некоторые интегралы

Введем декартову систему координат в пространстве: (x, y, z) , \vec{R} — пространственный радиус-вектор. Для векторной функции пространственных координат $\vec{a}(\vec{R})$ a_x обозначает его x -проекцию, a_y и a_z — y - и z -проекции.

Другая пространственная система координат — произвольная ортономированная криволинейная (μ^1, μ^2, μ^3) система координат. Для той же векторной функции $\vec{a}(\vec{R})$ a_i является ковариантной координатой:

$$a_i = \vec{a} \cdot \vec{R}_i, \text{ где } \vec{R}_i = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \mu^i}.$$

Контравариантные координаты имеют вид: $a^i = g^{ij}a_j$, где $g^{ij} = \vec{R}^i \cdot \vec{R}^j$ — метрический тензор. \vec{R}^i определяются из следующих уравнений:

$$\vec{R}_i \cdot \vec{R}^j = \delta_i^j; \quad \delta_i^j = 1(0), i = (\neq)j.$$

Также справедливы следующие соотношения:

$$a^i = \vec{a} \cdot \vec{R}^i; \quad a_i = g_{ij}a^j; \quad g_{ik}g^{jk} = \delta_i^j, \quad g_{ij} = \vec{R}_i \cdot \vec{R}_j.$$

В декартовых координатах a^i выражается как

$$a^i = \vec{a} \cdot \vec{R}^i = a_x R_x^i + a_y R_y^i + a_z R_z^i, \quad (8.3)$$

где R_x^i — x -проекция \vec{R}^i , и соответственно R_y^i и R_z^i — y и z -проекции этого вектора. Метрический тензор можно выразить следующим образом:

$$g^{ij} = \vec{R}^i \cdot \vec{R}^j = R_x^i R_x^j + R_y^i R_y^j + R_z^i R_z^j. \quad (8.4)$$

Введем в рассмотрение также два пространства скоростей — пространство линейных и пространство угловых скоростей. В пространстве линейных скоростей обозначаем радиус-вектор через ξ . По отношению к пространственным координатам $\vec{\xi}$ может рассматриваться как постоянное векторное поле ξ^i :

$$\nabla_j \xi^i = 0, \quad (8.5)$$

∇_j — ковариантная производная. В пространстве линейных скоростей введем декартову систему координат (ξ_x, ξ_y, ξ_z) , направления координатных осей которой совпадают с направлениями декартовой системы координат в пространстве \vec{R} .

В пространстве угловых скоростей также введем декартову систему координат $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$. Направления координатных осей в данном случае совпадают с главными осями молекулы как твердого тела, и различаются от одной молекулы к другой.

Ниже мы будем проводить интегрирование в пространстве линейных скоростей $\vec{\xi}$ и в пространстве угловых скоростей $\vec{\omega}$ с использованием соответствующих декартовых систем координат. Система моментных уравнений будет строиться в криволинейной системе координат (μ^1, μ^2, μ^3) .

Вычислим некоторые интегралы, полезные в дальнейшем. Если не указано иное, пределы интегрирования предполагаются бесконечными:

$$\int \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \dots;$$

в последующих вычислениях будем использовать (8.3), (8.4).

$$\begin{aligned} \int c^i f_0 d\vec{c} &= \int (c_x R_x^i + c_y R_y^i + c_z R_z^i) f_0 d\vec{c} \\ &= R_x^i \int \int \int c_x f_0 dc_x dc_y dc_z + \dots = 0; \end{aligned}$$

$$\int c_i f_0 d\vec{c} = g_{ik} \int c^k f_0 d\vec{c} = 0;$$

$$\begin{aligned} \int c^i c^j f_0 d\vec{c} &= \int (c_x R_x^i + c_y R_y^i + c_z R_z^i)(c_x R_x^j + c_y R_y^j + c_z R_z^j) f_0 d\vec{c} = \\ &= R_x^i R_x^j \int c_x^2 f_0 d\vec{c} + R_y^i R_y^j \int c_y^2 f_0 d\vec{c} + R_z^i R_z^j \int c_z^2 f_0 d\vec{c} = \\ &= (\vec{R}^i \cdot \vec{R}^j) p_{tr} = g^{ij} p_{tr}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int c^i c^j c^k f_0 d\vec{c} &= 0; \\
\int c_x^4 f_0 d\vec{c} &= \int c_y^4 f_0 d\vec{c} = \int c_z^4 f_0 d\vec{c} = 3 \frac{p_{tr}^2}{\rho}; \\
\int c_x^2 c_y^2 f_0 d\vec{c} &= \int c_x^2 c_z^2 f_0 d\vec{c} = \int c_y^2 c_z^2 f_0 d\vec{c} = \frac{p_{tr}^2}{\rho}; \\
\int c^i c^j \bar{c}^2 f_0 d\vec{c} &= 5 \frac{p_{tr}^2}{\rho} g^{ij}.
\end{aligned}$$

Здесь $p_{tr} = \rho(\mathcal{R}_*/\mathcal{M})T_{tr}$ — трансляционное давление (см. следующий параграф). При вычислении этих интегралов были использованы равенства

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2) dy &= \sqrt{\pi}; & \int_{-\infty}^{\infty} y^2 \exp(-y^2) dy &= \frac{1}{2} \sqrt{\pi}; \\
\int_{-\infty}^{\infty} y^4 \exp(-y^2) dy &= \frac{3}{4} \sqrt{\pi}.
\end{aligned}$$

8.3 Построение моментных уравнений

Поведение функции распределения f описывается уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \vec{\nabla}) f = \mathcal{I}(f, f), \quad (8.6)$$

где $\mathcal{I}(f, f)$ — интеграл столкновений. Для построения моментных уравнений, описывающих течения вязкого газа, традиционно используются приближения для функции f в виде разложения по малому параметру вблизи равновесного значения с последующим осреднением полученного кинетического уравнения с сумматорными инвариантами [12, 65].

Для построения уравнений, учитывающих поступательно-вращательную неравновесность (КГДР системы), заменим функцию

распределения f ее приближенным значением f^{QGDR} , которое представляет собой разложение по малому параметру в окрестности равновесной функции распределения f_{0r} (8.3) следующего вида

$$f^{QGDR} = f_{0r} - \tau(\vec{\xi}\vec{\nabla})f_{0r}.$$

Здесь τ представляет собой максвелловское время релаксации $\tau = \mu/p_{tr}$, где $\mu \sim T_{tr}^\omega$ — коэффициент вязкости газа, вычисляемый на основе поступательной температуры частиц [90], величина ω определяется законом межмолекулярного взаимодействия.

Формальная замена

$$f \rightarrow f^{QGDR}$$

в конвективном слагаемом уравнения Больцмана (8.6) приводит к приближенному уравнению:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{\xi}\vec{\nabla})f_{0r} - (\vec{\xi}\vec{\nabla})\tau(\vec{\xi}\vec{\nabla})f_{0r} = \mathcal{I}(f, f). \quad (8.7)$$

Приближенное уравнение аналогичного вида использовалось в главе 3 для построения КГД уравнений.

В отличие от классического кинетического уравнения Кагана–Максимова для газа с вращательными степенями свободы, полученного при сходных предположениях, в этом уравнении не учитываются ни поступательное ускорение молекулы под действием внешней силы, ни прецессия вращательного момента молекулы во внешнем магнитном или электрическом поле [57].

Макроскопические КГДР уравнения получаются посредством моментного осреднения уравнения (8.7) по пространствам скоростей. Процедура получения уравнений аналогична изложенным в [52] и в главе 2.

Считаем справедливыми следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \int f d\vec{\xi}d\vec{\omega} &= \int f_{0r} d\vec{\xi}d\vec{\omega} = \rho, & \int c^i f d\vec{\xi}d\vec{\omega} &= 0, \\ p_{tr} &= \frac{1}{3} \int \vec{c}^2 f d\vec{\xi}d\vec{\omega} = \frac{1}{3} \int \vec{c}^2 f_{0r} d\vec{\xi}d\vec{\omega} = \rho \frac{\mathcal{R}_*}{\mathcal{M}} T_{tr}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

В случае 2R:

$$\begin{aligned} p_{rot} &= \int \varepsilon_{\omega}^{2R} f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \int \varepsilon_{\omega}^{2R} f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \rho \frac{\mathcal{R}_{\star}}{\mathcal{M}} T_{rot}, \\ \varepsilon_{\omega}^{2R} &= \frac{I}{2\mathcal{M}} (\omega_1^2 + \omega_2^2). \end{aligned} \quad (8.9)$$

В случае 3R:

$$\begin{aligned} p_{rot} &= \frac{2}{3} \int \varepsilon_{\omega}^{3R} f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{2}{3} \int \varepsilon_{\omega}^{3R} f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \rho \frac{\mathcal{R}_{\star}}{\mathcal{M}} T_{rot}, \\ \varepsilon_{\omega}^{3R} &= \frac{1}{2\mathcal{M}} (I_1 \omega_1^2 + I_2 \omega_2^2 + I_3 \omega_3^2). \end{aligned} \quad (8.10)$$

Используя (8.1) и (8.2), легко получить, что полная энергия единицы массы газа, включающая в себя энергию поступательного E_{tr} и вращательного E_{rot} движений, записывается в виде

$$E = E_{tr} + E_{rot} = \int \left(\frac{\xi^2}{2} + \varepsilon_{\omega} \right) f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \int \left(\frac{\xi^2}{2} + \varepsilon_{\omega} \right) f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega},$$

где

$$\begin{aligned} E_{tr} &= \frac{1}{2} \int \xi^2 f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{1}{2} \int \xi^2 f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{\rho \bar{u}^2}{2} + \frac{3}{2} p_{tr}, \\ E_{rot}^{2R} &= \int \varepsilon_{\omega}^{2R} f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \int \varepsilon_{\omega}^{2R} f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = p_{rot}, \\ E_{rot}^{3R} &= \int \varepsilon_{\omega}^{3R} f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \int \varepsilon_{\omega}^{3R} f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{3}{2} p_{rot}. \end{aligned} \quad (8.11)$$

Среднее давление вычисляется как

$$p_{av} = \frac{3p_{tr} + \zeta p_{rot}}{3 + \zeta}. \quad (8.12)$$

Для 2R газа:

$$\zeta = 2, \quad p_{av} = (3p_{tr} + 2p_{rot})/5,$$

для 3R газа:

$$\zeta = 3, \quad p_{av} = (p_{tr} + p_{rot})/2.$$

Средняя температура связана со средним давлением уравнением состояния $p_{av} = \rho(\mathcal{R}_*/\mathcal{M})T_{av}$.

Выражение для полной энергии в обоих случаях можно записать через среднее давление:

$$E = \frac{1}{2}\rho\bar{u}^2 + \frac{p_{av}}{\gamma - 1},$$

где p_{av} определяется в (8.12). Здесь γ — показатель адиабаты. Для идеального газа [134]

$$\gamma = \frac{5 + \zeta}{3 + \zeta}. \quad (8.13)$$

Используя (8.5), перепишем уравнение (8.7) в индексной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_i \xi^i f_{0r} - \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} = \mathcal{I}(f, f). \quad (8.14)$$

Интегрируя (8.14) с весом 1 и используя соотношения (8.8)–(8.11) и выражения из п. 3.3, получим:

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \frac{\partial}{\partial t} \int f d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{\partial}{\partial t} \rho; \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \nabla_i \int (u^i + c^i) f_0 d\vec{c} \int f_{rot} d\vec{\omega} = \nabla_i \rho u^i; \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \nabla_i \tau \nabla_j \int (u^i + c^i)(u^j + c^j) f_0 d\vec{c} \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + \int c^i c^j f_0 d\vec{c}) = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p_{tr}). \end{aligned}$$

В силу свойств интеграла столкновений (единица является сумматорным инвариантом для интеграла столкновений Больцмана) интеграл от правой части обращается в нуль:

$$\int \mathcal{I}(f, f) d\vec{\xi} d\vec{\omega} = 0.$$

Таким образом, получаем уравнение для плотности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p_{tr}).$$

В дальнейшем будем использовать (8.8)–(8.11), опуская соответствующие ссылки.

Для получения уравнения импульса проинтегрируем (8.14) с весом ξ^k :

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \xi^k d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k. \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} \xi^k d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \nabla_i (\rho u^i u^k + g^{ik} p_{tr}). \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} \xi^k d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j u^k + p_{tr} (u^k g^{ij} + u^j g^{ik} + u^i g^{jk})). \end{aligned}$$

Поскольку ξ^k является сумматорным инвариантом, то и в этом случае

$$\int \mathcal{I}(f, f) \xi^k d\vec{\xi} d\vec{\omega} = 0.$$

Комбинируя полученные выражения, получаем уравнение для ρu^k :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i (\rho u^i u^k + g^{ik} p_{tr}) \\ = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j u^k + p_{tr} (u^k g^{ij} + u^j g^{ik} + u^i g^{jk})). \end{aligned}$$

С целью получить уравнение для поступательной энергии E_{tr} осредним (8.14) с весом $\xi^2/2$:

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\xi^2}{2} d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \frac{\partial}{\partial t} E_{tr}. \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} \frac{1}{2} \xi^2 d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \nabla_i \frac{1}{2} \int (u^i + c^i) f_0 \xi^2 d\vec{c} = \nabla_i u^i (E_{tr} + p_{tr}). \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} \frac{\xi^2}{2} d\vec{\xi} d\vec{\omega} \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j (u^i u^j E_{tr} + 2u^i u^j p_{tr} + \frac{1}{2} u_k u^k g^{ij} p_{tr} + \frac{5}{2} \frac{p_{tr}^2}{\rho} g^{ij}). \end{aligned}$$

Для интеграла столкновений \mathcal{I} величина $\xi^2/2$ уже не является сумматорным инвариантом, поскольку возможен обмен энергией

между поступательными и вращательными степенями свободы, и последний интеграл не обращается в нуль. Назовем его обменным членом и обозначим:

$$\int \mathcal{I}(f, f) \frac{\xi^2}{2} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = S_{tr}.$$

Комбинируя полученные выражения и дифференцируя по частям слагаемое с квадратом давления $5p_{tr}^2/(2\rho)$, получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E_{tr} + \nabla_i u^i (E_{tr} + p_{tr}) &= \nabla_i \tau \nabla_j (u^i u^j E_{tr} + 2u^i u^j p_{tr} \\ &+ \frac{1}{2} u_k u^k g^{ij} p_{tr}) + \frac{5}{2} \nabla_i \tau \frac{p_{tr}}{\rho} \nabla_j p_{tr} g^{ij} + \frac{5}{2} \nabla_i \tau p_{tr} \nabla_j \frac{p_{tr}}{\rho} g^{ij} + S_{tr}. \end{aligned}$$

Чтобы получить уравнение для вращательной энергии E_{rot} , необходимо осреднить (8.14) с весом ε_ω^{2R} в случае 2R молекул, и с весом ε_ω^{3R} в случае 3R молекул; эти величины определяются в (8.9)–(8.10).

Для первого варианта осреднения получим:

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \varepsilon_\omega d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \frac{\partial}{\partial t} E_{rot}. \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} \varepsilon_\omega d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \nabla_i \int \xi^i f_0 d\vec{c} \int \varepsilon_\omega f_{rot} d\vec{\omega} = \nabla_i u^i E_{rot}. \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} \varepsilon_\omega d\vec{\xi} d\vec{\omega} &= \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p_{tr}) \frac{E_{rot}}{\rho} = \nabla_i \tau \nabla_j (E_{rot} u^i u^j + g^{ij} \frac{p_{tr} p_{rot}}{\rho}). \end{aligned}$$

Обменный член обозначим как

$$\int \mathcal{I}(f, f) \varepsilon_\omega d\vec{\xi} d\vec{\omega} = S_{rot}.$$

Комбинируя вместе полученные выражения и дифференцируя по частям слагаемое, содержащее произведение давлений, получим

уравнение для вращательной энергии 2R молекул:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E_{rot} + \nabla_i u^i E_{rot} &= \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_{rot} \\ &+ \nabla_i \tau \frac{p_{rot}}{\rho} \nabla_j p_{tr} g^{ij} + \nabla_i \tau p_{tr} \nabla_j \frac{p_{rot}}{\rho} g^{ij} + S_{rot}. \end{aligned}$$

Аналогичным способом строится уравнение для вращательной энергии для 3R газа. При этом изменяется только правая часть уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E_{rot} + \nabla_i u^i E_{rot} &= \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_{rot} \\ &+ \frac{3}{2} \nabla_i \tau \frac{p_{rot}}{\rho} \nabla_j p_{tr} g^{ij} + \frac{3}{2} \nabla_i \tau p_{tr} \nabla_j \frac{p_{rot}}{\rho} g^{ij} + S_{rot}. \end{aligned}$$

Изложенный здесь способ получения моментных уравнений приводит к выражениям для теплового потока с числом Прандтля, равным единице. Для обобщения уравнений на случай произвольного числа Прандтля предпоследние слагаемые в уравнениях для поступательной и вращательной энергий следует домножить на величину Pr^{-1} . Для определения числа Прандтля можно воспользоваться аппроксимацией Эйкена [99]:

$$Pr = \frac{4\gamma}{9\gamma - 5},$$

где γ определяется в (8.13); в случае 2R газа $\gamma = 7/5$, $Pr = 14/19$, в случае 3R газа $\gamma = 8/6$, $Pr = 16/21$.

8.4 Вычисление обменных членов

Обменные члены в правых частях полученных уравнений для энергий представляют собой моменты интеграла столкновений уравнения Больцмана (8.6). Для их вычисления воспользуемся релаксационной моделью интеграла столкновений в ее традиционном виде

$$\mathcal{I}(f, f) = \frac{f_{0r}^0 - f}{\tau_{rot}},$$

где f_{0r}^0 представляет собой функцию распределения f_{0r} для равновесного случая, то есть для случая, когда $T_{tr} = T_{rot} = T_{av}$, соответственно $p_{tr} = p_{rot} = p_{av}$; τ_{rot} — среднее время вращательной релаксации, которое обычно в несколько раз превышает максвелловское время релаксации τ :

$$\tau_{rot} = Z_{rot}\tau_c,$$

$1/Z_{rot}$ — относительная частота неупругих соударений, $\tau_c = \tau/\Omega$ — характерное время между упругими соударениями, $\Omega = 30/((7 - 2\omega)(5 - 2\omega))$ [90, 134]. Способ вычисления величины Z_{rot} и ее влияние на структуру течения в ударной волне обсуждается в п. 3.4.2 и приложении В.

Подставляя выражение для интеграла столкновений в формулу для вычисления обменного члена, для случая 2R получаем:

$$\begin{aligned} S_{tr} &= \int \frac{1}{\tau_{rot}}(f_{0r}^0 - f) \frac{1}{2} \bar{\xi}^2 d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{1}{2\tau_{rot}} \int (f_{0r}^0 - f)(\bar{u}^2 + 2\bar{c}\bar{u} + \bar{c}^2) d\vec{\xi} d\vec{\omega} \\ &= \frac{\bar{u}^2}{2\tau_{rot}} \int (f_{0r}^0 - f) d\vec{\xi} d\vec{\omega} + \frac{\bar{u}}{\tau_{rot}} \int \bar{c}(f_{0r}^0 - f) d\vec{\xi} d\vec{\omega} \\ &\quad + \frac{1}{2\tau_{rot}} \int \bar{c}^2 (f_{0r}^0 - f)(\bar{u}^2 + 2\bar{c}\bar{u} + \bar{c}^2) d\vec{\xi} d\vec{\omega} \\ &= 0 + 0 + \frac{1}{2\tau_{rot}} (3p_{av} - 3p_{tr}) = \frac{3}{2\tau_{rot}} (p_{av} - p_{tr}). \end{aligned}$$

Для второго обменного члена аналогично получаем:

$$S_{rot} = \int \frac{1}{\tau_{rot}} (f_{0r}^0 - f) \varepsilon_{\omega}^{2R} d\vec{\xi} d\vec{\omega} = \frac{1}{\tau_{rot}} (p_{av} - p_{rot}).$$

Подставляя выражения для среднего давления (8.12), получим для 2R случая

$$S_{tr} = \frac{3}{5\tau_{rot}} (p_{rot} - p_{tr}), \quad S_{rot} = -S_{tr}.$$

Рассуждая аналогично, получим для 3R случая:

$$S_{tr} = \frac{3}{4\tau_{rot}} (p_{rot} - p_{tr}), \quad S_{rot} = -S_{tr}.$$

Заметим, что в соответствии с законом сохранения энергии

$$S_{tr} + S_{rot} = 0.$$

8.5 КГДР уравнения для газа с двумя и тремя вращательными степенями свободы

Приведем окончательный вид КГДР уравнений для двухатомных (2R) и полиатомных (3R) молекул в инвариантном относительно системы координат виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho u^i u^j + \nabla^i p_{tr}), \quad (8.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p_{tr} \\ = \nabla_i \tau \nabla_j \rho u^i u^j u^k + \nabla_i \tau (\nabla^i p_{tr} u^k + \nabla^k p_{tr} u^i) + \nabla^k \tau \nabla_i p_{tr} u^i, \end{aligned} \quad (8.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E_{tr} + \nabla_i u^i (E_{tr} + p_{tr}) = \nabla_i \tau (\nabla_j (E_{tr} + 2p_{tr}) u^i u^j \\ + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p_{tr}) + \frac{5}{2} \nabla_i \tau \frac{p_{tr}}{\rho} \nabla^i p_{tr} + Pr^{-1} \frac{5}{2} \nabla_i \tau p_{tr} \nabla^i \frac{p_{tr}}{\rho} + S_{tr}. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Уравнение для вращательной энергии и обменные члены в случае 2R газа имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E_{rot} + \nabla_i u^i E_{rot} \\ = \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_{rot} + \nabla_i \tau \frac{p_{rot}}{\rho} \nabla^i p_{tr} + Pr^{-1} \nabla_i \tau p_{tr} \nabla^i \frac{p_{rot}}{\rho} + S_{rot}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

$$S_{tr} = \frac{3}{5\tau_{rot}} (p_{rot} - p_{tr}); \quad S_{rot} = -S_{tr}; \quad E_{tr} = \frac{\rho \bar{u}^2}{2} + \frac{3p_{tr}}{2}; \quad E_{rot} = p_{rot}.$$

$$\gamma = 7/5; \quad Pr = 14/19; \quad p_{tr} = \rho \frac{\mathcal{R}_*}{\mathcal{M}} T_{tr}; \quad p_{rot} = \rho \frac{\mathcal{R}_*}{\mathcal{M}} T_{rot}.$$

Уравнение для вращательной энергии и обменные члены для 3R газа:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} E_{rot} + \nabla_i u^i E_{rot} \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_{rot} + \frac{3}{2} \nabla_i \tau \frac{p_{rot}}{\rho} \nabla^i p_{tr} + Pr^{-1} \frac{3}{2} \nabla_i \tau p_{tr} \nabla^i \frac{p_{rot}}{\rho} + S_{rot}. \\ S_{tr} &= \frac{3}{4\tau_{rot}} (p_{rot} - p_{tr}); \quad S_{rot} = -S_{tr}; \quad E_{tr} = \frac{\rho \bar{u}^2}{2} + \frac{3p_{tr}}{2}; \quad E_{rot} = \frac{3}{2} p_{rot}. \\ \gamma &= 8/6; \quad Pr = 16/21; \quad p_{tr} = \rho \frac{\mathcal{R}_*}{\mathcal{M}} T_{tr}; \quad p_{rot} = \rho \frac{\mathcal{R}_*}{\mathcal{M}} T_{rot}. \end{aligned}$$

Уравнение для вращательной энергии E_r для 2R и 3R вариантов может быть приближено следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} T_r + u^i \nabla_i T_r = (T_{av} - T_r) / \tau_{rot}.$$

Такая форма записи часто используется при изучении релаксационных процессов (см. [134], с. 117).

КГДР уравнения могут быть записаны в форме законов сохранения вида (1.54) – (1.56) в отсутствие внешних сил. При этом уравнения неразрывности (1.54) и импульса (1.55) сохраняют свой вид, в котором давление p заменяется на p_{tr} , а τ вычисляется как $\tau = \mu / p_{tr}$, где коэффициент вязкости определяется по поступательной температуре $\mu = \mu(T_{tr})$. В свою очередь в КГДР модели уравнение энергии (1.56) расщепляется на два уравнения – для энергии, связанной с поступательными E_{tr} и вращательными E_{tr} степенями свободы. Далее приведен вид этого расщепления для 2R газа:

$$\frac{\partial E_{tr}}{\partial t} + \nabla_i \frac{J^i}{\rho} (E_{tr} + p_{tr}) + \nabla_i q_{tr}^i = \nabla_i (\Pi^{ik} u^k) + S_{tr}, \quad (8.19)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial E_{rot}}{\partial t} + \nabla_i u^i E_{rot} + \nabla_i q_{rot}^i \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_{rot} + \nabla_i \tau \frac{p_{rot}}{\rho} \nabla^i p_{tr} + S_{rot}, \quad (8.20) \end{aligned}$$

Общий тепловой поток q^i также расщепляется на две составляющие

$$q_{tr}^i = -\frac{1}{Pr} \frac{5}{2} \mu \nabla^i \frac{p_{tr}}{\rho} - \tau \rho u^i [u^j \nabla_j \varepsilon + p_{tr} u_j \nabla^j (\frac{1}{\rho})], \quad (8.21)$$

где $\varepsilon = p_{tr}/(\rho(\gamma-1))$. Эта часть определяет поток тепла, обусловленный градиентом поступательной температуры T_{tr} . Вторая составляющая

$$q_{rot}^i = -\frac{1}{Pr} \mu \nabla^i \frac{p_{rot}}{\rho} \quad (8.22)$$

определяет тепловой поток, обусловленный градиентом вращательной температуры T_{rot} . Заметим, что в КГДР модели оба вектора теплового потока q_{tr} и q_{rot} в (8.21) и (8.22) пропорциональны $\mu(T_{tr})$.

Дополненные граничными условиями, выписанные здесь системы уравнений представляют собой замкнутую модель для расчета течений умеренно-разреженного газа с возможной неравновесностью между поступательными и вращательными степенями свободы.

В случае теплового равновесия газа по поступательным и вращательным степеням свободы, то есть в случае, когда $T_{tr} = T_{rot} = T$ и $p_{tr} = p_{rot} = p$, полная энергия единицы объема равна

$$E = E_{tr} + E_{rot} = \frac{\rho \vec{u}^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1},$$

где γ определяется в соответствии с (8.13).

При этом вид уравнений для плотности и импульса не изменится:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho u^i u^j + \nabla^i p),$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p &= \nabla_i \tau \nabla_j \rho u^i u^j u^k \\ &+ \nabla_i \tau (\nabla^i \rho u^k + \nabla^k \rho u^i) + \nabla^k \tau \nabla_i \rho u^i. \end{aligned}$$

Сложим уравнения для E_{tr} и E_{rot} , и получим уравнение для полной энергии E вида (3.10)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i u^i (E + p) &= \nabla_i \tau (\nabla_j (E + 2p) u^i u^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p) \\ &+ \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau \frac{p}{\rho} \nabla^i p + Pr^{-1} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau p \nabla^i \frac{p}{\rho}. \end{aligned}$$

Заметим, что приведенное выше уравнение энергии сразу может быть получено при осреднении приближенного уравнения (8.14) с сумматорным инвариантом $\xi^2/2 + \varepsilon_\omega$ и обобщении полученного уравнения на случай $Pr \neq 1$.

Таким образом, в равновесном случае КГДР система переходит в систему КГД с соответствующими значениями γ и Pr .

Далее приведен вид КГДР уравнений для пространственно-одномерных течений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u &= \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u^2 + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_{tr}. \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u^2 + \frac{\partial}{\partial r} p_{tr} &= \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u^3 \\ &+ 2 \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_{tr} u - 2\nu \frac{\tau}{r^2} p_{tr} u + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\tau}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu p_{tr} u. \\ \frac{\partial E_{tr}}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u (E_{tr} + p_{tr}) &= \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu (E_{tr} + 2p_{tr}) u^2 \\ &+ \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{2} u^2 p_{tr} + \frac{5}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{p_{tr}}{\rho} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_{tr} \\ &+ Pr^{-1} \frac{5}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau p_{tr} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{p_{tr}}{\rho} + S_{tr}. \end{aligned}$$

Для случая 2R:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{rot}}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u E_{rot} &= \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u^2 E_{rot} \\ &+ \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{p_{rot}}{\rho} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_{tr} + Pr^{-1} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau p_{tr} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{p_{rot}}{\rho} + S_{rot}. \end{aligned}$$

Для случая 3R:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{rot}}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u E_{rot} &= \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u^2 E_{rot} \\ + \frac{3}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{p_{rot}}{\rho} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_{tr} + Pr^{-1} \frac{3}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau p_{tr} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{p_{rot}}{\rho} &+ S_{rot}. \end{aligned}$$

Здесь $\nu = 0$ соответствует плоскому случаю, $\nu = 1$ — цилиндрической симметрии, $\nu = 2$ — сферической.

8.6 Примеры численных расчетов

В этом разделе приведены результаты, полученные на основе КГДР уравнений для задачи о течении азота, который рассматривался как 2R газ с параметрами $Z_{rot} = 5$ и 10 для $\omega = 0.75$, где ω — показатель степени в законе зависимости вязкости от температуры. Полученные результаты сопоставлены с расчетами, выполненными в рамках DSMC подхода. Рассматриваются две одномерные задачи: задача о релаксации поступательной и вращательной температур в потоке, и задача о структуре ударной волны. Численный алгоритм представляет собой явную по времени разностную схему второго порядка точности без искусственных регуляризаторов, аналогичную описанной в главе 5 (п. 5.7).

Помимо изложенных далее одномерных задач, решался цикл задач о течении газа в недорасширенных струях [159, 172].

8.6.1 Задача о релаксации

Рассмотрим стационарное одномерное течение газа ($Ma = 3.571$) с неравновесностью во входном сечении при $x = 0$, которое характеризуется температурами $T_{tr1} \neq T_{rot1}$, плотностью ρ_1 и скоростью u_1 . Вращательная и поступательная температуры эволюционируют к равновесному состоянию с ростом x .

Для плоского одномерного течения КГДР система имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho u = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p_{tr}),$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p_{tr}) = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3 + 3p_{tr}u),$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{tr}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u(E_{tr} + p_{tr}) &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (E_{tr} + 2p_{tr})u^2 + \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{2}u^2 p_{tr} \\ &+ \frac{5}{2} \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{p_{tr}}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} p_{tr} + \frac{5}{2Pr} \frac{\partial}{\partial x} \tau p_{tr} \frac{\partial}{\partial x} \frac{p_{tr}}{\rho} + S_{tr}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{rot}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u E_{rot} &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} u^2 E_{rot} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{p_{rot}}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} p_{tr} + \frac{1}{Pr} \frac{\partial}{\partial x} \tau p_{tr} \frac{\partial}{\partial x} \frac{p_{rot}}{\rho} + S_{rot}. \end{aligned}$$

Обменные члены вычисляются как

$$S_{tr} = \frac{3}{2\tau_{rot}}(p_{av} - p_{tr}), \quad S_{rot} = -S_{tr}, \quad \tau_{rot} = \tau \Omega^{-1}(\omega) Z_{rot}.$$

Здесь $\tau/\Omega = \tau_c$ — среднее время между столкновениями, $E_{tr} = \rho u^2 + 3p_{tr}/2$ — поступательная энергия, $E_{rot} = p_{rot}$ — вращательная энергия, $\tau = \mu/p_{tr}$. Средние значения давления и температуры определяются как

$$p_{av} = (3p_{tr} + 2p_{rot})/5 = \rho \mathcal{R} T_{av}.$$

В расчетах по методу DSMC использована модель соударений, которая приблизительно соответствует значению $Z_{rot} = 5$. Наличие градиента температуры на входной границе расчетной области вызывает трудности при постановке граничных условий для DSMC вычислений. Условия на левой входной границе в этом алгоритме реализованы следующим образом: молекулы с равновесными температурами T_{tr} и T_{rot} впрыскиваются в область расчета из зоны, расположенной в точке $x < 0$. Значения газодинамических параметров, полученные в DSMC вычислениях в точке $x = 0$, задаются в качестве граничных условий для КГДР вычислений. На правой выходной границе для КГДР уравнений ставятся условия сноса потока, или "мягкие граничные условия". Кинетический аналог этих же условий ставится и в DSMC алгоритме. Шаг пространственной сетки выбирался равным $h = 1$ и 0.5 .

Результаты, полученные по обоим методам, оказываются близкими, что характеризует точность построенной КГДР модели (рис. 8.1). На рис. 8.1 координата x нормирована на среднюю длину свободного пробега λ_1 , где

$$\lambda_1 = \frac{\mu(T_1)}{\rho_1 \sqrt{2(\mathcal{R}_*/\mathcal{M})T_{tr1}}} \times \frac{2(7-\omega)(5-\omega)}{15\sqrt{\pi}}.$$

Здесь $T_1 = T_{av}$ в точке $x = 0$.

8.6.2 Задача о структуре неподвижной ударной волны

Задача о структуре ударной волны решалась для следующих вариантов: число Маха набегающего потока $Ma = 1.71$ при $Z_{rot} = 5$ и 10 , что соответствует DSMC вычислениям, приведенным в работе [134] на стр. 298, и для чисел Маха $Ma = 7$ и 12.9 , $Z_{rot} = 5$, что соответствует DSMC расчетам [166].

Полученные в расчетах профили плотности, скорости и температур представлены на рис. 8.2–8.3, где значение координаты x нормировано на среднюю длину свободного пробега в набегающем потоке. Ординаты нормированы обычным образом с использованием соотношений Рэнкина–Гюгонио между параметрами перед ударной волной (1) и за ней (2), т. е. $f_\rho = (\rho - \rho^{(1)})/(\rho^{(2)} - \rho^{(1)})$, где f_ρ — значение плотности на рисунке, $\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$ — значения на границах; аналогично для температуры. Для скорости $f_u = (u - u^{(2)})/(u^{(1)} - u^{(2)})$.

На рис. 8.2 ($Z_{rot} = 5$) видны характерные особенности профилей в данной задаче. А именно, взаимное расположение кривых соответствует результатам Берда [134], где профиль поступательной температуры T_{tr} имеет небольшой максимум ($T_{tr} = 1.021$), причем этот профиль расположен левее профиля вращательной температуры T_{rot} , который максимума не имеет. Обратная ширина профиля плотности ударной волны составляет $\lambda_1/\delta = 0.152$. С увеличением Z_{rot} ширина ударной волны возрастает ($\lambda_1/\delta = 0.136$), а превышение величины поступательной температуры T_{tr} над ее значением за фронтом увеличивается примерно в два раза ($T_{tr} = 1.058$). Эти результаты соответствуют данным кинетических расчетов [134].

