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

Препринты ИПМ • Препринт № 59 за 2021 г.

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

М.А. Кирюшина, Т.Г. Елизарова

Моделирование запуска сопла для генерации недорасширенной струи водорода

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Кирюшина М.А., Елизарова Т.Г. Моделирование запуска сопла для генерации недорасширенной струи водорода // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 59. 30 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2021-59
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-59

ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. КЕЛДЫША
Российской академии наук

М.А. Кирюшина, Т.Г. Елизарова

Моделирование запуска сопла для генерации недорасширенной струи водорода

Москва — 2021

М.А. Кирюшина, Т.Г. Елизарова **Моделирование запуска сопла для генерации недорасширенной струи водорода**

Проведено численное моделирование течения водорода в микросопле, которое используется в качестве основного элемента в экспериментальной установке для изучения свойств разреженных газов при высоких скоростях и низких температурах. Особенности нестационарного течения – перепад давлений, скоростей и сложную геометрию задачи удалось единообразно описать в рамках квазигазодинамического алгоритма, включенного в открытую платформу OpenFOAM.

Ключевые слова: метод конечного объема, открытый программный комплекс OpenFOAM, недорасширенная струя водорода

M.A. Kiryushina, T.G. Elizarova **Modelling of nozzle start-up hydrogen underexpanded jet generation**

Numerical simulation of hydrogen jet in the micronozzle is carried out, which is used as the main element in the experimental installation to study the properties of rarefied gases at high speeds and low temperatures. The features of the transient jet flow - pressure gradients, velocities and the complex geometry of the problem are uniformly described within the framework of the quasi-gas dynamic algorithm included in the open platform OpenFOAM.

Key words: finite volume method, open software complex OpenFOAM, underdeveloped hydrogen jet

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-01-00169.

Содержание

1 Введение

В работе изложены результаты численного моделирования процесса запуска микросопла, в котором формируется струя водорода, вытекающая в камеру низкого давления. Изучаемое сопло долгое время используется для проведения экспериментов со струями водорода, водородных смесей и других газов для изучения их свойств при низких температурах. В частности, детально изучались неравновесные процессы в струе, состоящей из смеси 25 процентов пара– и 75 орто–водорода низкой плотности и температуры, которые достигались при расширении струи при ее истечении в область низкого давления, достигающего 160 Па. Температуры в струе составляли 5-20 градусов Кельвина, см., например, [1], [2], [3]. Газ в этой зоне становится существенно разреженным, и его исследование проводится с помощью Рамановского спектрометра, который позволяет с высокой точностью определять числовую плотность и кинетические составляющие температуры на оси струи. Остальные параметры струи рассчитываются на основании дополнительных кинетических соотношений и основных принципов классической газодинамики. Поэтому большой интерес для экспериментаторов представляет полный газодинамический расчет струи во всей трехмерной области ее течения, включая нестационарные эффекты, возникающие при запуске сопла.

В данной работе проводится численное моделирование запуска сопла, начиная от заданных в эксперименте начальных условий в камере, соединенной со входом в сопло, и заканчивая течением струи, формирующимся при ее вытекании в камеру низкого давления. В работе использованы реальные параметры сопла и данные, известные из эксперимента по условиям на входе в сопло и в камере низкого давления. Результаты сравниваются с измерениями, доступными из анализа спектрометрических величин.

В силу сложности геометрии задачи, достаточно подробных пространственных сеток и необходимости распараллеливания, а также табличного представления коэффициентов диссипации, учет которых требуется при расчете, вычисления проведены в рамках открытого пакета OpenFOAM [4]. Для учета реальных значений коэффициентов диссипации был дописан новый солвер и использовались имеющиеся возможности пакета OpenFOAM. Для анализа результатов расчета применялись современные способы графической обработки ParaView, имеющиеся в пакете OpenFOAM.

В приведенных расчетах применяется квазигазодинамический (КГД) алгоритм [5], [6], включенный в открытый пакет OpenFOAM [4]. Возможности КГД алгоритма позволяют рассчитывать нестационарные газодинамические течения в широком диапазоне чисел Маха и Рейнольдса, что существенно для поставленной задачи. Действительно, скорость течения газа в сопле меняется практически от нулевых значений на входе в сопло, вплоть до значений, соответствующих числам Маха порядка 9 на оси струи в зоне камеры низкого давления. При этом перепад давления недорасширенной струи, формирующейся на выходе из сопла, составляет порядка $2 \cdot 10^4$. КГД алгоритм обладает рядом настроечных параметров, адекватный выбор которых позволяет единообразно моделировать такое течение.

