

## ДВУМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОВЫХ ТЕЧЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМЫ МОМЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ R13

И.Э. Иванов<sup>1</sup>, И.А. Крюков<sup>2</sup>, М.Ю. Тимохин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, 119991, Ленинские горы, 1-2*

<sup>2</sup> *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1*

### Аннотация

Данная работа посвящена двумерному численному моделированию газовых течений в переходном режиме при наличии взаимодействия с твёрдой стенкой. В качестве математической модели используется регуляризованная тринадцатимоментная система уравнений Грэда (R13). Для решения этой системы уравнений используется метод Годунова повышенного порядка. Вектора потоков через грани расчётных ячеек рассчитываются с помощью приближённого метода HLL решения задачи Римана. Второй порядок точности по времени достигается при помощи модифицированного метода Рунге–Кутты. Для расчёта параметров на твёрдой поверхности используется итерационный метод Ньютона.

## 2D NUMERICAL SIMULATION OF GAS FLOW BASED ON R13 MOMENT SET OF EQUATIONS

I.E. Ivanov<sup>1</sup>, I.A. Kryukov<sup>2</sup>, M.Yu. Timokhin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Lomonosov Moscow State University, Russia, Moscow, 119991*

<sup>2</sup> *Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Russia, Moscow, 119526*

This article is devoted to the two-dimensional numerical simulation of gas flow in the transition regime with solid wall interaction. Regularized 13-moment Grad's set of equations (R13) was taken as a mathematical model. The variant of explicit high order Godunov-type scheme with linear flow parameter reconstruction is used for the numerical solution of this set of equations. Conservative variable fluxes on computational cell faces are evaluated with approximate solution of the Riemann problem due to HLL method. Modified explicit Runge–Kutta method of the second order of accuracy is used for time approximation. Flow parameters on the solid wall are calculated with the iterative Newton method.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе нас интересовала возможность численного моделирования течения газа в переходном режиме в приближении сплошной среды. Этот режим течения реализуется в случае, когда средняя длина свободного пробега молекул сопоставима с характерными линейными размерами данной задачи, то есть число Кнудсена  $Kn$  оказывается порядка единицы.

При этом для переходного режима течения характерно появление некоторых эффектов разреженности газа, которые не наблюдаются в плотных течениях. К таким эффектам можно отнести, например, проскальзывание газа и температурный скачок на стенке, неградиентный механизм появления теплового потока (тепловой поток образуется главным образом не за счёт градиента температуры), парадокс Кнудсена (появление минимума в расходе с ростом числа Кнудсена) и др.

В то же время переходный режим актуален для таких задач как течение газа в микро- и нано-каналах, где при нормальных условиях характерный размер становится сопоставим со средней длиной свободного пробега. С другой стороны, этот режим реализуется, например, во время входа летательного аппарата в верхние слои атмосферы, где разреженность газа дос-

точно велика, и длина свободного пробега может достигать порядка размеров летательного аппарата.

В 1949 году Грэд предложил так называемый моментный метод решения уравнения Больцмана [1]. В итоге была получена система уравнений относительно макропараметров (моментов). В общем случае система моментных уравнений является бесконечной. Поэтому необходимо введение некоторых замыкающих соотношений (связь моментов более высокого порядка с моментами более низкого). В [1] Грэдом были предложены простейшие замыкания, и была получена тринадцатимоментная система уравнений. В дальнейшем был выявлен ряд недостатков оригинальной системы Грэда [2].

Здесь в качестве математической модели была выбрана тринадцатимоментная система Грэда с предложенной её модификацией [2,5]. Полученная система названа авторами «регуляризованной системой Грэда» (или R13). В ходе данной работы было проведено численное тестирование применимости данной системы уравнений для моделирования переходного режима течения газа.

