



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 99 за 2017 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Балашов В.А., Борисов В.Е.

Алгоритм расчета
трехмерных течений
умеренно-разреженного газа
в областях с воксельной
геометрией

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Балашов В.А., Борисов В.Е. Алгоритм расчета трехмерных течений умеренно-разреженного газа в областях с воксельной геометрией // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 99. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2017-99](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-99)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-99>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

Балашов В.А., Борисов В.Е.

**Алгоритм расчета трехмерных течений
умеренно-разреженного газа в областях
с воксельной геометрией**

Москва, 2017

В.А. Балашов, В.Е. Борисов. Алгоритм расчета трехмерных течений умеренно-разреженного газа в областях с воксельной геометрией

Аннотация В работе предложен численный алгоритм, основанный на квази-гидродинамической системе уравнений и предназначенный для расчета изотермических течений вязкого газа в областях сложной формы, имеющих «воксельную» геометрию. Рассмотрены течения как с прилипанием на твердой стенке, так и с проскальзыванием (для умеренно разреженных течений). На примере расчета нескольких классических задач гидродинамики продемонстрирована корректность представленного алгоритма¹.

Ключевые слова: квазигидродинамическая система уравнений, регуляризованные уравнения Навье-Стокса, умеренно-разреженные течения, воксельная геометрия, условия скольжения Максвелла

Balashov V.A., Borisov V.E. Numerical algorithm for 3D moderately rarefied gas flows simulation within domains with voxel geometry

Abstract Numerical algorithm based on quasi-hydrodynamic equations for simulation of isothermal viscous gas flows within domains with complex voxel geometry is proposed. Flows with no-slip as well as slip boundary conditions (for moderately rarefied gas flows) are considered. Validity of proposed algorithm is exemplified by numerical solution of several classical hydrodynamic problems.

Key words: quasi-hydrodynamic equations, regularized Navier-Stokes equations, moderately rarefied flows, voxel geometry, Maxwell slip boundary conditions

Содержание

| | | |
|---|--|----|
| 1 | Введение | 3 |
| 2 | Система квазигидродинамических уравнений | 4 |
| 3 | Численный алгоритм | 5 |
| 4 | Валидация численного алгоритма | 11 |
| 5 | Заключение | 20 |

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №16-31-00400 мол_а.

1 Введение

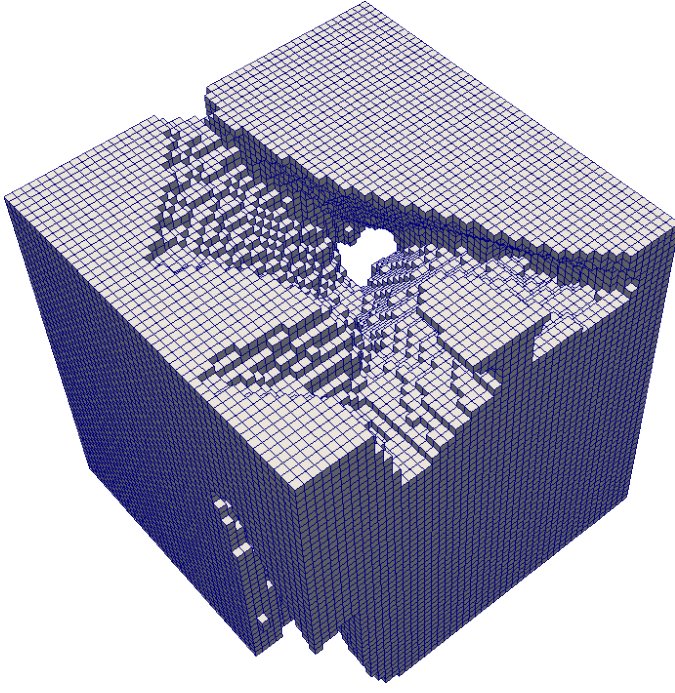
Моделирование течений жидкостей и газов в задачах науки и техники часто проводится при точно известных геометрических параметрах и положениях обтекаемых объектов, стенок каналов и т.п. Однако в ряде случаев для некоторых техногенных или природных материалов геометрия расчетной области не может быть охарактеризована точно. К таким средам можно отнести, например, образцы горных пород или пенометаллов (metal foams). Для решения этой проблемы часто используют компьютерную микротомографию. На основе ее результатов строят бинарное трехмерное («воксельное») изображение образца исследуемого материала: как и в случае двумерного «пиксельного» изображения, каждой ячейке приписано значение 0 или 1 в зависимости от того, есть ли материал в соответствующей точке или нет. Подробнее см., например, [1, 2]. Пример такого изображения представлен на рисунке 1, где показан фрагмент образца песчаника². Часто для таких задач геометрию расчетной области выбирают фактически совпадающей с построенным воксельным изображением.

Настоящая работа посвящена построению и валидации алгоритма расчета изотермических течений вязкого слабосжимаемого газа в областях с «воксельной» геометрией. В качестве математической модели использована квазигидродинамическая (КГиД) система уравнений. По сравнению с описанным в работе [3], представленный в настоящей работе алгоритм по-другому реализует условия прилипания на твердой стенке, а также позволяет использовать условия скольжения Максвелла, необходимые для моделирования течений умеренно-разреженного газа. Данная работа обобщает результаты [4, 5].

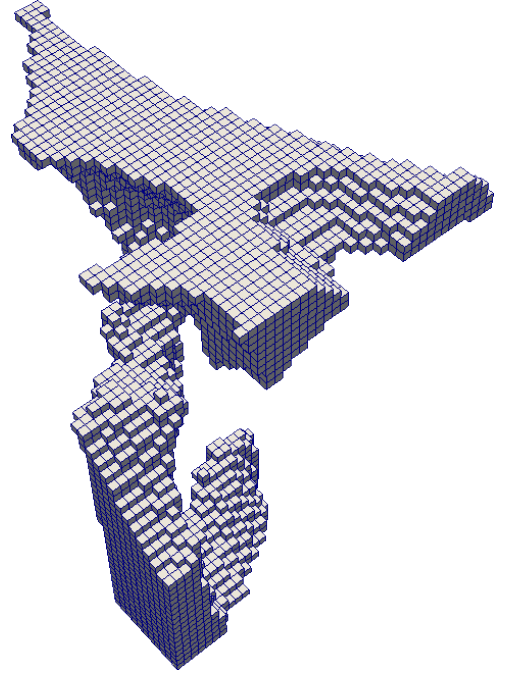
Квазигидродинамическая система уравнений является специальной модификацией классических уравнений Навье-Стокса, суть которой состоит в добавлении к исходным уравнениям дополнительных малых слагаемых диссипативного характера [6–8]. Эти слагаемые, с одной стороны, позволяют использовать логически простые разностные схемы, а с другой — показывают хорошее совпадение получаемых с их помощью результатов с экспериментальными данными (для течений в микроканалах и вблизи шара для чисел Кнудсена порядка 0.1 [6–10]).

Пользуясь случаем, авторы выражают глубокую благодарность к.ф.-м.н. Е.Б. Савенкову и Б.В. Критскому (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) за плодотворные обсуждения, улучшившие представленную работу.

² Данные взяты с сайта Imperial College London по адресу <http://www.imperial.ac.uk/earth-science/research/research-groups/perm/research/pore-scale-modelling/micro-ct-images-and-networks/>



(a) Порода.



(b) Поровое пространство.

Рис. 1. Пример трехмерного изображения размером $50 \times 50 \times 50$ вокселей, соответствующего части образца песчаника. Длина ребра одного вокселя составляет $9.1 \cdot 10^{-6}$ м.

2 Система квазигидродинамических уравнений

КГиД-система уравнений для описания изотермических течений вязкого сжимаемого газа без учета внешних сил имеет вид [6, 8]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0, \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \nabla \cdot \mathbf{\Pi}, \quad (2.1b)$$

где ρ — плотность, \mathbf{u} — вектор скорости, $\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$ — вектор плотности потока массы, $p = c_s^2 \rho$ — давление, c_s — скорость звука, $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{\text{NS}} + \mathbf{\Pi}^\tau$ — тензор вязких напряжений, $\mathbf{\Pi}^{\text{NS}} = \eta [(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - (2/3)\mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u}]$ — классический тензор вязких напряжений Навье-Стокса, \mathbf{I} — единичный тензор, η — коэффициент динамической вязкости, $\mathbf{\Pi}^\tau = \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$ — регуляризирующий тензор напряжений, $\mathbf{w} = (\tau/\rho)(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p)$, τ — малый параметр, выражение для которого принимается в виде [6, стр. 41]:

$$\tau = \frac{\eta}{p \operatorname{Sc}} = \frac{\eta}{\rho c_s^2 \operatorname{Sc}}, \quad (2.2)$$

где Sc — число Шмидта. Для течений газа параметр τ с точностью до коэффициента порядка единицы равен среднему времени свободного пробега мо-

лекул [6, стр. 42]. Для указанных течений слагаемые, пропорциональные τ , с одной стороны играют роль физически мотивированных регуляризаторов, а с другой — показывают хорошее совпадение получаемых с их помощью результатов с экспериментальными данными для течений в микроканалах и вблизи шара для чисел Кнудсена порядка 0.1 [6–10]. При расчете таких течений будем считать, что на границе с твердой поверхностью выполнены следующие условия, из которых два последних — условия скольжения Максвелла:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \mathbf{u}_\tau = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \frac{\partial \mathbf{u}_\tau}{\partial \mathbf{n}}, \quad u_n = 0, \quad (2.3)$$

где \mathbf{n} — единичная нормаль к поверхности, $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ — нормальная к поверхности составляющая скорости, а $\mathbf{u}_\tau = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})\mathbf{u}$ — касательная. Отметим, что из первого и последнего условий следует условие отсутствия потока массы через границу $\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} = 0$.