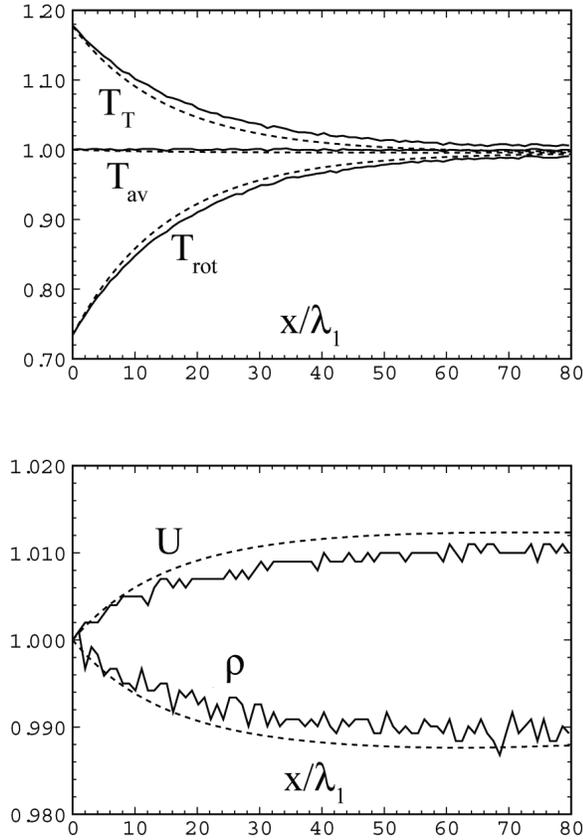


Рис. 8.1. Профили поступательной $T_t = T_{tr}$ и вращательной T_{rot} температуры, плотности и скорости в задаче о релаксации. Сплошная линия соответствует методу DSMC, пунктирная — модели КГДР

Результаты расчетов для $Ma = 7.0$ и $Ma = 12.9$ представлены на рис. 8.3. Они очень близки к результатам [166]. В частности, в обоих случаях профили ρ и T_{rot} расположены очень близко друг к другу. Кроме того, значения максимумов T_{tr} также находятся в хорошем соответствии с расчетами [166], где $T_{tr} = 1.068$ для $Ma = 7.0$, и $T_{tr} =$

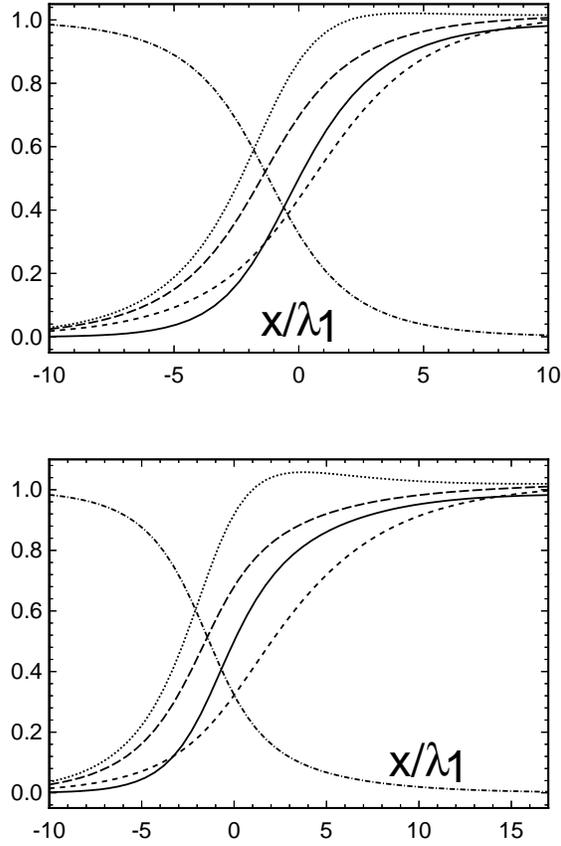


Рис. 8.2. Задача об ударной волне, $Ma = 1.71$, $Z_{rot} = 5$ (сверху) и $Z_{rot} = 10$ (снизу). Сплошная линия соответствует ρ , пунктирная линия – T_{rot} , точками обозначена температура T_{tr} , длинным пунктиром – T_{av} , и штрихпунктиром – u

$= 1.070$ для $Ma = 12.9$. Обратная толщина ударной волны λ_1/δ для этих случаев составляет 0.297 и 0.244 соответственно. Однако в области перед ударной волной значение поступательной и вращательной температур T_{tr} и T_{rot} , рассчитанных по КГДР модели, оказываются

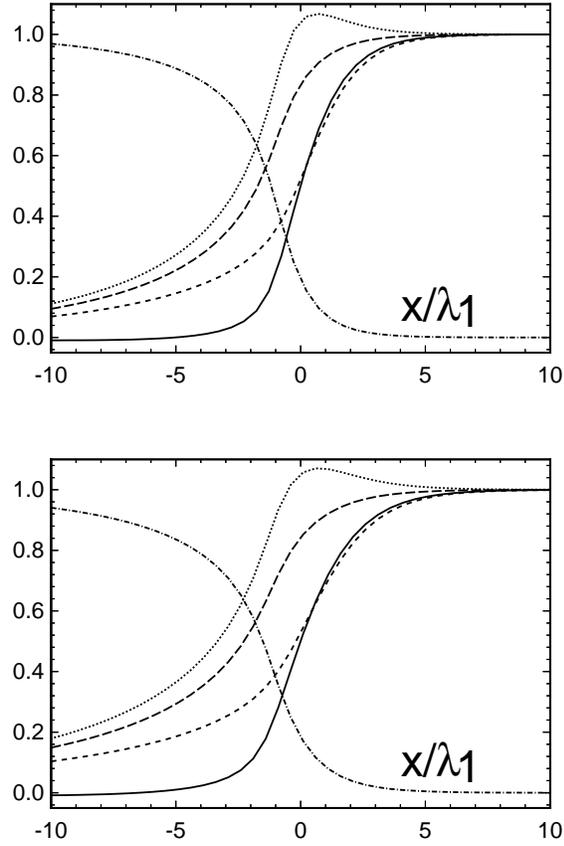


Рис. 8.3. Задача об ударной волне; $Ma = 7.0$, $Z_{rot} = 5$ (сверху); $Ma = 12.9$, $Z_{rot} = 5$ (снизу); обозначения те же, что на рис. 8.2

завышенными по сравнению с данными DSMC.

Полученное соответствие численных результатов данным расчетов по кинетическому DSMC алгоритму указывает на хорошую точность предложенной КГДР модели для описания поступательно-вращательной неравновесности в газе. При этом КГДР алгоритм существенно проще в численной реализации и требует неизмеримо

меньших затрат машинного времени, чем DSMC метод.

Использование КГДР моделей для расчета двумерных осесимметричных течений и сопоставление полученных результатов с данными экспериментов изложено в [159, 172]. Рассматривались недорасширенные струи CO_2 и N_2 газов, истекающие из звукового сопла круглого сечения. В этих расчетах показано, что согласие расчета с экспериментом улучшается при учете в численной модели поступательно-вращательной неравновесности. Численное моделирование этих задач проводилось для КГД и КГДР уравнений, выписанных в цилиндрической системе координат, с использованием параллельных вычислительных систем кластерного типа [26, 160].

Глава 9

КГД уравнения для бинарной смеси газов

Численное моделирование течений газовых смесей представляет интерес для многих практических приложений. В частности, эффективное моделирование течений нереагирующих газов является необходимым этапом, предшествующим построению моделей течений газов с химическими реакциями [19, 134].

Для расчета течений газовых смесей имеется две группы моделей. Первая — это кинетические модели, то есть модели, основанные на методах прямого численного моделирования [134], или основе решения уравнения Больцмана в том или ином приближении [165]. Другая группа — это системы моментных уравнений, которые получены на основе уравнений Навье–Стокса, как правило, феноменологически [19, 75, 98].

Кинетические модели достаточно точно описывают течения газа, но теряют свою эффективность с уменьшением чисел Кнудсена и Маха. Моментные методы более экономичны в вычислительном плане, однако феноменологические способы их построения приводят к ряду проблем. В частности, большинство методов представляют собой одножидкостное приближение, предполагающее, что скорости и температуры обеих компонент смеси одинаковы [19, 75]. Такое упрощение не позволяет анализировать поведение каждой из компонент и поэтому представляется недостаточно точным. Имеются немногочисленные примеры использования двухжидкостного, двухскоростного или двухтемпературного приближений, которые в основном строились для задач физики плазмы [58]. Указанные методы требуют введения целого ряда дополнительных констант, определение которых представляет собой самостоятельную задачу.

В этой главе описана макроскопическая модель для описания течений нереагирующей бинарной смеси газов, основанная на КГД

уравнениях. Эта модель двухжидкостного приближения, которая представляет собой систему уравнений для плотности, импульса и энергии каждой из компонент. Предложено также одножидкостное приближение этой модели. Построенная система уравнений (КГДМ) опирается на систему кинетических уравнений в релаксационном приближении и является естественным обобщением квазигазодинамических уравнений на случай смеси газов.

Изложение материала основано на работах [32] и [147].

9.1 Исходная кинетическая модель

В 1954 г. Бхатнагар, Гросс и Крук [132] опубликовали свое знаменитое уравнение, представляющее собой уравнение Больцмана с интегралом столкновений в релаксационной форме. Несмотря на свой простой вид, эта модель сохраняет основные свойства исходного кинетического уравнения и поэтому она нашла широкое применение при анализе большого круга задач. Обобщение БГК модели на случай смеси газов было дано Сировичем в 1962 г. [188]. В 1964 г. Морзе, основываясь на законах сохранения, вычислил недостающие "свободные параметры" указанной модели [176]. Эта доработанная кинетическая модель используется в дальнейшем для построения моментных (КГДМ) уравнений для течения бинарной смеси. В 1970 г. Ву и Ли [198] применили указанную кинетическую модель для расчета одномерного течения бинарной смеси в ударной трубе. Следует отметить, что эти расчеты соответствуют течению с числом Прандтля $Pr = 1$, что определяется выбранным видом релаксационного слагаемого в исходной кинетической модели.

Приведем краткое описание указанной кинетической модели в соответствии с работой [198].

Пусть смесь состоит из газов a и b с числовыми плотностями n_a и n_b и, соответственно, массовыми плотностями $\rho_a = m_a n_a$ и $\rho_b = m_b n_b$, где m_a и m_b — массы молекул для газов a и b . Пусть каждый газ характеризуется своей температурой T_i и макроскопической скоростью \vec{u}_i , где $i = a, b$, соответственно. Газовая постоянная равна $\mathcal{R}_i = k_B/m_i$, где k_B — постоянная Больцмана.

Тогда, в соответствии с [198], кинетическая модель для газовой смеси может быть записана в виде

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) f_a = \nu_a (F_a - f_a) + \nu_{ab} (\bar{F}_a - f_a), \quad (9.1)$$

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} + (\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla}) f_b = \nu_b (F_b - f_b) + \nu_{ba} (\bar{F}_b - f_b), \quad (9.2)$$

где $f_i(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ — функция распределения для i -й смеси, ($i = a, b$), $\vec{\xi} = \vec{u} + \vec{c}$ — скорость молекулы, \vec{c} — ее тепловая скорость. ν_a и ν_b представляют собой частоты взаимных столкновений между молекулами одного сорта, ν_{ab} — частота взаимных столкновений между молекулами сорта a с молекулами сорта b , а ν_{ba} — частота взаимных столкновений молекул сорта b с молекулами сорта a . Полное число столкновений между молекулами a и b должно быть сбалансировано, то есть

$$n_a \nu_{ab} = n_b \nu_{ba}. \quad (9.3)$$

F_a, F_b и \bar{F}_a, \bar{F}_b — максвелловские функции распределения, которые определяются следующим образом:

$$F_a = \frac{\rho_a}{(2\pi \mathcal{R}_a T_a)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u}_a)^2}{2\mathcal{R}_a T_a}\right), \quad (9.4)$$

$$F_b = \frac{\rho_b}{(2\pi \mathcal{R}_b T_b)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u}_b)^2}{2\mathcal{R}_b T_b}\right), \quad (9.5)$$

и

$$\bar{F}_a = \frac{\rho_a}{(2\pi \mathcal{R}_a \bar{T}_a)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u}_a)^2}{2\mathcal{R}_a \bar{T}_a}\right), \quad (9.6)$$

$$\bar{F}_b = \frac{\rho_b}{(2\pi \mathcal{R}_b \bar{T}_b)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u}_b)^2}{2\mathcal{R}_b \bar{T}_b}\right). \quad (9.7)$$

В формулы (9.6)–(9.7) входят "свободные параметры или "параметры газа после столкновений обозначенные чертой сверху. Эти величины, согласно [176], вычисляются через макропараметры газа

следующим образом:

$$\begin{aligned}\bar{u}_a &= \bar{u}_b = \frac{m_a \vec{u}_a + m_b \vec{u}_b}{m_a + m_b}, \\ \bar{T}_a &= T_a + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{m_b}{6k} (\vec{u}_b - \vec{u}_a)^2 \right), \\ \bar{T}_b &= T_b + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_a - T_b + \frac{m_a}{6k} (\vec{u}_b - \vec{u}_a)^2 \right).\end{aligned}\quad (9.8)$$

Выписанные функции распределения связаны между собой и определяют макропараметры газа следующим образом:

$$\int f_i d\vec{\xi} = \int F_i d\vec{\xi} = \int \bar{F}_i d\vec{\xi} = \rho_i, \quad (9.9)$$

$$\int \vec{\xi} f_i d\vec{\xi} = \int \vec{\xi} F_i d\vec{\xi} = \rho_i \vec{u}_i, \quad (9.10)$$

$$\int \vec{\xi} \bar{F}_i d\vec{\xi} = \rho_i \bar{u}_i, \quad (9.11)$$

$$\int \vec{c} f_i d\vec{\xi} = \int \vec{c} F_i d\vec{\xi} = \int \vec{c} \bar{F}_i d\vec{\xi} = 0, \quad (9.12)$$

$$\int \frac{\xi^2}{2} f_i d\vec{\xi} = \int \frac{\xi^2}{2} F_i d\vec{\xi} = \frac{\rho_i \vec{u}_i^2}{2} + \frac{3p_i}{2} = E_i, \quad (9.13)$$

$$\int \frac{\xi^2}{2} \bar{F}_i d\vec{\xi} = \frac{\rho_i \bar{u}_i^2}{2} + \frac{3\bar{p}_i}{2} = \bar{E}_i. \quad (9.14)$$

Далее на основе изложенной выше модели будет построена система макроскопических уравнений для описания течения бинарной смеси не реагирующих между собой газов.

9.2 Построение моментных уравнений

Для построения макроскопических, или моментных, уравнений для течения газовой смеси воспользуемся тем же приемом, который

применялся для построения КГД уравнений для однокомпонентного газа.

Предположим, что функции распределения частиц a и b близки к соответствующим локально-максвелловским функциям и приближенно могут быть представлены в виде разложений по малому параметру (градиентных разложений) в окрестности своих равновесных значений в виде

$$f_a^{QGD} = F_a - \tau(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})F_a, \quad (9.15)$$

$$f_b^{QGD} = F_b - \tau(\vec{\xi} \cdot \vec{\nabla})F_b. \quad (9.16)$$

Здесь τ — максвелловское время релаксации для смеси газов a и b , которое по величине близко к среднему времени между столкновениями для смеси и определяется как

$$\tau = \mu/p, \quad (9.17)$$

где μ — вязкость смеси, p — давление смеси, представляющее собой сумму парциальных давлений, то есть

$$p = p_a + p_b, \text{ где } p_a = \rho_a \mathcal{R}_a T_a, \quad p_b = \rho_b \mathcal{R}_b T_b. \quad (9.18)$$

Последние два соотношения представляют собой парциальные уравнения состояния. Способ вычисления коэффициента вязкости смеси μ и параметра релаксации τ будет приведен далее.

Формальная замена истинных значений функции распределения f_a, f_b на приближенные значения (9.15)–(9.16) в конвективных слагаемых уравнений (9.1)–(9.2) приводит к приближенным, или регуляризованным уравнениям, которые в индексной форме имеют вид

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \nabla_i \xi^i F_a - \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j F_a = \nu_a (F_a - f_a) + \nu_{ab} (\bar{F}_a - f_a), \quad (9.19)$$

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} + \nabla_i \xi^i F_b - \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j F_b = \nu_b (F_b - f_b) + \nu_{ba} (\bar{F}_b - f_b). \quad (9.20)$$

Здесь индексы i, j соответствуют компонентам пространственных координат.

Макроскопические КГДМ уравнения получаются посредством моментного усреднения выписанных уравнений в пространстве скоростей ξ^i .

Системы уравнений для обоих газов имеют одинаковый вид, поэтому приведем процедуру построения уравнений для газа a , опуская при этом индекс a .

Вычислим некоторые интегралы, которые будут использованы в дальнейшем:

$$\int c^i c^j F d\vec{\xi} = g^{ij} p, \quad (9.21)$$

$$\int c^i c^j c^k F d\vec{\xi} = 0, \quad (9.22)$$

$$\int c_x^4 F d\vec{\xi} = \int c_y^4 F d\vec{\xi} = \int c_z^4 F d\vec{\xi} = 3 \frac{p^2}{\rho}, \quad (9.23)$$

$$\int c_x^2 c_y^2 F d\vec{\xi} = \int c_x^2 c_z^2 F d\vec{\xi} = \int c_y^2 c_z^2 F d\vec{\xi} = \frac{p^2}{\rho}, \quad (9.24)$$

$$\int c^i c^j \mathbf{c}^2 F d\vec{\xi} = 5 \frac{p^2}{\rho} g^{ij}. \quad (9.25)$$

g^{ij} — метрический тензор. Все интегралы вычисляются в бесконечных пределах. При их вычислении были использованы равенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2) dy = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} y^2 \exp(-y^2) dy = \frac{1}{2} \sqrt{\pi},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^4 \exp(-y^2) dy = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}.$$

Интегрируя (9.19) с весом 1 и используя соотношения (9.9), (9.12), (9.21), получаем:

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \int f d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \rho;$$

$$\int \nabla_i \xi^i F d\vec{\xi} = \nabla_i \int (u^i + c^i) F d\vec{\xi} = \nabla_i \rho u^i;$$

$$\begin{aligned} \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j F d\vec{\xi} &= \nabla_i \tau \nabla_j \int (u^i + c^i)(u^j + c^j) F d\vec{c} = \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + \int c^i c^j F d\vec{c}) = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p). \end{aligned}$$

Как будет показано ниже, интеграл от правой части (9.19) обращается в нуль.

Таким образом, получаем уравнение для плотности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p). \quad (9.26)$$

Для получения уравнения импульса проинтегрируем (9.19) с весом ξ^k , используя соотношения (9.10), (9.12), (9.21), (9.22):

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \xi^k d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k, \\ \int \nabla_i \xi^i F \xi^k d\vec{\xi} &= \nabla_i (\rho u^i u^k + g^{ik} p), \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j F \xi^k d\vec{\xi} &= \rho u^i u^j u^k + p(u^k g^{ij} + u^j g^{ik} + u^i g^{jk}). \end{aligned}$$

Для интеграла столкновений уравнения (9.19) величина $\vec{\xi}$ не является сумматорным инвариантом, поскольку возможен обмен импульсом между компонентами смеси и интеграл от правой части не обращается в нуль. Назовем его обменным членом и обозначим S^u .

Комбинируя полученные выражения, получаем уравнение для ρu^k :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i (\rho u^i u^k + g^{ik} p) &= \\ = \nabla_i \tau \nabla_j [\rho u^i u^j u^k + p(u^k g^{ij} + u^j g^{ik} + u^i g^{jk})] &+ S^u. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Чтобы получить уравнение для удельной энергии E , усредним (9.19) с весом $\xi^2/2$, используя для этого соотношения (9.21)–(9.25):

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\xi^2}{2} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} E,$$

$$\int \nabla_i \xi^i F \frac{1}{2} \xi^2 d\vec{\xi} = \nabla_i \frac{1}{2} \int (u^i + c^i) F \xi^2 d\vec{\xi} = \nabla_i u^i (E + p),$$

$$\int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j F \frac{\xi^2}{2} d\vec{\xi} = \nabla_i \tau \nabla_j (u^i u^j E + 2u^i u^j p + \frac{1}{2} u_k u^k g^{ij} p + \frac{5}{2} \frac{p^2}{\rho} g^{ij}).$$

Для интеграла столкновений уравнения (9.19) величина $\xi^2/2$ также не является сумматорным инвариантом, поскольку возможен обмен энергией между компонентами смеси и интеграл от правой части (9.19) не обращается в нуль. Назовем его обменным членом и обозначим S^E .

Комбинируя полученные выражения и дифференцируя по частям последнее слагаемое, в которое входит квадрат давления, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i u^i (E + p) &= \nabla_i \tau \nabla_j (u^i u^j E + 2u^i u^j p + \\ &+ \frac{1}{2} u_k u^k g^{ij} p) + \frac{5}{2} \nabla_i \tau \frac{p}{\rho} \nabla_j p g^{ij} + \frac{5}{2} \nabla_i \tau p \nabla_j \frac{p}{\rho} g^{ij} + S^E. \end{aligned} \quad (9.28)$$

Изложенный здесь способ получения моментных уравнений приводит к выражениям для теплового потока с числом Прандтля, равным единице. Для обобщения уравнений на случай произвольного числа Прандтля предпоследнее слагаемое в уравнении энергии домножим на величину Pr^{-1} . Уравнение энергии получено здесь для одноатомного газа, что соответствует $\gamma = 5/3$. Обобщение на случай газов с внутренними степенями свободы может быть получено путем формальной замены коэффициента $5/3$ на γ в выражении для полной энергии (9.13), (9.14) ($3p/2 \rightarrow p/(\gamma - 1)$) и в двух последних слагаемых уравнения энергии (9.28) ($5/2 \rightarrow \gamma/(\gamma - 1)$).

9.3 Вычисление обменных членов

В правые части КГДМ уравнений входят обменные члены, которые представляют собой моменты интеграла столкновений, возникающие при его осреднении по скоростям молекул. Использование релаксационной модели позволяет вычислить эти моменты и выразить их через макропараметры газа.

Убедимся, что в уравнении для плотности (9.26) обменные члены равны нулю. Действительно, непосредственное интегрирование дает

$$\int \nu_a(F_a - f_a)d\vec{\xi} = \nu_a\left(\int F_a d\vec{\xi} - \int f_a d\vec{\xi}\right) = \nu_a(\rho_a - \rho_a) = 0,$$

$$\int \nu_{ab}(\overline{F}_a - f_a)d\vec{\xi} = \nu_{ab}\left(\int \overline{F}_a d\vec{\xi} - \int f_a d\vec{\xi}\right) = \nu_{ab}(\rho_a - \rho_a) = 0.$$

В релаксационной модели предполагается, что частоты столкновений не зависят от скоростей молекул.

Интегрирование с весом $\vec{\xi}$ позволяет вычислить обменный член в уравнении (9.27):

$$\int \nu_a(F_a - f_a)\vec{\xi}d\vec{\xi} = \nu_a(\rho_a\vec{u}_a - \rho_a\vec{u}_a) = 0,$$

$$\int \nu_{ab}(\overline{F}_a - f_a)\vec{\xi}d\vec{\xi} = \nu_{ab}(\rho_a\overline{\vec{u}}_a - \rho_a\vec{u}_a) = S_a^u.$$

Аналогично, путем осреднения с весом $\vec{\xi}^2/2$ вычисляются обменные члены и для уравнения энергии (9.28).

Соответственно, для газов a и b обменные члены имеют вид:

$$\begin{aligned} S_a^u &= \nu_{ab}\rho_a(\overline{\vec{u}}_a - \vec{u}_a), & S_b^u &= \nu_{ba}\rho_b(\overline{\vec{u}}_b - \vec{u}_b), \\ S_a^E &= \nu_{ab}(\overline{E}_a - E_a), & S_b^E &= \nu_{ba}(\overline{E}_b - E_b), \end{aligned} \quad (9.29)$$

где

$$\begin{aligned} \overline{E}_a &= (\rho_a\overline{\vec{u}}_a^2)/2 + \overline{p}_a/(\gamma_a - 1), & \overline{p}_a &= \rho_a\mathcal{R}_a\overline{T}_a \\ \overline{E}_b &= (\rho_b\overline{\vec{u}}_b^2)/2 + \overline{p}_b/(\gamma_b - 1), & \overline{p}_b &= \rho_b\mathcal{R}_b\overline{T}_b. \end{aligned} \quad (9.30)$$

Заметим, что в соответствии с законами сохранения импульса и энергии с учетом соотношения баланса (9.3)

$$S_a^u + S_b^u = 0, \quad S_a^E + S_b^E = 0. \quad (9.31)$$

Таким образом, в КГДМ модели учитывается обмен импульсом и энергией между компонентами смеси, интенсивность которого пропорциональна частотам столкновений между частицами разных газов. В уравнениях для плотности обменные члены отсутствуют, что является естественным, поскольку предполагается, что компоненты смеси не реагируют друг с другом.

9.4 Определение частот столкновений

Для замыкания системы КГДМ уравнений необходимо конкретизировать частоты столкновений ν_{ab} и ν_{ba} , а также время релаксации τ .

Соотношения частот столкновений молекул газа a друг с другом и молекул газа a с молекулами газа b , согласно, например, [134], [182], [198], можно вычислить следующим образом:

$$\nu_{ab} = \nu_a \left(\frac{d_{ab}}{d_a} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_b} \frac{n_b}{n_a}}, \quad (9.32)$$

здесь d_a — эффективный диаметр молекул газа a , d_{ab} — эффективный диаметр взаимодействия, который можно определить, согласно [134], с.16, как $d_{ab} = 0.5(d_a + d_b)$, n_a , n_b — числовые плотности газов a и b соответственно. В свою очередь, частоту столкновений ν_a можно связать с вязкостью газа. В приближении VHS и VSS моделей взаимодействия частиц эта связь имеет вид (см. [134], с.90):

$$\nu_a = \frac{p_a}{\mu_a} \Omega(\omega_a, \alpha_a),$$

$$\Omega(\omega_a, \alpha_a) = \frac{5(\alpha_a + 1)(\alpha_a + 2)}{\alpha_a(7 - 2\omega_a)(5 - 2\omega_a)}, \mu_a = \mu_{aref} \left(\frac{T_a}{T_{aref}} \right)^{\omega_a} \quad (9.33)$$

В дальнейшем для проведения расчетов будет использоваться $\alpha_a = 1$, что соответствует модели VHS (см., например, [134], с.41). При этом

$$\Omega(\omega_a, 1) = \Omega(\omega_a) = \frac{30}{(7 - 2\omega_a)(5 - 2\omega_a)}.$$

Имеются и другие выражения для частоты столкновений между частицами различных сортов (см., например, [134], с.96).

Общее число столкновений между молекулами газов a и b должно быть сбалансировано, то есть должно выполняться соотношение (9.3). Однако, выражения для частот столкновений в рамках VHS модели автоматически удовлетворяют указанному балансному соотношению только для случая максвелловских молекул ($\omega = 1$) при $T_{aref} = T_{bref}$. Поэтому, если одна из частот взаимных столкновений

определяется согласно, например, (9.32)–(9.33), то другую частоту следует определять из балансного соотношения (9.3).

В уравнения (9.26)–(9.28) входит параметр τ , который определяется как максвелловское время релаксации для смеси (9.17). Для определения вязкости бинарной смеси имеется, например, формула Уилки ([19], [195]):

$$\mu = \mu_a \left(1 + G_{ab} \frac{\rho_b}{\rho_a} \frac{M_a}{M_b}\right)^{-1} + \mu_b \left(1 + G_{ba} \frac{\rho_a}{\rho_b} \frac{M_b}{M_a}\right)^{-1},$$

$$\text{где } G_{ab} = \frac{\left(1 + \sqrt{\mu_a/\mu_b} \sqrt{M_b/M_a}\right)^2}{2\sqrt{2}(1 + M_a/M_b)}, \quad (9.34)$$

здесь M_a и M_b — молярные массы газов a и b соответственно. G_{ba} вычисляется аналогично G_{ab} путем циклической замены индексов.

В литературе имеются и другие выражения для определения вязкости бинарной смеси, например, в [102], с. 275, и в [18]. В [85] приведены коэффициенты вязкости отдельных компонент.

9.5 Квазигазодинамические уравнения для смеси газов

Выпишем окончательный вид КГДМ уравнений для бинарной смеси в инвариантном относительно системы координат виде. Системы уравнений для обоих газов имеют одинаковый вид, поэтому приведем систему уравнений, описывающую газ a :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_a + \nabla_i \rho_a u_a^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho_a u_a^i u_a^j + \nabla^i p_a), \quad (9.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_a u_a^k + \nabla_i \rho_a u_a^i u_a^k + \nabla^k p_a = \nabla_i \tau \left(\nabla_j \rho_a u_a^i u_a^j u_a^k + \nabla^i p_a u_a^k + \nabla^k p_a u_a^i \right) + \nabla^k \tau \nabla_i p_a u_a^i + S_a^u, \quad (9.36)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} E_a + \nabla_i u_a^i (E_a + p_a) \\
& = \nabla_i \tau (\nabla_j (E_a + 2p_a) u_a^i u_a^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_{ak} u_a^k p_a) \\
& + \frac{\gamma_a}{\gamma_a - 1} \nabla_i \tau \frac{p_a}{\rho_a} \nabla^i p_a + Pr_a^{-1} \frac{\gamma_a}{\gamma_a - 1} \nabla_i \tau p_a \nabla^i \frac{p_a}{\rho_a} + S_a^E, \quad (9.37)
\end{aligned}$$

где удельная энергия газа a имеет вид

$$E_a = \rho_a u_{ai}^2 / 2 + p_a / (\gamma_a - 1). \quad (9.38)$$

Обменные члены вычисляются согласно (9.29), (9.30), “свободные параметры” — согласно (9.8), а частоты столкновений и коэффициент вязкости смеси могут быть рассчитаны с помощью выражений (9.32)–(9.34). Время релаксации τ вычисляется согласно (9.17). Обратим внимание на то, что в правых частях уравнений плотности, также как и в одножидкостных моделях типа Навье–Стокса (см. например, [75]), имеются слагаемые диффузионного типа.

Дополненная граничными условиями, выписанная здесь система уравнений представляет собой замкнутую модель для расчета течений бинарной газовой смеси в двухжидкостном приближении.

Отметим, что двухжидкостная модель для смеси газов с использованием процедуры Чепмена–Энскога была выписана и проанализирована в [157]. Эта модель оказалась весьма громоздкой и не получила широкого применения в вычислительной практике.

В уравнения (9.35)–(9.38) не входят параметры для смеси газов. Однако в дальнейшем эти параметры будут использоваться, поэтому укажем способ их определения. Параметры смеси (переменные без индекса) определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}
n &= n_a + n_b, \quad \rho = \rho_a + \rho_b, \quad p = p_a + p_b, \quad u = (\rho_a u_a + \rho_b u_b) / \rho, \\
T &= (n_a T_a + n_b T_b) / n, \quad m = (m_a n_a + m_b n_b) / n, \quad p = \rho \mathcal{R} T, \\
\mathcal{R} &= (\rho_a \mathcal{R}_a + \rho_b \mathcal{R}_b) / \rho = k_B / m. \quad (9.39)
\end{aligned}$$

В случае однокомпонентного газа система (9.35)–(9.38) совпадает с изученной ранее КГД системой.

9.6 Одножидкостные приближения

9.6.1 КГДМ модель в одножидкостном приближении

Выписанная здесь двухжидкостная система КГДМ уравнений (9.35)–(9.37) может быть упрощена и сведена к одножидкостному приближению, что соответствует течениям смеси, в которой

$$u_a^i = u_b^i = u^i, \quad T_a = T_b = T. \quad (9.40)$$

При этом скорости диффузии компонент w_a^i и w_b^i остаются различными. Давления отдельных компонент вычисляются как

$$p_a = \rho_a \mathcal{R}_a T, \quad p_b = \rho_b \mathcal{R}_b T. \quad (9.41)$$

Построим одножидкостное приближение для КГДМ уравнений. Предположим, что для компонент смеси $\gamma_a = \gamma_b = \gamma$ и $Pr_a = Pr_b = Pr$. Тогда удельная энергия смеси имеет вид

$$E = E_a + E_b = \frac{(\rho_a + \rho_b)u_i^2}{2} + \frac{p_a + p_b}{\gamma - 1} = \frac{\rho u_i^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1}. \quad (9.42)$$

При переходе к одножидкостному приближению вид уравнений для плотности не изменится, за исключением того, что вместо скоростей u_a^i и u_b^i в них войдет скорость смеси u^i . Уравнения для импульса и удельной энергии смеси также сохраняют свой общий вид и получаются путем сложения двух соответствующих уравнений для каждой из компонент с учетом условий для обменных членов (9.31). Результирующая система КГДМ уравнений примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_a + \nabla_i \rho_a u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho_a u^i u^j + \nabla^i p_a), \quad (9.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_b + \nabla_i \rho_b u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho_b u^i u^j + \nabla^i p_b), \quad (9.44)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p \\ & = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho u^i u^j u^k + \nabla^i p u^k + \nabla^k p u^i) + \nabla^k \tau \nabla_i p u^i, \end{aligned} \quad (9.45)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i u^i (E + p) &= \nabla_i \tau (\nabla_j (E + 2p) u^i u^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p) \\
&\quad + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau \left(\frac{p_a}{\rho_a} \nabla^i p_a \right. \\
&\quad \left. + \frac{p_b}{\rho_b} \nabla^i p_b \right) + \frac{\gamma}{Pr(\gamma - 1)} \nabla_i \tau \left(p_a \nabla^i \frac{p_a}{\rho_a} + p_b \nabla^i \frac{p_b}{\rho_b} \right). \quad (9.46)
\end{aligned}$$

Одножидкостное приближение упрощает КГДМ систему, сводя ее к четырем уравнениям — двум уравнениям для плотностей и уравнениям для импульса и энергии, в которые уже не входят обменные члены. Тем самым для замыкания системы достаточно определить только коэффициент вязкости смеси μ , и эта модель не требует определения частот взаимных столкновений ν_{ab} и ν_{ba} и вычисления свободных параметров (9.8). Однако в данной модели газовая постоянная \mathcal{R} уже не является константой и зависит от концентраций компонент. В том случае, если значения γ и Pr для компонент смеси не совпадают между собой, определение этих величин для смеси также представляет собой самостоятельную проблему.