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

### 2.1. Уравнения основного потока

Регуляризованная тринадцатимоментная система Грэда (R13) была предложена в 2003 году в [2]. В дальнейшем были показаны некоторые преимущества этих уравнений по сравнению с оригинальным вариантом Грэда [5,6]. В тензорном виде система выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_k}{\partial x_k} &= 0, \\ \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} &= 0, \\ \frac{3}{2} \rho \frac{\partial \frac{k}{m} T}{\partial t} + \frac{3}{2} \rho v_k \frac{\partial \frac{k}{m} T}{\partial x_k} + \frac{\partial q_k}{\partial x_k} + p \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_k}{\partial x_k} + \frac{4}{5} \frac{\partial q_{(i}}{\partial x_{j)}} + 2p \frac{\partial v_{(i}}{\partial x_{j)}} + 2\sigma_{k(i} \frac{\partial v_{j)}}{\partial x_k} \\ &+ \frac{\partial m_{ijk}}{\partial x_k} = -\frac{\sigma_{ij}}{\tau}, \\ \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial q_i v_k}{\partial x_k} + \frac{5}{2} p \frac{\partial (\frac{k}{m} T)}{\partial x_i} + \frac{5}{2} \sigma_{ik} \frac{\partial (\frac{k}{m} T)}{\partial x_k} + \frac{k}{m} T \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \\ &- \sigma_{ik} \frac{k}{m} T \frac{\partial \rho}{\partial x_k} - \frac{\sigma_{ij}}{\rho} \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial x_k} + \frac{7}{5} q_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{2}{5} q_k \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \\ &+ \frac{2}{5} q_i \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \frac{1}{2} \frac{\partial R_{ik}}{\partial x_k} + \frac{1}{6} \frac{\partial \Delta}{\partial x_i} + m_{ijk} \frac{\partial v_j}{\partial x_k} = -\frac{2}{3} \frac{q_i}{\tau}, \end{aligned}$$

где плотность  $\rho$ , скорость  $v_i$ , давление  $p$ , тензор напряжений  $\sigma_{ij}$  и тепловой поток  $q_i$  ( $i = x, y, z$ ) составляют тринадцать физических переменных, четырнадцатая переменная, температура  $T$ , связана с остальными с помощью уравнения состояния. Моменты более высокого порядка (новые члены в уравнениях по сравнению с системой Грэда [1]) были получены в [2,5].

Во всех соотношениях, приведённых выше,  $k$ , которая не является индексом, обозначает постоянную Больцмана, а  $m$  – массу одной молекулы. Угловые скобки в индексах обозначают бесследовую часть тензора [5].

В 2006 году Torrilhon в работе [3] предложил дивергентную форму записи уравнений системы R13 для двумерного случая. Для двумерного случая (количество уравнений тогда уменьшается до девяти) эту систему уравнений можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial U(W)}{\partial t} + \text{div} F(W) = P(W),$$

где  $W$  – вектор физических переменных

$$W = \left\{ \rho, v_x, v_y, p, p_x, p_y, \sigma, q_x, q_y \right\}^T,$$

$p_y = \sigma_{yy}$ ,  $\sigma = \sigma_{xy}$ ,  $p = (p_x + p_y + p_z)/3$ . Векторы  $U(W)$ ,  $F(W)$  и  $P(W)$  являются векторами консервативных переменных, потоков и релаксационных членов соответственно. Вид этих векторов приведен в [3].

### 2.2. Граничные условия

Попытку вывода граничных условий на твёрдой стенке для системы R13 впервые предприняли Gu и

Emerson в работе [7]. В дальнейшем похожий метод использовали Struchtrup и Torrilhon [8] для вывода своего варианта граничных условий на твёрдой стенке. В обоих случаях за основу был взят вариант максвелловских граничных условий (аккомодационная модель Максвелла) [9]. Идея такой постановки граничных условий заключается в том, что часть молекул упруго (зеркально) отражается от стенки, сохраняя при этом свою абсолютную скорость (функция распределения таких молекул остаётся неизменной после соударения со стенкой). Остальные же молекулы отражаются диффузионно, покидая поверхность стенки с температурой стенки и скоростями, соответствующими функции распределения Максвелла. Таким образом, были получены пять, так называемых, «кинетических» граничных условий для твёрдой изотермической стенки [8]:

$$\begin{aligned} u &= u_w - \frac{1}{p_\alpha} \left( n_y \sqrt{\frac{\pi}{2}} \theta \frac{2-\alpha}{\alpha} \sigma_{xy} + \frac{m_{xyy}}{2} + \frac{q_x}{5} \right), \\ \theta &= \theta_w - \frac{1}{p_\alpha} \left( n_y \sqrt{\frac{\pi}{2}} \theta \frac{2-\alpha}{\alpha} \frac{q_y}{2} + \frac{\theta \sigma_{yy}}{4} + \frac{5R_{yy}}{56} + \frac{\Delta}{30} \right) \\ &\quad + \frac{(u - u_w)^2}{4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{xy} &= n_y \sqrt{\frac{2}{\pi\theta}} \frac{\alpha}{2-\alpha} \left[ p_\alpha \theta u_s - \frac{1}{2} \theta m_{xyy} \right. \\ &\quad \left. - \frac{11}{5} \theta q_x - p_\alpha (u - u_w)^3 \right. \\ &\quad \left. + 6 p_\alpha (\theta - \theta_w) (u - u_w) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{xxy} &= -n_y \sqrt{\frac{2}{\pi\theta}} \frac{\alpha}{2-\alpha} \left[ \frac{p_\alpha}{5} (\theta - \theta_w) - \frac{4p_\alpha}{5} (u - u_w)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{R_{xx}}{14} + \theta \left( \sigma_{xx} - \frac{\sigma_{yy}}{5} \right) + \frac{\Delta}{150} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{yyy} &= n_y \sqrt{\frac{2}{\pi\theta}} \frac{\alpha}{2-\alpha} \left[ \frac{2p_\alpha}{5} (\theta - \theta_w) - \frac{R_{yy}}{14} + \frac{\Delta}{75} \right. \\ &\quad \left. - \frac{7}{5} \theta \sigma_{yy} - \frac{3p_\alpha}{5} (u - u_w)^2 \right], \end{aligned}$$

где  $n_y$  – нормаль к поверхности стенки, направленная внутрь газа;  $\alpha$  – коэффициент аккомодации поверхности;  $F$  – внешняя сила;  $u_w$  и  $\theta_w$  – скорость по касательной и температура стенки, соответственно,

$$p_\alpha = p + \frac{\sigma_{yy}}{2} - \frac{R_{yy}}{28\theta} - \frac{\Delta}{120\theta}$$

Остальные интегралы обнуляются (интегралы для моментов, вес которых пропорционален четной степени перпендикулярной к стенке составляющей скорости молекул [1]). Недостающие соотношения для определения остальных переменных можно взять из уравнений основного потока [10,11].

### 3. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

В качестве численного метода для основной области был выбран метод Годунова повышенного порядка точности [12] с использованием линейного восстановления параметров течения. Потоки консервативных переменных через грани контрольного объема рассчитываются с помощью приближенного решения задачи Римана методом HLL [4,5]. Для аппроксимации системы уравнений по времени используется модифицированный метод Рунге-Кутты 2-го порядка [13]. Численная схема для основного потока достаточно подробно описана в [10,11,17,18]

Для моделирования твердой изотермической стенки, как уже было сказано, необходимо решать систему, в которую входят кинетические граничные условия и часть недостающих соотношений из аппроксимации некоторых уравнений описывающих течение газа внутри области. Полная система уравнений приведена в [10,11,17,18]. Тогда получаем систему аппроксимированных нелинейных уравнений. Эта нелинейная система численно решается с помощью итерационного метода Ньютона с обращением матрицы Якоби.

### 4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

#### 4.1. Течение Пуазейля

Рассмотрим течение в каналах в переходном режиме по числу Кнудсена. Число Кнудсена для течений в каналах определялось следующим образом:

$$Kn = \frac{\mu \sqrt{\pi/2} \sqrt{\theta}}{pH},$$

где  $\mu$  – вязкость;  $\theta$  – температура в энергетических единицах;  $p$  – давление и  $H$  – толщина канала.

На рис. 1 представлено сравнение профилей скорости течения Пуазейля, полученных с помощью численного решения уравнений Навье–Стокса с условием проскальзывания на границе, R13 и линейаризованного уравнения Больцмана [14], при числе Кнудсена  $Kn = 0.226$ . Продольная скорость в канале нормирована на

$$u_0 = -\frac{\partial p}{\partial x} \frac{H}{p_0} \sqrt{2\theta},$$

где  $p_0$  – давление на входе в канал;  $\partial p/\partial x$  – продольный градиент давления.