Далее везде положим $\sigma = 1$. Длину свободного пробега будем вычислять по формуле Чепмена [11]:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\eta}{p} \sqrt{\mathcal{R}T} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\eta}{\rho c_s}, \quad (2.4)$$

где \mathcal{R} — газовая постоянная, T — температура. Здесь учтено, что для скорости звука в изотермическом случае верно соотношение $c_s = \sqrt{\mathcal{R}T}$ [12, §23]. Если формально положить $\lambda = 0$, то граничные условия (2.3) перейдут в условия прилипания $\mathbf{u} = \mathbf{0}$.

Также в данной работе приведены результаты расчетов с условиями прилипания на границе с твердой стенкой. При этом КГиД-слагаемые следует рассматривать исключительно как регуляризаторы, а параметр τ в этом случае вычисляется как

$$\tau = \alpha^* \frac{h}{c_s}, \quad (2.5)$$

где α^* — безразмерное число, выбираемое из соображений устойчивости расчета, h — пространственный шаг разностной сетки.

3 Численный алгоритм

В данном разделе выписана используемая разностная схема и алгоритмы реализации граничных условий. Используются обозначения из работы [13].

3.1 Геометрическая модель расчетной области

В настоящей работе используется воксельная геометрия расчетной области. В связи с этим во всех расчетах будем использовать декартову ортогональную сетку с равными шагами по пространству $h_x = h_y = h_z = h$. Будем

считать, что каждая ячейка расчетной области является вокселем и соответственно относится либо к пустотному пространству (*активная ячейка*, т.е. там может «течь» газ), либо к породе (*неактивная ячейка*). На гранях, общих для активных и неактивных ячеек, ставятся граничные условия. Расчет проводится только в активных ячейках.

3.2 Разностная схема

Пусть $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ — область расчета. На $[0, L_x]$ введем равномерную сетку $\bar{\omega}_{xh}$ с шагом $h_x = h$ с узлами $h/2 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x} = L_x - h/2$. Узлы с индексами $0, -1, \dots$ и $N_x + 1, N_x + 2, \dots$ являются фиктивными, то есть такими, что они заведомо относятся либо к неактивным ячейкам либо используются для постановки краевых условий (втекания, вытекания, периодичности и т.п.). Пусть ω_{xh} состоит из узлов $x_m, 2 \leq m \leq N_x - 1$, являющихся внутренними для $\bar{\omega}_{xh}$. Введем вспомогательную *двойственную* сетку $\bar{\omega}_{xh}^*$ с узлами $x_{m+1/2} = (x_m + x_{m+1})/2, 0 \leq m \leq N_x$ и соответствующую внутреннюю сетку ω_{xh}^* с узлами $x_{m+1/2} = (x_m + x_{m+1})/2, 1 \leq m \leq N_x - 1$. Аналогично вводятся сетки с шагами $h_y = h_z = h$ на $[0, L_y]$ и $[0, L_z]$ соответственно. Введем трехмерные сетки $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh} \times \bar{\omega}_{zh}$ и $\bar{\omega}_h^* = \bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}^* \times \bar{\omega}_{zh}^*$. Аналогично для ω_h, ω_h^* . Пусть сетка $\bar{\omega}_{l*,h}$ получается из $\bar{\omega}_h$ в результате замены сомножителя $\bar{\omega}_{lh}$ на $\bar{\omega}_{lh}^*$, а сетка $\bar{\omega}_{l*,h}^*$ — из $\bar{\omega}_h^*$ в результате замены сомножителя $\bar{\omega}_{lh}^*$ на $\bar{\omega}_{lh}$. Точно так же вводятся сетки $\omega_{l*,h}, \omega_{l*,h}^*$. Здесь $l \in \{x, y, z\}$.

Будем считать, что сетка $\bar{\omega}_h$ содержит центры расчетных ячеек. Тогда центры граней лежат на сетках $\bar{\omega}_{x*,h}, \bar{\omega}_{y*,h}, \bar{\omega}_{z*,h}$, центры ребер на $\bar{\omega}_{x*,h}^*, \bar{\omega}_{y*,h}^*, \bar{\omega}_{z*,h}^*$, а угловые узлы — на сетке $\bar{\omega}_h^*$. Основные параметры течения (скорость \mathbf{u} и плотность ρ) определим в узлах основной сетки $\bar{\omega}_h$.

Пусть $H(\omega)$ — множество функций, определенных на некоторой сетке ω . Для функций $v \in H(\bar{\omega}_{lh})$ и $u \in H(\bar{\omega}_{lh}^*)$ введем операторы сеточного усреднения $s_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*), s_l^* : H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$ и разностного дифференцирования $\delta_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*), \delta_l^\circ : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}), \delta_l^* : H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$ по следующим формулам:

$$\begin{aligned} (s_l v)_{m-1/2} &= \frac{v_m + v_{m-1}}{2}, & (s_l^* u)_m &= \frac{u_{m+1/2} + u_{m-1/2}}{2}, & (\delta_l^\circ v)_m &= \frac{v_{m+1} - v_{m-1}}{2h}, \\ (\delta_l v)_{m-1/2} &= \frac{v_m - v_{m-1}}{h}, & (\delta_l^* u)_m &= \frac{u_{m+1/2} - u_{m-1/2}}{h}. \end{aligned}$$

Отметим, что $\delta_l^\circ = \delta_l^* s_l$.

Пусть δ_t — оператор разностного дифференцирования по времени:

$$\delta_t v = \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t}, \quad \text{где } \Delta t \text{ — шаг по времени.}$$

Выпишем разностную схему для узлов внутренней сетки ω_h . При этом сперва рассмотрим такие ячейки, все ближайшие соседи которых являются только активными ячейками. Другими словами, будем рассматривать такие ячейки, что их грани и ребра не инцидентны неактивным ячейкам. Тогда разностная схема для (2.1), предложенная в [8], примет вид:

$$\begin{aligned} \delta_t \rho + \delta_x^* j_{mx} + \delta_y^* j_{my} + \delta_z^* j_{mz} &= 0, \\ \delta_t(\rho u_x) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_x) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_x) + \delta_z^*(j_{mz} s_z u_x) &= \delta_x^* \Pi_{xx} + \delta_y^* \Pi_{yx} + \delta_z^* \Pi_{zx}, \\ \delta_t(\rho u_y) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_y) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_y) + \delta_z^*(j_{mz} s_z u_y) &= \delta_x^* \Pi_{xy} + \delta_y^* \Pi_{yy} + \delta_z^* \Pi_{zy}, \\ \delta_t(\rho u_z) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_z) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_z) + \delta_z^*(j_{mz} s_z u_z) &= \delta_x^* \Pi_{xz} + \delta_y^* \Pi_{yz} + \delta_z^* \Pi_{zz}, \end{aligned}$$

где дискретизации для Π_{xk}^{NS} , Π_{xk}^τ , j_{mk} при $k \in \{x, y, z\}$ определены на $\omega_{x^*,h}$:

$$\begin{aligned} w_x &= \tau^{(x)} \left[(s_x u_x) \delta_x u_x + (s_x u_y) \overset{\circ}{\delta}_y s_x u_x + (s_x u_z) \overset{\circ}{\delta}_z s_x u_x + \frac{\delta_x p}{s_x \rho} \right], \quad \tau^{(x)} = \frac{\eta}{(s_x \rho) c_s^2 \mathcal{S}c}, \\ j_{mx} &= (s_x \rho)(s_x u_x - w_x), \quad \Pi_{xx}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_x u_x - \frac{2}{3} \eta \left(\overset{\circ}{\delta}_y s_x u_y + \overset{\circ}{\delta}_z s_x u_z \right), \\ \Pi_{xy}^{NS} &= \eta \overset{\circ}{\delta}_y s_x u_x + \eta \delta_x u_y, \quad \Pi_{xz}^{NS} = \eta \overset{\circ}{\delta}_z s_x u_x + \eta \delta_x u_z, \\ \Pi_{xx}^\tau &= (s_x \rho)(s_x u_x) w_x, \quad \Pi_{xy}^\tau = (s_x \rho)(s_x u_x) w_y^{(x)}, \quad \Pi_{xz}^\tau = (s_x \rho)(s_x u_x) w_z^{(x)}, \\ w_l^{(x)} &= \tau^{(x)} \left[(s_x u_x) \delta_x u_l + (s_x u_y) \overset{\circ}{\delta}_y s_x u_l + (s_x u_z) \overset{\circ}{\delta}_z s_x u_l + \frac{\overset{\circ}{\delta}_l s_x p}{s_x \rho} \right], \quad l \in \{y, z\}. \end{aligned}$$

Аналогично определяются Π_{lk}^{NS} , Π_{lk}^τ , j_{ml} на $\omega_{l^*,h}$ при $l \in \{y, z\}$, $k \in \{x, y, z\}$.

3.3 Алгоритм реализации граничных условий

Выпишем разностную схему, аппроксимирующую условия (2.3) в узлах сеток $\bar{\omega}_{l^*,h}$, $l \in \{x, y, z\}$, которые лежат на граничных гранях, то есть инцидентных активным и неактивным ячейкам одновременно.

Рассмотрим некоторую *активную* ячейку расчетной области вместе с 26-ю ближайшими соседними ячейками ($3^3 - 1 = 26$). Каждой ячейке (а точнее, ее геометрическому центру) из рассматриваемой группы поставим в соответствие тройку целых индексов (i, j, k) , где $i, j, k \in \{0, 1, 2\}$. Тогда центрам граней естественно сопоставить тройки индексов, в которых ровно один полуцелый индекс, а ребрам — в которых ровно два индекса полуцелые. Рассматриваемой ячейке (и соответствующему узлу) тогда будет соответствовать тройка индексов $(1, 1, 1)$.