КГД алгоритм является разностной аппроксимацией осредненных уравнений газовой динамики [5] и [6]. Ранее этот алгоритм, реализованный в виде индивидуальных программ, применялся к численному моделированию недорасширенных струй азота и углекислого газа в сравнении с данными эксперимента для вариантов истечения в зону низкого давления с образованием диска Маха, см., например, [7]. Эти расчеты служат подтверждением возможностей алгоритма для моделирования недорасширенных струй.

Работа имеет следующую структуру. В первом разделе представлена постановка задачи, включающая систему уравнений Навье-Стокса и ее регуляризованный вариант, который используется для проведения расчетов, и приводятся параметры рабочего газа. Во втором разделе описана специфика решения задачи в рамках пакета OpenFOAM. А именно, определяется область расчета и способ задания пространственной сетки, указана постановка начальных и граничных условий и отмечены специфические настройки пакета OpenFOAM. В третьем разделе приведены результаты расчета формирования струи при запуске сопла. В четвертом разделе описан расчет фрагмента струи, истекающей в зону низкого давления, для которого имеются данные спектрометрических измерений на оси струи. В заключении приведены основные результаты работы. В двух приложениях конкретизированы программные особенности задания сетки и граничных условий.

2 Постановка задачи

Система уравнений газовой динамики в форме Навье–Стокса в виде уравнений баланса массы, импульса и полной энергии в традиционных обозначениях имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} &\partial_t \rho + \mathrm{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ &\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \mathrm{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \mathrm{div}\hat{\Pi}, \\ &\partial_t E + \mathrm{div}[(E+p)\mathbf{u}] + \mathrm{div}\mathbf{q} = \mathrm{div}(\hat{\Pi}\mathbf{u}). \end{aligned} \tag{1}$$

Знак $\otimes$ обозначает прямое тензорное произведение векторов.

Тензор вязких напряжений $\hat{\Pi}$ и вектор теплового потока $\mathbf{q}$ представлены как

$$\hat{\Pi} = \hat{\Pi}_{NS}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_{NS}, \tag{2}$$

$$\hat{\Pi}_{NS} = \mu((\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T - \frac{2}{3}\hat{I}\mathrm{div}\mathbf{u}), \tag{3}$$

$$\mathbf{q}_{NS} = -\kappa \nabla T, \tag{4}$$

$$p = \rho \widetilde{R} T, \widetilde{R} = \frac{R}{M}. \tag{5}$$

Здесь $\mu = \mu(\rho, T) > 0$ – коэффициент динамической вязкости, $\hat{I}$ – единичный тензор, $E = \rho\left(u_\varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)$ – полная энергия, $u_\varepsilon = e - \frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2$ – удельная внутренняя энергия, $T = \dfrac{p}{\rho\widetilde{R}}$ – температура, $p = \rho u_\varepsilon(\gamma - 1)$, коэффициент вязкости может быть вычислен по формуле $\mu = \mu(T) = \mu_0(T_0)\left(\dfrac{T}{T_0}\right)^\omega$ ($\omega = 0.67$ для водорода), коэффициент теплопроводности $\kappa = \dfrac{\mu\gamma\frac{R}{M}}{(\gamma - 1)Pr} = \dfrac{C_p\mu}{Pr}$, где γ – показатель адиабаты, Pr и Sc – числа Прандтля и Шмидта.

Газ в эксперименте представляет собой смесь чистого водорода H_2 и орто–водорода (Таблица 1).

Таблица 1. Параметры газовой смеси орто- и пара-водорода.

Величина	Значение
Масса молекулы H_2	$3.3 * 10^{-27}$ кг
Молярная масса M	$2.016 * 10^{-3}$ кг/моль
Газовая постоянная $\widetilde{R}$	4124 Дж/(кг·К)
Показатель адиабаты γ	1.41
Показатель ω	0.67
Число Прандтля Pr	0.69
Вязкость μ при $T = 273\ K$	$840.0 \cdot 10^{-8}$ Па· сек
Теплоемкость при постоянном давлении C_p	14183.11 Дж/(кг·К)