Разностные схемы с искусственной вязкостью, дифференциальное приближение которых по своей форме сходно с одножидкостным приближением КГДМ уравнений, были выписаны и опробованы в [28] на примере течения реагирующего газа в окрестности пластины.

В следующем разделе показана связь выписанной одножидкостной КГДМ модели с традиционным приближением типа уравнений Навье–Стокса.

9.6.2 Одножидкостная модель для уравнений Навье–Стокса

Одножидкостная модель для описания течения газовой смеси без химических реакций, основанная на уравнениях Навье–Стокса, имеет вид [19]:

$$\frac{\partial \rho c_a}{\partial t} + \nabla_i \rho c_a u^i = -\nabla_i \mathcal{J}_a^i, \quad (9.47)$$

$$\frac{\partial \rho c_b}{\partial t} + \nabla_i \rho c_b u^i = -\nabla_i \mathcal{J}_b^i, \quad (9.48)$$

$$\frac{\partial \rho u^k}{\partial t} + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p = \nabla_i \Pi_{NS}^{ik}, \quad (9.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla_i u^i (E + p) = \nabla_i (\Pi_{NS}^{ik} u^k) \\ - \nabla_i (h_a \mathcal{J}_a^i + h_b \mathcal{J}_b^i) + \nabla_i \varkappa \nabla^i T. \end{aligned} \quad (9.50)$$

Здесь $c_a = \rho_a/\rho$, $c_b = \rho_b/\rho$ — массовые концентрации газов a и b соответственно, \mathcal{J}_a^i , \mathcal{J}_b^i — плотности диффузионных потоков,

$$h_a = c_{p_a} T = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p_a}{\rho_a}, \quad h_b = c_{p_b} T = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p_b}{\rho_b} \quad (9.51)$$

— энтальпии газов a и b соответственно. Все параметры смеси определяются согласно (9.39), удельная энергия равна $E = \rho u_i^2/2 + p/(\gamma - 1)$, где γ — показатель адиабаты для смеси.

Согласно [19] выражение для диффузионных потоков в бинарной смеси записывается как

$$\mathcal{J}_a^i = -\rho c_a D \left(\nabla^i \ln c_a + \frac{m_b - m_a}{m} c_b \nabla^i \ln p \right) - \rho c_a D_a^T \nabla^i \ln T, \quad (9.52)$$

$$\mathcal{J}_b^i = -\rho c_b D \left(\nabla^i \ln c_b + \frac{m_a - m_b}{m} c_a \nabla^i \ln p \right) - \rho c_b D_b^T \nabla^i \ln T,$$

где D — коэффициент диффузии бинарной смеси, D_a^T и D_b^T — коэффициенты термодиффузии газов a и b . В представленной модели при отсутствии массовых сил диффузия может возникать по трем причинам: под воздействием градиента концентраций (массовая диффузия, первое слагаемое в (9.52)), под действием градиента давлений (бародиффузия, второе слагаемое) и под действием градиента температур (термодиффузия, третье слагаемое в (9.52)). Для смесей легких и тяжелых компонент вклад термодиффузии в перенос массы может стать достаточно заметным. Выражение для коэффициента термодиффузии приведено, например, в [102]. Однако

считается [75], что для многих течений термодиффузия является эффектом второго порядка по сравнению с массовой диффузией и ее влиянием пренебрегают.

Коэффициент диффузии связан с коэффициентом вязкости смеси соотношением [19]

$$D = \mu / (\rho S c), \quad (9.53)$$

где $S c$ — число Шмидта, которое для газов близко к единице.

Величина коэффициента диффузии для бинарной смеси также может быть определена выражением [85]:

$$D = 1.8826 \cdot 10^{-22} \sqrt{\frac{T^3 (\mathcal{M}_a + \mathcal{M}_b)}{\mathcal{M}_a \mathcal{M}_b}} \frac{1}{p \sigma^2 \Omega^{(1.1)*}(T^*)}, \quad (9.54)$$

здесь $\mathcal{M}_a, \mathcal{M}_b$ — молярные массы газов, p — давление, $\sigma = 0.5(\sigma_a + \sigma_b)$, где σ_a, σ_b (м) — эффективные диаметры столкновений, $T^* = k_B T / \varepsilon$ — характеристическая температура, ε / k_B — параметр потенциальной энергии молекул (К), характеризующий взаимодействие молекул сортов a и b , $\varepsilon = \sqrt{\varepsilon_a \varepsilon_b}$, $\varepsilon_a, \varepsilon_b$ — параметры потенциальной функции межмолекулярного взаимодействия. $\Omega^{(1.1)*}(T^*)$ — безразмерный интеграл соударений для переноса масс, выражающий меру отклонения от модели, рассматривающей молекулы газа как твердые шары, для которой $\Omega^{(1.1)*} = 1$.

Коэффициент вязкости газовой смеси, как и в КГДМ модели, может быть найден различными способами, например, из соотношения (9.34). При этом коэффициент вязкости для каждой из компонент может быть найден согласно (9.33), или из других соотношений, например, согласно [85]:

$$\mu_a = 26.69 \cdot 10^{-27} \frac{\sqrt{\mathcal{M}_a T_a}}{\sigma_a^2 \Omega^{(2.2)*}(T_a^*)}, \quad (9.55)$$

здесь $\Omega^{(2.2)*}(T_a^*)$ — безразмерный интеграл соударений для переноса импульса, выражающий меру отклонения от модели, рассматривающей молекулы газа как твердые шары, для которой $\Omega^{(2.2)*} = 1$, $T_a^* = k_B T / \varepsilon_a$ — характеристическая температура. Интегралы соударений $\Omega^{(1.1)*}(T^*)$ и $\Omega^{(2.2)*}(T^*)$ вычислены в [18] на основе потенциала Леннарда-Джонса и могут быть с достаточной для многих

приложений точно определены по следующим приближенным формулам:

$$\Omega^{(1.1)*}(T^*) = 1.074(T^*)^{-0.1604}, \quad \Omega^{(2.2)*}(T^*) = 1.157(T^*)^{-0.1472}. \quad (9.56)$$

9.6.3 Модификация одножидкостного приближения КГДМ уравнений

КГДМ система в одножидкостном приближении (9.43)–(9.6.1) может быть сведена к виду (9.47)–(9.50) с помощью некоторых упрощений.

Уравнение (9.43) представляется в виде (9.47), где диффузионный поток определяется выражением

$$\mathcal{J}_a^i = -\rho_a w_a^i = -\tau(\nabla_j \rho c_a u^i u^j + \nabla^i p_a). \quad (9.57)$$

Отбрасывая в правой части член с квадратом скорости, записывая $p_a = \rho c_a \mathcal{R}_a T$ и затем дифференцируя полученное выражение по частям, получим соотношение, аналогичное (9.52), с коэффициентом термодиффузии $D_a^T = 0$

$$\mathcal{J}_a^i = -\rho c_a D \frac{m}{m_a} (\nabla^i \ln c_a + \nabla^i \ln p), \quad (9.58)$$

где коэффициент D определяется как (9.53) при $Sc = 1$.

Аналогично, уравнение (9.44) сводится к виду (9.48), где

$$\mathcal{J}_b^i = -\rho c_b D \frac{m}{m_b} (\nabla^i \ln c_b + \nabla^i \ln p). \quad (9.59)$$

Диссипативные слагаемые КГД уравнений могут быть представлены в виде суммы диссипативных членов уравнений Навье–Стокса и добавки первого порядка малости по числу Кнудсена. Отбрасывая эти добавки, сразу приводим уравнение импульса (9.45) к виду (9.49).

Уравнение энергии (9.6.1) приводится к виду (9.50) путем выделения из правой части (9.6.1) диссипативных слагаемых и теплового потока вида $\nabla_i(\Pi_{NS}^{ik} u^k + \varkappa \nabla^i T)$ и отбрасывания оставшихся слагаемых со степенями скоростей. При этом слагаемые с градиентами давления сохраняются и переписываются в виде

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau \left(\frac{p_a}{\rho_a} \nabla^i p_a + \frac{p_b}{\rho_b} \nabla^i p_b \right) = -\nabla_i (h_a \mathcal{J}_a^i + h_b \mathcal{J}_b^i),$$

где h_a и h_b определяются соотношениями (9.51), а диффузионные потоки имеют вид (9.58) и (9.59).

Тем самым одножидкостная система КГДМ уравнений редуцируется и сводится к известному одножидкостному приближению для описания бинарной смеси, основанному на уравнениях НС.

9.7 КГДМ система для одномерного течения

Запишем систему квазигазодинамических уравнений, обобщенную на случай бинарной смеси газов (9.35)–(9.37) в одномерном случае для плоско-параллельного течения (индексом a обозначены параметры одного газа, индексом b — другого газа):

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho_a u_a = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho_a u_a^2 + p_a), \quad (9.60)$$

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho_b u_b = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho_b u_b^2 + p_b), \quad (9.61)$$

$$\frac{\partial \rho_a u_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_a u_a^2 + p_a) = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho_a u_a^3 + 3p_a u_a) + S_a^u, \quad (9.62)$$

$$\frac{\partial \rho_b u_b}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_b u_b^2 + p_b) = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho_b u_b^3 + 3p_b u_b) + S_b^u, \quad (9.63)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u_a (E_a + p_a) &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} u_a^2 (E_a + 2.5p_a) \\ &+ \frac{\gamma_a}{\gamma_a - 1} \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{p_a}{\rho_a} \frac{\partial p_a}{\partial x} + \frac{\gamma_a}{\gamma_a - 1} \frac{1}{Pr_a} \frac{\partial}{\partial x} \tau p_a \frac{\partial p_a}{\partial x \rho_a} + S_a^E, \end{aligned} \quad (9.64)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_b}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u_b (E_b + p_b) &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} u_b^2 (E_b + 2.5p_b) \\ &+ \frac{\gamma_b}{\gamma_b - 1} \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{p_b}{\rho_b} \frac{\partial p_b}{\partial x} + \frac{\gamma_b}{\gamma_b - 1} \frac{1}{Pr_b} \frac{\partial}{\partial x} \tau p_b \frac{\partial p_b}{\partial x \rho_b} + S_b^E. \end{aligned} \quad (9.65)$$

Удельная энергия для газов a и b записывается в виде

$$E_a = \frac{\rho_a u_a^2}{2} + \frac{p_a}{\gamma_a - 1}, \quad E_b = \frac{\rho_b u_b^2}{2} + \frac{p_b}{\gamma_b - 1}. \quad (9.66)$$

Обменные члены в уравнениях импульса для газов a и b , согласно (9.29), имеют вид

$$S_a^u = (\rho_a \bar{u}_a - \rho_a u_a) \nu_{ab}, \quad S_b^u = (\rho_b \bar{u}_b - \rho_b u_b) \nu_{ba} \quad (9.67)$$

и в уравнениях энергии

$$S_a^E = (\bar{E}_a - E_a) \nu_{ab}, \quad S_b^E = (\bar{E}_b - E_b) \nu_{ba}. \quad (9.68)$$

В свою очередь ν_{ab} вычисляется согласно (9.32)–(9.33) при $\alpha_a = 1$, а величина ν_{ba} находится из балансного соотношения (9.3).

В формулы (9.67)–(9.68) входят "свободные параметры обозначенные чертой сверху. Согласно (9.8) эти параметры вычисляются как

$$\begin{aligned} \bar{u}_a &= \bar{u}_b = \frac{m_a u_a + m_b u_b}{m_a + m_b}, \\ \bar{T}_a &= T_a + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{m_b}{6k} (u_b - u_a)^2 \right), \\ \bar{T}_b &= T_b + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_a - T_b + \frac{m_a}{6k} (u_b - u_a)^2 \right). \end{aligned} \quad (9.69)$$

Удельная энергия газов, входящая в соотношения (9.68) равна

$$\bar{E}_a = \frac{\rho_a \bar{u}_a^2}{2} + \rho_a \frac{R_a}{\gamma_a - 1} \bar{T}_a, \quad \bar{E}_b = \frac{\rho_b \bar{u}_b^2}{2} + \rho_b \frac{R_b}{\gamma_b - 1} \bar{T}_b.$$

Параметр τ определяется согласно (9.17), (9.34).

Безразмерный вид. Будем решать систему уравнений (9.60)–(9.65) в безразмерных переменных. Примем за размерные масштабы следующие характеристики газа a : $\rho_{a_{ref}}$ — плотность, $a_{a_{ref}} = \sqrt{\gamma_a \mathcal{R}_a T_{a_{ref}}}$ — скорость звука при температуре $T_{a_{ref}}$, $\lambda_{a_{ref}}$ — длина свободного пробега. Длина свободного пробега молекулы может быть вычислена как [134]:

$$\lambda = \frac{4\mu}{\rho\sqrt{\mathcal{R}T}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Omega(\omega, 1)} = \frac{\mu}{\rho\sqrt{\mathcal{R}T}} \frac{2(7-2\omega)(5-2\omega)}{15\sqrt{2\pi}}. \quad (9.70)$$

Тогда соотношения между размерными и безразмерными характеристиками будут иметь следующий вид (все параметры газа b масштабируются по параметрам газа a):

$$\rho = \tilde{\rho}\rho_{a_{ref}}, \quad a = \tilde{a}a_{a_{ref}}, \quad u = \tilde{u}a_{a_{ref}}, \quad p = \tilde{p}\rho_{a_{ref}}a_{a_{ref}}^2, \quad m = \tilde{m}\rho_{a_{ref}}\lambda_{a_{ref}}^3,$$

$$T = \tilde{T}\frac{a_{a_{ref}}^2}{\gamma_a\mathcal{R}_a} = \tilde{T}T_{a_{ref}}, \quad x = \tilde{x}\lambda_{a_{ref}}, \quad t = \tilde{t}\frac{\lambda_{a_{ref}}}{a_{a_{ref}}}, \quad \tau = \tilde{\tau}\frac{\lambda_{a_{ref}}}{a_{a_{ref}}},$$

$$n = \tilde{n}\frac{1}{\lambda_{a_{ref}}^3}, \quad \mu = \tilde{\mu}\lambda_{a_{ref}}\rho_{a_{ref}}a_{a_{ref}}\frac{15\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{\gamma_a}(7-2\omega_a)(5-2\omega_a)} = \tilde{\mu}\mu_{a_{ref}}.$$

После обезразмеривания уравнения (9.60)–(9.65) не изменят своего вида. Запишем соотношения между параметрами газов (уравнения связи), используемые в расчетах:

$$\tilde{a}_a = \sqrt{\tilde{T}_a}, \quad \tilde{a}_b = \sqrt{\frac{\gamma_b}{\gamma_a}\frac{\mathcal{R}_b}{\mathcal{R}_a}\tilde{T}_b}, \quad \tilde{T}_a = \frac{\gamma_a\tilde{p}_a}{\tilde{\rho}_a}, \quad \tilde{T}_b = \frac{\gamma_a\tilde{p}_b}{\tilde{\rho}_b}\frac{\mathcal{R}_a}{\mathcal{R}_b},$$

$$\tilde{\mu}_a = \tilde{T}_a^{\omega_a}, \quad \tilde{\mu}_b = \frac{\mu_{b_{ref}}}{\mu_{a_{ref}}}\left(\frac{T_{a_{ref}}}{T_{b_{ref}}}\right)^{\omega_b}\tilde{T}_b^{\omega_b},$$

здесь $\mu_{a_{ref}}$, $T_{a_{ref}}$ и $\mu_{b_{ref}}$, $T_{b_{ref}}$ — значения коэффициентов вязкости и соответствующих температур газов a и b , используемые в законе изменения вязкости (9.33),

$$\tilde{\lambda}_a = \frac{(\gamma_a\tilde{p}_a)^{\omega_a-0.5}}{\tilde{\rho}_a^{\omega_a+0.5}},$$

$$\tilde{\lambda}_b = \frac{(\gamma_a\tilde{p}_b)^{\omega_b-0.5}}{\tilde{\rho}_b^{\omega_b+0.5}}\frac{\mu_{b_{ref}}}{\mu_{a_{ref}}}\left(\frac{T_{a_{ref}}}{T_{b_{ref}}}\right)^{\omega_b}\frac{(7-2\omega_b)(5-2\omega_b)}{(7-2\omega_a)(5-2\omega_a)}\left(\frac{\mathcal{R}_a}{\mathcal{R}_b}\right)^{\omega_b}.$$

Длины свободного пробега непосредственно в расчете не используются, но необходимы для выбора шага пространственной сетки и графического представления результатов.

Среднее время между столкновениями для каждой из компонент вычисляется как

$$\tilde{\tau}_a = \frac{(\gamma_a \tilde{\rho}_a)^{\omega_a - 1}}{\tilde{\rho}_a^{\omega_a}} \frac{15\sqrt{2\pi\gamma_a}}{2(7 - 2\omega_a)(5 - 2\omega_a)},$$

$$\tilde{\tau}_b = \frac{\mu_{bref}}{\mu_{aref}} \left(\frac{T_{aref}}{T_{bref}} \right)^{\omega_b} \frac{(\gamma_a \tilde{\rho}_b)^{\omega_b - 1}}{\tilde{\rho}_b^{\omega_b}} \frac{15\sqrt{2\pi\gamma_a}}{2(7 - 2\omega_a)(5 - 2\omega_a)} \left(\frac{\mathcal{R}_a}{\mathcal{R}_b} \right)^{\omega_b}.$$

Безразмерный вид среднего времени $\tilde{\tau}_{ab}^c$ записывается как

$$\tilde{\tau}_{ab}^c = \frac{\tilde{\tau}_a}{\Omega(\omega_a)} \left(\frac{2d_a}{d_a + d_b} \right)^2 \sqrt{\frac{2m_b}{m_a + m_b} \frac{\rho_a m_b}{\rho_b m_a}}.$$

Значение $\tilde{\tau}_{ba}^c$ определяется с помощью балансного соотношения (9.3).

Кроме того, $\tau_{ab}^c = 1/\nu_{ab}$, $\tau_{ba}^c = 1/\nu_{ba}$, и τ_{ba}^c определяется как

$$\tau_{ba}^c = \tau_{ab}^c \frac{\rho_b m_a}{\rho_a m_b}. \quad (9.71)$$

9.8 Структура ударной волны в смеси гелия и ксенона

9.8.1 Постановка задачи

В качестве первого примера использования КГДМ уравнений рассматривается задача о структуре неподвижной ударной волны в смеси гелия (He — газ a) и ксенона (Xe — газ b). Профили плотности этих газов, измеренные с помощью электронной пушки и лазерного интерферометра, можно найти в работе [156]. Измерения проводились для следующих вариантов процентной концентрации газов:

- вариант V1: 98,5% He и 1,5% Xe , то есть $n_a/n = 0.985$, $n_b/n = 0.015$
- вариант V2: 97% He и 3% Xe , то есть $n_a/n = 0.97$, $n_b/n = 0.03$
- вариант V3: 94% He и 6% Xe , то есть $n_a/n = 0.94$, $n_b/n = 0.06$
- вариант V4: 91% He и 9% Xe , то есть $n_a/n = 0.91$, $n_b/n = 0.09$.

Для второго варианта процентной концентрации (V2) имеется расчет данной задачи методом прямого численного моделирования Монте-Карло (DSMC) [134], результаты которого для моментных уравнений можно рассматривать как эталонные, практически совпадающие с экспериментальными данными.

Параметры смеси перед ударной волной, выбранные в соответствии с данными эксперимента [156] и расчета [134], представлены в табл. 9.1.

	V1		V2		V3		V4	
	He	Xe	He	Xe	He	Xe	He	Xe
ρ (кг/м ³) $\cdot 10^5$	5.15	2.57	5.16	2.22	4.91	10.3	4.57	14.8
p (Па)	33.14	0.51	33.21	1.02	31.62	2.02	29.42	2.91
T (К)	310							
u (м/с)	3076.76		2882.6		2672.8		2530.3	
Ma	2.97	17.01	2.78	15.93	2.58	14.78	2.44	13.99

Таблица 9.1. Размерные параметры для компонент смеси

В табл. 9.2 приведены необходимые для проведения расчета по модели КГДМ физические параметры гелия и ксенона согласно [134]. Число Pr для указанных газов постоянно и равно $2/3$.

	He	Xe
m (кг)	$6.65 \cdot 10^{-27}$	$218 \cdot 10^{-27}$
\mathcal{R} (Дж/(кг · К))	2076.2	63.33
\mathcal{M} (кг/моль)	4.0	131.4
d (м)	$2.30 \cdot 10^{-10}$	$5.65 \cdot 10^{-10}$
γ	1.66	1.66
ω	0.66	0.85
μ_{ref} (ньютон · сек/м ²) при $T = 273K$	$1.865 \cdot 10^{-5}$	$2.107 \cdot 10^{-5}$

Таблица 9.2. Значения параметров для компонент смеси

Заметим, что молекулярные массы рассматриваемых газов отличаются более чем в 30 раз.

9.8.2 Расчет на основе двухжидкостной КГДМ модели

Расчет проводился в безразмерных переменных, все величины были обезразмерены на параметры гелия He (газ А) в набегающем потоке.

В табл. 9.3–9.6 приведены значения безразмерных параметров в невозмущенном газе для вариантов V1–V4.

	Газ А (He)	Газ В (Xe)	смесь
ρ	1.	0.499	1.499
T	1.	1.	1.
a	1.	0.175	0.823
λ	1.	11.09	1.151
p	0.6	0.0091	0.609
Ma	2.97	17.01	3.61

Таблица 9.3. Безразмерные параметры для варианта V1

	Газ А (He)	Газ В (Xe)	смесь
ρ	1.	1.011	2.011
T	1.	1.	1.
a	1.	0.175	0.715
λ	1.	5.485	1.134
p	0.6	0.0185	0.618
Ma	2.78	15.93	3.89

Таблица 9.4. Безразмерные параметры для варианта V2

	Газ А (He)	Газ В (Xe)	смесь
ρ	1.	2.095	3.095
T	1.	1.	1.
a	1.	0.175	0.587
λ	1.	2.646	1.167
p	0.6	0.0383	0.638
Ma	2.58	14.77	4.4

Таблица 9.5. Безразмерные параметры для варианта V3

	Газ А (He)	Газ В (Xe)	смесь
ρ	1.	3.245	4.245
T	1.	1.	1.
a	1.	0.175	0.509
λ	1.	1.708	1.064
p	0.6	0.0594	0.659
Ma	2.44	13.99	4.8

Таблица 9.6. Безразмерные параметры для варианта V4

Для построения граничных условий на правой и левой границах используются условия Ренкина–Гюгонио для неподвижной ударной волны в смеси газов. При этом величины справа от разрыва вычисляются как

$$\begin{aligned} \rho_2 &= \rho_1 \frac{(\gamma + 1)Ma^2}{2 + (\gamma - 1)Ma^2}, & p_2 &= p_1 \frac{2\gamma Ma^2 - \gamma + 1}{\gamma + 1}, \\ u_2 &= u_1 \frac{2 + (\gamma - 1)Ma^2}{(\gamma + 1)Ma^2}, & T_2 &= \frac{\gamma p_2}{\rho_2}, \end{aligned} \quad (9.72)$$

где индексы 1 и 2 соответствуют условиям Ренкина–Гюгонио для смеси до и после ударной волны, Ma — число Маха для смеси.

Для вычисления параметров отдельных компонент будем предполагать, что их температуры и скорости перед ударной волной и за ней выравниваются, в то время как процентные концентрации компонент при переходе через ударный фронт остаются неизменными. Тогда на основе условий (9.72) параметры каждой из компонент смеси до и после ударной волны определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \rho_{a1} &= m_a n_a, \quad \rho_{b1} = m_b n_b, \quad T_{a1} = T_{b1} = T_1, \quad u_{a1} = u_{b1} = u_1, \\ \rho_{a2} &= \rho_{a1} \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad \rho_{b2} = \rho_{b1} \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad T_{a2} = T_{b2} = T_2, \quad u_{a2} = u_{b2} = u_2. \end{aligned} \quad (9.73)$$

Начальные условия представляют собой разрыв в точке $x = 0$:

$$\begin{aligned} \text{при } x \leq 0 \quad & \rho_a = \rho_{a1}, \quad \rho_b = \rho_{b1}, \quad T_a = T_b = T_1, \quad u_a = u_b = u_1. \\ \text{при } x \geq 0 \quad & \rho_a = \rho_{a2}, \quad \rho_b = \rho_{b2}, \quad T_a = T_b = T_2, \quad u_a = u_b = u_2. \end{aligned} \quad (9.74)$$

Эти же значения используются и в качестве граничных условий.

Для решения системы (9.60)–(9.65) применялась явная разностная схема установления по времени, все пространственные производные, включая конвективные слагаемые, аппроксимировались центральными разностями.

Задача решалась на равномерной пространственной сетке при выбранной точности $\epsilon_{\rho a} = 10^{-5}$. При сгущении сетки в два раза отличия в результатах расчетов были чрезвычайно малы, что позволяет сделать вывод о достигнутой сходимости по сетке. В качестве примера в табл. 9.7 приведены параметры численного расчета для варианта V2.

	сетка 601	сетка 1201
шаг сетки h	0.5	0.25
шаг по времени Δt	$4.8 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$
число итераций N_{iter}	90251	360450

Таблица 9.7. Параметры расчетов варианта V2

Профили газодинамических параметров в ударной волне (скорости, плотности и температуры) приведены в нормированном виде на основе условий Ренкина–Гюгонио вверх и вниз по потоку. При этом $\rho \rightarrow (\rho - \rho_1)/(\rho_2 - \rho_1)$, аналогично для температуры. Для скорости $u \rightarrow (u - u_2)/(u_1 - u_2)$.

Остановимся более детально на результатах расчета варианта V2. На рис. 9.1 – 9.3 (слева) представлены профили газодинамических параметров на фронте ударной волны в сравнении с соответствующими результатами, полученными в [134] на основе метода ПММК, или, в английской транскрипции, метода DSMC. Кривые, соответствующие расчетам по модели ПММК, наложены на данные КГДМ модели таким образом, чтобы при $x = 0$ совпали значения средней плотности смеси.

На рис. 9.1 представлены профили плотности и температуры гелия и ксенона. На рис. 9.2 слева – распределения средней температуры и плотности смеси. Как и в модели ПММК, средняя температура смеси очень близка к температуре гелия, а температура ксенона превышает свое значение за ударной волной на $\sim 10\%$.

На рис. 9.2 справа построены скорости диффузии для компо-

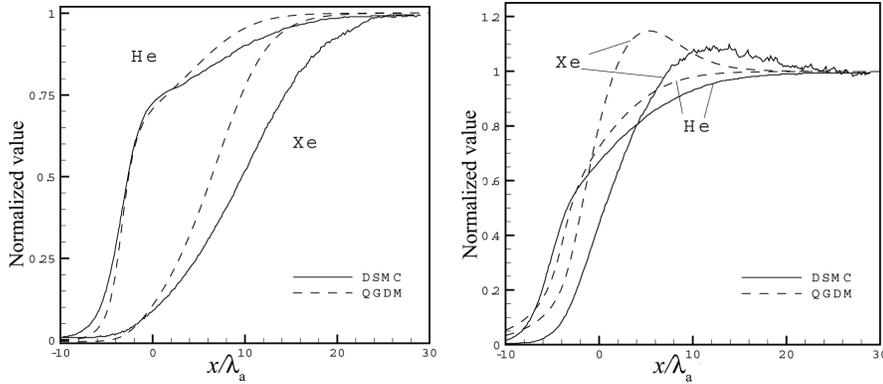


Рис. 9.1. Профили плотности (слева) и температуры (справа) в смеси He-Xe

нент смеси, отнесенные к скорости невозмущенного потока. Скорости диффузии компонент определялись согласно [134] как

$$u_{da} = u_a - u, \quad u_{db} = u_b - u, \quad (9.75)$$

где u — скорость движения смеси — определяется в соответствии с (9.39). При таком определении скорости диффузии компонент $u_{da}\rho_a + u_{db}\rho_b = 0$.

На рис. 9.3 слева представлено изменение концентрации ксенона. Видно, что значения концентрации ксенона на фронте ударной волны приблизительно в два раза меньше, чем в невозмущенной области течения.

Приведенные кривые свидетельствуют о том, что КГДМ модель как качественно, так и количественно хорошо отражает основные особенности рассматриваемого течения: взаимное расположение кривых и их форма соответствуют эталонным результатам.

На рис. 9.4 приведены профили плотности He и Xe в ударной волне для вариантов V1, V3 и V4, соответствующих экспериментам [156]. Данные результаты показывают, что при варьировании процентного состава смеси результаты численного расчета качественно соответствуют данным натурального эксперимента в пределах его точности.

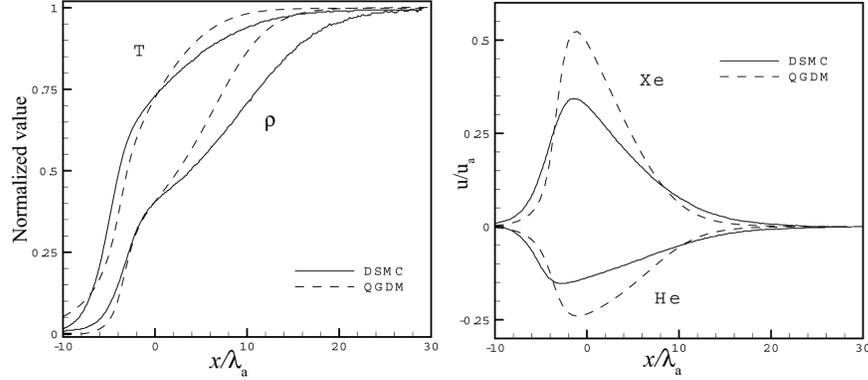


Рис. 9.2. Профили плотности и средней температуры (слева) и скоростей диффузии (справа) в смеси He-Xe

На основе расчетов вариантов V1–V4 на рис. 9.3 справа приведены зависимости относительной толщины ударной волны обеих компонент δ_{He}/λ_{He} и δ_{Xe}/λ_{Xe} в зависимости от концентрации Xe в смеси перед ударной волной в сравнении с результатами [156]. При этом толщина ударной волны вычисляется как

$$\delta = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\max_x(\partial\rho/\partial x)}. \quad (9.76)$$

Длина свободного пробега для каждой из компонент вычисляется в соответствии с (9.70) для параметров каждой из компонент газа перед ударной волной. Сплошной линией обозначены данные эксперимента, пунктиром — результаты расчетов по КГДМ модели. Все кривые представлены в виде, аналогичном [156].

Видно, что для варианта V1, который соответствует минимальной концентрации Xe, данные расчета и эксперимента практически совпадают. С ростом концентрации Xe полученная в расчете толщина ударной волны начинает превышать экспериментальные значения. При этом качественный характер зависимостей соответствует данным эксперимента и известным теоретическим результатам, в соответствии с которыми относительная толщина ударной волны для выбранного значения ω увеличивается при уменьшении числа Маха.

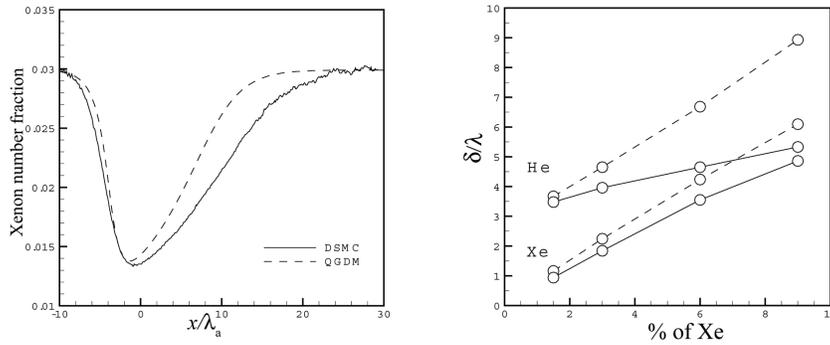


Рис. 9.3. Концентрация Хе (слева) и относительные толщины ударных волн (справа) в смеси He-Xe

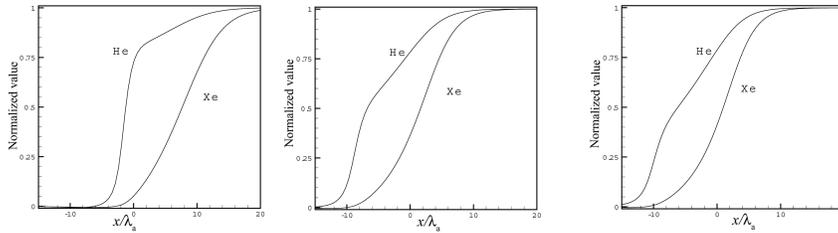


Рис. 9.4. Профили плотности в смеси He-Xe; слева 1.5%Xe, в центре 6%Xe, справа 9%Xe

Отметим, что толщина ударной волны является очень чувствительной характеристикой задачи, и ее расчет на основе моментных уравнений для однокомпонентного газа представляет собой достаточно сложную задачу.

9.8.3 Расчет в одножидкостном приближении

В рамках уравнений Навье–Стокса не имеется проработанных моделей расчета смеси газов в двухжидкостном приближении. Поэтому для сравнения КГДМ уравнений с известными макроскопическими подходами было выбрано сравнение одножидкостного приближения

КГДМ уравнений (9.43)–(9.6.1) с моделью НС (9.47)–(9.50) на примере численного моделирования задачи о структуре ударной волны (вариант V2). При этом КГДМ уравнения (9.43)–(9.6.1) были выписаны для плоского одномерного течения. Метод решения этих уравнений и определение всех необходимых констант полностью совпадает с описанным в п. 9.8.2.

При использовании модели НС (9.47)–(9.50) коэффициент вязкости смеси определялся на основе соотношения (9.34). При этом коэффициенты вязкости отдельных компонент определялись двумя способами: соотношениями (9.33) и (9.55), что практически не влияло на результаты расчетов. Для определения коэффициентов вязкости (9.55) и диффузии в выражениях для диффузионных потоков (9.52) оказывается недостаточно значений, приведенных в табл. 9.2, и необходимо дополнительно определить ряд констант. Параметры потенциала межмолекулярного взаимодействия определялись согласно [85]: $\varepsilon_a/k_B = 10.22$ К, $\varepsilon_b/k_B = 231.0$ К. Эффективные диаметры столкновений $\sigma_a = 2.551 \cdot 10^{-10}$ м, $\sigma_b = 4.047 \cdot 10^{-10}$ м приведены там же. Коэффициенты D_a^T и D_b^T , определяющие термодиффузию, полагались равными нулю.