Как следует из описанной разностной схемы, не все ячейки из 26 ближайших нужны для определения параметров течения в центральной ячейке: необходимы значения только из ячеек, представленных на рисунке 2а (их

число $26 - 8 = 18$). Для наглядности на рисунке 2b представлено сечение шаблона плоскостью перпендикулярной оси Oz и проходящей через узел $(1, 1, 1)$ для одного из возможных вариантов конфигурации неактивных ячеек. Серым цветом представлены неактивные ячейки, а белым — активные. Черные стрелки соответствуют нормальям к граничным граням.

На основе типов соседних ячеек для рассматриваемой ячейки введем набор чисел (*куб активности*) a_{ijk} размером $3 \times 3 \times 3$, где $i, j, k \in \{0, 1, 2\}$ по следующему правилу: если ячейка с индексами (i, j, k) относится к твердой стенке (то есть является неактивной), тогда $a_{ijk} = 0$, в противном случае $a_{ijk} = 1$. Для всех ячеек, участвующих в расчете, $a_{111} = 1$.

Для примера выпишем разностную схему для условий (2.3) в узле сетки $\bar{\omega}_{x^*,h}$, который лежит на граничной грани с нормалью $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$:

$$\rho = \frac{9\rho_{+\frac{1}{2}} - \rho_{+\frac{3}{2}}}{8} + O(h^2) = \rho_{+\frac{1}{2}} + O(h), \quad u_x = 0,$$

$$u_l = \lambda \frac{9(u_l)_{+\frac{1}{2}} - (u_l)_{+\frac{3}{2}} - 8u_l}{3h} + O(h^2) = \lambda \frac{(u_l)_{+\frac{1}{2}} - u_l}{h/2} + O(h), \quad l \in \{y, z\}.$$

Здесь обозначено $f_{+\frac{3}{2}} \equiv f_{i+\frac{3}{2},j,k}$, $f_{+\frac{1}{2}} \equiv f_{i+\frac{1}{2},j,k}$, где f — некоторая сеточная функция. Будем использовать аппроксимацию второго порядка, если соседняя ячейка, противоположная рассматриваемой граничной грани, является активной, а значит $a_{+\frac{3}{2}} = 1$ и в ней определено значение $f_{+\frac{3}{2}}$. Если же указанная ячейка неактивна, то в ее центре значение не определено и $a_{+\frac{3}{2}} = 0$. В этом случае будем использовать аппроксимацию первого порядка. Теперь для того же узла выпишем разностные соотношения для выражений, являющихся следствиями из (2.3):

$$j_{mx} = 0, \quad w_x = 0, \quad \Pi_{xx}^\tau = \Pi_{xy}^\tau = \Pi_{xz}^\tau = 0,$$

$$\delta_x^b u_x = (1 - a_{+\frac{3}{2}}) \frac{(u_x)_{+\frac{1}{2}}}{h/2} + a_{+\frac{3}{2}} \frac{9(u_x)_{+\frac{1}{2}} - (u_x)_{+\frac{3}{2}}}{3h}, \quad \delta_y^b u_x = \delta_z^b u_x = 0,$$

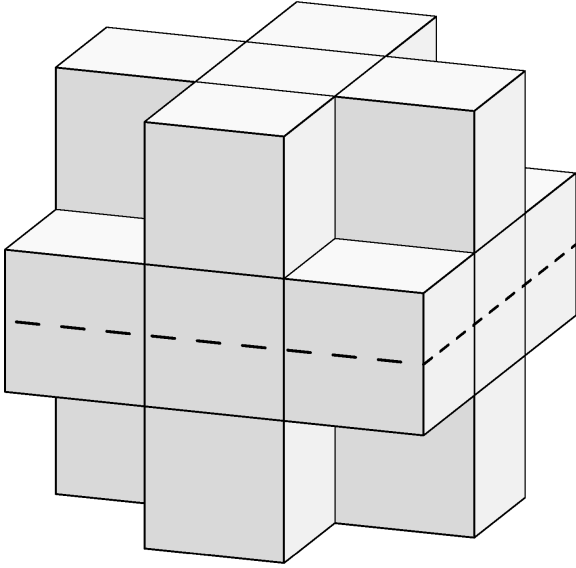
$$\delta_x^b u_l = (1 - a_{+\frac{3}{2}}) \frac{(u_l)_{+\frac{1}{2}}}{\lambda + h/2} + a_{+\frac{3}{2}} \frac{9(u_l)_{+\frac{1}{2}} - (u_l)_{+\frac{3}{2}}}{3h + 8\lambda}, \quad \tau^{(x)} = \frac{\eta}{\rho_{a4} c_s^2 S c},$$

$$\Pi_{xx}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_x^b u_x - \frac{2}{3} \eta [\delta_y^*(u_y)_{a5} + \delta_z^*(u_z)_{a5}], \quad \Pi_{xy}^{NS} = \eta \delta_x^b u_y, \quad \Pi_{xz}^{NS} = \eta \delta_x^b u_z,$$

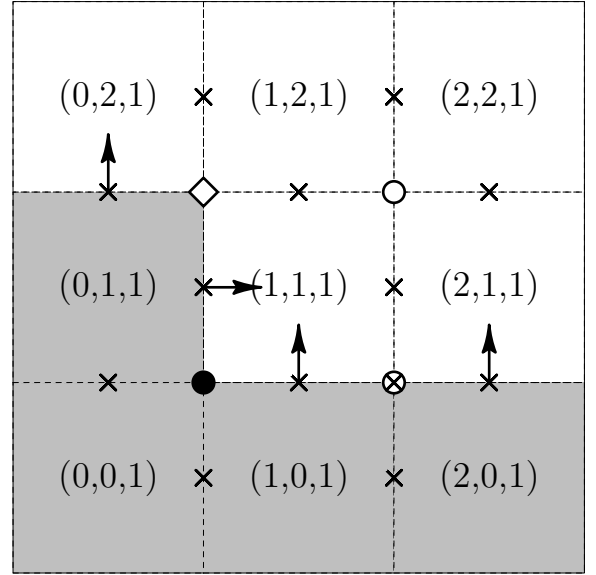
$$w_l^{(x)} = \tau^{(x)} \left[(u_y)_{a4} \delta_y^*(u_l)_{a5} + (u_z)_{a4} \delta_z^*(u_l)_{a5} + \frac{c_s^2 \delta_l^* \rho_{a5}}{\rho_{a4}} \right], \quad l \in \{y, z\}.$$

Для остальных граней разностные соотношения выписываются аналогично.

Видно, что для расчета необходимы значения в узлах сеток $\bar{\omega}_{y^*,h}^*$ и $\bar{\omega}_{z^*,h}^*$ (т.е. в центрах ребер). Они вычисляются с помощью алгоритмов 4 и 5, причем нижним индексом $a4$ помечены параметры, значения которых вычислены в алгоритме 4, а индексом $a5$ — в алгоритме 5.



(а) Шаблон описанной разностной схемы. Пунктиром обозначено сечение плоскостью, перпендикулярной оси Oz и проходящей через узел $(1, 1, 1)$. Сечение представлено на рисунке 2b.



(b) Сечение шаблона плоскостью перпендикулярной оси Oy для одной из возможных конфигураций неактивных ячеек.

Рис. 2. Шаблон представленной разностной схемы и пример расположения нормалей в его сечении.

Теперь рассмотрим случай, при котором все грани рассматриваемой ячейки инцидентны только активным ячейкам, но какое-то ребро оказалось инцидентно неактивной ячейке. В этом случае аппроксимации для \mathbf{w} и Π_{xx}^{NS} , Π_{xy}^{NS} , Π_{xz}^{NS} в рассматриваемом узле примут вид:

$$w_x = \tau^{(x)} \left[(s_x u_x) \delta_x u_x + (s_x u_y) \delta_y^*(u_x)_{a5} + (s_x u_z) \delta_z^*(u_x)_{a5} + \frac{\delta_x p}{s_x \rho} \right],$$

$$w_l^{(x)} = \tau^{(x)} \left[(s_x u_x) \delta_x u_l + (s_x u_y) \delta_y^*(u_l)_{a5} + (s_x u_z) \delta_z^*(u_l)_{a5} + \frac{\delta_l^* p_{a5}}{s_x \rho} \right],$$

$$\Pi_{xx}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_x u_x - \frac{2}{3} \eta (\delta_y^*(u_y)_{a5} + \delta_z^*(u_z)_{a5}), \quad \Pi_{xl}^{NS} = \eta \delta_l^*(u_x)_{a5} + \eta \delta_x u_l,$$

где $l \in \{y, z\}$. Разностные выражения для остальных параметров такие же как и в разделе 3.2.