Регуляризованная система уравнений Навье–Стокса в обозначениях, принятых в OpenFOAM, выглядит следующим образом:

$$\partial_t \rho + \mathrm{div}(\mathbf{j_m}) = 0, \tag{6}$$

$$\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \mathrm{div}(\mathbf{j_m}\mathbf{u}) + \nabla p = \mathrm{div}\hat{\Pi}, \tag{7}$$

$$\partial_t(\rho e) + \mathrm{div}[\mathbf{j_m}(e + p/\rho)] + \mathrm{div}\mathbf{q} = \mathrm{div}(\hat{\Pi}\mathbf{u}), \tag{8}$$

$$\mathbf{j_m} = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}), \mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho}\left(\mathrm{div}(\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla \mathrm{p}\right),$$

$$\hat{\Pi} = \hat{\Pi}_{NS} + \tau\mathbf{u} \otimes (\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p) + \tau\hat{I}\left((\mathbf{u} \cdot \nabla)p + \gamma p \nabla \mathbf{u}\right),$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_{NS} - \tau\rho\mathbf{u}\left((\mathbf{u} \cdot \nabla)\, u_\varepsilon + p\,(\mathbf{u} \cdot \nabla)\frac{1}{\rho}\right).$$

В используемом алгоритме применяется регуляризованный аналог системы уравнений Навье-Стокса (6) – (8). Эта система включает в себя дополнительную искусственную диссипацию, которая обеспечивает устойчивость и точность разностного алгоритма, основанного на явном по времени методе конечного объема с аппроксимацией производных второго порядка точности. Вклад этой диссипации регулируется коэффициентом

$$\tau = \alpha \frac{\Delta x}{c}$$

и связанной с ним добавкой к коэффициенту динамической вязкости

$$\mu^{QGD} = p \cdot \tau \cdot Sc = p \cdot \alpha \cdot \frac{\Delta x}{c} \cdot Sc.$$

Здесь Δx – локальный размер шага пространственной сетки, c – локальная скорость звука, α – настроечный параметр алгоритма, который обычно лежит в пределах $0 < \alpha < 1$ и определяет точность и величину шага по времени явной схемы расчета. Коэффициент μ^{QGD} представляет собой добавку к коэффициенту динамической вязкости в виде $p \cdot \tau \cdot Sc$, и динамическая вязкость заменяется суммой $\mu + \mu^{QGD}$, т.е.

$$\mu \to \mu + \mu^{QGD}.$$

Коэффициенты вязкости и теплопроводности взяты из описываемого эксперимента [2], [3].

На Рис. 1 изображена схема экспериментальной установки [2], с помощью которой измерялись параметры струи водорода при ее истечении в область низкого давления. В этой установке возможно сверхточное измерение расстояния точки измерения до выхода из сопла, числовой плотности и заселенности квантовых состояний молекул газа на оси струи. Остальные параметры струи вычисляются опосредованно с применением кинетических и газодинамических оценок. А именно, с помощью подхода [2], основанного на комбинации уравнений Навье–Стокса и кинетических уравнений, выведенных из обобщенного уравнения Больцмана, где вычисляется температура поступательного движения частиц (translational), скорость потока и энтропия на оси струи. Параметры течения газа внутри сопла в эксперименте не измеряются.

3 Решение задачи в рамках открытого пакета OpenFOAM

На Рис. 2 приведена расчетная область, представляющая из себя усеченный с двух концов сектор, вырезанный из цилиндра вдоль оси x. Внизу область обрезана на малую величину δ (в r, z–геометрии такая постановка исключает деление на 0). Такая область расчета удобна для моделирования осесимметричного течения в среде OpenFOAM. Двумерная осесимметричная струя в OpenFOAM конструируется в 3D–случае, где вдоль оси z используется только одна ячейка. Для этого должен быть выбран сектор шириною не более 5^o. В расчете сектор имеет ширину 2^o, Рис.2.

На Рис.3 представлена схема расчетной области. Началу сопла соответствует $x = -12$ мм, ширина сопла при этом 1 мм, далее сопло сужается до 0.5 мм при $x = -6$ мм, далее сопло сужается до 0.1725 мм при $x = -2$ мм, что соответствует выходу из сопла размером $D/2 = 0.1725$ мм, где D – диаметр выхода из сопла. Точка $x = 0$ соответствует выходу из сопла.

На Рис.4 приведена схема разбиения расчетной области на зоны для построения пространственной сетки, в которой используется 10 зон и сетка задается в соответствии с разбиением на области. В районе сопла в блоках II и IV сетка имеет троекратное сгущение по x. Число точек сетки иллюстрирует Таблица 2.

Таблица 2. Задание сетки в соответствии с разбиением на области.