Для численного решения системы НС (9.47)–(9.50), также как и в предыдущем случае, использовалась явная по времени схема с центральными разностями. Однако для обеспечения устойчивости разностного алгоритма оказалось необходимым аппроксимировать слагаемые с $\ln p$, входящие в выражения для диффузионных потоков (9.52), с помощью односторонних разностных производных вида

$$\frac{\partial \ln p}{\partial x} \sim \frac{\ln p_{i+1} - \ln p_i}{\Delta x}, \quad (9.77)$$

что вносит дополнительную схемную диссипацию порядка $O(h)$. (Здесь i — координата узла расчетной сетки). Для системы уравнений (9.47)–(9.52) справедливы соотношения баланса

$$\rho c_a + \rho c_b = \rho, \quad \mathcal{J}_a + \mathcal{J}_b = 0.$$

При численном решении указанной системы величины ρc_b и \mathcal{J}_b не вычисляются непосредственно, а находятся из указанных соотношений баланса с использованием вычисленных значений ρc_a и \mathcal{J}_a .

В качестве начальных условий используются условия (9.74). Эти же условия ставились и на левой границе. В отличие от КГДМ уравнений, для уравнений НС на правой границе ставились мягкие граничные условия $\partial\psi/\partial x = 0$, где $\psi = (\rho_a, \rho_b, u, E)$. Последнее дает возможность осцилляциям, возникающим в процессе численного решения задачи и распространяющимся вдоль течения, беспрепятственно покидать расчетную область через ее правую границу. Заметим, что при использовании КГДМ уравнений такие осцилляции не возникали.

Параметры расчета для этого варианта близки к приведенным в табл. 9.7. Число временных шагов до сходимости было несколько больше, чем указано в табл. 9.7. Например, для сетки с числом узлов 601 $N_{iter} = 140000$ при той же выбранной точности $\epsilon_{\rho a} = 10^{-5}$.

Таким образом, устойчивость численного алгоритма для одножидкостной модели НС была существенно ниже, чем для модели КГДМ, что выражалось в появлении осцилляций, для подавления которых было необходимо использовать аппроксимацию первого порядка точности вида (9.77) и условия сноса на правой границе.

На рис. 9.5–9.6 представлены газодинамические параметры в ударной волне, рассчитанные по одножидкостным моделям НС и КГДМ. Обозначения и нормировка на рисунках те же, что и в предыдущем разделе.

На рис. 9.5 (слева), аналогично рис. 9.2 (слева), представлены плотности компонент смеси, на рис. 9.5 (справа), аналогично рис. 9.3 (слева), приведены средняя температура и плотность смеси. Заметим, что данный подход не позволяет находить температуры отдельных компонент смеси. Видно, что результаты, полученные по обеим моделям, достаточно близки между собой и в то же время заметно отличаются от эталонных результатов DSMC модели по форме кривых. На рис. 9.6 (слева), аналогичном рис. 9.2 (справа), и на рис. 9.6 (справа), аналогичном рис. 9.3 (слева), представлены безразмерные профили скоростей диффузии для ксенона и гелия и концентрация ксенона на ударной волне, соответственно. Скорости диффузии для одножидкостной КГДМ модели нельзя вычислить на основе соотношения (9.75). Для КГДМ уравнений скорости диффузии компонент вычислялись по аналогии с моделью типа уравнений Навье–Стокса

через диффузионные потоки (9.57) в виде

$$\begin{aligned} u_{da} &= -w_a = -\frac{\tau}{\rho_a} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_a u^2 + p_a), \\ u_{db} &= -w_b = -\frac{\tau}{\rho_b} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_b u^2 + p_b). \end{aligned} \quad (9.78)$$

Для модели Навье–Стокса скорости диффузии компонент определялись как

$$u_{da} = \mathcal{J}_a / (\rho c_a), \quad u_{db} = \mathcal{J}_b / (\rho c_b). \quad (9.79)$$

Модель типа уравнений Навье–Стокса существенно завышает значения обеих скоростей диффузии, давая близкую к эталонным значениям концентрацию X_e в ударной волне, а модель КГДМ, напротив, дает более точные значения скоростей диффузии, завышая при этом концентрацию X_e .

Таким образом, из приведенного расчета следует, что обе одножидкостные модели близки между собой, хотя и оказываются заметно менее точными по сравнению с двухжидкостным КГДМ приближением и, тем более, с эталонными результатами метода DSMC.

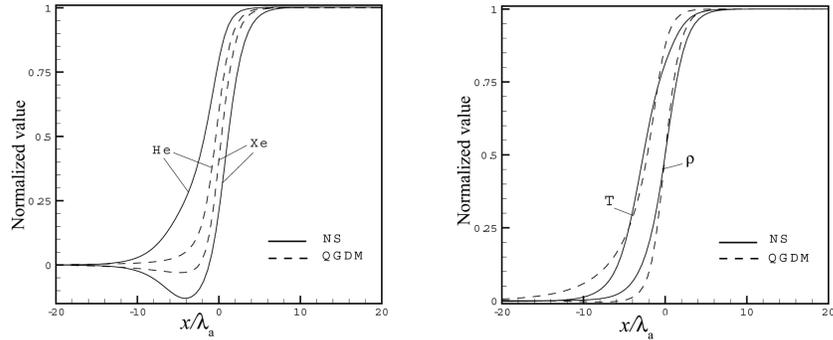


Рис. 9.5. Профили плотности компонент (слева) и средней температуры (справа) в смеси He-Xe. Одножидкостные модели

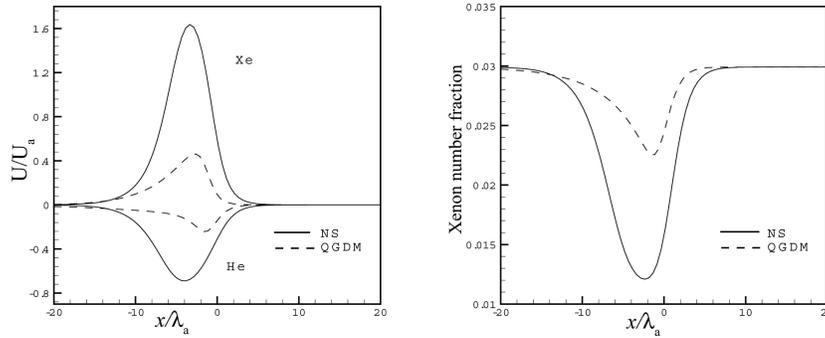


Рис. 9.6. Скорости диффузии (слева) и концентрация Хе (справа) в смеси Не-Хе. Одножидкостные модели

9.9 Задача диффузии аргона и гелия

В качестве второго примера апробации двухжидкостных КГДМ уравнений рассматривалась задача массовой диффузии гелия и аргона в постановке, соответствующей расчету по методу DSMC [134]. Пусть на расстоянии $L = 1\text{m}$ друг от друга расположены два резервуара, заполненные газами Не (газ a , справа), и Ar (газ b , слева). Числовая плотность молекул в резервуарах поддерживается постоянной и равной $n = 2.8 \cdot 10^{20} \text{m}^{-3}$. Предполагалось, что газы в резервуарах имеют одинаковую температуру $T = 273\text{K}$ и одинаковую скорость, равную нулю.

Необходимые в расчете константы для гелия и аргона приведены в табл. 9.8 в соответствии с [134]. Заметим что в отличие от предыдущего варианта, молекулярные массы газов отличаются в 10 раз.

Используя эти константы, получим недостающие начальные данные: плотность гелия $\rho_a = nm_a = 1.862 \cdot 10^{-6} \text{kg/m}^3$, скорость звука $a_a = \sqrt{\gamma_a \mathcal{R}_a T_a} = 971.9 \text{m/s}$, длина свободного пробега, рассчитанная по формуле (9.70), $\lambda_a = 1.479 \cdot 10^{-2} \text{m}$. Плотность аргона $\rho_b = nm_b = 1.856 \cdot 10^{-5} \text{kg/m}^3$, скорость звука $a_b = \sqrt{\gamma_b \mathcal{R}_b T_b} = 307.81 \text{m/s}$, длина свободного пробега, определяемая по формуле (9.70), составляет $\lambda_b = 4.63 \cdot 10^{-3} \text{m}$.

	He	Ar
m (кг)	$6.65 \cdot 10^{-27}$	$66.3 \cdot 10^{-27}$
\mathcal{R} (Дж/(кг·К))	2076.2	208.24
\mathcal{M} (кг/моль)	4.0	39.926
d (м)	$2.30 \cdot 10^{-10}$	$4.17 \cdot 10^{-10}$
γ	1.66	1.66
ω	0.66	0.81
Pr	0.666	0.666
μ_{ref} (н/(м·с)) при $T = 273K$	$1.865 \cdot 10^{-5}$	$2.117 \cdot 10^{-5}$

Таблица 9.8. Табличные значения для компонент смеси

Так же, как и в предыдущем разделе, расчет проводился в безразмерных переменных, причем все величины были нормированы на параметры газа А (гелия) в резервуаре. Соответствующие безразмерные параметры приведены в табл. 9.9.

	Газ А (He)	Газ В (Ar)
ρ	1.	9.969
T	1.	1.
a	1.	0.316
λ	1.	0.313
p	0.6	0.60

Таблица 9.9. Безразмерные параметры

Рассматривалось одномерное плоское течение, описываемое уравнениями (9.60)–(9.65). В качестве граничных условий использовались следующие безразмерные соотношения: на левой границе

$$\rho_a = 1. - 10^{-10}, \quad \rho_b = 10^{-10}, \quad T_a = T_b = 1, \quad \frac{\partial u_a}{\partial x} = \frac{\partial u_b}{\partial x} = 0,$$

на правой границе

$$\rho_b = 1. - 10^{-10}, \quad \rho_a = 10^{-10}, \quad T_a = T_b = 1, \quad \frac{\partial u_a}{\partial x} = \frac{\partial u_b}{\partial x} = 0.$$

То есть предполагалось, что в каждом из резервуаров присутствует $\sim 10^{-10}\%$ молекул другого газа. В начальный момент времени

предполагалось, что плотность компонент между резервуарами изменяется линейно:

$$\rho_a(x) = \frac{\rho_{a_{x=L}} - \rho_{a_{x=0}}}{L} x + \rho_{a_{x=0}}, \quad \rho_b(x) = \frac{\rho_{b_{x=L}} - \rho_{b_{x=0}}}{L} x + \rho_{b_{x=0}}.$$

Использовался тот же численный алгоритм, что и в предыдущем разделе при решении КГДМ уравнений. Задача решалась на равномерной пространственной сетке, состоящей из 339 точек с пространственным шагом $h = 0.2$, что соответствовало $0.2\lambda_a$ и $0.64\lambda_b$.

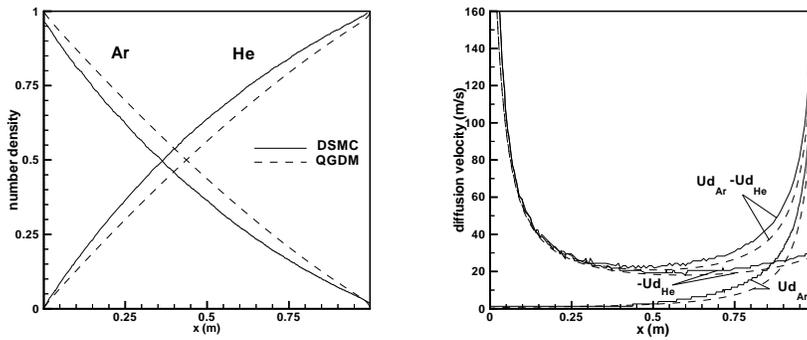


Рис. 9.7. Числовая плотность (слева) и диффузионные скорости (справа) в смеси Ar-He

На рис. 9.7 слева приведено изменение числовых плотностей Ar и He между резервуарами, отнесенных к числовой плотности в резервуарах. Скорости диффузии обоих газов показаны на рис. 9.7 справа в размерном виде. На обоих рисунках приведено сравнение с соответствующими результатами расчета из [134]. Скорости диффузии вычислялись согласно (9.75). Видно качественное и количественное сходство результатов, полученных по обоим методам. А именно, точка равных концентраций смещается от середины области влево, ближе к резервуару с более тяжелым газом. Скорость диффузии гелия больше, чем аргона, качественное поведение скоростей диффузии компонент различно: скорость диффузии гелия имеет слабо выраженный минимум в середине расчетной области.

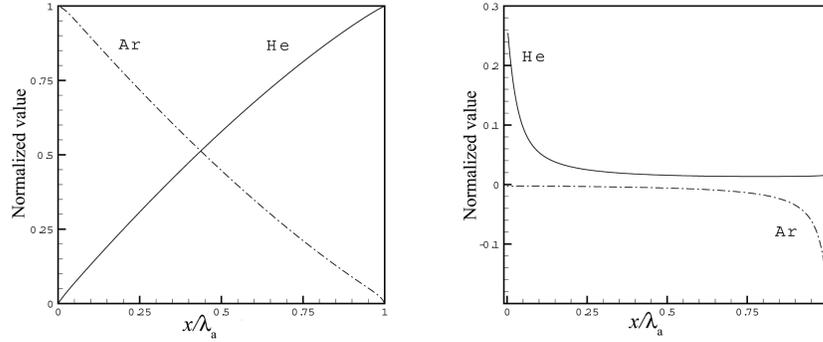


Рис. 9.8. Давления (слева) и скорости (справа) компонент в смеси Ar-He

На рис. 9.8 приведено распределение давлений и скоростей компонент между резервуарами. Распределение давления повторяет распределение числовых плотностей (рис. 9.8 слева). Скорость каждой из компонент очень мала вблизи резервуара с этой компонентой и значительно возрастает вблизи противоположного резервуара (рис. 9.8 справа).

Приведенные расчеты демонстрируют, что несмотря на использование относительно простых выражений для вязкости смеси и частоты столкновений, КГДМ модель хорошо описывает течение смесей, даже если молекулы в них сильно отличаются по массе. Тем не менее для увеличения точности модели целесообразно использовать более точные выражения для частот столкновений. В вычислительном плане КГДМ алгоритмы оказываются более устойчивыми, чем аналогичные алгоритмы, основанные на уравнениях Навье–Стокса. При необходимости в КГДМ модель можно включить искусственную диссипацию в виде добавки к коэффициенту τ вида ah/c . Для КГДМ уравнений построено уравнение для энтропии с неотрицательной диссипативной функцией¹. Подход, использованный при выводе КГДМ уравнений, может применяться для описания течений газов со взвешенными частицами.

¹А.А.Злотник, частное сообщение

Приложение А

Пример построения КГД уравнений

В качестве примера приведем детальный вывод квазигазодинамической системы уравнений, основанный на использовании кинетической модели.

Рассмотрим плоское одномерное течение вдоль оси x . При этом скорости молекул $\vec{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ связаны с тепловыми скоростями $\vec{c} = (c_x, c_y, c_z)$ соотношениями

$$\xi_x = u + c_x, \quad \xi_y = c_y, \quad \xi_z = c_z,$$

где u — макроскопическая скорость течения газа вдоль оси x . В этом случае кинетическое уравнение (3.4) принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} - \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) = \mathcal{I}(f, f). \quad (\text{A.1})$$

Макроскопические уравнения строятся путем умножения уравнения (A.1) последовательно на сумматорные инварианты

$$h(\vec{\xi}) = 1, \xi_x, \xi^2/2$$

и осреднения по всем скоростям частиц $\vec{\xi}$. Законы сохранения массы, импульса и энергии в процессе столкновений выражаются следующим соотношением для интеграла столкновений

$$\int \mathcal{I}(f, f) h(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Таким образом, из результирующих уравнений исчезают слагаемые с интегралом столкновений.

Уравнение неразрывности

Интегрируем уравнение (А.1) по всем скоростям частиц. При интегрировании первого слагаемого получаем

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \int f d\vec{\xi} = \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Второе слагаемое преобразуется как

$$\int \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \xi_x d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial x} \int (u + c_x) f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial x} \int u f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial x} \rho u. \quad (\text{А.3})$$

Здесь использованы соотношения (3.7) в виде

$$\int c_x f^{(0)} d\vec{\xi} = 0, \quad (\text{А.4})$$

совместно с определением ρ

$$\rho = \int f d\vec{\xi} = \int f^{(0)} d\vec{\xi}.$$

Второе слагаемое в левой части уравнения (А.1) преобразуется как

$$\begin{aligned} \int \xi_x \frac{\partial}{\partial x} (\tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x}) d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \xi_x^2 f^{(0)} d\vec{\xi} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int (u + c_x)^2 f^{(0)} d\vec{\xi} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p). \end{aligned} \quad (\text{А.5})$$

Здесь использованы соотношения (3.7) и (А.4) совместно с определением давления p в виде

$$p = \frac{1}{3} \int \vec{c}^2 f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{1}{3} \int (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) f^{(0)} d\vec{\xi} = \int c_x^2 f^{(0)} d\vec{\xi}. \quad (\text{А.6})$$

Объединяя выражения (А.2), (А.3) и (А.5), получим первое уравнение КГД системы в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p). \quad (\text{А.7})$$

Уравнение импульса

Умножим уравнение (A.1) на ξ_x и проинтегрируем по всем скоростям $\vec{\xi}$.

Принимая во внимание определение плотности и (3.7), (A.4) и (A.6), запишем первое и второе слагаемые кинетического уравнения как

$$\int \xi_x \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \int \xi_x f d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \rho u,$$

$$\int \xi_x^2 \frac{\partial}{\partial x} f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial x} \int (u^2 + 2c_x u + c_x^2) f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p). \quad (\text{A.8})$$

Последнее слагаемое преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} & \int \xi_x^2 \frac{\partial}{\partial x} \tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} d\vec{\xi} = \\ & \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int \xi_x^3 f^{(0)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int (u + c_x)^3 f^{(0)} d\vec{\xi} \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int (u^3 + 3u^2 c_x + 3u c_x^2 + c_x^3) f^{(0)} d\vec{\xi} \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3 + 3pu). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Здесь использованы выражения (3.7), (A.4) и (A.6) совместно с формулой

$$\int c_x^3 f^{(0)} d\vec{\xi} = 0. \quad (\text{A.10})$$

В более общем случае, вследствие симметрии, справедливо соотношение

$$\int c_i c_j^2 f^{(0)} d\vec{\xi} = 0. \quad (\text{A.11})$$

Объединяя уравнения (A.2), (A.8) и (A.9), получим второе уравнение КГД системы в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3 + 3pu). \quad (\text{A.12})$$

Уравнение энергии

Осредняя уравнение (А.1) с весом $\vec{\xi}^2/2$, получим для первых двух слагаемых модельного кинетического уравнения

$$\int \frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{2} f d\vec{\xi} = \frac{\partial E}{\partial t},$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial x} f^{(0)} \xi_x \frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{2} d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial x} \int u \frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{2} f_0 d\vec{\xi} \\ + \frac{\partial}{\partial x} \int c_x \frac{(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial x} uE + \frac{\partial}{\partial x} up. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Здесь мы использовали определения для ρ и p совместно с уравнениями (А.11) и определение полной энергии в виде

$$E = \frac{1}{2} \int \vec{\xi}^2 f d\vec{\xi}. \quad (\text{A.14})$$

Последнее слагаемое кинетического уравнения преобразуется в слагаемые со вторыми пространственными производными в уравнении для полной энергии:

$$\begin{aligned} \int \frac{\vec{\xi}^2}{2} \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} d\vec{\xi} &= \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{\vec{\xi}^2}{2} \xi_x^2 f^{(0)} d\vec{\xi} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int (u + c_x)^2 \frac{(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int u^2 \frac{(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int 2uc_x \frac{(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \int c_x^2 \frac{(c_x + u)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (u^2 E + 2u^2 p + \frac{u^2 p}{2} + \int c_x^2 \frac{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} d\vec{\xi}). \end{aligned}$$

Для вычисления последнего интеграла выполним замену переменных

$$x = \frac{c_x}{\sqrt{2\mathcal{R}T}}, \quad y = \frac{c_y}{\sqrt{2\mathcal{R}T}}, \quad z = \frac{c_z}{\sqrt{2\mathcal{R}T}}.$$

Принимая во внимание формулы

$$\int \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}, \quad \int x^2 \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}/2,$$

$$\int x^4 \exp(-x^2) dx = 3\sqrt{\pi}/4,$$

получим

$$\int c_x^2 \frac{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} f^{(0)} dc_x dc_y dc_z = \frac{5p^2}{2\rho}. \quad (\text{A.15})$$

В соответствии с полученными выше соотношениями, искомые слагаемые в уравнении энергии будут иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \left(u^2 \left(E + \frac{5}{2} p \right) + \frac{5p^2}{2\rho} \right). \quad (\text{A.16})$$

Объединяя формулы (A.2), (A.13) и (A.16), получим последнее уравнение КГД системы в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E + \frac{\partial}{\partial x} u(E+p) &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} u^2 \left(E + \frac{5}{2} p \right) + \frac{5}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{p}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \tau p \frac{\partial}{\partial x} \frac{p}{\rho} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} \left(u^2 (E+2p) + \frac{p}{\rho} (E+p) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Результирующая система уравнений

Уравнения (A.7), (A.12) и (A.17) образуют результирующую систему уравнений. При окончательной записи этой системы преобразуем правую часть уравнения энергии (A.17) следующим образом: выделим в ней слагаемое, описывающее тепловой поток, в котором введем число Прандтля Pr и идентифицируем коэффициент $5/3$ с параметром γ как $5/2 = \gamma/(\gamma-1)$. Полученная система КГД уравнений примет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p). \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) = \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3 + 3pu). \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E + \frac{\partial}{\partial x} u(E + p) &= \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial}{\partial x} (u^2(E + 2p) + \frac{u^2}{2} p) \\ &+ \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{p}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Pr} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} \tau p \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{\rho}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Приложение В

Течение вязкого сжимаемого газа в микроканалах

В этом приложении рассматривается задача о течении вязкого сжимаемого газа в микроканалах каналах с изотермическими стенками. Для таких течений построены приближенные формулы для вычисления расхода. Показано, что КГД модели, дополненные условиями скольжения Максвелла для скорости, предсказывают существование минимума расхода в канале — так называемого минимума Кнудсена. Предложены поправки, позволяющие выписать приближенные формулы для расхода, справедливые для любых чисел Кнудсена. Приведенные результаты основаны на работах [33, 152].

Введение

При движениях умеренно-разреженного газа с числами Кнудсена порядка единицы возникают эффекты, трудно объяснимые в рамках классических уравнений Навье–Стокса даже с использованием граничных условий скольжения и температурного скачка [68, 104, 134, 182, 189] и др. Такие эффекты замечены, в частности, при течении газа в длинных изотермических микроканалах. В этих задачах наблюдается увеличение массового расхода газа по сравнению с расходом, вычисленным в рамках уравнений Навье–Стокса, и тесно связанный с этим явлением так называемый эффект Кнудсена.

Эксперименты Кнудсена, выполненные в 1900 годах¹, показывают наличие минимума удельного расхода газа для течений в длинных изотермических каналах при числах Кнудсена порядка единицы (парадокс, или минимум Кнудсена). Возможность описания этих явлений с помощью различных теоретических моделей является актуальной задачей.

¹Knudsen M. Ann. d.Physik, 1909, Vol. 28.

При использовании кинетических подходов эффект Кнудсена был получен в целом ряде работ с использованием вариационных подходов к решению уравнения Больцмана в БГК приближении [68, 103, 104, 128, 136–138, 167, 187]. Применение методов Монте-Карло для таких задач является проблематичным, что связано с необходимостью подавления статистических флуктуаций при расчетах медленных течений, и приводит к неоправданно большим вычислительным затратам [167].

На основе макроскопических уравнений эффект Кнудсена удастся описать с помощью вариантов уравнений Барнета [167], либо системы Навье–Стокса, дополненной граничными условиями скольжения искусственного вида [141, 142, 163].

В данной главе течения в микроканалах рассматриваются на основе КГД моделей с классическими граничными условиями скольжения. Выше было показано, что для течений с умеренными числами Кнудсена — течений в тонких щелях, порах, капиллярах и микроканалах, где коэффициент τ оказывается не слишком малым, дополнительные члены в КГД уравнениях могут оказывать влияние на решение задачи. Далее на основе КГД уравнений с классическими условиями скольжения для скорости — условиями Максвелла — построены приближенные аналитические формулы, описывающие увеличение массового расхода и эффект Кнудсена в микроканалах. Предложены поправки, позволяющие выписать приближенные формулы для расхода в плоских и цилиндрических каналах, справедливые во всем диапазоне чисел Кнудсена.

Течение Пуазейля в плоском канале

Формулы для массового расхода. Рассмотрим течение газа в плоском канале длины L и ширины H . Пусть на входе и выходе канала давления равны p_1 и p_2 , где $p_1 > p_2$. Следуя [72] (гл.2, пар.18, задача 6) предположим, что градиент давления вдоль канала невелик, и на малой длине канала dx плотность ρ газа можно считать постоянной. Будем искать решение задачи в виде

$$u_x = u(y), \quad u_y = 0, \quad p = p(x), \quad T = T_0. \quad (\text{B.1})$$

При этом обе КГД системы сводятся к системе двух уравнений. А именно, из уравнений неразрывности следует

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial p(x)}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.2})$$

а из уравнений движения для обеих систем получаем

$$\frac{\partial p(x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial u(y)}{\partial y} + 2u(y) \frac{\partial}{\partial x} \tau \frac{\partial p(x)}{\partial x}. \quad (\text{B.3})$$

Эти два уравнения эквивалентны одному уравнению

$$\frac{dp(x)}{dx} = \mu_0 \frac{d^2 u(y)}{dy^2}. \quad (\text{B.4})$$

Такое же уравнение получается при подстановке соотношений (B.1) в систему уравнений Навье–Стокса. Здесь $\mu(T) = \mu(T_0) = \mu_0$.

Используя в качестве граничных условий условия скольжения Максвелла для скорости [3], [79]:

$$\left(u - \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \frac{du}{dy} \right) \Big|_{y=0} = 0, \quad \left(u + \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \frac{du}{dy} \right) \Big|_{y=H} = 0,$$

найдем профиль скорости, который имеет вид модифицированной параболы Пуазейля

$$u_x = -\frac{1}{2\mu_0} \frac{dp(x)}{dx} \left[y(H - y) + \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda H \right].$$

Здесь σ — коэффициент аккомодации для скорости, или доля диффузно отраженных молекул, которая близка к единице. λ — средняя длина свободного пробега частиц, которая связана с коэффициентом вязкости как

$$\lambda = A \frac{\mu}{p} \sqrt{\mathcal{R}T}. \quad (\text{B.5})$$

Коэффициент $A = \sqrt{\pi/2}$ для формулы Чепмена [3], и $A = 2(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)/(15\sqrt{2\pi})$ для формулы Берда [134].

Распределение скорости в канале удастся получить и для случая, когда коэффициенты аккомодации на верхней и нижней стенках канала различны. Пусть на нижней стенке коэффициент аккомодации равен σ_1 , а на верхней — σ_2 . Тогда граничные условия для скорости примут вид

$$\left(u - \frac{2 - \sigma_1}{\sigma_1} \lambda \frac{du}{dy}\right) \Big|_{y=0} = 0, \quad \left(u + \frac{2 - \sigma_2}{\sigma_2} \lambda \frac{du}{dy}\right) \Big|_{y=H} = 0,$$

и распределение скорости можно записать как

$$u_x = -\frac{1}{2\mu_0} \frac{dp(x)}{dx} \left[y(H\beta - y) + \frac{2 - \sigma_2}{\sigma_2} \lambda H\beta \right], \quad (\text{B.6})$$

где коэффициент β имеет вид

$$\beta = \frac{H + 2\lambda(2 - \sigma_2)/\sigma_2}{H + \lambda(2 - \sigma_1)/\sigma_1 + \lambda(2 - \sigma_2)/\sigma_2}.$$

При $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ последняя формула переходит в полученное ранее выражение.

Для уравнений Навье–Стокса плотность потока массы $j_{mx} = \rho u_x$, и массовый расход газа в расчете на единицу ширины канала в произвольном сечении вычисляется как

$$\begin{aligned} J_{NS} &= \int_0^H j_{mx} dy = \int_0^H \rho u_x dy = \\ &= -\frac{H^3}{8\mu_0 \mathcal{R}T_0} \left[\frac{2}{3} p \frac{dp}{dx} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} p \frac{dp}{dx} \frac{\lambda}{H} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

При вычислении интеграла, следуя методике [72], выполнена замена $\rho = p/\mathcal{R}T_0$. Аналогичная формула для расхода газа в длинном канале с учетом условий скольжения приведена в [182] для цилиндрического канала и названа модифицированной формулой Пуазейля для массового расхода.

Для КГД моделей $j_{mx} = \rho(u_x - w_x)$, причем для рассматриваемой задачи величина w_x для обеих моделей одинакова и равна

$$w_x = -\frac{\tau}{\rho} \frac{dp}{dx} = -\frac{\mu}{pSc} \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx}.$$

В рамках КГД подхода расход газа через сечение канала равен

$$\begin{aligned} J^{xy} &= \int_0^H \rho(u_x - w_x) dy = \int_0^H \rho u_x dy - \frac{\mu}{Sc} \int_0^H \frac{1}{p} \frac{dp(x)}{dx} dy = \\ &= -\frac{H^3}{8\mu_0 \mathcal{R} T_0} \left[\frac{2}{3} p \frac{dp}{dx} + 4 \frac{2-\sigma}{\sigma} p \frac{dp}{dx} \frac{\lambda}{H} + \frac{8}{A^2 Sc} p \frac{dp}{dx} \left(\frac{\lambda}{H} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Последнее слагаемое в этой формуле получено следующим образом:

$$\frac{\mu}{Sc} \int_0^H \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} dy = \frac{\mu}{Sc} \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} H = \frac{\mu^2}{Sc \mu_0} \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} H,$$

где коэффициент вязкости μ выражен через длину свободного пробега (B.5).

Первое слагаемое в формуле (B.8) соответствует расходу, определяемому параболой Пуазейля с условиями прилипания, второе слагаемое описывает увеличение расхода за счет условий скольжения для скорости, третье — расход за счет процессов самодиффузии. Последнее слагаемое имеет порядок $O(\tau^2)$ или $O(Kn^2)$, где число Кнудсена $Kn = \lambda/H$. Для стационарных течений именно такое отличие существует между уравнениями Навье–Стокса и КГД моделями.

Минимум расхода, или эффект Кнудсена. В экспериментах Кнудсена было показано, что при течении газа в длинных цилиндрических каналах нормированный расход через сечение зависит от числа Кнудсена не монотонно, и при числах Кнудсена $Kn \sim 1$ наблюдается минимум удельного расхода. На эти классические эксперименты указано, например, в [104] (гл. 7) и [182] (раздел 4-3). Там же подчеркивается, что существующие макроскопические модели не позволяют получить минимум Кнудсена. Однако при учете в макроскопических уравнениях процессов самодиффузии этот результат может быть получен.

При использовании кинетических подходов эффект Кнудсена был получен в целом ряде работ. В частности, в [103, 104, 128, 136–138, 187] с помощью вариационных подходов к решению кинетического уравнения Больцмана в приближении БГК был вычислен массовый расход для течений газа в плоском и цилиндрическом каналах в широком диапазоне чисел Kn , включая минимум Кнудсена.

В [167] для решения этой задачи использовался комбинированный подход, включающий уравнения Барнетта и БГК модель.

В экспериментах Кнудсена расход рассчитывался в нормализованном виде, где нормировочный множитель определялся массовым расходом в канале для свободно-молекулярного течения. Массовый расход в сечении длинного канала для свободно-молекулярного течения определяется процессами диффузии. Для газа, состоящего из молекул-твердых сфер при $\sigma = 1$ этот расход выписан, например, в [182]. Для плоского канала его величина равна

$$J_0^{xy} = \frac{4H^2\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}\mathcal{R}T_0} \frac{dp}{dx}, \quad (\text{B.9})$$

где H — ширина канала.

Обратим внимание на различие в формулах для расхода, вычисленного в рамках модели плотного газа (первое слагаемое в выражениях (B.7) и (B.8)), и расхода в приближении свободно-молекулярного течения (B.9). В первом случае расход пропорционален H^3 , градиенту давления и среднему давлению. Во втором случае расход пропорционален H^2 и градиенту давления, и не зависит от среднего давления в канале.

Выражая коэффициент вязкости через длину свободного пробега (B.5), вычислим нормированное значение расхода (B.8)

$$Q_{xy} = \frac{J^{xy}}{J_0^{xy}} = \frac{3\sqrt{\pi}A}{8\sqrt{2}} \left[\frac{Kn^{-1}}{6} + \frac{2-\sigma}{\sigma} + \frac{2}{A^2 Sc} Kn \right]. \quad (\text{B.10})$$

Отсюда следует, что величина Q имеет минимум при числе Кнудсена

$$Kn_m = \frac{A}{2} \sqrt{\frac{Sc}{3}}.$$

Положение минимума не зависит от коэффициента аккомодации σ . При $Sc = 1$, $A = \sqrt{\pi/2}$, $Kn_m = 0.36$.

В [68, 104, 136] для молекул-твердых сфер ($\omega = 0.5$) в БГК приближении вычислен расход в плоском канале. Полученные результаты не выражаются аналитически и представлены в виде таблиц

и графиков. Для малых чисел Kn ($Kn \rightarrow 0$) эти результаты представлены в виде приближенной формулы

$$Q_{cer} = \frac{Kn^{-1}}{6} + \sigma + (2\sigma^2 - 1)Kn. \quad (\text{B.11})$$

При $\sigma = 1$ выражения (B.10) и (B.11) отличаются только численным коэффициентом перед слагаемым $\sim Kn$ и множителем порядка единицы перед скобкой. Этот множитель связан с выбранной в [104, 136] нормировкой, для которой $A = \sqrt{2}$ и:

$$J_0^{xy} = \frac{H^2}{\sqrt{2\mathcal{R}T_0}} \frac{dp}{dx}. \quad (\text{B.12})$$

Многочисленные данные и асимптотические формулы для расхода, полученные на основе различных форм БГК уравнения, собраны в обзоре [187]. Эти формулы отличаются от (B.11) коэффициентами, близкими к 1 во втором и третьем слагаемых, и содержат дополнительное, четвертое слагаемое $\sim -Kn^2$.

Зависимость расхода от перепада давления. В эксперименте, как правило, измеряется величина расхода в микроканале в зависимости от перепада давлений на его концах. Получим такую формулу. Для этого вернемся к выражению (B.8) и вычислим интегральный расход по длине канала L .