В алгоритме 4 описана процедура вычисления значения в центральных узлах «основных» граней расчетного шаблона. На рисунке 2b эти узлы обозначены «крестиками» « \times ». Аналогично эти узлы расположены в двух других плоскостях (всего таких узлов $3 \cdot 12 = 36$). Тройки индексов этих узлов помещены в список *mainFaces*[36]. В строках с 4 по 13 определяется направление нормали \mathbf{n} в узле (i, j, k) и число неактивных ячеек ws , инцидентных соот-

Алгоритм 1 Процедура для расчета среднего значения в узле (i, j, k)

```
1: procedure AVR( $\mathbf{u}, \rho, i, j, k$ )
2:    $bi = (2i \bmod 2), bj = (2j \bmod 2), bk = (2k \bmod 2)$ 
3:    $\mathbf{u} = \mathbf{0}, \rho = 0$ 
4:   for  $ri = -bi/2$  to  $bi/2$  do
5:     for  $rj = -bj/2$  to  $bj/2$  do
6:       for  $rk = -bk/2$  to  $bk/2$  do
7:          $\mathbf{u}_{ijk} = \mathbf{u}_{ijk} + \mathbf{u}_{i+ri, j+rj, k+rk}, \rho_{ijk} = \rho_{ijk} + \rho_{i+ri, j+rj, k+rk}$ 
8:       end for
9:     end for
10:  end for
11:   $\mathbf{u}_{ijk} = \mathbf{u}_{ijk}/2^{(bi+bj+bk)}, \rho_{ijk} = \rho_{ijk}/2^{(bi+bj+bk)}$ 
12: end procedure
```

Алгоритм 2 Процедура для расчета значения в центре грани со вторым порядком точности

```
1: procedure CALCFACEVAL2( $\mathbf{u}, \rho, \mathbf{n}, i, j, k$ )
2:   if  $n_x \neq 0$  then
3:      $\rho_{i,j,k} = (9\rho_{i+n_x/2,j,k} - \rho_{i+3n_x/2,j,k})/8, u_x = 0, \lambda = \lambda(\rho_{i,j,k})$ 
4:      $(u_y)_{i,j,k} = \lambda \frac{9(u_y)_{i+n_x/2,j,k} - (u_y)_{i+3n_x/2,j,k}}{3h + \lambda 8}$ 
5:      $(u_z)_{i,j,k} = \lambda \frac{9(u_z)_{i+n_x/2,j,k} - (u_z)_{i+3n_x/2,j,k}}{3h + \lambda 8}$ 
6:   end if
7:    $\triangleright$  Аналогично для случаев  $n_y \neq 0$  и  $n_z \neq 0$ .
8: end procedure
```

Алгоритм 3 Процедура для расчета значения в центре грани с первым порядком точности

```
1: procedure CALCFACEVAL1( $\mathbf{u}, \rho, \mathbf{n}, i, j, k$ )
2:   if  $n_x \neq 0$  then
3:      $\rho_{i,j,k} = \rho_{i+n_x/2,j,k}, u_x = 0, \lambda = \lambda(\rho_{i,j,k})$ 
4:      $(u_y)_{i,j,k} = \lambda \frac{(u_y)_{i+n_x/2,j,k}}{0.5h + \lambda}, (u_z)_{i,j,k} = \lambda \frac{(u_z)_{i+n_x/2,j,k}}{0.5h + \lambda}$ 
5:   end if
6:    $\triangleright$  Аналогично для случаев  $n_y \neq 0$  и  $n_z \neq 0$ .
7: end procedure
```

ветствующей грани. Здесь отметим, что нормаль может быть коллинеарна только одной из координатных осей и $\|\mathbf{n}\| = 1$. Если $ws = 0$, то рассматриваемый узел не является граничным и значение в нем вычисляется обычным усреднением (см. алгоритм 1). Если $ws = 1$, то рассматриваемый узел является граничным. В этом случае параметры в нем вычисляются с точностью $O(h^2)$ с помощью алгоритма 2, если противоположная ячейка лежит в пределах шаблона и является активной. В противном случае используется алгоритм 3, имеющий точность $O(h)$. Значение $ws = 2$ соответствует тому, что узел (i, j, k) попал «внутри» стенки (обе инцидентные ячейки являются неактивными). В этом случае значение в нем не используется и никаких вычислений не проводится. Здесь и далее остаток от деления числа a на число b записывается как $(a \bmod b)$.

Значения в узлах (i, j, k) , соответствующих ребрам основной ячейки, вычисляются с помощью алгоритма 5. Тройки индексов этих узлов помещены в список *mainEdges*[12]. В строках 4–13 вычисляется количество неактивных ячеек, инцидентных рассматриваемому ребру. Если $ws = 0$, то есть все 4 ячейки являются активными, то значения в центре ребра вычисляются обычным усреднением. На рисунке 2b такой узел обозначен символом «○». Если только одна ячейка оказалась неактивной ($ws = 1$), то значение также вычисляется усреднением, только значения берутся не из центров инцидентных ячеек, а из центров инцидентных граней, значения в центрах которых были вычислены в алгоритме 4. На рисунке 2b такой узел обозначен символом «◇». Если $ws = 2$, то возможно две ситуации: у неактивных ячеек общее только ребро или общая только грань. Первый случай в настоящей работе рассматривается как вырожденный. Второй случай вполне естественный, и значение в центре ребра вычисляется усреднением значений в двух ближайших гранях. На рисунке 2b такой узел обозначен символом «⊗». Если оказалось, что $ws = 3$ (ребро имеет три неактивных инцидентных ему ячейки), то в узле (i, j, k) ставятся условия прилипания (даже если $\lambda > 0$). На рисунке 2b такой узел имеет индексы $(1/2, 1/2, 1)$ и обозначен символом «●». Случай $ws = 4$ исключен, поскольку основная ячейка всегда активна.

Как видно из описания алгоритма 5, разностная схема, учитывающая неактивное ребро, фактически совпадает со схемой расчета параметров вдали от границ, представленной в разделе 3.2, в случае когда соответствующее ребро активно.

4 Валидация численного алгоритма

Для валидации и верификации описанного численного алгоритма и соответствующего программного комплекса был проведен ряд тестовых расчетов. В данном разделе представим результаты расчетов изотермических течений

Алгоритм 4 Вычисление значений параметров в узлах, соответствующих центрам основных граней

```
1: for  $m = 1$  to 36 do
2:    $(i, j, k) = \text{mainFaces}[m]$ 
3:    $bi = (2i \bmod 2), bj = (2j \bmod 2), bk = (2k \bmod 2)$ 
4:    $n_x = n_y = n_z = 0, wc = 0$ 
5:   for  $ri = -bi/2$  to  $bi/2$  do
6:     for  $rj = -bj/2$  to  $bj/2$  do
7:       for  $rk = -bk/2$  to  $bk/2$  do
8:          $actv = a_{i+ri, j+rj, k+rk}$ 
9:          $n_x = n_x + 2 \cdot ri \cdot actv, n_y = n_y + 2 \cdot rj \cdot actv, n_z = n_z + 2 \cdot rk \cdot actv$ 
10:         $wc = wc + (1 - actv)$ 
11:       end for
12:     end for
13:   end for
14:   switch  $wc$  do
15:     case 0 ▷ все ячейки, инцидентные данной грани, активны
16:        $\text{AVR}(\mathbf{u}, \rho, i, j, k)$ 
17:     case 1 ▷ одна соседняя ячейка является неактивной
18:        $ii = i + \frac{3}{2}n_x, jj = j + \frac{3}{2}n_y, kk = k + \frac{3}{2}n_z$ 
19:       if  $(\{ii, jj, kk\} \in [0, 2] \text{ и } a_{ii, jj, kk} = 1)$  then
20:          $\text{CALCFACEVAL2}(\mathbf{u}, \rho, \mathbf{n}, i, j, k)$ 
21:       else
22:          $\text{CALCFACEVAL1}(\mathbf{u}, \rho, \mathbf{n}, i, j, k)$ 
23:       end if
24:   end switch
25: end for
```

умеренно-разреженного газа в трубках с квадратным и круглым сечениями, а также около сферы.

4.1 Течение в трубке квадратного сечения

В качестве первой тестовой задачи рассмотрим течение газа в трубке квадратного сечения. Пусть $L_x = L_z = 5 \cdot 10^{-6}$ м, $L_y = 2L_x$. Рассмотрим изотермическое течение газа с параметрами: $\eta = 1.5 \cdot 10^{-5}$ Па · с, $Sc = 0.77$, $\mathcal{R} = 2.0785 \cdot 10^3$ Дж/(кг · К), $T = 300$ К, $c_s = \sqrt{\mathcal{R}T} = 789.65$ м/с. Обозначим p_1 и p_2 — значения давления на входе ($y = 0$) и выходе ($y = L_y$) из трубки. Пусть $p_2 = 5 \cdot 10^4$ Па, $\Delta p = p_1 - p_2 = 0.001$ Па. При выбранных параметрах средняя длина свободного пробега составляет $\lambda = 2.969 \cdot 10^{-7}$ м. Для ско-