I	120×10
II	6×100
III	56×10
IV	56×1
V	56×100
VI	240×10
VII	240×18
VIII	360×10
IX	360×18
X	360×28

Программная реализация процедуры blockMeshDict приведена в Приложении 1.

Граничные условия для задачи приведены далее в соответствии со схемой на Рис. 3. Граничные условия на inlet задаются в виде постоянных значений. На walls $\mathbf{u} = 0$ (условие прилипания) для скорости, $\dfrac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0$ для температуры, $\dfrac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0$ для давления. На outlet $\dfrac{\partial p}{\partial \mathbf{n}}$ для давления, $\dfrac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0$ для температуры, $\dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0$ для скорости.

Задание этих граничных условий в среде OpenFOAM поясняет Таблица 3.

Таблица 3. Граничные условия задачи.

	inlet	outlet	walls
p	328800.0	subsonicSupersonicPressureOutlet	zeroGradient
U	(0 0 0)	zeroGradient	noSlip
T	295.4	zeroGradient	zeroGradient

Реализация граничных условий для давления в среде OpenFOAM приведена в Приложении 2.

В ходе моделирования истечения струи водорода возникали следующие проблемы:

1. задание осесимметричной области,

2. выбор угла вырезаемого сектора,

3. выбор в качестве линейного размера задачи вдоль оси y размер перпендикуляра равнобедренного треугольника, а не радиуса сектора,

4. способ разбиения области расчета на подобласти,

5. задание реальных коэффициентов вязкости μ и теплопроводности κ, Рис. 5. В программе они реализованы в виде прямых.

6. начало расчета от конца сопла в два этапа, задавая сначала на inlet значение давления в 10 раз меньше, а начиная со времени $2 \cdot 10^{-8}$ сек, задавая на inlet правильное значение давления,

7. подбор параметра α и регуляризатора τ, выбор $Sc = 1$, $Pr = 1$,

8. особенности алгоритма счета при выборе числа Куранта,

9. уменьшение времени расчета путем распараллеливания алгоритма и сгущения сетки во время расчета.

4 Моделирование запуска сопла

Была проведена серия расчетов газодинамического течения, формирующегося при запуске сопла. Интерес к этому процессу объясняется тем, что резкие кратковременные всплески температуры струи водорода, которые могут формироваться при разгоне струи в сопле с негладким профилем стенок, могут вызывать взрывоопасные ситуации в условиях лаборатории.

В качестве начальных условий использовались следующие параметры, соответствующие экспериментальным данным – на границе inlet: $u = 0.0$ м/сек, давление соответствует заданной в эксперименте плотности в резервуаре большого объема, присоединенному к входу в сопло $n = p/(kT) = 8061.9 \cdot 10^{22}$ 1/м^3, откуда $p = 328800.0$ Па, где k – постоянная Больцмана, $T = 295.4$ К, см. Табл. 4. Начальные условия в камере низкого давления справа от сопла, (граница ∞): $u = 0$ м/сек, $p = 160$ Па, $T = 295.4$ К. Эти же условия полагаются начальными во всем объеме сопла перед его запуском.

Таблица 4. Начальные условия для расчета запуска сопла.

	Левая граница	Камера низкого давления
Давление p	328800	160
Плотность ρ	0.269	0.00015
Числовая плотность n	$8065.7 \cdot 10^{22}$	$3.92 \cdot 10^{22}$
Температура T	295.4	295.4

В основной серии расчетов использовались пространственные сетки с числом ячеек 33814. Для проверки сходимости расчета дополнительно задача рассчитывалась на менее подробной сетке.

На Рис. 6, 7, 8 приведен процесс установления течения после запуска сопла для моментов времени $t = 4{\cdot}10^{-6}$, $8{\cdot}10^{-6}$, $1{\cdot}10^{-5}$, $1.4{\cdot}10^{-5}$, $2.5{\cdot}10^{-5}$, $7.5{\cdot}10^{-5}$. Показаны, соответственно, распределения числовой плотности n, температуры T и компоненты скорости U_x. Показан вариант расчета для настроечного параметра $\alpha = 0.5$ в формуле для $\tau = \alpha \dfrac{\Delta x}{c} + \dfrac{\mu}{pSc}$.

На Рис. 9 показано формирование тороидального вихря в окрестности уступа внутри сопла, сопровождающееся локальным ростом давления и температуры в потоке. Линии тока и плотности приведены для моментов времени, значения которых выбраны таким образом, чтобы наиболее выпукло показать характерные моменты формирования струи в сопле. В частности, это возникновение и распад тороидальных вихрей, которые показаны в увеличенном виде на фрагментах общей картины течения.