Положим в (B.8) $\lambda = \lambda_2 p_2 / p$, где λ_2 — средняя длина свободного пробега на выходе из канала. Проинтегрируем полученное выражение на интервале $[0, L]$. Предположим, что ширина канала D много больше его высоты H . Тогда, пренебрегая влиянием боковых стенок, вычислим расход:

$$Q_{xy}^L = \frac{D}{L} \int_0^L J^{xy} dx = D \frac{H^3 p_2^2}{8\mu_0 \mathcal{R} T_0 L} \left[\frac{(p_1/p_2)^2 - 1}{3} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} Kn_2 \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right) + \frac{8}{A^2 Sc} Kn_2^2 \ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \right], \quad (\text{B.13})$$

где $Kn_2 = \lambda_2/H$. Аналогичная формула для системы Навье–Стокса с условиями скольжения имеет вид

$$Q_{NS}^L = D \frac{H^3 p_2^2}{8\mu_0 \mathcal{R} T_0 L} \left[\frac{(p_1/p_2)^2 - 1}{3} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} Kn_2 \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right) \right]. \quad (\text{В.14})$$

Выражение

$$Q_{NS}^{L2} = D \frac{H^3 p_2^2}{8\mu_0 \mathcal{R} T_0 L} \left[\frac{(p_1/p_2)^2 - 1}{3} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} Kn_2 \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right) + 9Kn_2^2 \ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \right], \quad (\text{В.15})$$

отличающееся от (В.13) лишь коэффициентом перед последним членом, было получено из системы Навье–Стокса с использованием так называемых граничных условий скольжения второго порядка [142], [127]

$$u_s = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{9\lambda^2}{8} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),$$

где длина свободного пробега λ вычисляется по формуле Чепмена. Формулы для расхода (В.13), (В.14) и (В.15) сравнивались с данными экспериментов в азоте и гелии.

В [141] представлены результаты экспериментальных измерений массового расхода при изотермических течениях гелия и азота в микроканалах длины L , высоты H и ширины D . Наиболее подходящим для сравнения является образец микроканала с размерами $L = 5 \cdot 10^{-3}$ м, $H = 0.545 \cdot 10^{-6}$ м, $D = 5 \cdot 10^{-5}$ м. Здесь выполнено условие $H \ll D$, и канал можно считать плоским.

При течениях гелия эффект увеличения расхода ярко выражен, если $T_0 = 294.2$ К, $p_2 = 0.75 \cdot 10^5$ Па. Взятые из справочников значение коэффициента динамической вязкости гелия при указанной температуре $\mu_0 = 19.6 \cdot 10^{-6}$ Па·с, газовая постоянная $\mathcal{R} = 2.0785 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К), число Шмидта $Sc = 0.77$. Соответствующие графики в сравнении с экспериментальными точками показаны на рис. В.1. В первом случае для вычисления длины свободного пробега использовалась формула Чепмена, а во втором – формула Берда с показателем $\omega = 0.66$ [134]. Доля диффузно отраженных молекул σ считалась равной единице. Видно, что расчеты с помощью

КГД уравнений наиболее точно описывают эксперимент. Система Навье–Стокса с традиционными граничными условиями максвелловского скольжения дает не вполне удовлетворительный результат.

Аналогичные данные для азота представлены на рис. В.2. Отличия в параметрах задачи по сравнению с предыдущим вариантом следующие: $\mu_0 = 17.8 \cdot 10^{-6}$ Па·с, $\mathcal{R} = 2.962 \cdot 10^2$ Дж/(кг·К), $Sc = 0.74$, $\omega = 0.74$, $\sigma = 0.93$. Последняя величина соответствует данным [141]. Кривая, отвечающая КГД моделям, идеально соответствует эксперименту, хотя эффект увеличения расхода в данном случае и не является ярко выраженным.

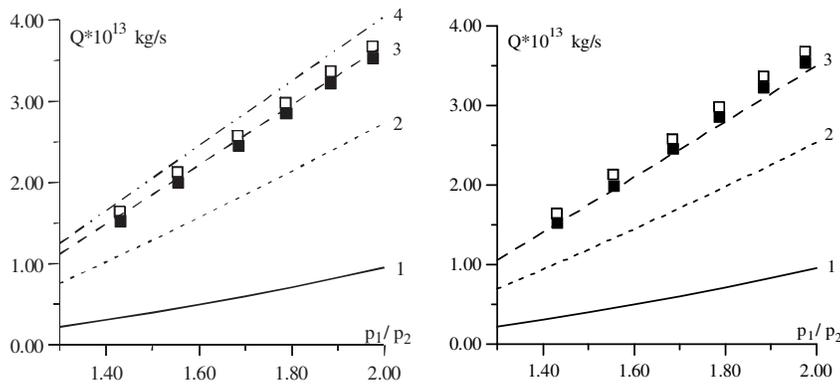


Рис. В.1. Результаты для гелия. Слева – формула Чепмена, справа – формула Берда. 1 – система НС с условиями прилипания, 2 – система НС с условиями скольжения Максвелла, 3 – КГД уравнения с условиями скольжения Максвелла, 4 – система НС с условиями скольжения второго порядка, символы – эксперименты [141].

Массовый расход для аргона может быть дополнительно сопоставлен с данными [167]. Для гелия и азота – с данными [173].

В рассмотренных вариантах число Кнудсена на выходе из канала не превосходит 0.5. Для $Kn_2 \leq 0.1$ расход газа адекватно описывается системой Навье–Стокса с условиями максвелловского скольжения, поскольку член второго порядка малости по Kn_2 в формуле (В.13) может быть опущен.

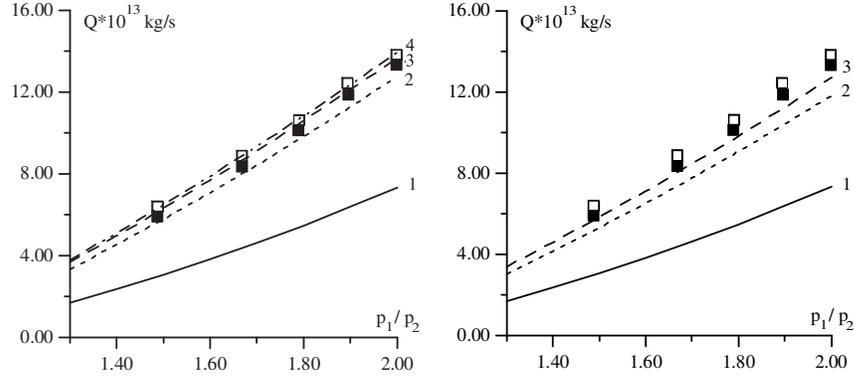


Рис. В.2. Результаты для азота. Слева – формула Чепмена, справа – формула Берда. 1 – система НС с условиями прилипания, 2 – система НС с условиями скольжения Максвелла, 3 – КГД уравнения с условиями скольжения Максвелла, 4 – система НС с условиями скольжения второго порядка, символы – эксперименты [141].

Течение Пуазейля в круглой трубе

Приведем формулы для расхода в случае течения газа в круглой трубе. Для этого рассмотрим течение газа в длинном изотермическом канале длины L и радиуса H . Решение задачи будем искать в виде

$$u_z = u(r), \quad u_r = 0, \quad p = p(z), \quad T = T_0. \quad (\text{B.16})$$

Подставляя зависимости (B.16) систему Навье–Стокса и в КГД системы, получим уравнение, связывающее градиент давления и продольную скорость

$$\frac{dp(z)}{dz} = \mu_0 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du(r)}{dr} \right). \quad (\text{B.17})$$

Используя граничные условия скольжения для скорости

$$\left(u + \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \frac{du}{dr} \right) \Big|_{r=H} = 0,$$

получим профиль скорости вида

$$u(r) = -\frac{1}{4\mu_0} \frac{dp(z)}{dz} \left[(H^2 - r^2) + 2\frac{2-\sigma}{\sigma} \lambda H \right].$$

Для уравнений Навье–Стокса $j_{mr} = \rho u_z$. Заменяя $\rho = p/\mathcal{R}T_0$, вычислим

$$J_{NS} = 2\pi \int_0^H r \rho u_z dr = -\frac{\pi H^4}{8\mu_0 \mathcal{R}T_0} \left[p \frac{dp}{dz} + 4\frac{2-\sigma}{\sigma} p \frac{dp}{dz} \frac{\lambda}{H} \right]. \quad (\text{B.18})$$

С точностью до обозначений такая формула для расхода газа твердых сфер в длинном цилиндрическом канале с учетом условий скольжения приведена в [182] и названа модифицированной формулой Пуазейля.

Для КГД систем $j_{mz} = \rho(u_z - w_z)$. Для рассматриваемой задачи величина добавки для обеих моделей одинакова и равна

$$w_z = -\frac{\tau}{\rho} \frac{dp}{dz} = -\frac{\mu}{pSc} \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dz}.$$

Массовый расход в сечении канала равен

$$\begin{aligned} J^{rz} &= 2\pi \int_0^H r \rho (u_z - w_z) dr = \\ &= 2\pi \int_0^H r \rho u_z dr - 2\pi \frac{\mu}{Sc} \int_0^H r \frac{1}{p} \frac{dp(z)}{dz} dr = \\ &= -\frac{\pi H^4}{8\mu_0 \mathcal{R}T_0} \left[p \frac{dp}{dz} + 4\frac{2-\sigma}{\sigma} p \frac{dp}{dz} \frac{\lambda}{H} + \frac{8}{A^2 Sc} p \frac{dp}{dz} \left(\frac{\lambda}{H} \right)^2 \right]. \quad (\text{B.19}) \end{aligned}$$

Согласно [182], (глава 4-3, формула (4-43)) массовый расход газа в сечении цилиндрического канала, вычисленный в предположении о свободно-молекулярном течении с условиями полной аккомодации скорости на стенке $\sigma = 1$ для газа твердых сфер, равен

$$J_0^{rz} = \frac{4H^3}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{\mathcal{R}T_0}} \frac{dp}{dz}.$$

В [182] указывается, что в экспериментах для достаточно разреженных газов приведенная формула описывает расход в канале с точностью до 1%.

Нормированное значение расхода составляет

$$Q_{rz} = \frac{J^{rz}}{J_0^{rz}} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{A}{\sqrt{2}} \left[\frac{Kn^{-1}}{4} + \frac{2-\sigma}{\sigma} + \frac{2}{A^2 Sc} Kn \right]. \quad (\text{B.20})$$

Из (B.20) следует, что величина Q_{rz} имеет минимум при

$$Kn_m = \frac{A}{2} \sqrt{\frac{Sc}{2}}.$$

При $Sc = 1$, $A = \sqrt{\pi/2}$, $Kn_m = 0.42$.

Выражение (B.20) было сопоставлено с расчетами [68, 104, 137], результаты которых приведены в виде таблиц. Здесь для малых чисел Kn ($Kn \rightarrow 0$) приведена упрощенная формула для расхода, которая имеет вид

$$Q_{cer} = \frac{Kn^{-1}}{4} + \sigma + (2\sigma^2 - 1)Kn. \quad (\text{B.21})$$

При $\sigma = 1$ формулы (B.20) и (B.21) отличаются множителем $A/\sqrt{2} = 0.89$, и числом Шмидта Sc . Согласно расчетам [104, 138], минимальное значение расхода наблюдается при $Kn \sim 3$. В [104] $A = \sqrt{2}$ и расход нормирован на величину

$$J_0^{rz} = \frac{\pi H^3}{\sqrt{2} \mathcal{R} T_0} \frac{dp}{dz}. \quad (\text{B.22})$$

Используя (B.19), получим, что расход газа в зависимости от перепада давления на концах канала вычисляется как

$$Q_{rz}^L = \frac{1}{L} \int_0^L J(z) dz = \frac{\pi H^4 p_2^2}{8\mu_0 \mathcal{R} T_0 L} \left[\frac{(p_1/p_2)^2 - 1}{2} + 4 \frac{2-\sigma}{\sigma} Kn_2 \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right) + \frac{8}{A^2 Sc} Kn_2^2 \ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \right], \quad (\text{B.23})$$

где $Kn_2 = \lambda_2/H$.

Сопоставление расхода в сечении плоских и цилиндрических каналов с данными экспериментов и расчетов в БГК приближении будет приведено далее. Здесь укажем только, что анализ результатов показывает, что при числах Кнудсена $0.1 < Kn < 0.5$ полученные на основе КГД модели формулы расхода в длинных изотермических каналах лучше соответствуют имеющимся данным, чем формулы, основанные на уравнениях Навье–Стокса. В обеих моделях ставятся классические условия скольжения Максвелла. Однако для чисел Кнудсена $Kn > 0.5$ расхождение КГД результатов с данными кинетических моделей резко увеличивается. Ниже предлагается способ устранения этого эффекта путем введения коррекции в коэффициент τ .

Вычисление расхода для разреженных течений

Коррекция коэффициента τ для разреженных течений.

Для локально-равновесных течений достаточно плотного газа масштаб временного сглаживания определяется

$$\tau = \frac{\mu}{pSc} = \frac{\gamma}{Sc} \frac{\mu}{\rho c^2} = \frac{\lambda}{Sc A \sqrt{\mathcal{R}T}}, \quad (\text{B.24})$$

где γ — показатель адиабаты, Sc — число Шмидта, которое для газов близко к единице, c — скорость звука. Для идеального газа величина c имеет порядок средней относительной скорости $\langle \vec{c} \rangle \sim \sqrt{2\mathcal{R}T}$ теплового движения молекул, а коэффициент μ по порядку величины равен $\lambda \langle \vec{c} \rangle$, где λ — средняя длина свободного пробега частиц в газе. Таким образом, из (B.24) следует, что величина τ с точностью до коэффициента порядка единицы равна среднему времени свободного пробега частиц в газе $\lambda/\sqrt{2\mathcal{R}T}$. Расчеты течений плотных и умеренно-разреженных газов подтверждают правильность выбора параметра сглаживания в виде (B.24).

Величина $\tau \sim 1/\rho$, и при увеличении разреженности газа (числа Kn) неограниченно возрастает. Для течений достаточно разреженных газов, когда $\lambda \geq H$, то есть $Kn = \lambda/H \geq 1$, естественно ограничить время осреднения и связать его дополнительно с характерным размером задачи. Для этого свяжем масштаб сглаживания с величиной Kn , заменяя его на величину

$$\tau \rightarrow \tau(Kn) = \frac{\tau}{1 + Kn} = \frac{\lambda}{Sc(1 + Kn)A\sqrt{\mathcal{R}T}}. \quad (\text{B.25})$$

При $Kn \rightarrow 0$ выражение (B.25) вырождается в формулу (B.24).

Оценим влияние поправки в предельном случае сильно разреженных течений. Подставляя выражение для λ вида (B.5), получим, что при больших числах Кнудсена $Kn \gg 1$

$$\tau = \frac{\lambda}{Sc(1 + Kn)A\sqrt{\mathcal{R}T}} \sim \frac{\lambda}{ScKnA\sqrt{\mathcal{R}T}} = \frac{H}{ScA\sqrt{\mathcal{R}T}}. \quad (\text{B.26})$$

Таким образом, для разреженных течений $\tau \sim H/\sqrt{\mathcal{R}T}$ имеет порядок характерного времени свободного пробега молекул между столкновениями с границами рассматриваемой области.

С помощью вычисленного таким образом характерного времени релаксации можно определить модифицированные коэффициенты диффузии, вязкости и теплопроводности в разреженном газе. Тогда коэффициент вязкости примет вид

$$\mu(Kn) = \tau(Kn)pSc \sim \frac{\rho H\sqrt{\mathcal{R}T}}{A}. \quad (\text{B.27})$$

Коэффициент диффузии

$$D(Kn) = \frac{\tau(Kn)pSc}{\rho Sc} \sim \frac{H\sqrt{\mathcal{R}T}}{ScA}. \quad (\text{B.28})$$

Коэффициент теплопроводности для идеального политропного газа ($\varepsilon = c_v T, c_v = \mathcal{R}/(\gamma - 1)$)

$$\kappa(Kn) = \frac{\gamma \mathcal{R} \mu(Kn)}{(\gamma - 1) Pr} \sim \frac{\gamma \mathcal{R}}{(\gamma - 1) Pr} \frac{\rho H\sqrt{\mathcal{R}T}}{A}. \quad (\text{B.29})$$

Коэффициенты переноса близкой структуры для течений в длинных каналах предлагались ранее в [181].

В качестве примера использования полученных таким образом коэффициентов рассмотрим свободномолекулярные течения газа в плоском слое. Выражения для потока массы, силы трения и потока

тепла для этих задач, полученные методами кинетической теории, известны и приведены, например, в [68, 134, 175] для $\sigma = 1$.

Задача диффузии. Рассмотрим два бесконечных резервуара, которые заполнены газом с плотностями ρ_1 и ρ_2 . Пусть резервуары разделены перегородкой, в которой имеется отверстие единичной площади. Пусть длина свободного пробега частиц достаточно велика ($\lambda \gg 1$). Пусть для определенности $\rho_2 > \rho_1$. Температура газа постоянна и равна T . Согласно [134] и [68], диффузионный поток между резервуарами вычисляется как

$$j_D^{kin} = \rho_2 \frac{\sqrt{8\mathcal{R}T}}{\sqrt{\pi}} - \rho_1 \frac{\sqrt{8\mathcal{R}T}}{\sqrt{\pi}} = \frac{\sqrt{8\mathcal{R}T}}{\sqrt{\pi}} (\rho_2 - \rho_1), \quad (\text{B.30})$$

где $\sqrt{8\mathcal{R}T/\pi}$ — средняя скорость частиц, вычисленная на основе максвелловского распределения [182].

Используя коэффициент диффузии в виде (B.28), получим

$$j_D = D \frac{d\rho}{dy} = D \frac{\rho_2 - \rho_1}{H} = \frac{\sqrt{\mathcal{R}T}}{ASc} (\rho_2 - \rho_1). \quad (\text{B.31})$$

Соотношения (B.30) и (B.31) совпадают с точностью до численного коэффициента ~ 1 . В обоих случаях поток массы через отверстие пропорционален разности плотностей и тепловой скорости частиц.

Задача Куэтта. Вычислим силу трения, возникающую между двумя бесконечными параллельными пластинами, расположенными на расстоянии H друг от друга. Пусть одна из пластин неподвижна, а другая движется со скоростью U . Газ, расположенный в слое между пластинами, имеет температуру T и плотность ρ . Согласно [134] для свободномолекулярного течения сила трения между пластинами вычисляется как

$$F_t^{kin} = \frac{\rho U \sqrt{\mathcal{R}T}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{B.32})$$

Приведенное в [65] выражение отличается от (B.32) коэффициентом 2 в числителе. В отличие от случая плотного газа, когда сила трения определяется законом Ньютона $F_t = \mu du/dy \sim \mu U/H$, для свободномолекулярного течения сила трения пропорциональна плотности частиц и не зависит от расстояния между пластинами.

Используя коэффициент вязкости (В.27) на основе формулы Ньютона, получим

$$F_t = \mu \frac{du}{dy} = \frac{\rho U \sqrt{\mathcal{R}T}}{A}. \quad (\text{В.33})$$

Формулы (В.32) и (В.33) совпадают с точностью до численного коэффициента порядка 1.

Задача о теплопередаче. Кинетическая теория дает формулу для потока тепла между двумя бесконечными пластинами, находящимися при температурах T_1 и T_2 ($T_2 > T_1$) для газа с $Kn \gg 1$ в виде [134, 175]

$$q^{kin} = \frac{\gamma + 1}{\sqrt{2\pi}(\gamma - 1)} \frac{\rho \sqrt{\mathcal{R}T_1 T_2}}{(\sqrt{T_1} + \sqrt{T_2})} \mathcal{R}(T_2 - T_1). \quad (\text{В.34})$$

Согласно [68], для данной задачи первый множитель равен $\sqrt{8/\pi}$.

Подставляя коэффициент теплопроводности (В.29) в закон Фурье $q = \varkappa dT/dy = \varkappa(T_2 - T_1)/H$, сразу получаем

$$q = \frac{\gamma}{PrA(\gamma - 1)} \rho \sqrt{\mathcal{R}T} \mathcal{R}(T_2 - T_1). \quad (\text{В.35})$$

Последние два соотношения отличаются способом определения средней температуры между пластинами T как функции от T_1, T_2 и численными коэффициентами порядка единицы.

Таким образом, предложенный вид модификации параметра τ позволяет для модельных задач получить значения диффузионного потока массы, силы трения и потока тепла, соответствующие результатам кинетического подхода для свободномолекулярных течений.

Универсальные формулы для вычисления расхода.

Используем модифицированную формулу для τ при вычислении значений расхода в микроканалах, приведенных в предыдущих разделах работы. При этом учтем, что коэффициент τ входит только в диффузионную составляющую потока массы, которая описывается последним слагаемым в соответствующих формулах.

При определении числа Kn имеется определенный произвол, связанный с выбором характерного масштаба H и определения характерной длины λ . Поэтому в (В.25) удобно ввести калибровочный коэффициент α , в результате чего получим

$$\tau = \frac{\mu}{pSc(1 + \alpha Kn)}. \quad (\text{В.36})$$

Тогда формула для локального расхода в сечении плоского канала (В.8) примет вид

$$J^{xy} = -\frac{H^3}{8\mu_0 \mathcal{R}T_0} \left[\frac{2}{3} p \frac{dp}{dx} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} p \frac{dp}{dx} \frac{\lambda}{H} + \frac{8}{A^2 Sc} p \frac{dp}{dx} \left(\frac{\lambda}{H} \right)^2 \frac{1}{(1 + \alpha \lambda/H)} \right]. \quad (\text{В.37})$$

Нормированное значение расхода примет вид (аналог формулы (В.10))

$$Q_{xy} = \frac{J^{xy}}{J_0^{xy}} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{A}{\sqrt{2}} \left[\frac{Kn^{-1}}{6} + \frac{2 - \sigma}{\sigma} + \frac{2}{A^2 Sc} \frac{Kn}{1 + \alpha Kn} \right]. \quad (\text{В.38})$$

Нормированный расход имеет минимум при числе Кнудсена

$$Kn_m = \frac{A}{2} \sqrt{\frac{Sc}{3}} \left(1 - \alpha \frac{A}{2} \sqrt{\frac{Sc}{3}} \right)^{-1},$$

где величина Kn_m определяется как положительный корень соответствующего квадратного уравнения. При $Sc = 1$, $A = \sqrt{\pi/2}$, $\alpha = 1$, $Kn_m = 0.56$.

Условие существования минимума Кнудсена $Kn_{xy} > 0$ накладывает ограничение на величину α :

$$\alpha < \frac{A\sqrt{Sc}}{2\sqrt{3}} \sim 3.$$

При $Kn \gg 1$ расход в сечении канала будет равен расходу при свободномолекулярном течении, и выражение (В.38) примет вид

$$Q_{xy} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{A}{\sqrt{2}} \left[\frac{2 - \sigma}{\sigma} + \frac{2}{\alpha A^2 Sc} \right] = 1. \quad (\text{В.39})$$

Отсюда можно однозначно определить величину коэффициента α . При $\sigma = 1$

$$\alpha = \frac{6\sqrt{\pi}}{A Sc(8\sqrt{2} - 3A\sqrt{\pi})}.$$

Если $A = \sqrt{\pi/2}$, $Sc = 1$, то $\alpha = 1.82$.

Формула для локального расхода в сечении цилиндрического канала (В.19) примет вид

$$J^{rz} = -\frac{\pi H^4}{8\eta_0 \mathcal{R}T_0} \left[p \frac{dp}{dx} + 4 \frac{2-\sigma}{\sigma} p \frac{dp}{dx} \frac{\lambda}{H} + \frac{8}{A^2 Sc} p \frac{dp}{dx} \left(\frac{\lambda}{H} \right)^2 \frac{1}{(1 + \alpha\lambda/H)} \right]. \quad (\text{В.40})$$

Нормированное значение расхода Q_{rz} примет вид (аналог формулы (В.20))

$$Q_{rz} = \frac{J^{rz}}{J_0^{rz}} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{A}{\sqrt{2}} \left[\frac{Kn^{-1}}{4} + \frac{2-\sigma}{\sigma} + \frac{2}{A^2 Sc} \frac{Kn}{(1 + \alpha Kn)} \right]. \quad (\text{В.41})$$

Нормированный расход имеет минимум при числе Кнудсена

$$Kn_{rz} = \frac{A}{2} \sqrt{\frac{Sc}{2}} \left(1 - \alpha \frac{A}{2} \sqrt{\frac{Sc}{2}} \right)^{-1} \sim 0.72,$$

при $Sc = 1$, $A = \sqrt{\pi/2}$, $\alpha = 1$.

При $Kn \gg 1$ расход в канале будет равен расходу при свободномолекулярном течении. При этом выражение (В.41) совпадает с (В.39) и позволяет определить величину коэффициента α .

Сопоставление выражений (В.38) и (В.41) с результатами [104] приведено на рис. В.3 для $\sigma = 1$, $A = \sqrt{\pi/2}$, $Sc = 1$. Нижняя кривая соответствует уравнениям Навье–Стокса с условием прилипания для скорости, линия 1 — уравнения Навье–Стокса с условиями скольжения для скорости, 2 — КГД модель для $\alpha = 0$, линия 3 соответствует $\alpha = 1$, линия Сер — данные [104]. На рис. В.3 линия 4 соответствует $\alpha = 2$.

Отметим, что при $Kn \rightarrow \infty$ БГК модель для плоского канала имеет асимптотику $Q_{xy} \sim \log Kn$, а для цилиндрического канала

$Q_{rz} \sim const$ [104]. Более простые по способу получения КГД оценки в обоих случаях имеют асимптотику $Q \sim const$ (рис. В.3).

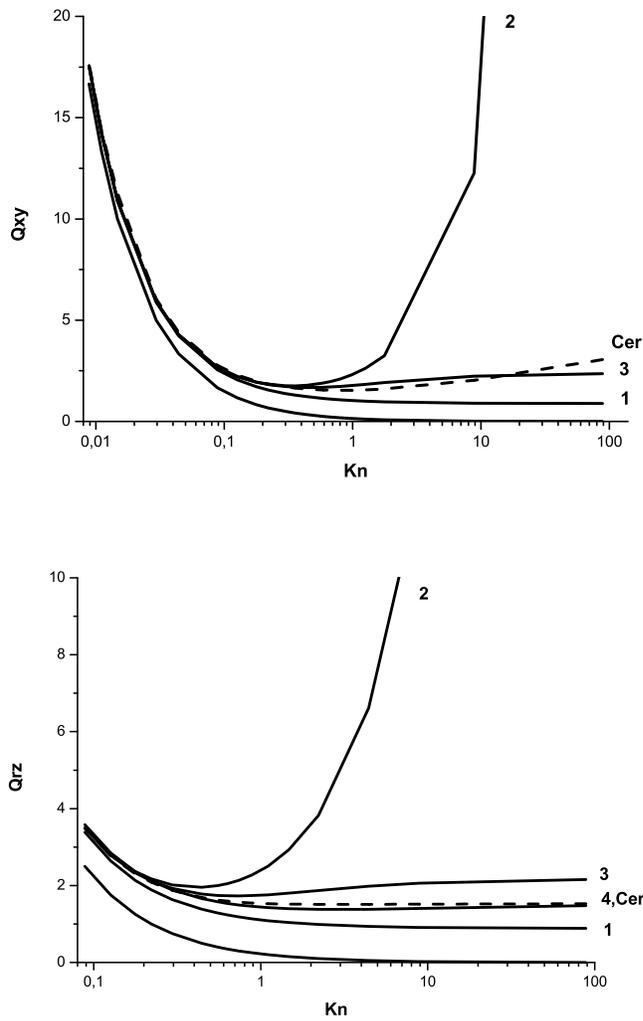


Рис. В.3. Зависимость удельного расхода Q от числа Kn в плоском (сверху) и цилиндрическом (снизу) каналах

Приведенные графики демонстрируют, что для чисел Кнудсена,

не превосходящих $Kn \sim 0.1$, уравнения Навье–Стокса и КГД система с условиями скольжения для скорости хорошо соответствуют расчетам по БГК модели. Для $Kn < 0.5$ КГД модель хорошо соответствует эталонным результатам, но далее, с ростом числа Kn , данные КГД быстро теряют свою точность. При использовании коррекции КГД результаты очень хорошо соответствуют данными БГК приближения во всем диапазоне чисел Кнудсена. При этом коэффициент $\alpha = 1$ для плоского канала, и $\alpha = 2$ для цилиндрического канала.

Приведем интегральные формулы для расхода в зависимости от перепада давлений для плоского и цилиндрического каналов.

Аналог формулы (В.13) примет вид:

$$Q_{xy}^L = D \frac{H^3 p_2^2}{8\mu_0 \mathcal{R} T_0 L} \left[\frac{(p_1/p_2)^2 - 1}{3} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} Kn_2 \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right) + \frac{8}{A^2 Sc} Kn_2^2 \ln \left(\frac{p_1/p_2 + \alpha Kn_2}{1 + \alpha Kn_2} \right) \right], \quad (\text{В.42})$$

где $Kn_2 = \lambda_2/H$. В пределе больших чисел Кнудсена последнее слагаемое становится линейным по числу Kn , и может быть переписано в виде

$$\frac{8Kn_2}{A^2 Sc \alpha} \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right).$$

Аналог формулы (В.23) с поправкой имеет вид

$$Q_{rz}^L = \frac{\pi H^4 p_2^2}{8\eta_0 \mathcal{R} T_0 L} \left[\frac{(p_1/p_2)^2 - 1}{2} + 4 \frac{2 - \sigma}{\sigma} Kn_2 \left(\frac{p_1}{p_2} - 1 \right) + \frac{8}{A^2 Sc} Kn_2^2 \ln \left(\frac{p_1/p_2 + \alpha Kn_2}{1 + \alpha Kn_2} \right) \right]. \quad (\text{В.43})$$

Сравнение с данными эксперимента

Сопоставим полученные формулы для расхода с данными эксперимента, приведенными в [173]. Здесь собраны результаты, полученные в работах [125, 141] и в работах самих авторов [173] для течений гелия и азота в плоских силиконовых микроканалах. Измеренные

значения расхода представлены в безразмерном виде путем нормировки на величину расхода для течения Пуазейля (В.7)

$$J_0 = \frac{H^3 p}{12\mu_0 \mathcal{R} T_0} \frac{dp}{dx} \quad (\text{В.44})$$

и представлены в зависимости от числа Кнудсена в диапазоне $0 < Kn < 1$. Число Кнудсена в [173] определяется как $Kn = \lambda/H$, где длина свободного пробега вычисляется в виде

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi r a^2},$$

где a — диаметр молекулы, k — постоянная Больцмана. Такое определение длины свободного пробега соответствует формуле Берда для газа твердых сфер (В.5). Это можно увидеть, используя формулу Берда (В.5) и коэффициент вязкости в виде [134]

$$\mu = \frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{m_0 \sqrt{2k_B T/m_0}}{(2-\alpha)^\alpha \Gamma(4-\alpha) \sigma_{ref}} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^\alpha,$$

где $\sigma_{ref} = \pi a^2$ — площадь сечения взаимодействия для молекулы, $\alpha = \omega - 1/2$. Для газа твердых сфер $\omega = 1/2$, $\alpha = 0$, гамма-функция $\Gamma(4) = 3! = 6$, $p = \rho \mathcal{R} T$, $\mathcal{R} = k_B/m_0$.

Для сопоставления с данными эксперимента, нормируем расход (В.8) на величину расхода в течении Пуазейля (В.44)

$$S = \frac{J_{xy}}{J_0} = 1 + 6 \frac{2-\sigma}{\sigma} Kn + 12 \frac{1}{A^2 S_c} Kn^2. \quad (\text{В.45})$$

В [173] аналитическая формула для зависимости величины расхода от Kn представлена в виде

$$S = 1 + 6A_1 Kn + 12A_2 Kn^2,$$

где коэффициент $A_1 = (2-\sigma)/\sigma$, а коэффициент A_2 определяется подгонкой под эксперимент и предполагается зависящим от σ и Kn . Коэффициент аккомодации также полагается зависящим от числа

Кнудсена, и для соответствия с экспериментом в ряде случаев выбирается большим единицы $\sigma > 1$. Такие же предположения для вычисления величины расхода делаются в [171].

Формула для расхода (В.45), полученная для КГД моделей, имеет такую же структуру, как и предсказываемая в работах [171, 173]. При этом коэффициент A_2 определяется коэффициентом A в зависимости (В.5) и значением числа Шмидта $A_2 = 1/(A^2 Sc)$, то есть свойствами газа.

Согласно (В.5) значение коэффициента A в формуле Берда (В.5) варьируется в следующих пределах: для максвелловских молекул $\omega = 1$, $A = 0.798$, для азота $\omega = 0.74$, $A = 1.034$, для гелия $\omega = 0.66$, $A = 1.112$, для газа твердых сфер $\omega = 0.5$, $A = 16/(5\sqrt{2\pi}) = 1.28$. Для формулы Чепмена $A = \sqrt{\pi}/2 = 1.252$ — постоянная величина.

Для числа Шмидта Sc имеются приближенные формулы, например, согласно [134], число Шмидта может быть вычислено как $Sc = 5/(7 - 2\omega)$. В соответствии с этим для гелия $Sc = 0.883$, для азота $Sc = 0.905$. В то же время для многих газов число Шмидта измерено в экспериментах с изотопами и известно достаточно точно. В [134] приведены экспериментальные значения, которые составляют для гелия $Sc = 0.757$, для азота $Sc = 0.746$.

На рис. В.4 представлено сопоставление выражения (В.45) с данными эксперимента [173] для азота и гелия. Здесь $A = 16/(5\sqrt{2\pi}) = 1.28$ — вычисляется по формуле Берда (В.5) для газа твердых сфер, $\sigma = 1$, $Sc = 0.88$ и 0.75 .

Видно, что данные КГД достаточно хорошо соответствуют эксперименту вплоть до $Kn \sim 0.4-0.5$. Пунктирная кривая (1) представляет зависимость $(1 + 6Kn)$ — расход, вычисленный в рамках модели Навье–Стокса. Здесь совпадение с экспериментом достигается при $Kn < 0.1$.