Алгоритм 5 Вычисление значений параметров в узлах, соответствующих ребрам основной ячейки

```
1: for  $m = 1$  to 12 do
2:    $(i, j, k) = \text{mainEdges}[m]$ 
3:    $bi = (2i \bmod 2), bj = (2j \bmod 2), bk = (2k \bmod 2)$ 
4:    $n_x = n_y = n_z = 0, wc = 0$ 
5:   for  $ri = -bi/2$  to  $bi/2$  do
6:     for  $rj = -bj/2$  to  $bj/2$  do
7:       for  $rk = -bk/2$  to  $bk/2$  do
8:          $actv = a_{ri+i, rj+j, rk+k}$ 
9:          $n_x = n_x + 2 \cdot ri \cdot actv, n_y = n_y + 2 \cdot rj \cdot actv, n_z = n_z + 2 \cdot rk \cdot actv$ 
10:         $wc = wc + (1 - actv)$ 
11:      end for
12:    end for
13:  end for
14:  switch  $wc$  do
15:    case 0 ▷ все ячейки, инцидентные данной грани, активны
16:       $\text{AVR}(\mathbf{u}, \rho, i, j, k)$ 
17:    case 1 ▷ одна соседняя ячейка является неактивной
18:       $\mathbf{u}_{i,j,k} = 0, \rho_{i,j,k} = 0$ 
19:      if  $bi = 1$  then
20:        for  $ri = -bi/2$  to  $bi/2$  do
21:           $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{u}_{i,j,k} + \mathbf{u}_{i+ri,j,k}, \rho_{i,j,k} = \rho_{i,j,k} + \rho_{i+ri,j,k}$ 
22:        end for
23:      end if
24:      if  $bj = 1$  then
25:        for  $rj = -bj/2$  to  $bj/2$  do
26:           $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{u}_{i,j,k} + \mathbf{u}_{i,j+rj,k}, \rho_{i,j,k} = \rho_{i,j,k} + \rho_{i,j+rj,k}$ 
27:        end for
28:      end if
29:      if  $bk = 1$  then
30:        for  $rk = -bk/2$  to  $bk/2$  do
31:           $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{u}_{i,j,k} + \mathbf{u}_{i,j,k+rk}, \rho_{i,j,k} = \rho_{i,j,k} + \rho_{i,j,k+rk}$ 
32:        end for
33:      end if
34:       $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{u}_{i,j,k}/4, \rho_{i,j,k} = \rho_{i,j,k}/4$ 
```

```

35:     case 2
36:         if  $\mathbf{n} = \mathbf{0}$  then ▷ Вырожденный случай
37:              $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{0}, \rho_{i,j,k} = \rho_{1,1,1}$ 
38:         else
39:              $ip = ib \cdot (1 - n_x^2), jp = jb \cdot (1 - n_y^2), kp = kb \cdot (1 - n_z^2)$ 
40:             for  $ri = -ip/2$  to  $ip/2$  do
41:                 for  $rj = -jp/2$  to  $jp/2$  do
42:                     for  $rk = -kp/2$  to  $kp/2$  do
43:                          $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{u}_{i,j,k} + \mathbf{u}_{i+ri,j+rj,k+rk}$ 
44:                          $\rho_{i,j,k} = \rho_{i,j,k} + \rho_{i+ri,j+rj,k+rk}$ 
45:                     end for
46:                 end for
47:             end for
48:              $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{u}_{i,j,k}/2, \rho_{i,j,k} = \rho_{i,j,k}/2$ 
49:         end if
50:     case 3
51:          $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{0}, \rho_{i,j,k} = \rho_{1,1,1}$ 
52:     end switch
53: end for

```

рости на входе и выходе поставим «мягкие» условия: $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$. Шаг по пространству выбирался как $h = L_x / N_x$.

Полученные в расчетах значения будем сравнивать с решением следующей краевой задачи:

$$\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial p}{\partial y}, \quad (x, z) \in \Omega_{xz}; \quad u_y = \lambda \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{\partial u_y}{\partial \mathbf{n}}, \quad (x, z) \in \partial \Omega_{xz}, \quad (4.6)$$

которая является следствием из (2.1) в предположении о несжимаемости и $p = p(y)$, $u_y = u_y(x, z)$, $u_x = u_z = 0$. Здесь Ω_{xz} — квадратная область со стороной $a = L_x$, а $\partial \Omega_{xz}$ — граница этой области с внутренней единичной нормалью \mathbf{n} . Заметим, что с учетом сделанных предположений массовый расход через поперечное сечение трубки можно представить в виде

$$Q_m = \int_0^{L_x} \int_0^{L_z} \rho u_y \, dx dz - \int_0^{L_x} \int_0^{L_z} \rho w_y \, dx dz = \rho Q_v^{NS} + \frac{L_x L_z \eta \Delta p}{L_y \rho c_s^2 Sc}, \quad (4.7)$$

где объемный расход газа, не учитывающий КГиД добавки:

$$Q_v^{NS} = \int_0^{L_x} \int_0^{L_z} u_y \, dx dz.$$

Таблица 1. Результаты расчетов течения в трубке квадратного сечения. Здесь $\|f\|_\infty = \max_{i,k} |f_{i,N_y/2,k}|$. В последней строке представлены опорные значения.

| N_x | Прилипание ($\lambda = 0$) | | | Проскальзывание ($\lambda > 0$) | | |
|-------|------------------------------|--------------------------------|-------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|-------------------------|
| | $\ u_y - u_y^e\ _\infty$ | $u_y^{max}, 10^{-5}\text{М/с}$ | $k, 10^{-12}\text{М}^2$ | $\ u_y - u_y^{fem}\ _\infty$ | $u_y^{max}, 10^{-5}\text{М/с}$ | $k, 10^{-12}\text{М}^2$ |
| 8 | $9.68 \cdot 10^{-8}$ | 1.1858 | 0.9647 | $9.37 \cdot 10^{-8}$ | 1.4682 | 1.3689 |
| 16 | $3.08 \cdot 10^{-8}$ | 1.2166 | 0.9178 | $2.84 \cdot 10^{-8}$ | 1.4990 | 1.3604 |
| 32 | $8.57 \cdot 10^{-9}$ | 1.2249 | 0.8975 | $7.82 \cdot 10^{-9}$ | 1.5071 | 1.3588 |
| 64 | $2.25 \cdot 10^{-9}$ | 1.2271 | 0.8879 | $2.02 \cdot 10^{-9}$ | 1.5092 | 1.3585 |
| — | — | 1.2279 | 0.8786 | — | 1.5095 | 1.3584 |

Заметим, что второе слагаемое в (4.7) пропорционально $\text{Kn}^2 = (\lambda/L_y)^2$.

Если $\lambda = 0$ (то есть если выполнены условия прилипания), то для задачи (4.6) можно выписать решение в виде ряда:

$$u_y^e = -\frac{16a^2}{\pi^4\eta} \frac{\partial p}{\partial y} \sum_{n,k=1}^{\infty} \frac{1}{nk(n^2+k^2)} \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi kz}{a}\right), \quad (4.8)$$

где суммирование ведется по нечетным n и k . Интегрируя (4.8) по сечению канала, получаем для объемного расхода

$$Q_v^{NS} \approx -\frac{a^4}{\eta} \frac{\partial p}{\partial y} 0.035144.$$

Коэффициент проницаемости k связан с Q_m по формуле [14, стр. 67]:

$$Q_m = \frac{k(p_1^2 - p_2^2)|A|}{2\eta c_s^2 L_y}, \quad (4.9)$$

где $|A|$ — площадь сечения A , перпендикулярного оси Oy .

Поэтому для коэффициента проницаемости канала в рассматриваемом случае имеем $k_{no\ slip}^e = L_x^4 \cdot 0.035144 / (L_x L_z) = 0.8786 \cdot 10^{-12} \text{М}^2$. По формуле (4.8) для максимальной скорости получаем $u_y^{e,max} = 1.2279 \cdot 10^{-5} \text{М/с}$.

В случае $\lambda > 0$ (то есть если выполнены условия скольжения) будем использовать решение задачи (4.6), полученное численно, а именно с помощью метода конечных элементов (функции формы выбраны линейными, конечные элементы треугольными, а их количество $\approx 2 \cdot 10^4$): $u_y^{fem,max} = 1.5095 \cdot 10^{-5} \text{М/с}$, $k_{slip}^{fem} = 1.3584 \cdot 10^{-12} \text{М}^2$. Здесь отметим, что $\rho Q_v^{fem} = 1.718 \cdot 10^{-17} \text{М}^3/\text{с}$, а второе слагаемое из (4.7), обусловленное КГиД-добавками, имеет значение $0.0974 \cdot 10^{-17}$. При выбранных условиях величина потока, связанная с наличием в уравнениях КГиД-слагаемых составляет $\approx 5\%$ от общего расхода.

В таблице 1 представлены результаты проведенных расчетов на различных сетках: значения максимального отклонения, максимальной скорости и проницаемости (массовый расход вычислялся как $Q_m = \frac{1}{N_y} \sum_{k,l,m} (j_{my})_{k,l,m} h^2$, подробнее см. [4,5]). Из приведенных данных видно, что для обоих случаев наблюдается сходимость к опорному (валидационному) решению. Причем для случая прилипания наблюдаемый порядок сходимости ≈ 1.1 , а для случая проскальзывания ≈ 1.9 . Это можно объяснить тем, что в расчетах с прилипанием параметр τ пропорционален шагу сетки h (поскольку в этом случае τ играет роль только регуляризирующего параметра, см. формулу (2.5)), а для случая проскальзывания τ вычисляется по формуле (2.2), куда h не входит.

4.2 Течение в трубке круглого сечения

Теперь рассмотрим течение в трубке круглого сечения радиуса R длиной $L_y = 4R$. Параметры газа, граничные и начальные условия задаются такими же как и в разделе 4.1.

В таблице 2 представлены результаты проведенных расчетов на различных сетках: значения коэффициента проницаемости k , максимальной скорости u_y^{max} вдоль оси Oy и относительные отклонения $\varepsilon_y = \|u_y^e - u_y\|_2 / \|u_y^e\|_2$, где $\|f\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j,k} f_{i,j,k}^2}$ для некоторой сеточной функции f .

В отличие от предыдущей задачи здесь границы расчетной области имеют «ступенчатую форму»: на рисунке 3 представлено сечение трубки на различных сетках. Число N_R соответствует количеству ячеек, приходящихся на радиус сечения трубки. Серым цветом закрашены неактивные ячейки, а белым — активные. Черной линией обозначена граница «истинного» сечения.

Ясно что при измельчении шага расчетной сетки площадь «воксельного» круга будет стремиться к площади «истинного» круга, однако длина «воксельной» окружности постоянна при $h \rightarrow 0$ и равна $8R$. По этой причине можно ожидать, что характеристики течения могут содержать *неустраняемые* ошибки, то есть не стремящиеся к нулю при $h \rightarrow 0$. В свою очередь, это объясняет, почему представленные в таблице 2 результаты не сходятся к точному решению при измельчении сетки (но весьма к нему близки).