$t = 5 \cdot 10^{-6}$, $7 \cdot 10^{-6}$, $9 \cdot 10^{-6}$, $1.1 \cdot 10^{-5}$, $1.2 \cdot 10^{-5}$, $1.5 \cdot 10^{-5}$.

На Рис. 10 приведена стационарная картина истечения из сопла. Именно такой режим используется при проведении измерений параметров газа в струе при низких температурах.

На Рис. 11 показаны одномерные распределения числовой плотности, температуры и скорости на оси течения на последовательные моменты времени $t = 4{\cdot}10^{-5}$, $1{\cdot}10^{-4}$, $2{\cdot}10^{-4}$, $5{\cdot}10^{-4}$, $1{\cdot}10^{-3}$, $2{\cdot}10^{-3}$ при $\alpha = 0.3$. Распределение температуры немонотонно по времени и имеет резкий рост на оси (кривая 2). При этом изменения скорости и числовой плотности газа в процессе установления оказываются достаточно монотонными.

На Рис. 12 приведены стационарные 1D–распределения для двух значений коэффициента регуляризации $\alpha = 0.3$, 0.5 при $t = 2 \cdot 10^{-3}$. Приведенные графики показывают зависимость результатов от величины коэффициента искусственной диссипации α и их точность по сравнению с имеющимися экспериментальными данными. Приведены также числовая плотность в эксперименте (n_{exp}), и значения, полученные в эксперименте для средней температуры T_{av}, поступательной T_{tr} и вращательной T_{rot} температур. Более детально эти величины будут пояснены в следующем разделе. Показанная скорость U_{exp} расчитана на основе данных эксперимента и непосредственно не измеряется.

Из приведенных рисунков следует, что результаты расчета мало зависят от выбора параметра регуляризации в диапазоне устойчивого счета во всей области течения, за исключением зоны выхода из сопла, где струя сильно ускоряется. В этой же зоне результаты расчета существенно отличаются от данных эксперимента. Особенно это видно на графиках числовой плотности и скорости. Причина этого в настоящее время не ясна.

5 Моделирование истечения недорасширенной струи

Для детального изучения параметров струи при ее стационарном истечении из сопла в камеру низкого давления был проведен расчет фрагмента полной задачи.

На Рис.13 представлена расчетная область для этого варианта. Расчет начинается от выхода из сопла, в сечении которого заданы известные из эксперимента параметры струи на его срезе.

На Рис.14 указаны размеры расчетной области. Номера $1, 2, 3$ соответствуют блокам разбиения расчетной области. Количество ячеек в расчете составляет 33283, Таблица 5.

Таблица 5. Задание сетки в соответствии с разбиением на зоны.

I	200×20
II	200×100
III	100×100

Начальные и граничные условия ставятся на основе известных данных эксперимента на срезе сопла - границе inlet: скорость $u = 1090.14$ м/сек, давление $p = 192173.43$ Па, соответствующее заданной экспериментальной плотности $n = p/(kT) = 5511.63 \cdot 10^{22}$ 1/м^3, и температура $T = 252.54$ К, соответствующая температуре T_{tr}, вычисленной аналитически исходя из измеренной плотности. Начальные условия в камере низкого давления (на ∞): скорость $u = 0$ м/сек, давление $p = 160$ Па, температура $T = 295.4$ К.

На Рис. 15 приведена плотность n для установившегося течения. На двух последующих рисунках 16, 17 показаны процессы установления температуры T и модуля скорости U на последовательные моменты времени. Коэффициент искусственной диссипации во всех расчетах этого раздела соответствует $\alpha = 0.5$.

На Рис. 18 представлен стационарный режим течения в виде 1D–распределений вдоль оси: протности n, температуры T, скорости U при разных γ для установившегося режима $t = 5 \cdot 10^{-5}$ сек в сравнении с измеренной в эксперименте плотностью n_{exp}, кинетическими температурами и оценкой скорости U_{exp}.

Отметим, что в эксперименте измеряются величины только на оси струи. При этом значения числовой плотности n_{exp} и кинетических температур измеряются рамановским спектрометром с высокой точностью. Скорость на оси струи не измеряется непосредственно, а вычисляется из общих законов сохранения в пренебрежении вязкими эффектами.