При $Kn \sim 0.5$ начинает сказываться зависимость решения от числа Sc . С ростом Sc величина расхода уменьшается и становится ближе к эксперименту. Согласие с экспериментом удастся получить при $Sc > 1$, что не соответствует реальным значениям этой величины. При $Kn > 0.5$ соответствие с экспериментом достигается путем введения поправки в параметр сглаживания (В.25) и подбором коэффициента α . При этом аналог формулы (В.45) имеет вид

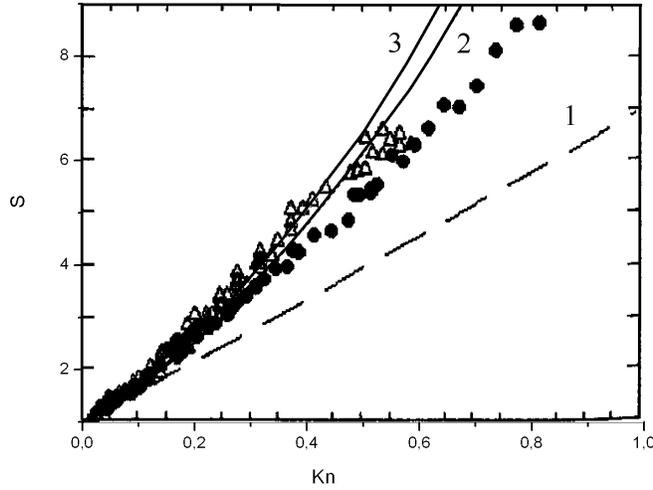


Рис. В.4. Зависимость S от Kn . 1 — модель НС с условиями скольжения. 2 — КГД модель для $Sc = 0.88$, 3 — КГД модель для $Sc = 0.75$. Эксперименты [173] азот — треугольники, гелий — точки

$$S = 1 + 6 \frac{2 - \sigma}{\sigma} Kn + 12 \frac{1}{A^2 Sc} \frac{Kn^2}{(1 + \alpha Kn)}. \quad (\text{В.46})$$

Сопоставление расхода, рассчитанного согласно (В.46) для $\sigma = 1$, $A = 16/(5\sqrt{2\pi}) = 1.28$, $Sc = 0.75$ с данными экспериментов показано на рис. В.5. Видно хорошее соответствие для азота при $\alpha = 1$ и гелия при $\alpha = 2$. Значения расхода, рассчитанные по КГД моделям с модифицированным значением τ , хорошо совпадают с данными экспериментов в плоских изотермических каналах вплоть до $Kn = 1$.

Следует заметить, что недостаточная точность в определении коэффициентов затрудняет проведение аккуратного сопоставления данных расчета и эксперимента. Оказывает влияние на величину расхода и значение коэффициента аккомодации σ , определение ко-

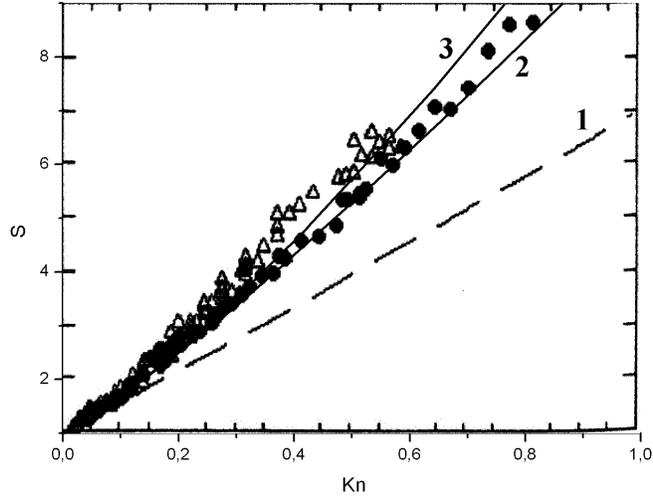


Рис. В.5. График зависимости S от Kn для $Sc = 0.75$. Сравнение с данными эксперимента для азота (треугольники) и гелия (точки) [173]. $\alpha = 2$ соответствует линия 2, $\alpha = 1$ — линия 3. 1 — уравнения НС с условиями скольжения Максвелла

торого представляет собой самостоятельную задачу. В данном рассмотрении мы полагали $\sigma = 1$.

В [163] для вычисления расхода в длинных микроканалах вводится искусственное граничное условие для скорости скольжения

$$u_s = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{Kn}{(1 - bKn)} \lambda \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Здесь коэффициент при производной от скорости зависит от числа Кнудсена и некоторого переменного коэффициента b . Полученные в результате формулы для расхода практически совпадают с КГД формулой (В.46), за исключением того, что вместо величин A и Sc , которые в нашем рассмотрении зависят от сорта газа, в выражениях из [163] входят численные коэффициенты, определяемые из дополнительных предположений. Сопоставление формул [163] с данными кинетических расчетов и экспериментов демонстрируют их

хорошую точность, что опосредованно подтверждает точность полученных нами универсальных формул (В.42), (В.43) и (В.46) для больших чисел Кнудсена.

Заключительные замечания

Приведенные результаты демонстрируют, что основываясь на уравнениях Навье–Стокса с классическими условиями скольжения Максвелла, удастся построить формулы для расхода в длинных микроканалах, справедливые для чисел Кнудсена $Kn < 0.1$.

Полученные в рамках КГД уравнений приближенные формулы для расхода предсказывают эффект Кнудсена и позволяют вычислять величину массового расхода с достаточной точностью вплоть до чисел Кнудсена порядка $Kn \sim 0.5$.

Введение поправки в параметр релаксации КГД модели позволяет получить величину расхода, которая хорошо совпадает с результатами кинетической теории во всем диапазоне чисел Кнудсена.

Для расчета течений газа в неизотермических каналах аналитические выражения получить не удастся, и такие задачи можно решать с использованием упрощенных уравнений газовой динамики. Такими уравнениями являются уравнения Прандтля и семейство так называемых параболизированных уравнений. Уравнения Прандтля для плоских двумерных течений имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} = 0, \quad (\text{В.47})$$

$$\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_x u_y)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u_x}{\partial y} \right), \quad (\text{В.48})$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad (\text{В.49})$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{u_x^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u_x \left(\frac{u_x^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho u_y \left(\frac{u_x^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu u_x \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (\text{В.50})$$

Варианты параболических приближений для уравнений Навье–Стокса и КГД уравнений для стационарных течений можно получить путем отбрасывания слагаемых со вторыми производными, содержащими градиенты по продольному направлению [19,117,175]. Упрощенные уравнения для стационарных течений удастся эффективно решить с помощью маршевых алгоритмов, где в качестве маршевой координаты выбирается координата вдоль основного направления потока. Варианты таких алгоритмов приведены, например, в [5,19] и обзоре [86].

Приложение С

Численное моделирование структуры неподвижной ударной волны

Приведены результаты численного решения задачи о структуре фронта неподвижной ударной волны в аргоне и азоте, полученные на основе КГД уравнений и уравнений Навье–Стокса. Полученные данные уточняют сложившиеся представления о пределах применимости макроскопических уравнений для течений моноатомных и двухатомных разреженных газов. Получено, что профиль плотности ударной волны в аргоне и азоте в диапазоне чисел Маха от 1.5 до 10 оказывается существенно ближе к данным эксперимента, чем считалось ранее. Отличия от эксперимента по ширине профиля составляют порядка 30%, при этом сами профили плотности совпадают с экспериментом достаточно хорошо. При расчетах для двухатомного азота совпадение с экспериментом достигается при учете коэффициента второй вязкости. Показано, что уравнения Навье–Стокса и КГД уравнения в этой задаче дают очень близкие результаты.

Материалы этой главы основаны на работах [48, 55, 145, 148, 154].

Введение

Задача о структуре фронта неподвижной ударной волны является классической задачей, на которой демонстрируется ограниченность модели Навье–Стокса для описания течений разреженных газов. В частности, в многочисленных монографиях, посвященных кинетическим моделям для описания течений разреженного газа ([65, 134, 138], и др.), приводится сравнение ширины ударной волны, вычисленной по модели Навье–Стокса, с данными экспериментов для аргона и азота, наиболее полными из которых являются данные [123]. Среди первых численных расчетов структуры ударной волны, которые цитируются при сопоставлении с экспериментами,

отметим работы [185] и [170]. Полученные данные показывают, что результаты, основанные на системе Навье–Стокса, адекватно описывают ширину ударной волны до чисел Маха менее 2. При больших числах Маха ширина профиля плотности в расчете в полтора-два раза превосходит экспериментальные значения. Этот факт служит постоянным стимулом к усовершенствованию модели Навье–Стокса для описания течений умеренно-разреженного газа, что отражается в большом числе научных публикаций. В качестве примера укажем статью [192] и библиографию к ней.

Описанные выше расчеты структуры ударной волны на основе системы Навье–Стокса выполнены достаточно давно, с использованием целого ряда приближений и при помощи маломощных вычислительных средств. Далее представлены результаты расчетов этой задачи на современном уровне в рамках уравнений Навье–Стокса и КГД уравнений, и с применением различных численных алгоритмов и уточненными константами в зависимости вязкости от температуры. Результаты расчетов сопоставлены между собой и с данными экспериментов для двух газов — аргона, который является монокристаллическим газом и не обладает внутренними степенями свободы, и двухатомного газа азота, который имеет дополнительные степени свободы, связанные с вращательной энергией.

Молекулярные свойства газов выбираются в соответствии с данными [134]. В качестве эталона взяты данные экспериментов [123]. Эти данные получены в ударной трубе, где форму ударной волны с большой точностью можно считать плоской, что позволяет решать задачу в одномерном приближении. Температура перед ударной волной в этих экспериментах порядка $300^0 K$, что дает возможность использовать степенную зависимость коэффициента вязкости от температуры.

В [123] с помощью электронного зонда измерялась плотность в ударной волне. В частности, приведены профили плотности и зависимости обратной ширины ударной волны от числа Маха. Профили температуры и скорости в этих экспериментах не измерялись. Сравнение численных моделей с экспериментом проводилось только для распределений плотности. При сопоставлении численных и экспериментальных данных используется обезразмеривание [123].

Постановка задачи

Математическая модель для решения этой задачи представляет собой систему уравнений газовой динамики для плоского одномерного течения. Эта система приведена в п. 5.7 и имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_m}{\partial x} = 0, \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(j_m u)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \Pi}{\partial x}, \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(j_m H)}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial x} = \frac{\partial(\Pi u)}{\partial x}. \quad (\text{C.3})$$

Здесь ρ — плотность газа, u — скорость, $p = \rho \mathcal{R} T$ — давление, T — температура, γ — показатель адиабаты, \mathcal{R} — газовая постоянная, E и H — полная энергия единицы объема и полная удельная энтальпия, которые вычисляются по формулам: $E = \rho u^2/2 + p/(\gamma - 1)$ и $H = (E + p)/\rho$. Способ вычисления входящих в эту систему величин приведен в п. 5.7. Коэффициенты динамической вязкости μ , теплопроводности \varkappa и релаксационный параметр τ связаны соотношениями:

$$\mu = \mu_\infty \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^\omega, \quad \varkappa = \frac{\gamma \mathcal{R}}{(\gamma - 1) Pr} \mu, \quad \tau = \frac{\mu}{p Sc},$$

где Pr и Sc — числа Прандтля и Шмидта, соответственно.

В качестве единиц измерения x , t , ρ , u , p , T , E , H используются величины l , l/c_∞ , ρ_∞ , c_∞ , $\rho_\infty c_\infty^2$, T_∞ , $\rho_\infty c_\infty^2$, c_∞^2 . Здесь l — линейный размер, c_∞ — скорость звука, ρ_∞ — плотность, T_∞ — температура (три последние величины вычисляются в невозмущенном потоке перед фронтом ударной волны). Характерный размер l в данной задаче выбирается равным средней длине свободного пробега λ_∞ в невозмущенном потоке, которая вычисляется согласно [134] как

$$\lambda = \mu / (\rho \sqrt{2\pi \mathcal{R} T} \cdot \Omega/4), \quad (\text{C.4})$$

где $\Omega(\omega) = 30/((7 - 2\omega)(5 - 2\omega))$. В данной задаче длина свободного пробега, выбранная для обезразмеривания, вычисляется согласно

(С.4) при $\Omega(0.5) = 5/4$ и составляет

$$\lambda_{\infty} = \frac{16}{5} \frac{\mu_{\infty}}{\rho_{\infty} \sqrt{2\pi \mathcal{R} T_{\infty}}}. \quad (\text{С.5})$$

Именно такое определение средней длины свободного пробега применялось для представления результатов в [123] и других работах по изучению структуры ударной волны.

Обезразмеривание не изменяет вида уравнений. Релаксационный параметр и коэффициенты вязкости и теплопроводности в безразмерном виде вычисляются как

$$\mu = \gamma^{\omega-0.5} \frac{5\sqrt{2\pi}}{16} \left(\frac{p}{\rho}\right)^{\omega}, \quad \varkappa = \frac{\mu}{Pr(\gamma-1)}, \quad \tau = \frac{\mu}{p \cdot Sc},$$

причем $p = \rho T / \gamma$. В безразмерном виде число Маха $Ma = u_{\infty}$, скорость звука $c = \sqrt{T}$.

Система уравнений (С.1)–(С.3) дополняется начальными и краевыми условиями. Начальные условия представляют собой разрыв в точке $x = 0$. При этом слева от разрыва $\rho = \rho^{(1)} = 1$, $u = u^{(1)} = Ma$, $p = p^{(1)} = 1/\gamma$, а значения справа от разрыва определяются из условий Рэнкина–Гюгонио:

$$\rho^{(2)} = \rho^{(1)} \frac{(\gamma+1)Ma^2}{2 + (\gamma-1)Ma^2}, \quad u^{(2)} = u^{(1)} \frac{2 + (\gamma-1)Ma^2}{(\gamma+1)Ma^2},$$

$$p^{(2)} = p^{(1)} \frac{2\gamma Ma^2 - \gamma + 1}{\gamma + 1}.$$

Значения на границах области расчета фиксированы и определяются выписанными выше соотношениями.

Для каждого значения числа Маха определяется обратная ширина фронта λ_{∞}/δ , δ — ширина фронта плотности. Безразмерное значение δ вычисляется по максимальному значению производной $\partial\rho/\partial x$:

$$1/\delta = \max \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) \frac{1}{\rho^{(2)} - \rho^{(1)}}.$$

Для численного решения начально-краевой задачи (С.1)–(С.3) определим расчетную область как $-L \leq x \leq L$. Введем равномерную сетку x_i , $i = 0, \dots, N-1$. Используем явную разностную схему с

аппроксимацией всех пространственных производных центральными разностями, а производных по времени - односторонними разностями. Такая схема выписана в п. 5.7. Полученный алгоритм позволяет найти решение как для уравнений Навье–Стокса (при $\tau = 0$), так и для КГД системы. Шаг пространственной сетки h выберем достаточно малым по сравнению с шириной фронта ударной волны, что обеспечивает устойчивость численного алгоритма без введения искусственной вязкости.

Стационарное решение находится методом установления. Критерий прекращения вычислений имеет вид:

$$\max(\hat{\rho} - \rho)/\Delta t < \varepsilon = 10^{-3}.$$

Безразмерное значение обратной ширины фронта волны рассчитывается как

$$1/\delta = \max_i \left(\frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{2h} \right) \frac{1}{\rho^{(2)} - \rho^{(1)}}.$$

Далее приведены результаты расчетов для аргона, полученные с помощью метода установления.

Результаты расчетов для аргона. Метод установления

Значения параметров для аргона (одноатомный газ) следующие: $\gamma = 5/3$, $\omega = 0.81$, $Sc = 0.752$, $Pr = 2/3$. Показатель степени в законе вязкости и число Шмидта взяты из [134].

Для расчётов использовалась КГД система (С.1)–(С.3), а также система Навье–Стокса, которая получается из (С.1)–(С.3) при $\tau = 0$. Число точек сетки $N = 1200$, шаг сетки $h = 0.25$. Шаг по времени определяется как $\Delta t = \beta h / \max(\sqrt{T} + |u|)$, $\beta = 0.001$.

Полученные в расчетах значения обратной ширины фронта приведены на рис. С.1. Там же изображены экспериментальные данные из [123]. Результаты, полученные автором [123], обозначены знаком ∇ .

Из рис. С.1 видно, что во всем диапазоне чисел Маха модели КГД и Навье–Стокса дают очень близкие результаты. Тем самым данные, полученные по обеим моделям, оказываются существенно ближе к данным эксперимента, чем считалось ранее.

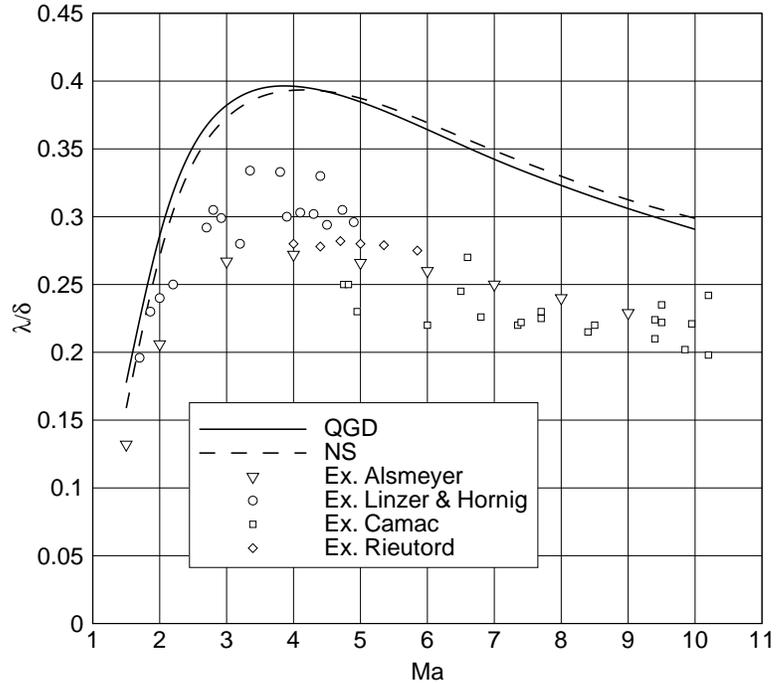


Рис. С.1. Зависимость обратной ширины ударной волны от числа Маха для аргона. QGD–КГД уравнения, NS–уравнения Навье-Стокса.

Близкое соответствие результатов было получено в [53] при расчетах этой задачи для идеализированных молекул моноатомных газов – газов твердых сфер ($\omega = 0.5$) и максвелловских молекул ($\omega = 1$) в сравнении с данными DSMC, и в [145] при сопоставлении КГД расчетов с расчетами по кинетической модели для моноатомного газа с показателем степени в законе вязкости $\omega = 0.72$.

Эти результаты меняют изложенные в ряде публикаций (см., например, [65, 104, 134, 138]) представления, согласно которым при числах Маха больше 2 результаты расчета по уравнениям Навье-Стокса

отличаются от данных эксперимента и кинетических расчетов в 1.5–2 раза .

На рис. С.2 изображены профили плотности, температуры и скорости в ударной волне в аргоне для $Ma = 9$. Профили в ударной волне здесь и далее приведены в нормированном виде, т. е. $f_\rho = (\rho - \rho^{(1)})/(\rho^{(2)} - \rho^{(1)})$, где f_ρ — значение плотности на рисунке, $\rho^{(1)}, \rho^{(2)}$ — значения на границах; аналогично для температуры. Для скорости $f_u = (u - u^{(2)})/(u^{(1)} - u^{(2)})$. Экспериментальные точки для профиля плотности взяты из [123]. Экспериментальные данные для профиля плотности близко совпадают с результатами расчетов по КГД модели, и удовлетворительно с расчетами по модели Навье–Стокса.

Профили скорости и температуры для КГД модели и уравнений Навье–Стокса значительно отличаются друг от друга в области перед ударной волной ($x < -2$) — в КГД модели эти профили более сглажены. Именно такое отличие наблюдается при сравнении расчетов в БГК приближении с расчетами по модели Навье–Стокса [65]. Сопоставления с экспериментом для этих профилей представляет большие трудности и здесь не приводится.

Число временных шагов до достижения сходимости для КГД модели составляет $3 \cdot 10^5 - 3 \cdot 10^6$ для чисел Маха, соответственно, 1.5–10. Для системы уравнений Навье–Стокса число итерационных шагов варьируется в пределах $1 \cdot 10^6 - 2 \cdot 10^7$. То есть вычисления для модели Навье–Стокса требуют в 3–10 раз больше шагов по времени для установления. На рис. С.3 изображены профили плотности в ударной волны в аргоне в увеличенном масштабе. Видно, что алгоритм, основанный на уравнениях Навье–Стокса, в зоне за ударной волной обнаруживает вычислительную неустойчивость: колебания численного решения с периодом, равным шагу пространственной сетки. В то же время КГД алгоритм дает гладкую кривую. Этот эффект объясняет медленную сходимость численного решения для уравнений Навье–Стокса по сравнению с КГД алгоритмом.

Метод установления был исследован на сходимость по сетке. Для этого на основе КГД системы (С.1)–(С.3) был проведен расчёт для аргона для $Ma = 10$, $\beta = 0.0001$, $N = 2400$, шаг сетки был уменьшен вдвое, $h = 0.125$. При этом величины λ/δ отличались в третьем

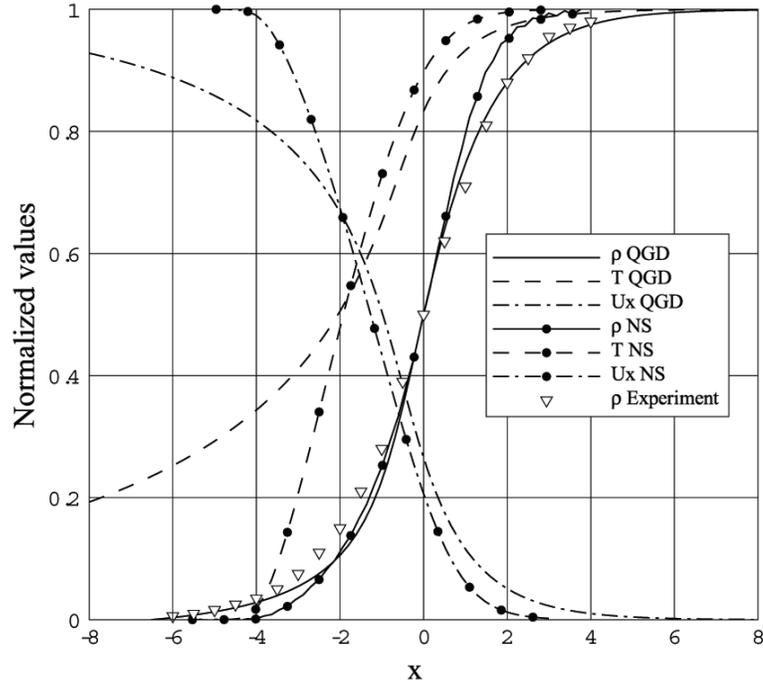


Рис. С.2. Профили плотности, температуры и скорости ударной волны в аргоне для $Ma = 9$

знаке после запятой. Число шагов по времени в этом случае составило $N_t = 6.6415 \cdot 10^7$. Таким образом, можно утверждать, что в приведенных расчетах достигнута сходимость по сетке.

Решение задачи о структуре неподвижной ударной волны в рамках уравнений Навье–Стокса можно получить более эффективным способом, сводя систему уравнений в частных производных к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений. Соответствующий алгоритм изложен в следующем разделе.

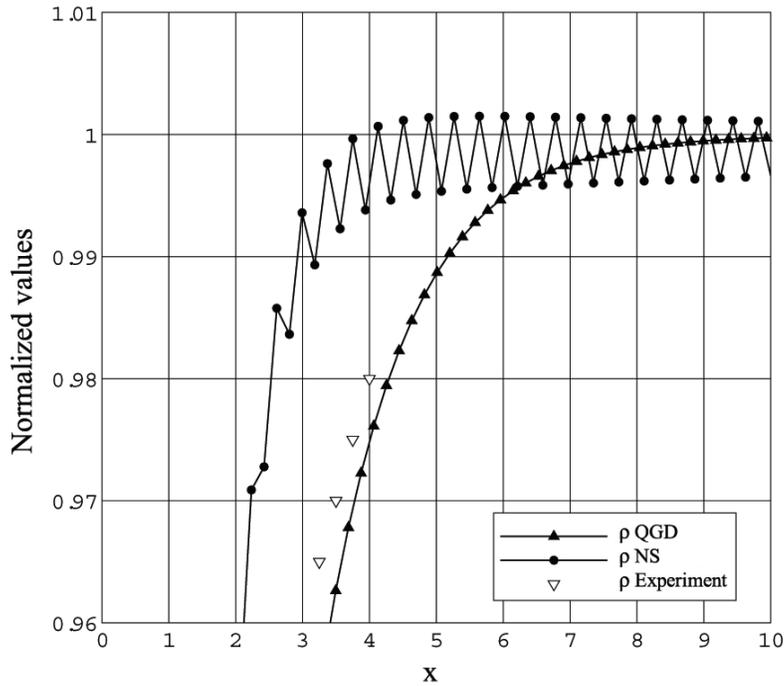


Рис. С.3. Профили плотности в ударной волны в аргоне для $Ma = 9$

Решение стационарной системы уравнений Навье–Стокса

В случае $\tau = 0$, что соответствует системе уравнений Навье–Стокса, для стационарного течения систему (С.1)–(С.3) удастся упростить путем сведения ее к задаче Коши для системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений. Система уравнений Навье–Стокса

для рассматриваемой задачи имеет вид:

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0, \quad (\text{C.6})$$

$$\frac{d(\rho u^2)}{dx} + \frac{dp}{dx} = \frac{d\Pi}{dx}, \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{d(\rho u H)}{dx} + \frac{dq}{dx} = \frac{d(\Pi u)}{dx}. \quad (\text{C.8})$$

Здесь $\Pi = \Pi_{NS} = 4\mu/3(du/dx)$. Интегрируя систему уравнений (C.6)–(C.8) один раз, приходим к системе

$$\begin{aligned} \rho u &= c_0, \\ \rho u^2 + p &= \Pi + c_1, \\ \rho u H + q &= \Pi u + c_2, \end{aligned}$$

где константы c_0, c_1, c_2 определяются из граничных условий. Подставляя выражения для входящих сюда величин, можно свести полученную систему к системе двух уравнений для p и ρ

$$\frac{d\rho}{dx} = \frac{3\rho^2}{4\mu c_0} \left(c_1 - p - \frac{c_0^2}{\rho} \right), \quad (\text{C.9})$$

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d\rho}{dx} \cdot \frac{p}{\rho} - \frac{\mathcal{R}\rho}{\varkappa} \left(c_2 - \frac{4\mu c_0^2}{3\rho^3} \frac{d\rho}{dx} - \frac{c_0^3}{2\rho^2} - \frac{c_0 p}{\rho} \cdot \frac{\gamma}{\gamma - 1} \right). \quad (\text{C.10})$$

Приведем уравнения к безразмерному виду, как это было сделано в предыдущем разделе. При этом уравнения (C.9) и (C.10) принимают вид

$$\frac{d\rho}{dx} = \frac{3\rho^2}{4\mu c_0} \left(c_1 - p - \frac{c_0^2}{\rho} \right), \quad (\text{C.11})$$

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d\rho}{dx} \cdot \frac{p}{\rho} - \frac{\rho}{\varkappa\gamma} \left(c_2 - \frac{4\mu c_0^2}{3\rho^3} \frac{d\rho}{dx} - \frac{c_0^3}{2\rho^2} - \frac{c_0 p}{\rho} \cdot \frac{\gamma}{\gamma - 1} \right). \quad (\text{C.12})$$

Безразмерные коэффициенты μ и \varkappa вычисляются как

$$\mu = \gamma^{\omega-0.5} \frac{5\sqrt{2\pi}}{16} \left(\frac{p}{\rho} \right)^\omega, \quad \varkappa = \frac{\mu}{\text{Pr}(\gamma - 1)}.$$

Задача состоит в нахождении решения уравнений (С.11)–(С.12), удовлетворяющего асимптотическим условиям (условиям Рэнкина–Гюгонио) на бесконечности в виде:

$$\rho(-\infty) = \rho_L = 1, \quad p(-\infty) = p_L = \frac{1}{\gamma}, \quad (\text{С.13})$$

$$\rho(+\infty) = \rho_R = \frac{(\gamma + 1)Ma^2}{2 + (\gamma - 1)Ma^2}, \quad p(+\infty) = p_R = \frac{2\gamma Ma^2 - (\gamma - 1)}{\gamma(\gamma + 1)}. \quad (\text{С.14})$$

Входящие в систему уравнений константы интегрирования выражаются из граничных условий (С.13), (С.13) и соотношений $d\rho/dx = dp/dx = 0$

$$c_0 = Ma, \quad c_1 = Ma^2 + \frac{1}{\gamma}, \quad c_2 = \frac{Ma^3}{2} + \frac{Ma}{\gamma - 1}.$$

Численное решение системы уравнений (С.11)–(С.12) с граничными условиями (С.13)–(С.14) осложнено следующими двумя особенностями:

1. Из уравнений следует, что если функции $\rho(x)$ и $p(x)$ являются решениями задачи, то той же задаче удовлетворяют и функции $\tilde{\rho}(x) = \rho(x+c)$, $\tilde{p}(x) = p(x+c)$, где c — произвольная константа, то есть искомая пара функций не единственная.
2. Граничные условия имеют асимптотический характер.

Поставленную задачу можно решить следующим способом. Наложим в центральной точке $x_C = 0$ дополнительное условие $p(x_C) = (p_R + p_L)/2$. Тем самым обеспечивается единственность решения и появляется одно неасимптотическое условие. Будем считать значение $\rho(x_C) = \rho_C$ параметром задачи. При каждом фиксированном значении этого параметра получаем задачу Коши для системы двух уравнений с двумя начальными условиями в точке x_C . Полученную начальную задачу Коши будем решать методом Рунге–Кутты, а неизвестное значение параметра найдем подбором, исходя из необходимости удовлетворить асимптотическим условиям (С.13)–(С.14).

Для решения задачи воспользуемся следующим алгоритмом.

1. Выбираем достаточно большой отрезок, на котором строится решение $[x_L, x_R]$.
2. Выбираем начальное значение ρ_C , начальный шаг δ и допустимую погрешность Δ .
3. Решаем задачу для текущего ρ_C .
4. Если получено решение с $\rho(x_R) < \rho_R - \Delta$, то увеличиваем ρ_C на δ и переходим на шаг 3.
5. Если получено решение с $\rho(x_R) > \rho_R + \Delta$, то уменьшаем ρ_C на $\delta/2$, уменьшаем δ в два раза и переходим на шаг 3.

На шаге 3 решение строится по формулам Розенброка второго порядка в среде Matlab [186]. Погрешность Δ выбирается равной 0.001, начальный шаг $\delta = (\rho_R - \rho_L)/3$, начальное значение параметра $\rho_C = \rho_L$.

На рисунке С.4 в качестве примера представлены последовательные итерации решения $\rho(x)$ для аргона ($\gamma = 5/3$, $Pr = 2/3$, $\omega = 0.81$) для $Ma = 4$ при различных значениях параметра ρ_C . Все полученные $\rho(x)$ удовлетворяют асимптотическому условию на левой границе, условию же на правой границе удовлетворяет лишь искомое решение.

Из графика также видно, что получаемые решения сильно чувствительны к изменению значения параметра ρ_C , и их отклонение от искомого решения достигает наибольшей величины в правой граничной точке. Точное значение параметра можно определить методом деления пополам. При этом выполнение правого граничного условия с относительной точностью в 10^{-2} достигается при погрешности параметра $\rho_C < 10^{-7}$. Таким образом, мы получаем зависимость $\rho(x)$, отличающуюся от искомой зависимости в точке x_C менее, чем на 10^{-7} . Из (С.11) и (С.12) видно, что такой же исчезающе малой является и погрешность вычисления производных $d\rho/dx$, dp/dx в центре отрезка интегрирования.

Результаты, полученные для аргона, с высокой точностью соответствуют данным, полученным для уравнений Навье–Стокса мето-

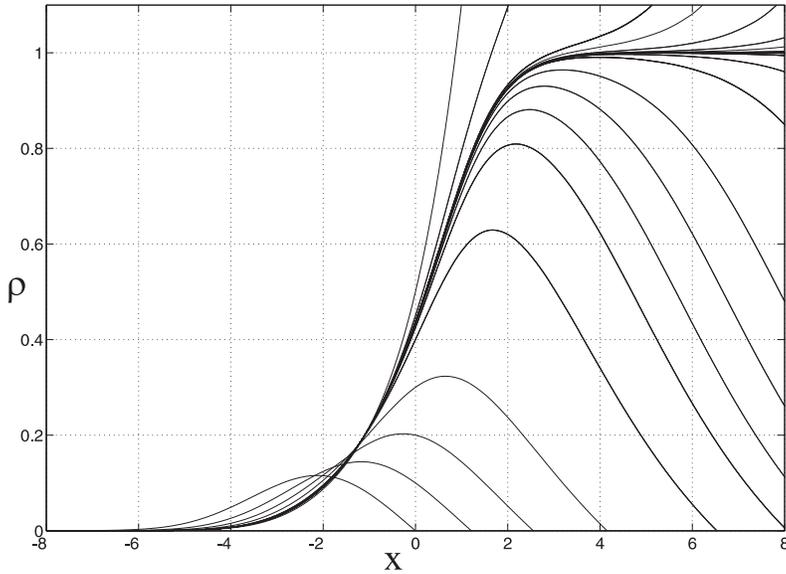


Рис. С.4. Семейство $\rho(x)$, полученное в результате численного решения задачи при разных значениях ρ_C , жирная линия — искомое решение типа ударной волны

дом установления в предыдущем разделе. Это дополнительно подтверждает точность полученных решений.

Для КГД уравнений поставленную задачу удастся свести к системе трех обыкновенных дифференциальных уравнений, решение которой описанным выше методом стрельбы представляет собой существенные трудности.

Результаты расчетов для азота

Азот является двухатомным газом, который обладает двумя вращательными степенями свободы. Значения молекулярных параметров, согласно [134], составляют: $\gamma = 7/5$, $\omega = 0.74$, $Pr = 14/19$, $Sc = 0.746$.

Для уточнения описания течений газов с внутренними степенями свободы при вычислении тензора вязких напряжений следует

учесть вторую, или объемную вязкость. При этом тензор вязких напряжений представляется в виде

$$\Pi = \frac{4}{3}\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \zeta \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (\text{C.15})$$

Как показано в главе 3, коэффициент второй вязкости можно записать в виде:

$$\zeta = \mu \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) B. \quad (\text{C.16})$$

Согласно результатам п. 3.4 безразмерный коэффициент B равен

$$B = \frac{3}{2}(\gamma - 1)A\sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot Z_{rot}, \quad (\text{C.17})$$

$$A = \frac{2(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)}{15\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{C.18})$$

$$Z_{rot} = \frac{Z_{\infty}}{1 + (\pi^{3/2}/2)(T^*/T)^{1/2} + (\pi + \pi^2/4)(T^*/T)}, \quad (\text{C.19})$$

где для азота $Z_{\infty} = 23$, $T^* = 91.5K$ [134]. В безразмерном виде, при температуре газа в невозмущенном потоке $273K$, $T^* = 91.5/273$. Величина $1/Z_{rot}$ представляет собой относительную частоту неупругих соударений.