Отметим, что существуют методы, позволяющие осуществить подсеточное разрешение границ расчетной области (метод вложенной границы, cut-cell метод и др.). Они в данной работе не рассматриваются.

Для данной задачи (в случае точного задания геометрии) известно аналитическое решение [6, стр. 101]:

$$u_y^e = \frac{\Delta p}{4\eta L_y} [(R^2 - r^2) + 2\lambda R], \quad u_\phi^e = u_r^e = 0, \quad p^e = \left(1 - \frac{y}{L_y}\right) p_1 + \frac{y}{L_y} p_2, \quad (4.10)$$

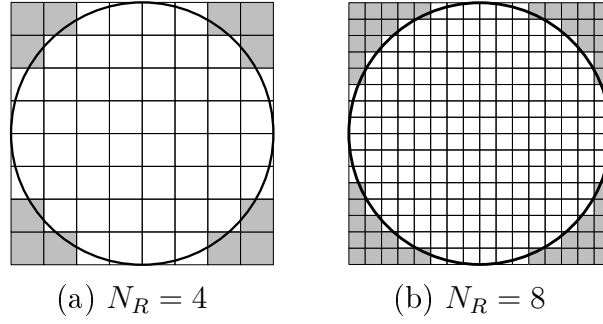


Рис. 3. Сечения трубки для различных значений N_R .

Таблица 2. Результаты расчетов задачи о течении в трубке круглого сечения. В последней строке указаны значения, полученные на основе (4.10), (4.11).

| N_R | Прилипание ($\lambda = 0$) | | | Проскальзывание ($\lambda > 0$) | | |
|-------|------------------------------|----------------------------------|---------------------------|-----------------------------------|----------------------------------|---------------------------|
| | ε_y | $u_y^{max}, 10^{-5} \text{ м/с}$ | $k, 10^{-12} \text{ м}^2$ | ε_y | $u_y^{max}, 10^{-5} \text{ м/с}$ | $k, 10^{-12} \text{ м}^2$ |
| 4 | 0.0550 | 1.0314 | 0.7104 | 0.0292 | 1.2403 | 0.9620 |
| 8 | 0.0442 | 1.0557 | 0.6737 | 0.0153 | 1.2693 | 0.9612 |
| 16 | 0.0098 | 1.0423 | 0.6323 | 0.0488 | 1.2474 | 0.9188 |
| 32 | 0.0051 | 1.0400 | 0.6198 | 0.0573 | 1.2418 | 0.9083 |
| — | — | 1.0416 | 0.6135 | — | 1.2891 | 0.9743 |

где r — расстояние до оси трубки, u_r^e, u_ϕ^e — радиальная и азимутальная составляющие скорости \mathbf{u}^e соответственно. Выражение для массового расхода имеет вид:

$$Q_m^e = \frac{\pi \rho R^4 \Delta p}{8 \eta L} (1 + 4\xi + 8\xi^2), \quad \text{где } \xi = \frac{\eta}{\rho c_s R} = \frac{\lambda}{R} = \text{Кн}. \quad (4.11)$$

Тогда для проницаемости и максимальной скорости в случае $\lambda = 0$ имеем: $k_{no\ slip}^e = 0.6135 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2$, $u_{y,no\ slip}^{e,max} = 1.0416 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$; в случае $\lambda > 0$ имеем: $k_{slip}^e = 0.9743 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2$, $u_{y,slip}^{e,max} = 1.2891 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$. При вычислении проницаемости здесь использована не площадь сечения самой трубки, а площадь того квадрата, в который это сечение вписано: $|A| = 4R^2$.

4.3 Обтекание сферы

В данном разделе рассмотрим задачу изотермического обтекания медленным потоком вязкого умеренно-разреженного газа сферы радиуса R с центром, расположенным в начале координат. Будем считать, что набегающий поток направлен вдоль оси Oz . Рассмотрим сферические координаты (r, φ, θ) ,

связанные с декартовыми соотношениями $x = r \cos \varphi \sin \theta$, $y = r \sin \varphi \sin \theta$, $z = r \cos \theta$, $\theta \in [0, \pi)$, $\varphi \in [0, 2\pi)$. Для КГиД-системы в приближении Стокса известно аналитическое решение данной задачи [6, стр. 178, 179]:

$$u_r^e = A \left(\frac{r}{R} \right) U_\infty \cos \theta, \quad u_\varphi^e = 0, \quad u_\theta^e = -B \left(\frac{r}{R} \right) U_\infty \sin \theta, \quad (4.12)$$

$$p^e = p_\infty + C \left(\frac{r}{R} \right) U_\infty^2 \cos \theta, \quad (4.13)$$

где

$$A(x) = 1 - \frac{1}{x^3} - c_1^* \left(\frac{1}{x} - \frac{1 + \delta^2}{x^3} \right) - \frac{c_2^*}{x^3} \left[2 \left(1 + \frac{x}{\delta} \right) + \frac{x^2}{\delta^2} \right] \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right),$$

$$B(x) = 1 + \frac{1}{2x^3} - \frac{c_1^*}{2} \left(\frac{1}{x} + \frac{1 + \delta^2}{x^3} \right) + \frac{c_2^*}{x^3} \left(1 + \frac{x}{\delta} \right) \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right),$$

$$C(x) = -\frac{1}{\text{Re}} \left[\frac{c_1^*}{x^2} - \frac{2c_2^*}{x^2 \delta^2} \left(1 + \frac{x}{\delta} \right) \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right) \right],$$

$$c_1^* = \frac{3 + 6\delta + 6\delta^2}{2\xi + 4\xi(\delta + \delta^2) + \delta^2}, \quad c_2^* = \frac{3\delta^4}{2\xi + 4\xi(\delta + \delta^2) + \delta^2} \exp \left(\frac{1}{\delta} \right), \quad \xi = \frac{1 + 2\zeta}{1 + \zeta}.$$

Величины U_∞ и p_∞ соответствуют z -компоненте скорости и давлению газа на бесконечности соответственно. С учетом $u_\varphi^e = 0$ для компонент скорости в декартовых координатах u_x^e , u_y^e , u_z^e имеем:

$$u_x^e = u_r^e \sin \theta \cos \varphi + u_\theta^e \cos \theta \cos \varphi, \quad (4.14)$$

$$u_y^e = u_r^e \sin \theta \sin \varphi + u_\theta^e \cos \theta \sin \varphi, \quad (4.15)$$

$$u_z^e = u_r^e \cos \theta - u_\theta^e \sin \theta. \quad (4.16)$$

Выражение для силы сопротивления имеет следующий вид [6, стр. 179]:

$$F_{d,slip}^e = \frac{2}{3} c_1^* 6\pi\eta R U_\infty = \left[1 - \alpha \text{Kn} + 2 \left(\alpha^2 - \frac{1}{\pi \text{Sc}} \right) \text{Kn}^2 + \dots \right] 6\pi\eta R U_\infty. \quad (4.17)$$

Здесь $\text{Kn} = \lambda/R$, $\text{Re} = \rho_\infty U_\infty R/\eta$, $\alpha = (2 - \sigma)/\sigma$, $\zeta = \alpha\lambda/R$, $\delta = 2\lambda/(R\sqrt{\pi \text{Sc}})$. Отметим, что если не учитывать проскальзывание на твердой стенке и формально положить $\lambda = 0$, то $\delta = 0$, $\xi = 1$ и формулы (4.12), (4.13), (4.17) сведутся к классическим формулам, соответствующим течению жидкости с граничными условиями прилипания.

Рассмотрим течение газа с параметрами из раздела 4.1. Пусть на бесконечности $U_\infty = 10^{-2}$ м/с, $p_\infty = 5 \cdot 10^4$ Па, $\rho_\infty = p_\infty/c_s^2$. Геометрические параметры расчетной области: $L_x = L_y = L_z = 50 \cdot 10^{-6}$ м, $R = 1.5 \cdot 10^{-6}$ м.

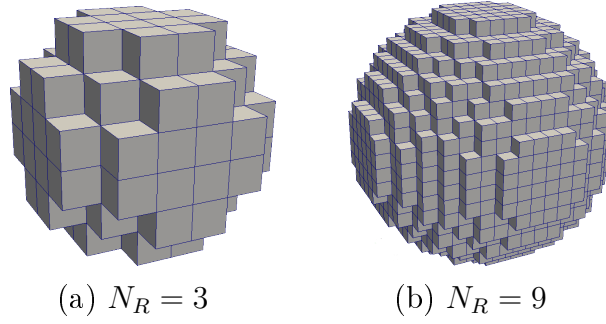


Рис. 4. «Воксельная» сфера при различном измельчении расчетной сетки.

Тогда $\text{Kn} = 0.2$, $\text{Re} = 8 \cdot 10^{-5}$. При указанных параметрах для силы сопротивления в случае обтекания сферы с условиями прилипания на границе имеем $F_{d,no\ slip}^e = 4.24 \cdot 10^{-12}$ Н; с условиями проскальзывания — $F_{d,slip}^e = 3.58 \cdot 10^{-12}$ Н.

Пусть на всех границах расчетной области значения скорости и давления заданы согласно аналитическому решению (4.13), (4.14) – (4.16). Расчет прекращался при выполнении условия $\|\partial \mathbf{u} / \partial t\|_{\infty} < 10^{-6}$.

В таблице 4 представлены результаты расчетов с условиями прилипания и проскальзывания: значения силы сопротивления F_d , относительные отклонения полученного решения от точного: $\varepsilon_l = \|u_l - u_l^e\|_2 / \|u_l^e\|_2$, где $l \in \{x, y, z\}$. Во всех случаях $\varepsilon_x = \varepsilon_y$. Число N_R соответствует количеству ячеек, приходящихся на радиус сферы.