Рис. 2 демонстрирует появление минимума в массовом расходе через сечение канала при течении Пуазейля (парадокс Кнудсена). По оси абсцисс в логарифмическом масштабе отложено число Кнудсена  $Kn$ , а по оси ординат  $Q/Q_0$  – массовый расход  $Q$ , нормированный на  $Q_0$ , где  $\rho_0$  – плотность на входе в канал.

На графике приведены результаты, полученные с использованием уравнений Навье–Стокса–Фурье с условием проскальзывания на стенке, результаты, полученные по R13, и результаты численного решения линейаризованного уравнения Больцмана [14].

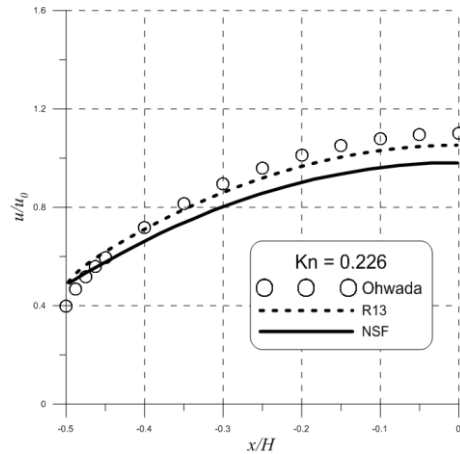


Рис. 1. Сравнение профилей скорости для течения Пуазейля при  $Kn = 0.226$

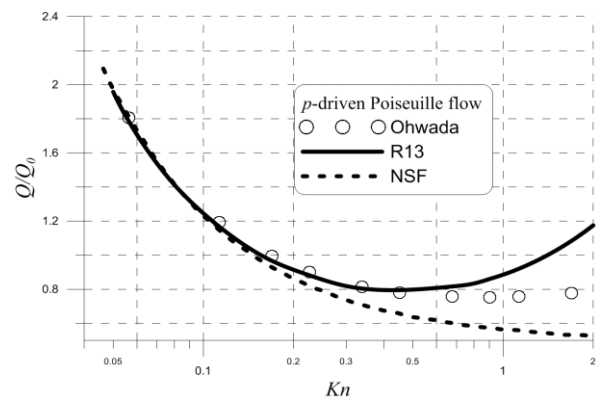


Рис. 2. Появление минимума в массовом расходе для течения Пуазейля

#### 4.2. Течение Куэтта

Также для умеренно разреженного газа были проведены расчёты течения Куэтта. Расчёты производились для аргона, температура стенок равна 273 К, стенки двигаются в противоположных направлениях со скоростями 50 м/с. На рис. 3 и 4 представлены профили скорости, полученные с помощью R13, уравнений Навье–Стокса с проскальзыванием на стенке и методом Монте-Карло для числа Кнудсена  $Kn = 0.25$  и  $Kn = 0.50$ .