Далее приведены результаты расчета структуры ударной волны в азоте, полученной на основе системы уравнений Навье–Стокса и КГД уравнений с учетом объемной вязкости вида (C.16).

Система уравнений Навье–Стокса решается путем сведения ее к задаче Коши для системы двух дифференциальных уравнений первого порядка, согласно методу, описанному в предыдущем разделе. При этом уравнения (C.9) и (C.10) записываются с учетом коэффициента объемной вязкости в виде

$$\frac{d\rho}{dx} = \frac{\rho^2}{\left(\frac{4}{3}\mu + \zeta\right) c_0} \left(c_1 - p - \frac{c_0^2}{\rho} \right),$$

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d\rho}{dx} \cdot \frac{p}{\rho} - \frac{R\rho}{\varkappa} \left(c_2 - \left(\frac{4}{3}\mu + \zeta \right) \frac{c_0^2}{\rho^3} \frac{d\rho}{dx} - \frac{c_0^3}{2\rho^2} - \frac{c_0 p}{\rho} \cdot \frac{\gamma}{\gamma - 1} \right).$$

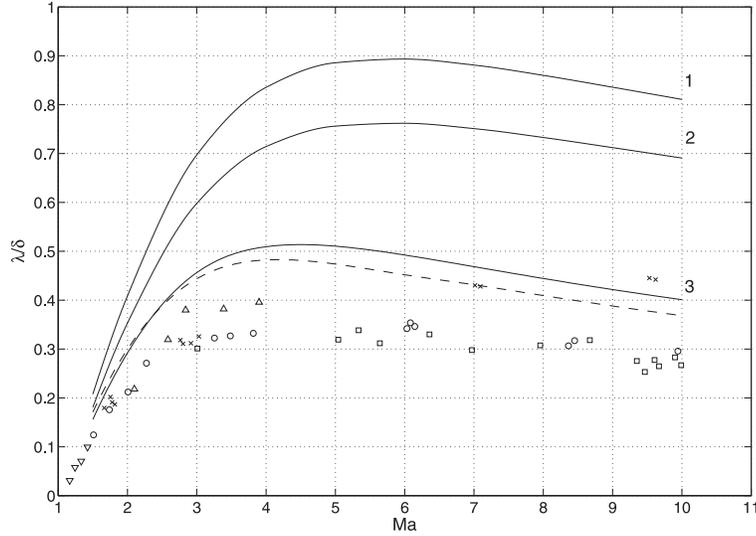


Рис. С.5. Обратная ширина ударной волны λ_∞/δ в сравнении с данными экспериментов для азота (маркеры). Сплошные линии — расчет по уравнениям Навье–Стокса при $B = 0$ (1), $B = 1$ (2), $B(Z_{rot}, T)$ (3). Пунктир — расчет по КГД модели при $B(Z_{rot}, T)$

Вся остальная процедура решения не изменяется.

КГД система решается методом установления, в котором используется сетка с числом узлов $N = 1200$, шаг сетки $h = 0.25$, шаг по времени $\Delta t = \beta h / \max(\sqrt{T} + |u|)$, $\beta = 0.001$.

На рис. С.5 приведены данные для обратной ширины ударной волны в азоте в сопоставлении с данными экспериментов [123], которые обозначены маркерами. Данные экспериментов для азота нормированы на длину свободного пробега для аргона, вычисленную согласно (С.5) и составляющую $\lambda_{Ar} = 1.098 \text{ mm}$ при $p_\infty = 50 \text{ Torr}$, $T_\infty = 300 \text{ K}$. При этих условиях $\lambda_{Ar}/\lambda_{N_2} = \mu_{Ar}/\mu_{N_2} \sqrt{m_{Ar}/m_{N_2}} = 1.060$.

Представлены три варианта расчета — без учета второй вязкости $B = 0$ (линия 1), с учетом второй вязкости в упрощенном виде

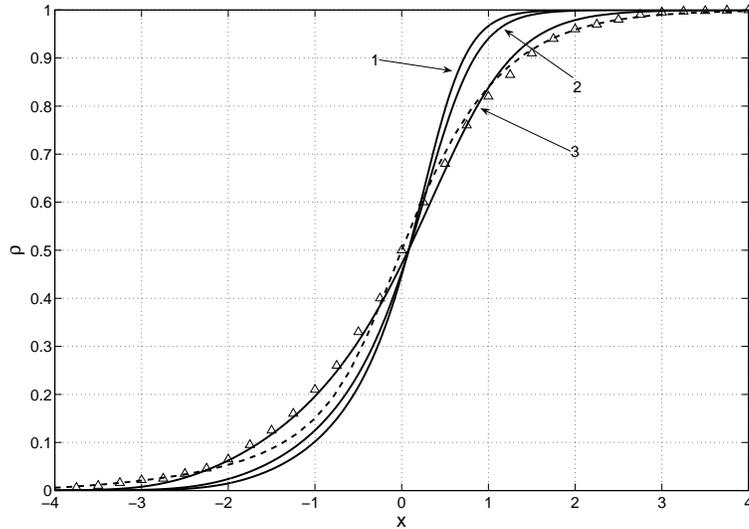


Рис. С.6. Профили плотности в азоте для $Ma = 6.1$ в сравнении с данными экспериментов (маркеры). Сплошные линии — расчет по уравнениям Навье–Стокса при $B = 0$ (1), $B = 1$ (2), $B(Z_{rot}, T)$ (3). Пунктир — расчет по КГД модели при $B(Z_{rot}, T)$

$B = 1$ (2), и для B в виде (С.17) (линия 3). Как следует из зависимости $B(T)$ (п. 3.4), при изменении числа Маха коэффициент B меняется в пределах 0.5–3. Толщина профиля плотности без учета объемной вязкости ($B = 0$) при $Ma > 3$ оказывается меньше, чем в эксперименте, почти в три раза. Учет влияния внутренних степеней свободы путем введения коэффициента объемной вязкости улучшает точность описания профиля плотности, и при выборе B в виде (С.17) существенно приближает численное решение к данным эксперимента с точностью порядка 30%. (рис. С.5).

Для исследования температурной неравновесности в этой задаче можно использовать КГДР модель для газа с двумя вращательными степенями свободы. Соответствующая система уравнений приведена в главе 8.

Ma	аргон	азот		
		$B = 0$	$B = 1$	$B(Z_{rot}, T)$
1.5	0.15877	0.20759	0.18088	0.15591
2	0.27232	0.40876	0.35330	0.29220
3	0.37882	0.69726	0.59801	0.45643
4	0.40028	0.83537	0.71425	0.50934
5	0.39137	0.88571	0.75611	0.51047
6	0.37313	0.89316	0.76189	0.49234
7	0.35307	0.88095	0.75098	0.46854
8	0.33375	0.86001	0.73292	0.44434
9	0.31600	0.83572	0.71209	0.42165
10	0.29996	0.81073	0.69069	0.40100

Таблица С.1. Результаты численного расчета обратной толщины ударной волны, модель Навье–Стокса

На рис. С.6 приведены нормированные профили плотности в ударной волне для $Ma = 6.1$ в сравнении с данными эксперимента. Видно достаточно хорошее совпадение измеренных и рассчитанных значений при учете коэффициента объемной вязкости.

Таким образом для профиля плотности ударной волны в азоте модель Навье–Стокса и КГД уравнения дают близкие результаты. При введении в модель коэффициента объемной вязкости ширина профиля плотности в расчете становится ближе к данным эксперимента, и отличия составляют порядка 30%. В заключение в таблице (С.1) представлены результаты расчетов обратной толщины ударной волны для аргона и азота.

Изложенная выше задача поясняет, что у обеих использованных математических моделей есть свои достоинства и недостатки. Так расчет по модели Навье–Стокса для одномерного стационарного течения целесообразно проводить с использованием метода пристрелки, который быстро сходится и позволяет находить решение с высокой точностью. Метод установления в этом случае сходится очень медленно. Для КГД уравнений, напротив, в силу более сложного вида уравнений метод стрельбы представляет большие сложности, а метод установления сходится достаточно быстро.

Приложение D

Численное моделирование отрывных течений за обратным уступом

В этом приложении приведены результаты численного моделирования дозвукового течения вязкого сжимаемого газа в канале с внезапным расширением. Расчеты выполнены в диапазоне чисел Рейнольдса, включающем ламинарный и турбулентный режимы течения. Получено, что с ростом числа Рейнольдса происходит бифуркация решения, и стационарный ламинарный режим течения сменяется нестационарным турбулентным режимом. Показано, что КГД модель позволяет в рамках единого алгоритма описать оба режима течения.

Приведенные результаты основаны на работах [41, 46, 47].

Введение

Схема расчетной области приведена на рис. D.1. Здесь h и l — высота и длина уступа, H и L — высота и длина канала, соответственно. Течение характеризуется безразмерными числами Рейнольдса и Маха

$$Re = \frac{\rho_0 U_0 h}{\mu_0}, \quad Ma = \frac{U_0}{c_0}, \quad (D.1)$$

где U_0 — средняя скорость газа во входном сечении канала, ρ_0 , μ_0 и c_0 — плотность, коэффициент вязкости и скорость звука в этом же сечении. Будем рассматривать дозвуковые течения, соответствующие $0.01 < Ma < 1$. Длина области возвратного течения L_s , или отрывной зоны, которая формируется при таком течении за уступом, является показательной и чувствительной характеристикой режима течения.

Согласно [126] при числах $Re < 600$ течение является ламинарным¹. В этом случае L_s растет почти линейно с увеличением Re .

¹Число Рейнольдса в [126] вычисляется согласно (D.1) для $D \sim 2h$.

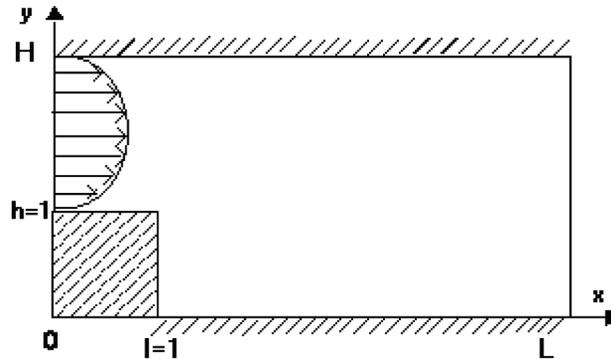


Рис. D.1. Схема течения в канале с внезапным расширением

При числах Рейнольдса $Re > 600$ наблюдается переход от ламинарного течения к турбулентному. При этом длина возвратной зоны уменьшается с ростом Re . В режиме развитого турбулентного течения длина отрывной зоны, отнесенная к высоте уступа L_s/h , практически не зависит от числа Рейнольдса и варьируется по разным оценкам от 5 до 8 в зависимости от геометрии задачи. Особую сложность для численного моделирования представляют собой течения с числами Рейнольдса, соответствующими процессу перехода от ламинарного течения к турбулентному.

Численные модели расчета турбулентных течений, за исключением метода прямого численного моделирования (DNS), основаны на введении в уравнения газовой динамики дополнительной диссипации. При этом молекулярные коэффициенты переноса в уравнениях Навье–Стокса заменяются на некоторые эффективные значения, где эффективная вязкость и теплопроводность вычисляются как сумма молекулярной вязкости и теплопроводности и некоторых добавок. Такой способ введения турбулентной диссипации не меняет общей структуры уравнений гидродинамики. В рамках осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса (RANS модели) эти добавки вычисляются на основе алгебраических или дифференциальных моделей. Расчеты двумерных течений за уступом на основе таких подходов отражены, например, в работах [168,177,191,194] и библио-

графиях к ним. В рамках моделей крупных вихрей (LES) добавка к коэффициентам определяется с использованием моделей подсеточной вязкости, и оказывается связанной с шагом пространственной сетки. Имеются также модели, где роль турбулентной диссипации на масштабах, меньших шага пространственной сетки, выполняют искусственные регуляризаторы [11]. Диссипативный механизм, присущий численным регуляризаторам, играет роль фильтра, который сглаживает подсеточные пульсации газодинамических величин.

Все перечисленные модели включают в себя неизвестные заранее константы, а уравнения, использующие эти модели, как правило, требуют постановки специальных условий на границе, которые тоже теоретически недостаточно проработаны.

В этом разделе для численного моделирования ламинарно-турбулентного перехода используются КГД уравнения без использования традиционных моделей турбулентности. При этом роль турбулентной диссипации играют роль нелинейные диссипативные слагаемые, пропорциональные коэффициенту τ , включенные во все уравнения системы и присутствующие в расчетах как ламинарных, так и турбулентных режимов.

Для медленно меняющихся ламинарных течений эти слагаемые играют роль эффективных регуляризаторов численного алгоритма. Их величина пропорциональна $O(\tau^2)$ и они мало влияют на структуру течения. Для быстро меняющихся турбулентных течений величина КГД добавок имеет порядок $O(\tau)$, и они могут существенно влиять на характер течения. Коэффициент τ связывается с характерным временем, за которое возмущение пересекает разностную ячейку. Такой способ численного моделирования позволяет единообразно описать ламинарный режим течения и переход от ламинарного течения к нестационарному турбулентному режиму при увеличении числа Рейнольдса.

Результаты КГД расчетов сопоставлены с данными эксперимента [126], который для этой задачи считается классическим и до настоящего времени используется для тестирования численных алгоритмов (см., например, [169, 194] и библиографии к ним). В указанном эксперименте воспроизведены условия, при которых течение за уступом с достаточной точностью можно считать двумерным.

Постановка задачи

В соответствии с экспериментом [126], полагаем, что на входе в канал скорость течения представляет собой параболу Пуазейля:

$$u_x(0, y) = -\frac{Re}{2} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \cdot (H - y) \cdot (h - y), \quad u_y(0, y) = 0. \quad (D.2)$$

Из условия, что средняя безразмерная скорость на входе в канал равна единице

$$U_0 = U_x(0) = \int_h^H u_x(y) dy = 1,$$

вычислим градиент давления на входе в канал. В соответствии с [126] $H/h = 2$, и

$$u_x(y) = -6 \cdot (2 - y)(1 - y), \quad \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{12}{Re}. \quad (D.3)$$

Граничные условия на входе (D.3) дополним условиями для плотности $\rho(y) = 1$ и вертикальной компоненты скорости $u_y(y) = 0$.

На выходной границе для дозвукового потока используем граничные условия "сноса" для плотности и компонент скорости, а давление будем полагать постоянным (5.10):

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_y}{\partial x} = 0, \quad p = \frac{1}{\gamma Ma^2}. \quad (D.4)$$

На твердых стенках зададим условия "прилипания" и "непротекания" для скорости совместно с условием адиабатичности для температуры. На верхней и нижней стенках канала эти условия имеют вид

$$u_x = u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y} = 0.$$

В качестве начальных условий выберем условия входного невозмущенного потока в зоне над уступом и состояние неподвижного газа в зоне за уступом.

Численный алгоритм, который представляет собой явную по времени разностную схему с аппроксимацией второго порядка точности

для всех пространственных производных, а также способ обезразмеривания уравнений и введения искусственной диссипации, детально описан в главе 5. В расчетах использовалась равномерная пространственная сетка по обоим направлениям с шагом $h_x = h_y = h_{xy}$. Параметр сглаживания τ определялся в виде

$$\tau = \frac{\mu}{\rho Sc} + \alpha \frac{h_{xy}}{c}, \quad (\text{D.5})$$

где $\mu = \mu_0(T/T_0)^\omega$ – коэффициент динамической вязкости, Sc – число Шмидта, $c = \sqrt{\gamma RT}$ – скорость звука, $0 < \alpha < 1$ – численный коэффициент. Величина h_{xy}/c соответствует времени, за которое возмущение пересекает разностную ячейку. Шаг по времени выбирался из условия устойчивости $\Delta t = \beta h_{xy}/c$, где коэффициент $0 < \beta < 1$ подбирался в процессе вычислений из условия устойчивости счета.

Расчеты проведены для дозвуковых течений воздушного потока при нормальном давлении. Молекулярные параметры составляют $\gamma = 1.4$, $Pr = 0.737$, $\omega = 0.74$, $Sc = 0.746$.

Численные расчеты и обсуждение результатов

Ламинарные течения

Эта серия расчетов проведена для чисел Рейнольдса $Re = 100, 200, 300, 400$ и чисел Маха от $Ma = 0.5$ до 0.01 на равномерных пространственных сетках с шагами $h_{xy} = 0.1$ и 0.05 . Шаги по времени Δt в безразмерных единицах варьировались в интервале 10^{-3} – 10^{-4} . Стационарное решение находилось методом установления. Расчет прекращался при достижении точности $\epsilon \sim 0.01$ – 0.001 .

Для рассмотренных течений градиенты плотности пропорциональны $1/Ma^2$, что позволяет проводить сопоставление решения с расчетами, выполненными в приближении вязкой несжимаемой жидкости (глава 7) и данными экспериментов [126], проведенных при числах Маха ~ 0.01 – 0.001 . Как показывают численные расчеты, длина отрывной зоны практически не зависит от числа Маха при $0.01 < Ma < 0.5$. При дальнейшем уменьшении ($Ma < 0.01$) значительно замедляется скорость сходимости решения, поскольку безразмерное время установления решения $\sim 1/Ma$.

Re	эксперимент [126]	Жидкость (Гл. 7)	Газ, $Ma = 0.1$	
		$h_{xy} = 0.05$	$h_{xy} = 0.1$	$h_{xy} = 0.05$
100	5	5	5.1	5.00
200	8.3	8.2	8.5	8.35
300	11.3	10.1	10.1	10.3
400	14.2	14.8	11.3	12.70

Таблица D.1. Относительная длина отрывной зоны L_s/h при разных Re

В табл. D.1 приведены основные характеристики расчетов ламинарных течений при $Ma = 0.1$, $\alpha = 0.5$. Соответствующие картины установившихся течений приведены на рис. D.2.

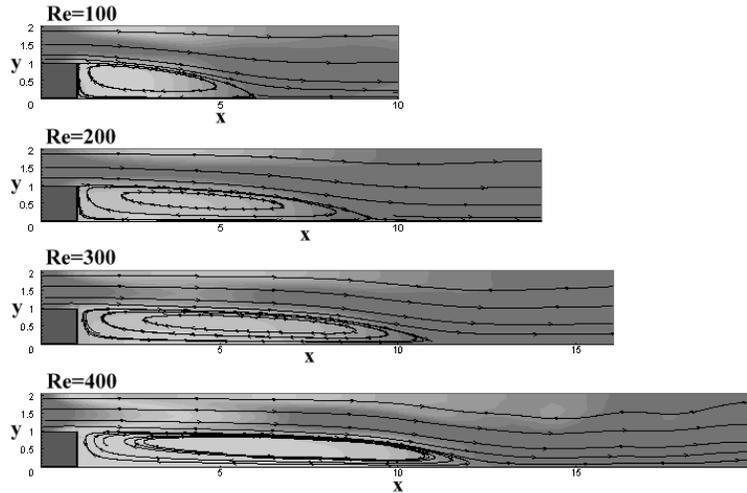


Рис. D.2. Распределение плотности и линии тока для $Re = 100, 200, 300$ и 400 . $Ma = 0.1$

Длина отрывной зоны L_s для всех вариантов расчета хорошо соответствует эталонным результатам для $Re = 100, 200$ и 300 . При уменьшении шага пространственной сетки длина отрывной зоны для $Re = 400$ становится ближе к экспериментальному значению (см. табл. D.1).

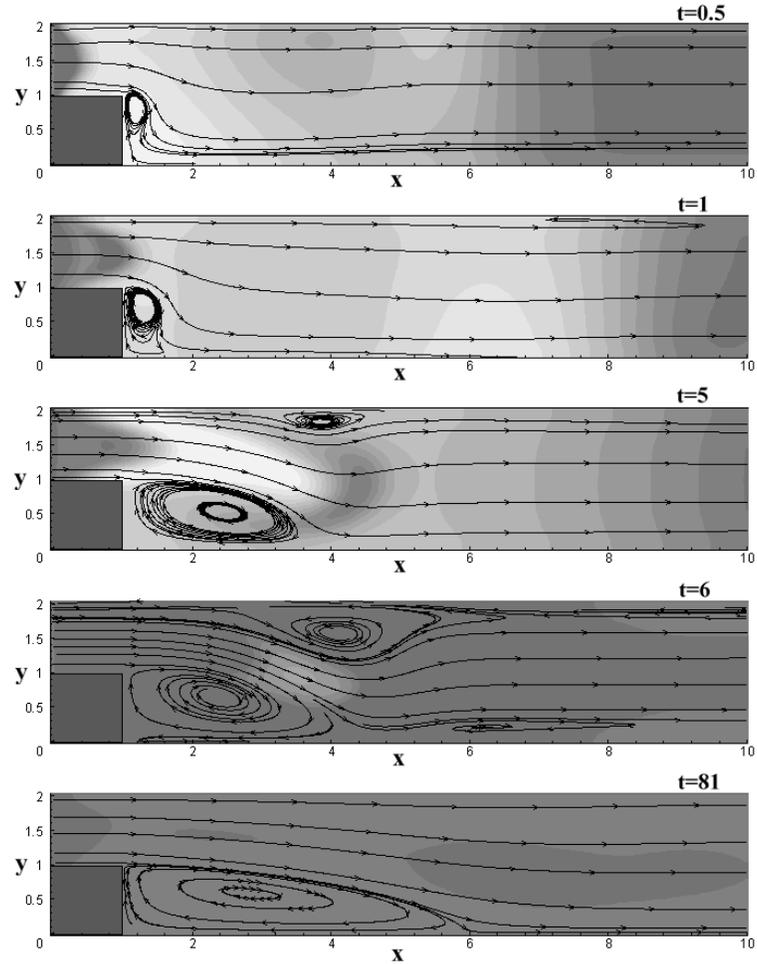


Рис. D.3. Установление дозвукового течения в канале с внезапным расширением, $Re = 100$, $Ma = 0.1$

На рис. D.3 изображен процесс установления течения для варианта $Re = 100$, $\alpha = 0.5$, $Ma = 0.1$. На фоне распределения вертикальной составляющей скорости u_y приведены линии тока для

моментов времени $t = 0.5, 1, 5, 6, 81$. В процессе установления возмущения, возникающие в поле течения, свободно пересекают входную и выходную границы области.

Ламинарно-турбулентный переход

Для ламинарных течений ($Re < 600$) возвратное течение за уступом является стационарным, и длина отрывной зоны хорошо соответствует данным эксперимента и известным расчетам. При $Re > 600$ в поле течения возникают осцилляции, и оно приобретает нестационарный, турбулентный характер. Длина отрывной зоны в этом случае определяется по осредненному по времени полю скорости.

На рис. D.4 представлены эволюции во времени продольной компоненты скорости для $Re = 300$ (слева) и $Re = 600$ (справа) в точке с координатами (8,1). Ламинарное течение при $Re = 300$ в процессе установления выходит на стационарный режим. $Re = 600$ соответствует переходному режиму, для которого видно зарождение осцилляций скорости.

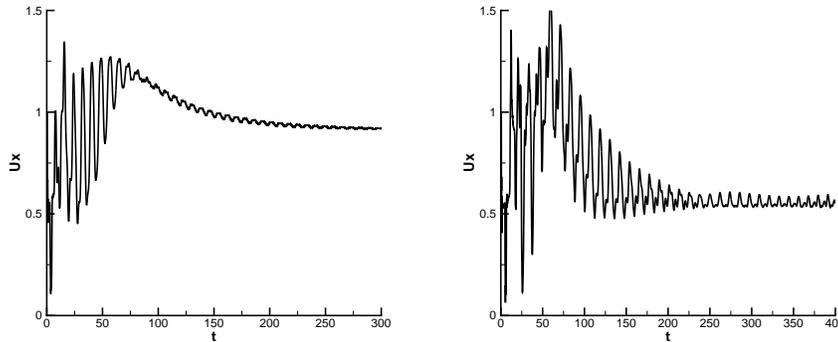


Рис. D.4. Временная эволюция скорости для $Re=300$ (слева) $Re=600$ (справа).

На рис. D.5 приведен фрагмент временной эволюции горизонтальной компоненты скорости для турбулентного режима течения (слева) и его энергетический спектр $E(k)$ в логарифмическом мас-

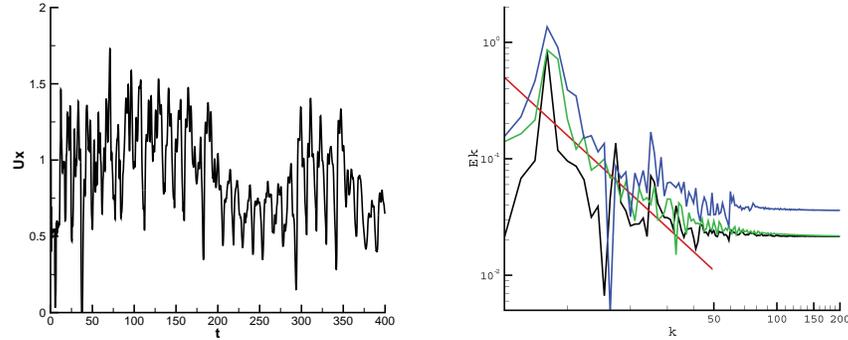


Рис. D.5. Фрагменты временной эволюции скорости $Re = 1000$ (слева) и энергетический спектр x -компоненты скорости течения в логарифмическом масштабе (справа) для $Re = 1000, 3500$ и 4667 .

штабе (справа) для $Re=1000$. Здесь же приведена зависимость $E(k) \sim k^{-5/3}$ (закон Колмогорова–Обухова в спектральной форме [11]). Этот закон диссипации кинетической энергии характерен для развитого турбулентного течения. Этот режим для данной задачи соответствует $Re > 6000$. Полученный в численном эксперименте энергетический спектр в диапазоне частот, который соответствует разрешению пространственной сетки, в целом отвечает классическому закону убывания кинетической энергии E_k с ростом волнового числа k .

Полученные в расчетах турбулентные течения оказываются существенно нестационарными. Для сопоставления размера отрывной зоны с данными экспериментов проводится осреднение поля скоростей на некотором интервале времени. Осредненное течение мало зависит от длины интервала осреднения, если этот интервал выбран достаточно далеко от точки $t = 0$ и его величина существенно больше характерного периода колебаний Δt^* . В данном случае $\Delta t^* \sim 5$, и период осреднения составлял $t_1 = 300 < t < t_2 = 400$. На рис. D.6 и D.7 приведены мгновенная и осредненная картины течения для $Re = 1000$. Обе картины качественно соответствуют

результатам [194], полученным в двумерном расчете для $Re = 3700$ методом прямого численного моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости на основе уравнений Навье–Стокса с использованием разностных аппроксимаций третьего и четвертого порядка точности по времени и пространству.

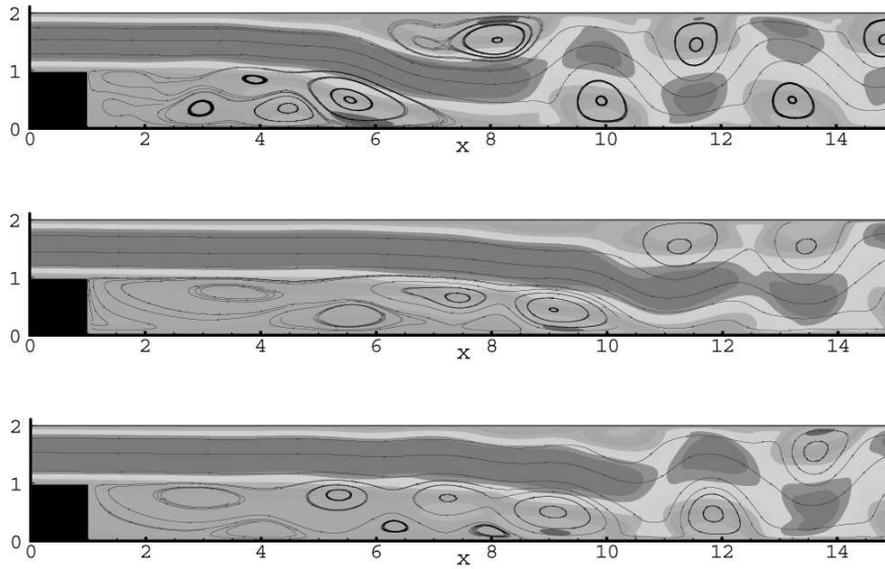


Рис. D.6. Мгновенные линии тока, $Re = 1000, t = 80, t = 360, t = 400$, $\alpha = 0.3$. Цветом отмечена величина компонента скорости u_x

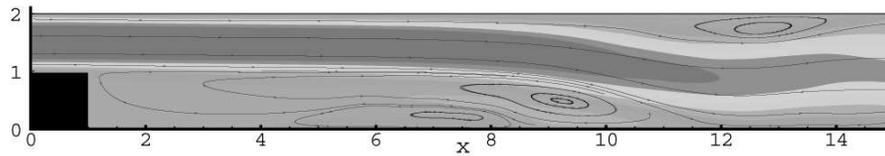


Рис. D.7. Линии тока для осредненного течения, $Re = 1000$; фрагмент

В табл. D.2 собраны основные данные расчетов, выполненных при $Ma = 0.1$ в диапазоне чисел Рейнольдса, включающем ламинар-

ный режим и переход от ламинарного режима течения к развитому турбулентному течению. Здесь T_f – безразмерное время окончания счета. Длина отрывной зоны для турбулентного режима течения L_s мало зависит от шага пространственной сетки при $h_{xy} < 0.1$. Для области перехода $Re \sim 600$ такая зависимость наблюдается.

На рис. D.8 рассчитанные картины течений сопоставлены с экспериментальными данными [126] по длине отрывной зоны L_s для двух значений параметра $\alpha = 0.3$ и 0.5 .

Видно хорошее согласие данных расчета и эксперимента во всем интервале изменения числа Рейнольдса — увеличение размера отрывной зоны с ростом Re для ламинарных режимов, уменьшение L_s при дальнейшем росте Re и формирование максимума $L_s(Re)$, который определяет область перехода между двумя этими режимами. Положение максимума кривой с хорошей точностью согласуется с экспериментом [126]. Немонотонный характер уменьшения L_s в эксперименте при $700 < Re < 3500$ может быть связан с возникновением в течении трехмерных вихревых структур, появление которых в выполненном численном расчете невозможно.

В отличие от большинства традиционных моделей турбулентности, в КГД подходе при вычислении параметра сглаживания τ (см. D.5) имеется только один свободный коэффициент — численный коэффициент $0 < \alpha < 1$. Исследование характера течения и его устойчивости в зависимости от величины коэффициента α проведено, в частности, для $Re = 1000$ в интервале значений $0.05 < \alpha < 0.5$ и представлено на рис. 5.13 в п. 5.11. Максимальный шаг по времени, обеспечивающий устойчивость разностного алгоритма, достигается при $0.2 < \alpha < 0.5$.

Согласно практике расчетов, для ламинарных течений размер отрывной зоны мало зависит от величины α . В расчетах ламинарно-турбулентного перехода некоторая зависимость от α наблюдается. При $\alpha > 0.5$ излишняя диссипация препятствует возникновению нестационарного течения. При малых значениях этого коэффициента временной шаг, обеспечивающий устойчивость метода, становится неоправданно малым. Таким образом, оптимальным значением является $\alpha = 0.3 - 0.5$. Можно ожидать, что с уменьшением шага сетки влияние параметра α на осредненное течение будет умень-

Re	h_{xy}	α	β	Δt	L	L_s [126]	L_s	T_f
100	0.05	0.5	0.2	0.0010	10	5.0	5.0	81
200	0.05	0.5	0.2	0.0010	14	8.5	8.4	204
300	0.05	0.5	0.3	0.0015	20	11.3	10.4	300
400	0.05	0.5	0.2	0.0010	20	14.2	12.7	626
600	0.05	0.3	0.5	0.0025	30	17.0	16.0	400
		0.5	0.3	0.0015			15.5	
700	0.05	0.3	0.5	0.0025	30	15.5	15.7	400
		0.5	0.3	0.0015			17.0	
1000	0.03	0.3	0.5	0.0015	30	13.8	10.6	400
		0.5	0.3	0.0009			11.4	
2000	0.05	0.3	0.5	0.0025	30	9.0	9.1	400
		0.5	0.3	0.0015			10.9	
2800	0.05	0.3	0.5	0.0025	30	6.1	7.2	400
		0.5	0.3	0.0015			8.8	
3500	0.05	0.3	0.5	0.0025	30	8.0	7.8	400
		0.5	0.3	0.0015			9.0	

Таблица D.2. Параметры и результаты расчетов

шаться, так как все большая часть энергетического спектра и вихревых структур будет разрешаться пространственной сеткой.

Близкие результаты по сопоставлению с экспериментом структуры отрывной зоны были получены при моделировании ламинарных и турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости за обратным уступом в рамках квазигидродинамических уравнений [38].

Рассмотренный пример показывает, что КГД модель позволяет проводить численное моделирование ламинарного течения и его переход к турбулентному режиму в рамках одного и того же численного алгоритма, без привлечения дополнительных моделей. Однородность вычислительной модели представляется особенно важной для инженерных приложений, когда момент смены режима течения заранее неизвестен.