Измерения температуры проводятся только для так называемой поступательной температуры T_{tr}. На срезе сопла поступательная T_{tr} и вращательная T_{rot} температуры одинаковы, однако при увеличении разреженности струи вдоль оси температурное равновесие в струе нарушается, и поступательная и вращательная температуры начинают все больше различаться, Рис. 18. Зная число вращательных степеней свободы частицы ξ, можно вычислить среднюю температуру в струе T_{av} по формуле

$$T_{av} = \frac{3T_{tr} + \xi T_{rot}}{3 + \xi}.$$

Соответственно, показатель адиабаты γ и число Прандтля Pr вычисляются как

$$\gamma = \frac{5+\xi}{3+\xi}, \qquad Pr = \frac{4\gamma}{9\gamma - 5}.$$

Для молекулярного водорода $\xi = 2$, для одноатомного газа $\xi = 0$.

Таким образом, по измеренным температурам можно вычислить значение так называемой средней температуры T_{av}, которая входит в уравнения газовой динамики, используемые в численной модели.

Однако для реальной струи такая простая формула может быть неадекватной, и эффективное вращательное число степеней свободы может оказываться не целым и не постоянным при изменении плотности. Для оценки роли этого явления проведены численные расчеты расширения струи, соответствующие значениям $\gamma = 1.4, 1.45$ и 1.5 для того, чтобы оценить влияние числа степеней свободы на распределение плотности, температуры и скорости в разреженной струе. Результаты расчета струи с этими значениями γ приведены на графиках Рис. 18, где показано его влияние на параметры расширяющейся струи. Оказывается, влияние γ на плотность и скорость в струе мало, однако температура в струе существенно зависит от величины γ.

Числа Маха, Рейнольдса и Кнудсена рассчитываются по формулам

$$Ma = \frac{u}{\sqrt{\gamma \widetilde{R} T}}, \;\; Re = \frac{uD\rho}{\mu}, \;\; Kn = l/D = \frac{Ma}{Re}\sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}},$$

где D – сечение сопла на его входе в камеру низкого давления, l – длина свободного пробега молекулы в газе.

Таблица 6. Параметры струи на оси для задачи в упрощенной постановке для $\gamma = 1.45$.

	$x = 0.0$ мм	$x = 4.0$ мм
Давление p	192173	12.6
Плотность ρ	0.18	$2.2 \cdot 10^{-4}$
Числовая плотность n	$5511.63 \cdot 10^{22}$	$6.63 \cdot 10^{22}$
Температура T	252.54	13.8
Скорость U	1090.14	2756
Коэф. вязкости μ	$8 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$
Число Маха Ma	0.9	9.6
Число Рейнольдса Re	8338	206.15
Число Кнудсена Kn	$1.9 \cdot 10^{-4}$	$7.0 \cdot 10^{-2}$

Заключение

Впервые проведено прямое численное моделирование течения водорода в микросопле, которое долгое время используется в качестве основного элемента в экспериментальной установке для изучения свойств ряда разреженных газов при высоких скоростях и низких температурах. Особенности нестационарного течения – перепад давлений, скоростей и сложную геометрию задачи удалось единообразно описать в рамках КГД алгоритма, включенного в открытую платформу OpenFOAM.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *G. Tejeda, E. Carmona–Novillo, E. Moreno, J.M. Fernandez, M.I. Hernandez, and S. Montero* Laboratory study of rate coefficients for H_2O : He inelastic collisions between 20 and 120 K // The astrophysical journal supplement series, 216:3 (8pp), 2015 January
2. *S. Montero* Molecular description of steady supersonic free jets // Physics of Fluids 29, 096101, 2017.
3. *S. Montero, G. Tejeda, and J.M. Fernandez* Laboratory study of rate coefficients for H_2 : H_2 inelastic collisions between 295 and 20 K // The astrophysical journal supplement series, 247:14 (14pp), 2020 March.
4. *Kraposhin M.V., Smirnova E.V., Elizarova T.G., Istomina M.A.* Development of a new OpenFOAM solver using regularized gas dynamic equations // Comput. Fluids. 2018. V. 166. P. 163-175.
5. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
6. *Елизарова Т.Г.* Осреднение по времени как приближенный способ построения квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений // Ж. вычисл. матем. матем. физ. 2011. Т. 51. № 11. С. 2096-2105.
7. *I.A. Graur, T.G. Elizarova, A. Ramos, G. Tejeda, J.M. Fernandez, S. Montero* A stady of shock waves in expanding flows on the basis of spectroscopic experiments and quasi-gasdynamic equations // Journal of Fluid Mechanics, 2004, 504, 239-270.
8. *M.J. Assael and S. Mixafendi* The viscosity and thermal conductivity of normal hydrogen in the limit of zero density // J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 15, No. 4, 1986.
9. *G.A. Bird* Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows // Oxford: Clarendon press, Oxford, 1994.
10. *B. Mate, I.A. Graur, T. Elizarova, I. Shirokov, G. Tejeda, J.M. Fernandez, S. Montero* Experimental and numerical investigation of an axisymmetric supersonic jet // Journal of Fluid Mechanics, 2001, 426, 199-197.