На рисунках 5–8 представлены распределения компоненты скорости u_z вдоль прямых l_1 , l_2 , l_3 и l_4 соответственно (см. таблицу 3), полученные при расчете течения с условиями прилипания. На рисунках 9–12 представлены распределения компоненты скорости u_z вдоль тех же прямых, полученные при расчете течения с условиями проскальзывания. Во всех расчетах проекции силы сопротивления на направления Ox и Oy не превышали значения машинного нуля.

Из представленных данных видно, что полученные в расчетах значения параметров течения близки к теоретическим, однако к ним не сходятся. Особенно это заметно вблизи поверхности сферы. По мере удаления от поверхности сходимости несколько лучше. На некоторых графиках можно заметить как решение около границы резко «загибается». Это связано с тем, что с одной стороны на границах расчетной области ставятся условия Дирихле на основании *аналитического решения* (4.13), (4.14)–(4.16), а с другой — полученное решение, как было сказано выше, не стремится к точному.

Такое поведение можно объяснить тем, что воксельное представление сферы содержит *неустранимую* ошибку: при уменьшении шага сетки представление улучшается (см. рисунки 4а–4б), однако площадь поверхности «воксельной» сферы не стремится к площади настоящей (она стремится к значению $6\pi R^2$). См. также обсуждение в разделе 4.2.

Таблица 3. Описание прямых, вдоль которых рассматриваются параметры течения в задаче обтекания сферы.

| Прямая | Система координат | |
|--------|---|---|
| | Декартова | Сферическая |
| l_1 | $x = y = 0, z \in [R, L_z/2]$ | $\theta = \pi/2, \varphi = \pi/2, r \in [R, L_z/2]$ |
| l_2 | $x \in [-L_x/2, L_x/2], y = 2R, z = 2R$ | $r = \sqrt{x_0^2 + 8R^2}, \cos \theta = 2R/r,$ $\cos \varphi = x_0/(r \sin \theta), x_0 \in [-L_x/2, L_x/2]$ |
| l_3 | $x = 0, y = 3R, z \in [-L_z/2, L_z/2]$ | $r = \sqrt{9R^2 + z_0^2}, \cos \theta = z_0/r,$ $\cos \varphi = 0, z_0 \in [-L_z/2, L_z/2]$ |
| l_4 | $x = z = 0, y \in [R, L_y/2]$ | $r \in [R, L_y/2], \varphi = \theta = \pi/2$ |

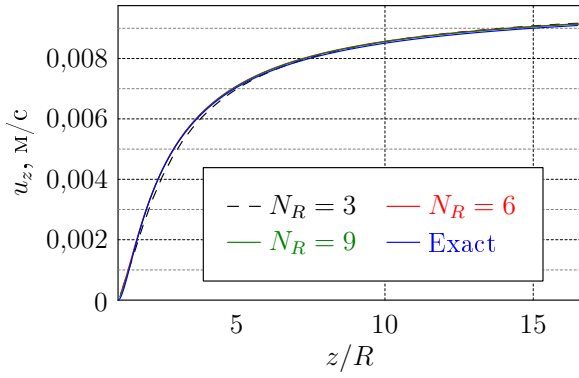
Таблица 4. Результаты расчета обтекания сферы. В последней строке указаны значения F_d , рассчитанные по формуле (4.17).

| N_R | N_x | Прилипание ($\lambda = 0$) | | | Проскальзывание ($\lambda > 0$) | | |
|-------|-------|------------------------------|-----------------|-------------------------|-----------------------------------|-----------------|-------------------------|
| | | ε_x | ε_z | $F_d, 10^{-12}\text{Н}$ | ε_x | ε_z | $F_d, 10^{-12}\text{Н}$ |
| 3 | 100 | 0.0709 | 0.0068 | 4.6301 | 0.1314 | 0.0073 | 4.3444 |
| 6 | 200 | 0.0540 | 0.0051 | 4.3268 | 0.0897 | 0.0064 | 4.0453 |
| 9 | 300 | 0.0451 | 0.0042 | 4.3293 | 0.0920 | 0.0065 | 4.0699 |
| — | — | — | — | 4.2412 | — | — | 3.5790 |

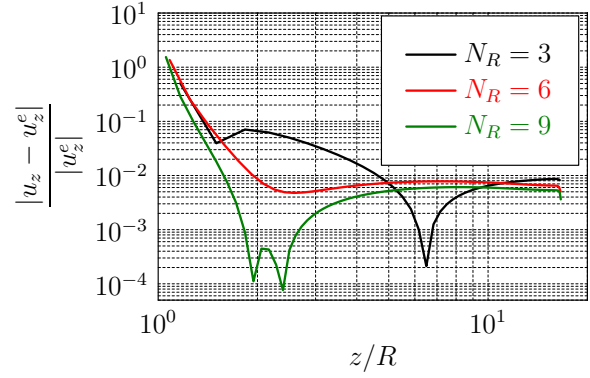
5 Заключение

В настоящей работе представлен алгоритм, основанный на КГиД-системе уравнений, для расчета изотермических течений вязкого газа в областях с воксельной геометрией. Алгоритм позволяет использовать как условия прилипания, так и условия скольжения на границе с твердой поверхностью. Работоспособность и корректность представленного алгоритма продемонстрирована на задачах о течении в трубке квадратного сечения, в трубке круглого сечения и около сферы. В последних двух задачах полученное решение не стремится к аналитическому, однако весьма к нему близко. Это объясняется наличием неустранимой при $h \rightarrow 0$ ошибки в задании геометрии расчетной области. Отметим, что с точки зрения приложений наличие такой ошибки не является проблемой, так как с одной стороны настоящая геометрия области неизвестна, а с другой — используемая в расчетах геометрия является наиболее точной.

В дальнейших работах планируется применить представленный алгоритм для расчета течений в образцах горных пород с целью определения их фильтрационных свойств.

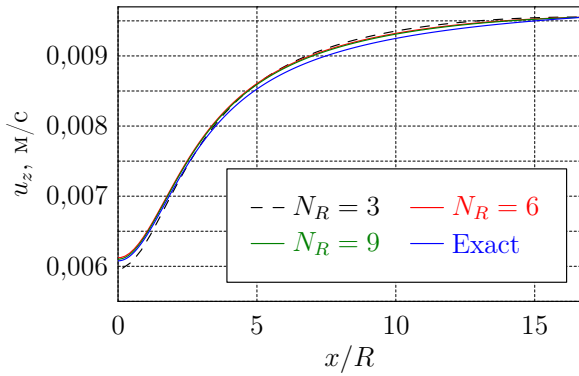


(a) Значения u_z на различных сетках

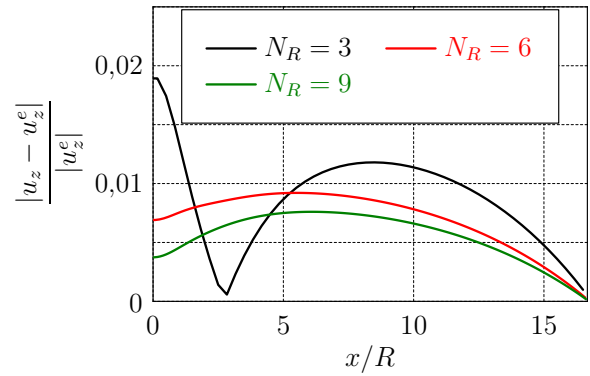


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 5. Распределение u_z вдоль l_1

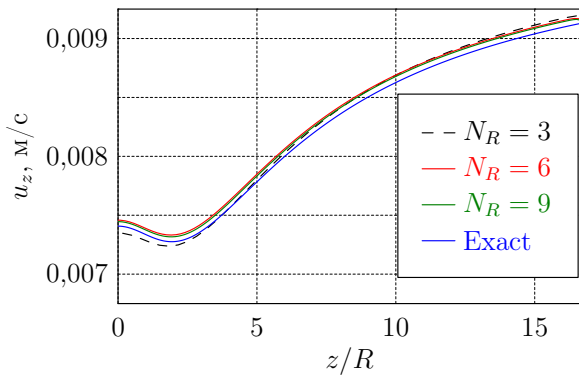


(a) Значения u_z на различных сетках

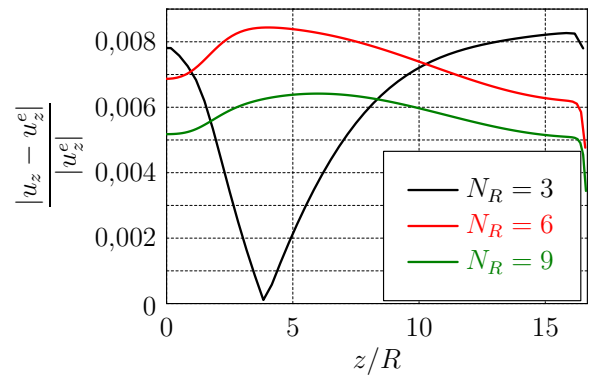


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 6. Распределение u_z вдоль l_2