Моделирование ламинарно-турбулентного перехода в рамках трехмерной модели представляет несомненный интерес и также может быть выполнено в рамках КГД системы, поскольку описанный алгоритм естественным образом обобщается на трехмерные

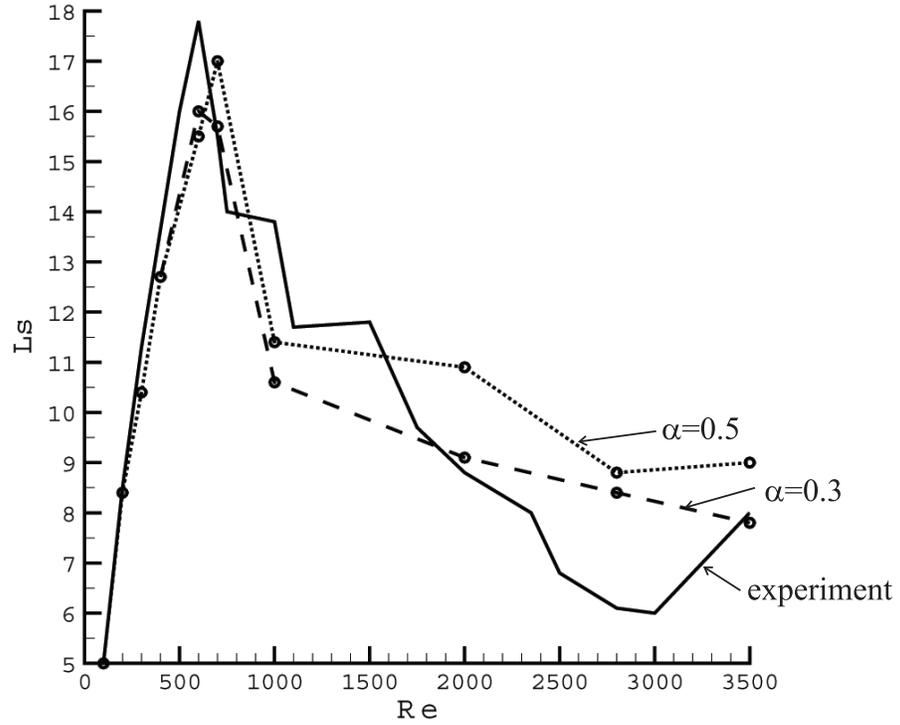


Рис. D.8. Сопоставление рассчитанной длины отрывной зоны для $\alpha = 0.5$ и 0.3 (пунктир, маркерами обозначены проведенные расчеты) с данными эксперимента [126] (сплошная линия)

течения и эффективно адаптируется для проведения расчетов на многопроцессорных вычислительных системах [26, 40].

Литература

- [1] *Абалакин И.В., Жохова А.В., Четверушкин Б.Н.* Кинетически согласованные разностные схемы на нерегулярных сетках // Математическое моделирование, 1997, 9(7), 44–53.
- [2] *Абалакин И.В., Жохова А.В., Четверушкин Б.Н.* Кинетически-согласованный алгоритм для расчета газодинамических течений на треугольных сетках // Математическое моделирование, 1998, 10(4), 51–60.
- [3] *Абрамович Г.Н.* Прикладная газовая динамика. — М.: Наука, 1991. — т. 2.
- [4] *Алексеев Б.В.* Обобщенная бoльцмановская физическая кинетика // Теплофизика высоких температур. — 1997, 35(1), 129–146.
- [5] *Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р.* Вычислительная гидромеханика и теплообмен. В 2-х т. — М.: Мир, 1990. — / Пер. с англ.
- [6] *Антонов А.Н., Елизарова Т.Г., Павлов А.Н., Четверушкин Б.Н.* Математическое моделирование колебательных режимов при обтекании тела с иглой // Математическое моделирование, 1989, 1(2), 13–23.
- [7] *Антонов А.Н., Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н., Шеретов Ю.В.* Численное моделирование пульсационных режимов при сверхзвуковом обтекании полого цилиндра // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1990, 30(4), 548–556.
- [8] *Антонов М.А., Граур И.А., Косарев Л.В., Четверушкин Б.Н.* Численное моделирование пульсаций давления в трехмерных выемках // Математическое моделирование, 1996, 8(5), 76–90.

- [9] *Аристов В.В., Черемисин Ф.Г.* Решение уравнений Эйлера и Навье-Стокса на основе операторного расщепления кинетического уравнения // Доклады АН СССР, 1983, 272(3), 555-559.
- [10] *Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М.* Метод крупных частиц в газовой динамике. — М.: Наука, 1982.
- [11] *Белоцерковский О.М., Опарин А.М.* Численный эксперимент в турбулентности. От порядка к хаосу. — М.: Наука, 2004.
- [12] *Берд Г.А.* Молекулярная газовая динамика. — М.: Наука, 1981.
- [13] Библиотека программ для решения сеточных уравнений / Под ред. Николаева Е. С. — М.: Издательство МГУ, 1984.
- [14] *Вабищевич П.Н., Макаров М.М., Чуданов В.В., Чурбанов А.Г.* Численное моделирование конвективных течений в переменных 'функция тока, вихрь скорости, температура': Препринт 28: М.: ИММ РАН, 1993.
- [15] *Валландер С.В.* Уравнения движения вязкого газа // Доклады АН СССР, 1951, 58(1), 25-27.
- [16] *Ван-Дайк М.* Альбом течений жидкости и газа. — М.: Мир, 1986.
- [17] *Гильманов А.Н.* Метод адаптивных сеток в задачах газовой динамики. — М.: Физматлит, 2000.
- [18] *Гиришфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Издательство иностранной литературы, 1961.
- [19] *Головачев Ю.П.* Численное моделирование течений вязкого газа в ударном слое. — М.: Наука, Физматлит, 1996.
- [20] *Граур И.А.* Алгоритмы численного решения квазигазодинамических уравнений. // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1999, 39(8), 1356-1371.

- [21] *Граур И.А.* Метод расщепления для решения уравнения Эйлера // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2001, 41(10), 1583–1596.
- [22] *Граур И.А.* Алгоритмы численного решения квазигазодинамических уравнений второго порядка точности. // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2002, 42(5), 698-708.
- [23] *Граур И.А.* Разностные схемы расщепления для решения уравнений Эйлера, построенные на основе квазигазодинамических уравнений // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2004, 44(1), 166–178.
- [24] *Граур И.А., Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н.* Моделирование сложных газодинамических течений на основе кинетических алгоритмов // Дифференциальные уравнения, 1986, 22(7), 1173–1180.
- [25] *Граур И.А., Елизарова Т.Г., Четверушкин Б. Н.* Численное моделирование обтекания каверн сверхзвуковым потоком вязкого сжимаемого газа // Инженерно-физический журнал, 1991, 61(4), 570–577.
- [26] *Граур И.А., Елизарова Т.Г., Кудряшова Т.А, Поляков С.В.* Численное исследование струйных течений с использованием многопроцессорных систем. Математическое Моделирование, 2002, 14(6), 51–62.
- [27] *Гуров Д.Б., Елизарова Т.Г., Шеретов Ю.В.* Численное моделирование течений жидкости в каверне на основе квазигидродинамической системы уравнений // Математическое моделирование, 1996, 8(7), 33–44.
- [28] *Дородницын Л.В.* Искусственные граничные условия при численном моделировании дозвуковых течений газа // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2005, 45(7), 1251–1278.

- [29] *Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т.* Современная геометрия. Методы и приложения. — М.: Едиториал, 1998.
- [30] *Елизарова Т.Г.* Кинетически-согласованные разностные схемы газовой динамики. Диссертация на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук, Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша АН СССР, Москва, 1989.
- [31] *Елизарова Т.Г.* О классе кинетически-согласованных разностных схем газовой динамики // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1987, 27(11), 1748–1752.
- [32] *Елизарова Т.Г., Граур И.А.* Макроскопические уравнения для бинарной смеси газов. Препринт. — М.: Макс Пресс, 2000.
- [33] *Елизарова Т.Г., Ершов Д.Г.* Вычисление расхода для течения газа в микроканале // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2007, 1, 21–24.
- [34] *Елизарова Т.Г., Жериков А.В., Калачинская И.С., Шеретов Ю.В.* Численное моделирование конвективных течений электропроводной жидкости в каверне // Прикладная математика и информатика, МГУ, Труды факультета Вычислительной математики и кибернетики / Под ред. Д.П.Костомаров, В.И.Дмитриев. — М.: Макс Пресс, 2003. — 13. — с. 63–81.
- [35] *Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Ключникова А.В., Шеретов Ю.В.* Использование квазигидродинамической системы уравнений для моделирования течений теплопроводной жидкости // IV Международная конференция 'Математика, компьютер, образование'. — 1997. — с. 108–115.
- [36] *Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Ключникова А.В., Шеретов Ю.В.* Использование квазигидродинамических уравнений для моделирования тепловой конвекции при малых числах Прандтля // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1998, 38(10), 1732–1742.

- [37] *Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Ключникова А.В., Шеретов Ю.В.* Расчет конвективных течений на основе квазигидродинамических уравнений // Проблемы математической физики / Под ред. Д.П.Костомаров, В.И.Дмитриев. — М.: Диалог МГУ, 1998. — с. 193–208.
- [38] *Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Шеретов Ю.В., Шильников Е.В.* Численное моделирование отрывных течений за обратным уступом // Прикладная математика и информатика, Труды факультета Вычислительной математики и кибернетики. — М.: Макс Пресс, 2003. — т. 14, с. 85–118.
- [39] *Елизарова Т.Г., Калачинская И.С., Шеретов Ю.В., Широков И.А.* Численное моделирование течений электропроводной жидкости во внешнем магнитном поле // Журнал радиотехника и электроника, 2005, 50(2), 245–251.
- [40] *Елизарова Т.Г., Милукова О.Ю.* Численное моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости в кубической каверне // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2003, 43(3), 453–466.
- [41] *Елизарова Т.Г., Никольский П.Н.* Численное моделирование ламинарно-турбулентного перехода в течении за обратным ступом // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2007, 3, 21–24.
- [42] *Елизарова Т.Г., Серегин В.В.* Аппроксимация квазигазодинамических уравнений на треугольных сетках // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2005, 4, 15–18.
- [43] *Елизарова Т.Г., Серегин В.В.* Квазигазодинамические уравнения и аппроксимационная формула для объемной вязкости // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2006, 1, 15–18.
- [44] *Елизарова Т.Г., Соколова М.Е., Шеретов Ю.В.* Квазигазодинамические уравнения и численное моделирование течений

- вязкого газа // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2005, 45(3), 544–555.
- [45] *Елизарова Т.Г., Соколова М.Е.* Диссипативные слагаемые в квазигазодинамических уравнениях и их влияние на поле течения в ударной волне // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2001, 5, 19–22.
- [46] *Елизарова Т.Г., Соколова М.Е.* Численный алгоритм расчета сверхзвуковых течений, основанный на квазигазодинамических уравнениях // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2004, 1, 10–15.
- [47] *Елизарова Т.Г., Соколова М.Е.* Численный алгоритм расчета дозвуковых течений вязкого сжимаемого газа // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2005, 3, 6–10.
- [48] *Елизарова Т.Г., Хохлов А.А.* Численное моделирование структуры ударной волны путем решения стационарных уравнений Навье-Стокса // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2006, 3, 28–32.
- [49] *Елизарова Т.Г., Хохлов А.А.* Квазигазодинамические уравнения для течений газа с внешними источниками тепла // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2007, 3, 10–13.
- [50] *Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н.* Об одном вычислительном алгоритме для расчета газодинамических течений // Доклады АН СССР, 1984, 279(1), 80–83.
- [51] *Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н.* Кинетический алгоритм для расчета газодинамических течений // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1985, 25(10), 1526–1533.
- [52] *Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н.* Использование кинетических моделей для расчета газодинамических течений // Мате-

- матическое моделирование: процессы в нелинейных средах. — М.: Наука, 1986. — с. 261–278.
- [53] *Елизарова Т.Г., Шеретов Ю.В.* Теоретическое и численное исследование квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2001, 41(2), 239–255.
- [54] *Елизарова Т.Г., Широков И.А.* Макроскопическая модель газа с поступательно - вращательной неравновесностью // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1999, 39(1), 141–153.
- [55] *Елизарова Т.Г., Широков И.А.* Численное моделирование ударной волны в аргоне, гелии и азоте // Прикладная математика и информатика. МГУ, Труды факультета Вычислительной математики и кибернетики / Под ред. Д.П.Костомаров, В.И.Дмитриев. — М.: Макс Пресс, 2004. — 18. — с. 66–82.
- [56] *Ермаков С.М.* Метод Монте-Карло и смежные вопросы. — М.: Наука, 1975.
- [57] *Жданов В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. — М.: Наука, 1989.
- [58] *Жданов В.М.* Процессы переноса и релаксации в многокомпонентной плазме. — М.: Мир, Энергоиздат, 1982.
- [59] *Жмакин А.И., Фурсенко А.А.* Об одной монотонной разностной схеме сквозного счета // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1980, 20(4), 1021–1031.
- [60] *Ильгамов М.А., Гильманов А.Н.* Неотражающие условия на границах расчетной области. — М.: Физматлит, 2003.
- [61] *Исаев С.А., Баранов П.А., Кудрявцев Н.А., Лысенко Д.А., Усачов А.Е.* Сравнительный анализ пакетов $vr2/3$ и *fluent* при расчете нестационарного обтекания кругового цилиндра с использованием моделей турбулентности Спаларта-Аллмареса и

- Ментера // Инженерно-физический журнал, 2005, 78(6), 148–162.
- [62] *Климонтович Ю.Л.* Статистическая физика. — М.: Наука, 1982.
- [63] *Климонтович Ю.Л.* Турбулентное движение и структура хаоса. — М.: Наука, 1990.
- [64] *Климонтович Ю.Л.* Статистическая теория открытых систем. — М.: ЯНУС, 1995.
- [65] *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
- [66] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. — М.: Наука, 1977.
- [67] *Косефф Дж. Р., Стрит Р.П.* О влиянии торцевых стенок на течение в каверне с движущейся крышкой // Теоретические основы инженерных расчетов, 1984, 106(4), 299–308. Пер. с англ.
- [68] *Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А.* Прикладная динамика разреженного газа. — М.: Машиностроение, 1977.
- [69] *Кудрявцев Л.Д.* Курс математического анализа. — М.: Высшая школа, 1981.
- [70] *Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2001.
- [71] *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Механика. — М.: Наука, 1965.
- [72] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Гидродинамика. — М.: Наука, 1986.
- [73] *Ланфорд О.Э., Гринберг У., Полевчак Я. и др.* Неравновесные явления: уравнение Больцмана. (пер. с англ. А.В.Лукшин) — М.: Мир, 1986.

- [74] *Лапин Ю.В., Стрелец М.Х.* Внутренние течения газовых смесей. — М.: Наука, 1989.
- [75] *Лапин Ю.В.* Турбулентный пограничный слой в сверхзвуковых потоках газа. — М.: Наука, 1982.
- [76] *Ларина И.Н., Рыков В.А.* Подобие гиперзвуковых течений разреженного газа около тупых тел // *Механика жидкости и газа*, 1981, 2, 130–135.
- [77] *Ларина И.Н., Рыков В.А.* Расчет обтекания кругового цилиндра газом при малых числах Кнудсена // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 2005, 45(7), 1304–1320.
- [78] *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. — М.: Физматлит, 2002.
- [79] *Лойцянский Л.Г.* Механика жидкости и газа. — М.: Наука, 1987.
- [80] *Паули В.* Теория относительности. — М.: Наука, 1983.
- [81] *Позняк Э.Г., Шликин Е.В.* Дифференциальная геометрия. Первое знакомство. — М.: Изд-во МГУ, 1990.
- [82] *Попов И.В., Поляков С.В.* Построение адаптивных нерегулярных треугольных сеток для двумерных многосвязных невыпуклых областей // *Математическое моделирование*, 2002, 14(6), 25.
- [83] *Препарата Ф., Шеймос М.* Вычислительная геометрия: введение. — М.: Мир, 1989. — Пер. с англ.
- [84] *Пушкина И.Г., Тишкин В.Ф.* Адаптивные расчетные сетки из ячеек Дирихле для решения задач математической физики: методика построения, примеры // *Математическое моделирование*, 2000, 12(3), 97.

- [85] *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. — Ленинград: Химия, 1982.
- [86] *Рогов Б.В., Соколова И.А.* Обзор моделей вязких внутренних течений // Математическое моделирование, 2002, 14(1), 41–72.
- [87] *Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н.* Системы квазилинейных уравнений. — М.: Наука, 1978.
- [88] *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. — М.: Мир, 1970.
- [89] *Рыков В.А., Скобелкин В.Н.* О макроскопическом описании движений газа с вращательными степенями свободы // Механика жидкости и газа, 1978, 1, 180–183.
- [90] *Рыков В.А.* Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // Механика жидкости и газа, — 1975, 6, 107–115.
- [91] *Самарский А.А., Попов Ю.П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. — М.: Наука, 1980.
- [92] *Самарский А.А.* Теория разностных схем. — М.: Наука, 1989.
- [93] *Седов Л.И.* Механика сплошной среды. — М.: Наука, 1976. — т.1,2.
- [94] *Семенов М.В., Шеретов Ю.В.* Численное моделирование течений жидкости в окрестности шара // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 2005. — 107–123.
- [95] *Семенов М.В., Шеретов Ю.В.* Численное моделирование дозвуковых осесимметричных течений газа вблизи шара // Вестник Тверского государственного университета, 2006, 4, 78–97.
- [96] *Слезкин Н.А.* О дифференциальных уравнениях движения газа // Доклады АН СССР, 1951, 77(2), 205–208.
- [97] *Страйк Д.Ж.* Краткий очерк истории математики. — М.: Наука, 1984.

- [98] *Стулов В.П.* Лекции по газовой динамике. — М.: Физматлит, 2004.
- [99] *Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И.* Релаксационные процессы в ударных волнах. — М.: Наука, 1965.
- [100] *Тихомиров Д.В.* Тензорно-индексное представление квазигазодинамической системы и разностная аппроксимация // Вестник Московского университета, серия 3. Физика. Астрономия, 2006, 1, 31–35.
- [101] *Фортков В.Е., Левин В.К., Савин Г.И., Забродин А.В., Каратанов В.В., Елизаров Г.С., Корнеев В.В., Шабанов Б.М.* Суперкомпьютер МВС - 1000М и перспективы его применения // Информационно-аналитический журнал “Наука и промышленность России”, 2001, 55(11), 49–52.
- [102] *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. — М.: Издательство иностранной литературы, 1960.
- [103] *Черчиньяни К.* Математические методы в кинетической теории газов. — М.: Мир, 1973.
- [104] *Черчиньяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана. — М.: Мир, 1978.
- [105] *Четверушкин Б.Н.* Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике. — М.: МГУ, 1999.
- [106] *Четверушкин Б.Н.* Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. — М.: Макс Пресс, 2004.
- [107] *Чэсен П.* Отрывные течения. М.: Мир, 1973, Т.1-3.
- [108] *Шахов Е.М.* Метод исследования движений разреженного газа. — М.: Наука, 1974.
- [109] *Шеретов В.Г., Щербакова С.Ю.* Российской математике - триста лет. Историко-математические очерки. — Тверь: Тверской государственный университет, 2000.

- [110] *Шеретов Ю.В.* Об одной новой математической модели в гидродинамике // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 1996. — 124–134.
- [111] *Шеретов Ю.В.* Квазигидродинамические уравнения как модель течений сжимаемой вязкой теплопроводной среды // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 1997. — 127–155.
- [112] *Шеретов Ю.В.* О точных решениях квазигидродинамических уравнений // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 1998. — 213–241.
- [113] *Шеретов Ю.В.* Разностные схемы гидродинамики в эйлеровых и лагранжевых координатах на основе квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 1999. — 184–208.
- [114] *Шеретов Ю.В.* Математическое моделирование течений жидкости и газа на основе квазигидродинамических и квазигазодинамических уравнений. — Тверь: Тверской государственный университет, 2000.
- [115] *Шеретов Ю.В.* Некоторые свойства квазигазодинамических уравнений // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 2000. — 134–149.
- [116] *Шеретов Ю.В.* О разностных аппроксимациях квазигазодинамических уравнений для осесимметричных течений // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 2001. — 191–207.

- [117] *Шеретов Ю.В.* Параболизованные квазигидродинамические уравнения // Вестник Тверского государственного университета, 2003, 2, 79–83.
- [118] *Шеретов Ю.В.* Уравнения гидродинамики и преобразования Галилея // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 2003. — 187–198.
- [119] *Шеретов Ю.В.* Анализ устойчивости модифицированной кинетически-согласованной схемы в акустическом приближении // Применение функционального анализа в теории приближений. — Тверь: Тверской государственный университет, 2004. — 147–160.
- [120] *Шеретов Ю.В.* Математические модели гидродинамики. Учебное пособие. — Тверь: Тверской государственный университет, 2004.
- [121] *Широков И.А.* Решение уравнения Пуассона на многопроцессорной системе в задачах моделирования течений несжимаемой жидкости // Дифференциальные уравнения, 2003, 39(7), 993–1000.
- [122] *Alexeev B.V.* Generalized Boltzmann physical kinetics. — Elsevier, Amsterdam, 2004.
- [123] *Alsmeyer H.* Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // Journal of Fluid Mechanics, 1976, 74(3), 479–513.
- [124] *Aristov V.V.* Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001.
- [125] *Arkilic E.B., Bruer K.S., Schmidt M.A.* Massflow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels // Journal of Fluid Mechanics, 2001, 437, 29–43.

- [126] *Armaly B.F., Durst F., Pereira J.C.F., Schonung B.* Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow // Journal of Fluid Mechanics, 1983, 127, 473–496.
- [127] *Aubert C., Colin S.* High order boundary conditions for gaseous flows in rectangular microchannels // Microscale Thermophysical engineering, 2001, 5(1), 41–54.
- [128] *Bassanini P., Cercigniani C., Sernagiotto F.* Flow of a rarefied gas in a tube of annular section // Physics of Fluids, 1966, 9(6), 1174–1178.
- [129] *Behnia M., de Vahl Davis G.* Fine mesh solutions using streamfunction - vorticity formulation // Workshop: "Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids". Notes on Numerical Fluid Dynamic, 1990, 27, 11–18.
- [130] *Behnia M.* Synthesis of finite difference methods // Workshop: "Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids". Notes on Numerical Fluid Dynamic, 1990, 27, 265–272.
- [131] *Ben Hadid H., Roux B.* Buoyancy-driven oscillatory flows in shallow cavities filled with a low-Prandtl number fluid // Workshop: "Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids". Notes on Numerical Fluid Dynamic, 1990, 27, 25–34.
- [132] *Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M.* Model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one component systems // Physical Review, 1954, 94, 511–524.
- [133] *Bird G.A.* Breakdown of translational and rotational equilibrium in gaseous expansions // AIAA Journal, 1970, 8(11), 1988–2003.
- [134] *Bird G.A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. — Oxford: Clarendon press, 1994.
- [135] *Biringen S., Danabasoglu G., Eastman T.K.* A finite-difference method with direct solvers for thermally-driven cavity problems //

- Workshop: "Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids". Notes on Numerical Fluid Dynamic, 1990, 27, 35–42.
- [136] *Cercignani C., Lampis M., Lorenzani S.* Variational approach to gas flows in microchannels // *Physics of Fluids*, 2004, 16(9), 3426–3437.
- [137] *Cercignani C., Sernagiotto F.* Cylindrical Poiseuille flow of a rarefied gas // *Physics of Fluids*, 1966, 9(1), 40–44.
- [138] *Cercignani C.* Rarefied Gas Dynamics. From basic concepts to actual calculations. — Cambridge University Press, 2000.
- [139] *Chirokov I.A., Elizarova T.G., Lengrand J.C.* Numerical study of shock wave structure based on quasigasdynamic equations with rotational nonequilibrium // 21th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Marseille, France, July 26-30, 1998 / Ed. by R.Brun et al., v. 1, Cepadues, Toulouse, France, 1999, 175–182.
- [140] *Chpoun A., Elizarova T.G., Graur I.A., Lengrand J.C.* Simulation of the rarefied gas flow around a perpendicular disk // *European Journal of Mechanics (B/Fluids)*, 2005, 24, 457–467.
- [141] *Colin S.* Rarefaction and compressibility effects on steady and transient gas flows in microchannels. review // *Microfluidics and Nanofluidics*. — Springer-Verlag, 2004.
<http://springerlink.metapress.com/media/>
- [142] *Deissler R.G.* An analysis of second-order slip flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases // *International Journal of Heat Mass Transfer*, 1964, 7, 681–694.
- [143] *De Vahl Davis G., Jones I.P.* Natural convection in a square cavity: a comparison exercise // *International Journal on Numerical Methanics in Fluids*, 1983, 3, 227–248.
- [144] *Deshpande S.M.* Kinetic theory based on new upwind methods for inviscid compressible flows. // *AIAA*, 1986, Paper 86–0275.

- [145] *Elizarova T.G., Chetverushkin B.N., Sheretov Yu.V.* Quasi-gasdynamic equations and computer simulation of viscous gas flows // Lecture Notes in Physics, No 414. Proceedings of 13th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Roma. — Springer-Verlag, 1992. — 421–425.
- [146] *Elizarova T.G., Graur I.A., Lengrand J.C., Chpoun A.* Rarefied gas flow simulation based on quasigasdynamic equations // AIAA Journal, 1995, 33(12), 2316–2324.
- [147] *Elizarova T.G., Graur I.A., Lengrand J.-C.* Two-fluid computational model for a binary gas mixture // European Journal of Mechanics (B/Fluids), 2001, 3, 351–369.
- [148] *Elizarova T.G., Graur I.A., Sheretov Yu.V.* Quasi-gasdynamic equations and computer simulation of rarefied gas flows // Proceedings of the 19th International Symposium on Shock Waves, Marseille, France, July 26-30, v. 4. — Springer, 1993. — 45–50.
- [149] *Elizarova T.G., Kalachinskaya I.S., Sheretov Yu.V.* Separating flow behind a back-step. part I. Quasi-hydrodynamic equations and computation of a laminar flow. <http://arXiv.org/abs/math-ph/0407053>.
- [150] *Elizarova T.G., Lengrand J.C., Graur I.A.* Gradient expansions for distribution functions and derivation of moment equations // 21th International Symposium on RGD, Marseille, France, July 26–30, 1998 / Ed. by R. Brun. — Toulouse, France, Cepadues, 1999. — 119–126.
- [151] *Elizarova T.G., Miliukova O.Yu.* Parallel algorithm for numerical simulation of 3D incompressible flows // Parallel computational fluid dynamics. Advanced numerical methods software and Applications. Proceedings of the Parallel CFD 2003 Conf. Moscow, Russia. May 13-15, 2003 / Ed. by B. Chetverushkin et al. — Elsevier, 2004. — 65–72.
- [152] *Elizarova T.G., Sheretov Yu.V.* Analyse du probleme de l'ecoulement gazeux dans les microcanaux par les equations

- quasi hydrodynamiques // Journal La Houille Blanche. Revue Internationale de l'Eau, 2003, 5, 66–72. — также опубл.: Congres Societe Hydrotechnique de France (SHF) 'Microfluidique'. Toulouse. 3-5 Decembre 2002, 309–318.
- [153] *Elizarova T.G., Shilnikov E.V., Weber R., Hureau J.* Separated flow behind a backward-facing step. Part II. Experimental and numerical investigation of a turbulent flow. <http://arXiv.org/abs/math-ph/0410023>.
- [154] *Elizarova T.G., Shirokov I.A., and Montero S.* Numerical simulation of shock wave structure for argon and helium // Physics of Fluids, 2005, 17(6), P. 068101 (3 pages).
- [155] *Elizarova T. G., Shilnikov E. V., Weber R., Hureau J., Lengrand J.C.* Experimental and numerical investigation of the turbulent flow behind a backward-facing step // International Conference on Boundary and Interior Layers (BAIL), France, Toulouse, 5–7, July 2004.
- [156] *Gmurczyk A.S., Tarczyński M. and Walenta Z.A.* Shock wave structure in the binary mixtures of gases with disparate molecular masses // Rarefied gas dynamics / Ed. by R. Compargue. — CEA, Paris, 1979. — v. 1. — 333–341.
- [157] *Goldman E., Sirovich L.* Equations for gas mixtures // Physics of Fluids, 1967, 10(9), 1928–1940.
- [158] *Graur I.A., Elizarova T.G., Lengrand J.C.* Quasigasdynamic equations with multiple translational temperatures: Report R 97-1: Laboratoire d'A'erothermique du CNRS, Meudon (Fr), 1997.
- [159] *Graur I.A., Elizarova T.G., Ramos A., Tejada G., Fernandez J.M., Montero S.* A study of shock waves in expanding flows on the basis of spectroscopic experiments and quasi-gasdynamic equations // Journal of Fluid Mechanics, 2004, 504, 239–270.

- [160] *Graur I.A., Elizarova T.G., Kudriashova T.A, Poliakov S.V. Montero S.* Implementation of underexpanded jet problems on multiprocessor computer systems, in book *Parallel Computational Fluid Dynamics, Practice and Theory*, North Holland, ed. by P.Wilders and all., Elsevier, 2002, 151–158.
- [161] *Graur I.A., Ivanov M.S., Markelov G.N., Burtschell Y., Valerio E., Zeitoun D.* Comparison of kinetic and continuum approaches for simulation of shock wave/boundary layer interaction // *Shock Waves*, 2003, 12, 343–350.
- [162] *Hackman L.P., Raithby G.D., Strong A.B.* Numerical predictions of flows over backward-facing steps // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1984, 4(8), 711–724.
- [163] *Kardiadakis G., Beskok A., Aluru N.* *Microflows and nanoflows. Fundamentals and simulation.* — Springer, 2005.
- [164] *Kim J., Moin P.* Application of a fractional-step method to incompressible Navier–Stokes equations // *Journal of Computer Physics*, 1985, 59, 308–323.
- [165] *Kosuge S., Aoki K., Takata S.* Shock-wave structure for a binary gas mixture: Finite-difference analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules: Preprint: Kyoto University, 1999.
- [166] *Koura K.* Monte Carlo direct simulation of rotational relaxation of diatomic molecules using classical trajectory calculations: Nitrogen shock wave // *Physics of Fluids*, 1997, 9(11), 3543–3549.
- [167] *Kun Xu, Zhihui Li* Microchannel flow in the slip regime: gas-kinetic BGK-Burnett solutions // *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, 513, 87–110.
- [168] *Lasher W.C., Taulbee D.B.* On the computation of turbulent backstep flow. // *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 1992, 13(1), 30–40.

- [169] Le H., Moin P., Kim J. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. // *Journal of Fluid Mechanics*, 1997, 330, 349–374.
- [170] *Linzer M., Hornig D.F.* Structure of shock fronts in argon and nitrogen // *Physics of Fluids*, 1963, 6(12), 1661–1668.
- [171] *Lockerby D.A., Reese J.M., Emerson D.R., Barber R.W.* Velocity boundary condition at the solid walls in rarefied gas calculations // *Physical Review E*, 2004, 70, P. 017303.
- [172] *Mate B., Graur I.A., Elizarova T., Chirokov I., Tejeda G., Fernandez J.M., Montero S.* Experimental and numerical investigation of an axisymmetric supersonic jet // *Journal of Fluid Mechanics*, 2001, 426, 177–197.
- [173] *Maurer J., Tabeling P., Joseph P., Willaime H.* Second order slip laws in microchannels for helium and nitrogen // *Physics of Fluids*, 2003, 15(9), 2613–2621.
- [174] *Maxwell J.C.* On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature // *Philosophical transactions of the Royal Society of London*, 1879, 70(6), 231–256.
- [175] *Microfluidique. Chapitre 2. Micro-écoulements gazeux.* / Edited by Colin S. — EGEM, Lavoisier, 2004. www.hermes-science.com.
- [176] *Morse T.F.* Kinetic model equation for gas mixture // *Physics of Fluids*, 1964, 7(12), 2012–2013.
- [177] *Nallasamy M.* Turbulence models and their applications to the prediction of internal flows: a review. *Computers and Fluids*, 1987, 15(2), 151–194.
- [178] *Ohnishi M., Azuma H., Doi T.* Computer simulation of oscillatory Marangoni flow // *Asta Astronautica*, 1992, 26(8–10), 685–696.
- [179] *Ohshima H., Ninokata H.* Numerical simulation of oscillatory convection in low Prandtl number fluids using Aqua code //

- Workshop: "Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids". Notes on Numerical Fluid Dynamic, 1990, 27, 90–97.
- [180] *Frey P. G., George P.-L.* Mesh generation. Application of finite elements. — HERMES Science Publishing, 2000.
- [181] *Polard W.G., Present R.D.* On gaseous self-diffusion in long capillary tubes // Physical Review, 1948, 73(7), 762–774.
- [182] *Present R.D.* Kinetic theory of gases. — New York, Toronto, London, McGraw-Hill Book Company, INC., 1958.
- [183] *Roushan P., Wu X.L.* Universal wake structures of Karman vortex streets in two-dimensional flows // Physics of Fluids, 2005, 17, P. 073601.
- [184] *Roux B., Ben Hadid H., Laure P.* Hydrodynamical regimes in metallic melts subject to a horizontal temperature gradient // European Journal of Mechanics (B/Fluids), 1989, 8(5), 375–396.
- [185] *Schwartz L.M., Hornig D.F.* Navier-Stokes calculations of argon shock wave structure // Physics of Fluids, 1963, 6(12), 1669–1675.
- [186] *Shampine L.F. and Reichelt M. W.* The matlab code suite // SIAM Journal on Scientific Computing, 1997, 18, 1–22.
- [187] *Sharipov F., Seleznev V.* Data on internal rarefied gas flows // Journal Physical and Chemical Reference Data, 1988, 27(3), 657–706.
- [188] *Sirovich L.* Kinetic modeling of gas mixtures // Physics of Fluids, 1962, 5(8), 908–918.
- [189] *Sone Y.* Continuum gas dynamics in the light of kinetic theory and new features of rarefied gas flows // 20th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, Proceedings / Ed. by C. Shen, Peking University Press, Beijing, China, 1997, 3–24.
- [190] *Sparrow E.M., Chuck W.* PC solutions for heat transfer and fluid flow downstream of an abrupt, asymmetric enlargement in a channel // Numerical Heat Transfer, 1987, 12, 19–40.

- [191] *Thangam S., Speziale C.G.* Turbulent Flow Past a Backward-Facing Step: A Critical Evaluation of Two-Equation Models. *AIAA Journal*, 1992, 30(5), 1314-1320.
- [192] *Torrilhon M., Struchtrup H.* Regularized 13-moment equations: shock structure calculations and comparison to Burnett models // *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, 513, 171–198.
- [193] *Vincenti W.G. and Kruger Jr.C.H.* Introduction to Physical Gas Dynamics. — Wiley, 1965.
- [194] *Wee D., Tongxun Yi., Annaswamy A., Ghoniem A.* Self-sustained oscillations and vortex shedding in backward-facing step flows: Simulation and linear instability analysis // *Physisc of Fluids*, 2004, 16(9), 3361–3373.
- [195] *Wilke C.R.* A viscosity equation for gas mixtures // *Journal of Chemical Physics*, 1950, 18(4), 517–522.
- [196] *Woodward P., Collela P.J.* The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shock // *Computer Physics*, 1984, 54, 115–173.
- [197] *Wu M.-H., Wen Ch.-Yu., Yen R.-H., Weng M.-Ch., Wang M.-Ch.* Experimental and numerical study of the separation angle for flow around a circular cylinder at low Reynolds number // *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, 515, 233–260.
- [198] *Wu Y., Lee C.H.* Kinetic theory of shock tube problems for binary mixtures // *Physics of Fluids*, 1971, 14(2), 313–322.