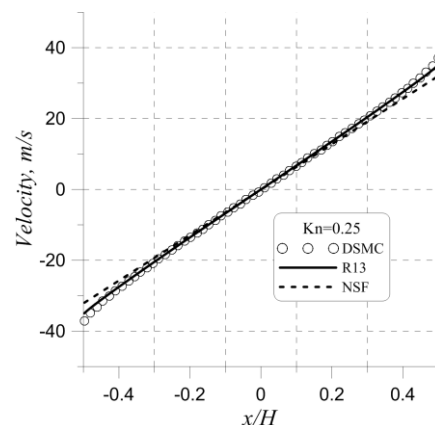


Рис. 3. Сравнение профилей скорости для течения Куэтта при  $Kn = 0.25$

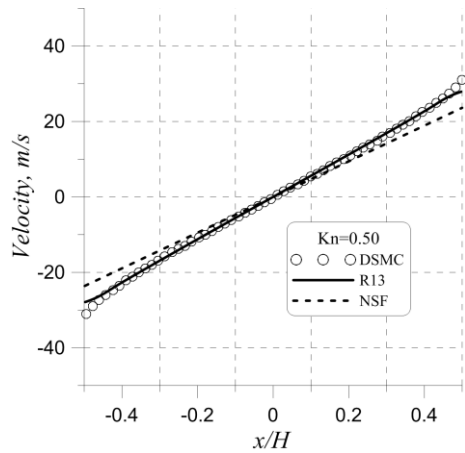


Рис. 4. Сравнение профилей скорости для течения Куэтта при  $Kn = 0.50$

При использовании системы моментных уравнений появляется продольный тепловой поток, который в разреженном течении появляется в отсутствии градиента температуры. При этом уравнения Навье – Стокса – Фурье не могут выявить этот эффект. На рис. 5 приведено сравнение распределений продольного теплового потока при  $Kn = 0.10$ , полученных с помощью метода Монте-Карло [15], системы R13 и оригинальной системы Грэда (G13).

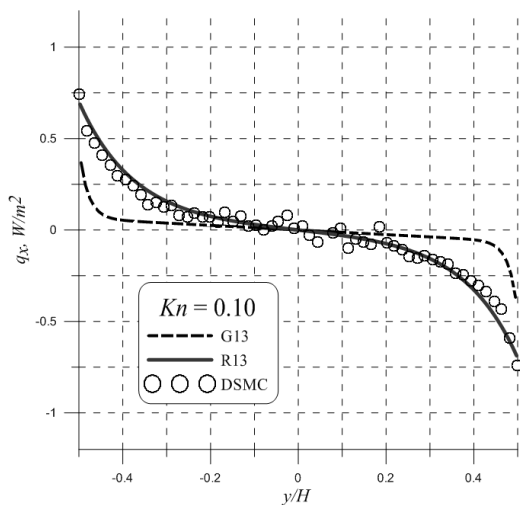


Рис. 5. Сравнение распределения продольного теплового потока для течения Куэтта при  $Kn = 0.10$  (R13, система Грэда и метод Монте-Карло)

### 4.3. Течение в каверне

В качестве третьей задачи рассмотрим течение в каверне с движущейся верхней стенкой. Задача решается в двумерной квадратной области. Все четыре границы представляют собой твёрдые изотермические стенки с температурой 273 К. Верхняя стенка двигается со скоростью 30 м/с, остальные стенки покоятся. В качестве модельного газа был взят аргон. Параметры задачи были заимствованы из [16].

На рис. 6 и 7 приведены результаты теплового поведения (температура, линии тепловых потоков соответственно) для течения в каверне при числе Кнудсена  $Kn = 0.10$ . Стоит обратить внимание на то, что тепло-

вые потоки обусловлены здесь не градиентом температуры.

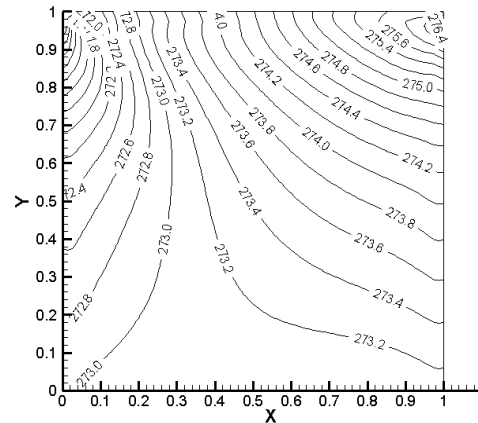


Рис.6. Распределение температуры для течения в каверне для  $Kn = 0.10$

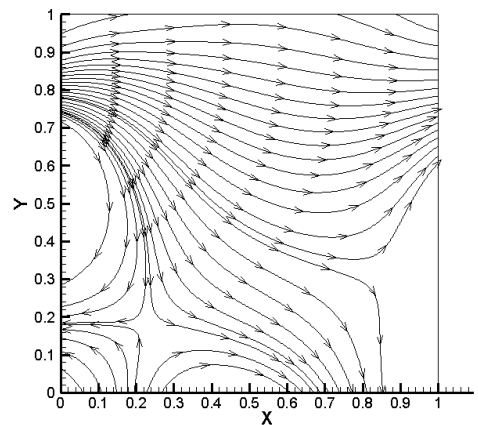


Рис. 7. Линии тепловых потоков для течения в каверне для  $Kn = 0.10$

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численные результаты расчёта течений умеренно разреженного газа продемонстрировали адекватность выбранной математической модели и численного метода для моделирования газового течения и граничных условий твёрдой изотермической стенки в достаточно широком диапазоне чисел Кнудсена. В то же время данный метод применим как для континуального режима, так и переходного режима течения (по числу Кнудсена). Полученные результаты также продемонстрировали преимущества системы R13 по сравнению с оригинальной системой Грэда и уравнениями Навье – Стокса.