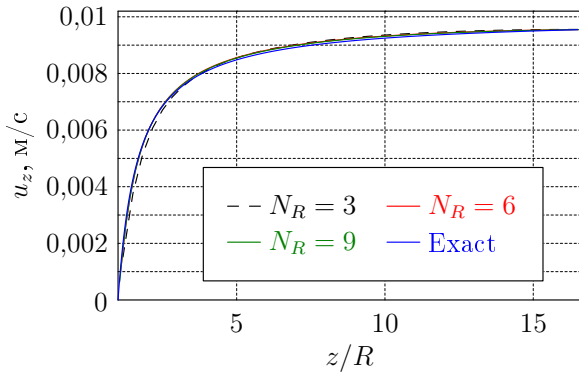


(a) Значения u_z на различных сетках

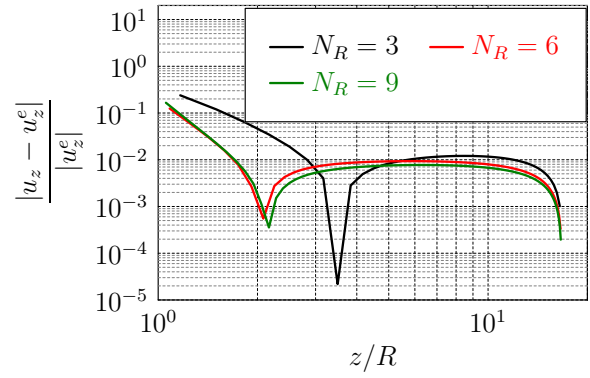


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 7. Распределение u_z вдоль l_3

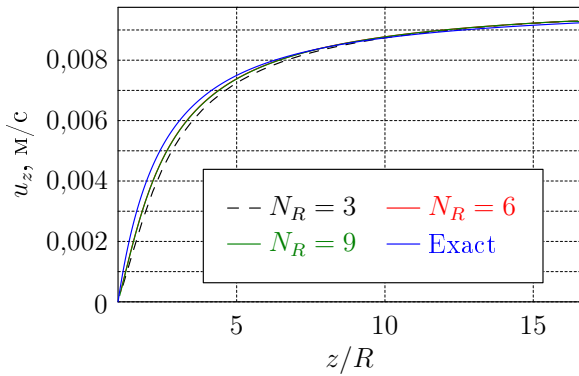


(a) Значения u_z на различных сетках

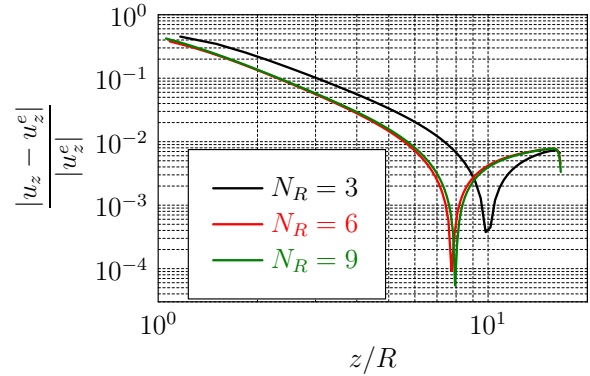


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 8. Распределение u_z вдоль l_4

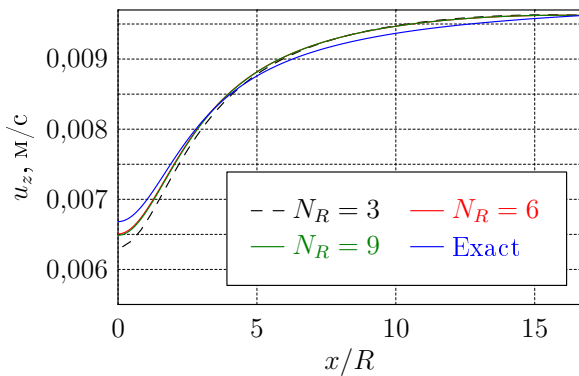


(a) Значения u_z на различных сетках

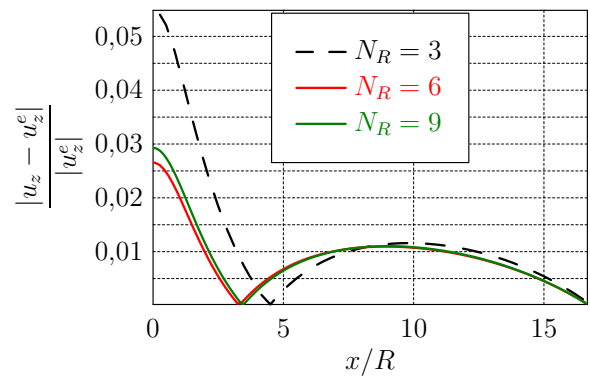


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 9. Распределение u_z вдоль l_1 для течения с проскальзыванием

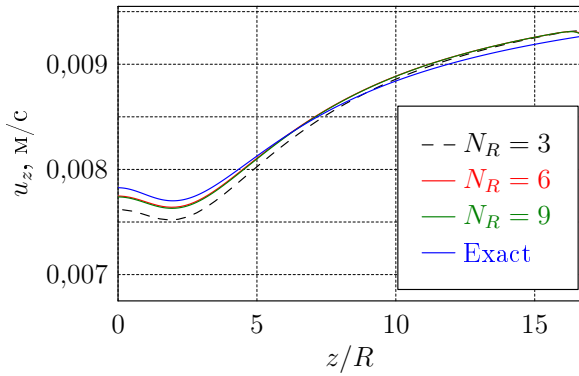


(a) Значения u_z на различных сетках

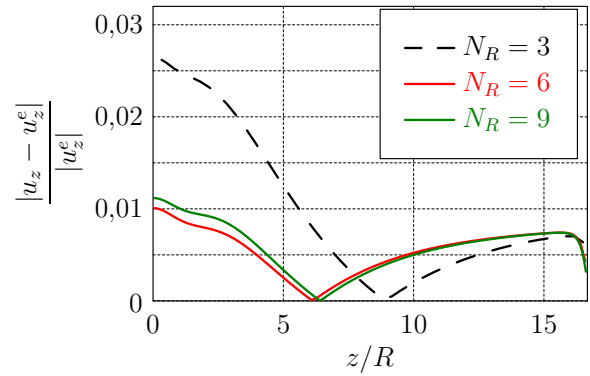


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 10. Распределение u_z вдоль l_2 для течения с проскальзыванием

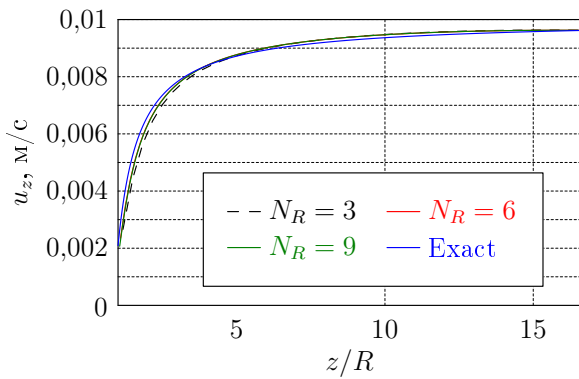


(a) Значения u_z на различных сетках

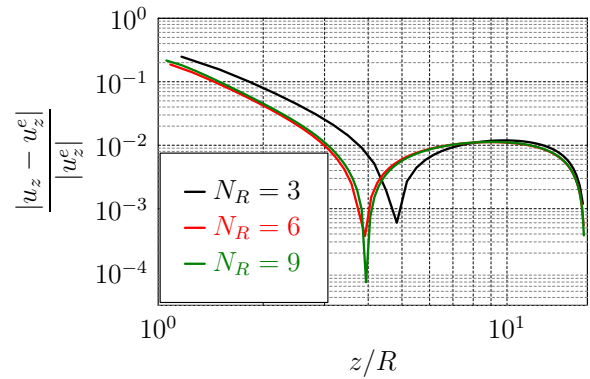


(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 11. Распределение u_z вдоль l_3 для течения с проскальзыванием



(a) Значения u_z на различных сетках



(b) Отклонение u_z от u_z^e

Рис. 12. Распределение u_z вдоль l_4 для течения с проскальзыванием

Список литературы

- [1] Dvorkin J., Derzhi N., Diaz E., Fang Q. Relevance of computational rock physics. // *Geophysics*, V. 76. 2011, No. 5, E141–E153.
- [2] Blunt M. J., Bijeljic B., Dong H., Gharbi O., Iglauer S., Mostaghimi P., Paluszny A., Pentland C., Pore-scale imaging and modelling // *Advances in Water Resources*, V. 51. 2013. P. 197–216
- [3] Балашов В.А., Савенков Е.Б. Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в микрообразцах горных пород // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2015. № 84. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-84>
- [4] Балашов В.А. Прямое моделирование течений умеренно-разреженного газа в двумерных модельных пористых средах // *Матем. моделирование*, 2018, т. 30, № 1, с. 3-16. (принята к печати)
- [5] Балашов В.А. Численное моделирование двумерных течений умеренно-разреженного газа в областях со сложной геометрией // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2016. № 104. 24 с. doi:10.20948/prepr-2016-104 URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-104>
- [6] Шеретов Ю. В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009. 400 с.
- [7] Четверушкин Б. Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004. 332 с.
- [8] Елизарова Т. Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007. 352 с.
- [9] Karniadakis G. E., Beskok A., Aluru N. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation*. Springer-Verlag, 2005.
- [10] Семенов М. В., Шеретов Ю. В.. Численное моделирование дозвуковых осесимметричных течений газа вблизи шара. // *Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика*, Т. 1. 2006. № 3, с. 78–97.
- [11] Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М: Наука, 1967. 440 с.
- [12] Сивухин Д. В. *Общий курс физики. Т. II Термодинамика и молекулярная физика*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 576 с.
- [13] Злотник А. А. О консервативных пространственных дискретизациях баротропной квазигазодинамической системы уравнений с потенциальной массовой силой. // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, Т. 56. 2016. № 2, с. 301–317.
- [14] Басниев К. С., Кочина И. Н., Максимов В. М. *Подземная гидромеханика, Т. 2*. Москва «Недра», 1993, с. 416.