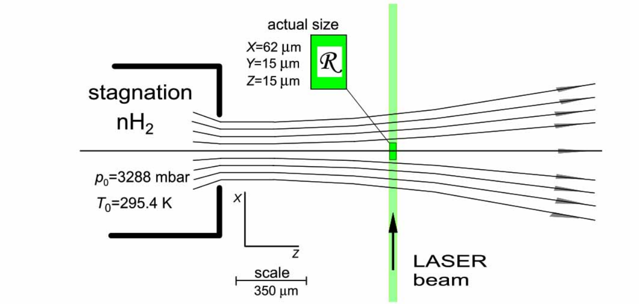

Рис. 1. Принципиальная схема экспериментальной установки согласно [2], [3]

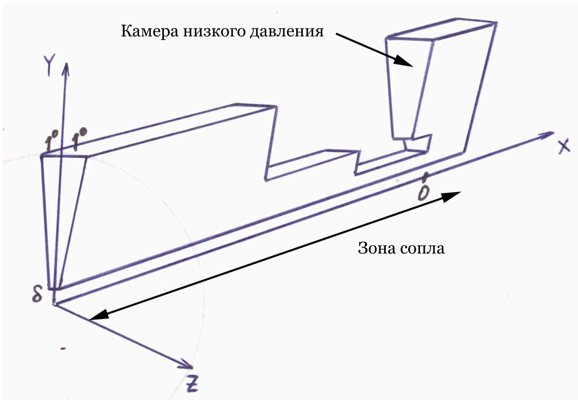

Рис. 2. Схема расчетной области

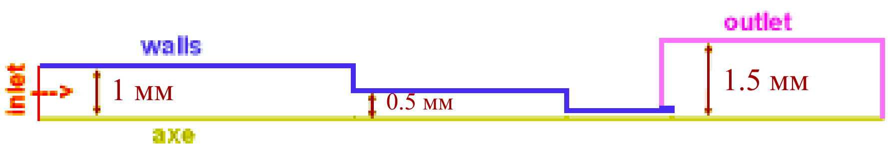

Рис. 3. Двумерная схема расчетной области

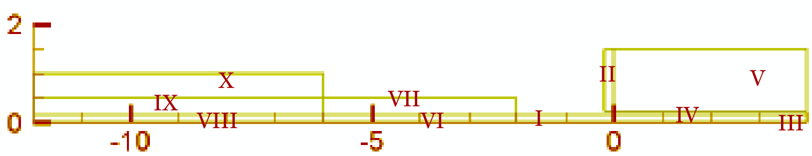

Рис. 4. Схема разбиения расчетной области на зоны для построения сетки

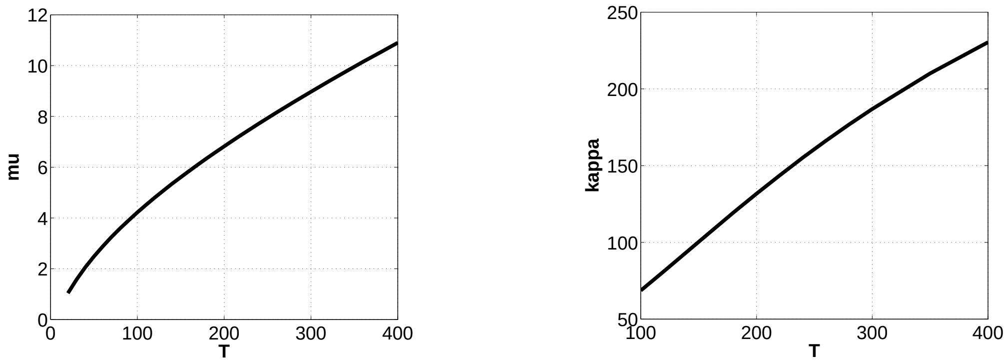

Рис. 5. Коэффициенты вязкости μ, 10^{-6} Па·сек и теплопроводности κ, 10^{-3} Вт/(м·К)