В качестве возможного развития данной работы можно предложить использование многоуровневого подхода [19] и переход к неявным численным методам.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Comm. Pure Appl. Math. Vol. 2. 1949. Pp. 331–407.
2. Struchtrup H., Torrilhon M. Regularization of Grad’s 13-moment-equations: Derivation and linear analysis // Phys. Fluids. V. 15. 2003. Pp. 2668–2680.

3. Torrilhon M. Two-dimensional bulk microflow simulations based on regularized Grad's 13-moment equations // *Multi-scale Model. Simul.* V. 5. № 3. 2006. Pp. 695–728.
4. Harten A., Lax P. D., B. van Leer On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws // *SIAM Rev.* V. 25. 1983. Pp. 35–45.
5. Struchtrup H. *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows.* Springer, 2005. 258 p.
6. Torrilhon M., Struchtrup H. Regularized 13-moment equations: shock structure calculations and comparison to Burnett models // *J. Fluid Mech.* V. 513. 2004. Pp. 171–198.
7. Gu X. J., Emerson D.R. A computational strategy for the regularized 13 moment equations with enhanced wall-boundary conditions // *J. Comput. Phys.* V. 225. 2007. Pp. 263–283.
8. Struchtrup H., Torrilhon M. Boundary conditions for regularized 13-moment-equations for micro-channel-flows // *J. Comput. Phys.* V. 227. 2008. Pp. 1982–2011.
9. Maxwell J.C. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature // *Phil. Trans. Roy. Soc. (London).* 1879. Pp. 231–256.
10. Timokhin M.Yu., Ivanov I.E., Kryukov I.A. 2D Numerical Simulation of Gas Flow Interaction with Solid Wall by Regularized Grad's Set of Equations // *Proc. of 28th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics.* New York, 2012. Pp. 843–848.
11. Иванов И.Э., Крюков И.А., Тимохин М.Ю. Математическое моделирование высокоскоростных газодинамических течений на основе регуляризированной системы уравнений R13 // *Тр. 4-ой Всер. школы-семинара «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем» (АФМ-2010).* М.: ИПМех РАН, 2011. С. 63–70.
12. Иванов И.Э., Крюков И.А. Квазимонотонный метод повышенного порядка точности для расчета внутренних и струйных течений невязкого газа // *Математическое моделирование.* Т. 8. № 6. 1996. С. 47–55.
13. Глушко Г.С., Иванов И.Э., Крюков И.А. Метод расчета турбулентных сверхзвуковых течений // *Математическое моделирование.* Т. 21. № 12. 2009. С. 103–121.
14. Ohwada T., Sone Yo., Aoki K. Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *Phys. Fluids A* 1. 1989. Pp. 2042–2049.
15. Gu X. J., Emerson D.R. A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime // *J. Fluid Mech.* V. 636. 2009. Pp. 177–216.
16. Mizzi S. *Extended Macroscopic Models for Rarefied Gas Dynamics in Micro-sized Domains* // Thesis submitted for the PhD in the University of Strathclyde, 2008.
17. Иванов И.Э., Крюков И.А., Тимохин М.Ю. Применение системы уравнений R13 для моделирования течений в микроканалах // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике.* 2013. Т.15. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013-04-29-011.pdf>
18. Иванов И.Э., Крюков И.А., Тимохин М.Ю. Численное моделирование ударно-волновых течений с помощью моментных уравнений // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике.* 2011. Т.11. <http://chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-010.pdf>
19. Суржиков С.Т. Перспективы многоуровневого подхода к задачам компьютерной аэрофизики // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике.* 2008. Т.7. <http://chemphys.edu.ru/media/files/2008-09-01-002.pdf>
20. Ермаков М.К. Исследование возможностей матричных методов для решения уравнений Навье – Стокса // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике.* 2010. Т.9. <http://chemphys.edu.ru/pdf/010-01-12-031.pdf>