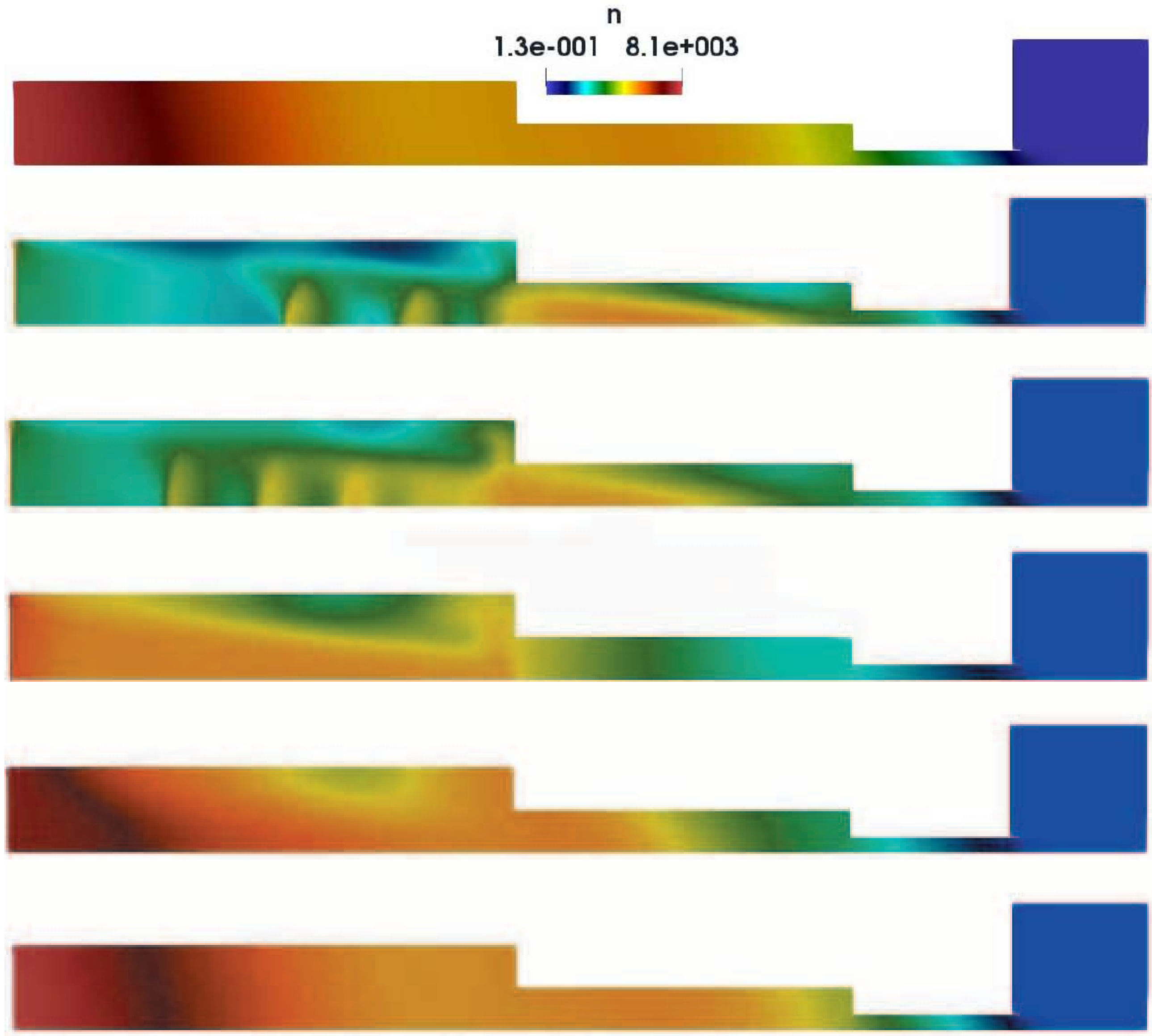

Рис. 6. Развитие течения в сопле: плотность n при $t = 4 \cdot 10^{-6}$, $8 \cdot 10^{-6}$, $1 \cdot 10^{-5}$, $1.4 \cdot 10^{-5}$, $2.5 \cdot 10^{-5}$, $7.5 \cdot 10^{-5}$, $\alpha = 0.5$

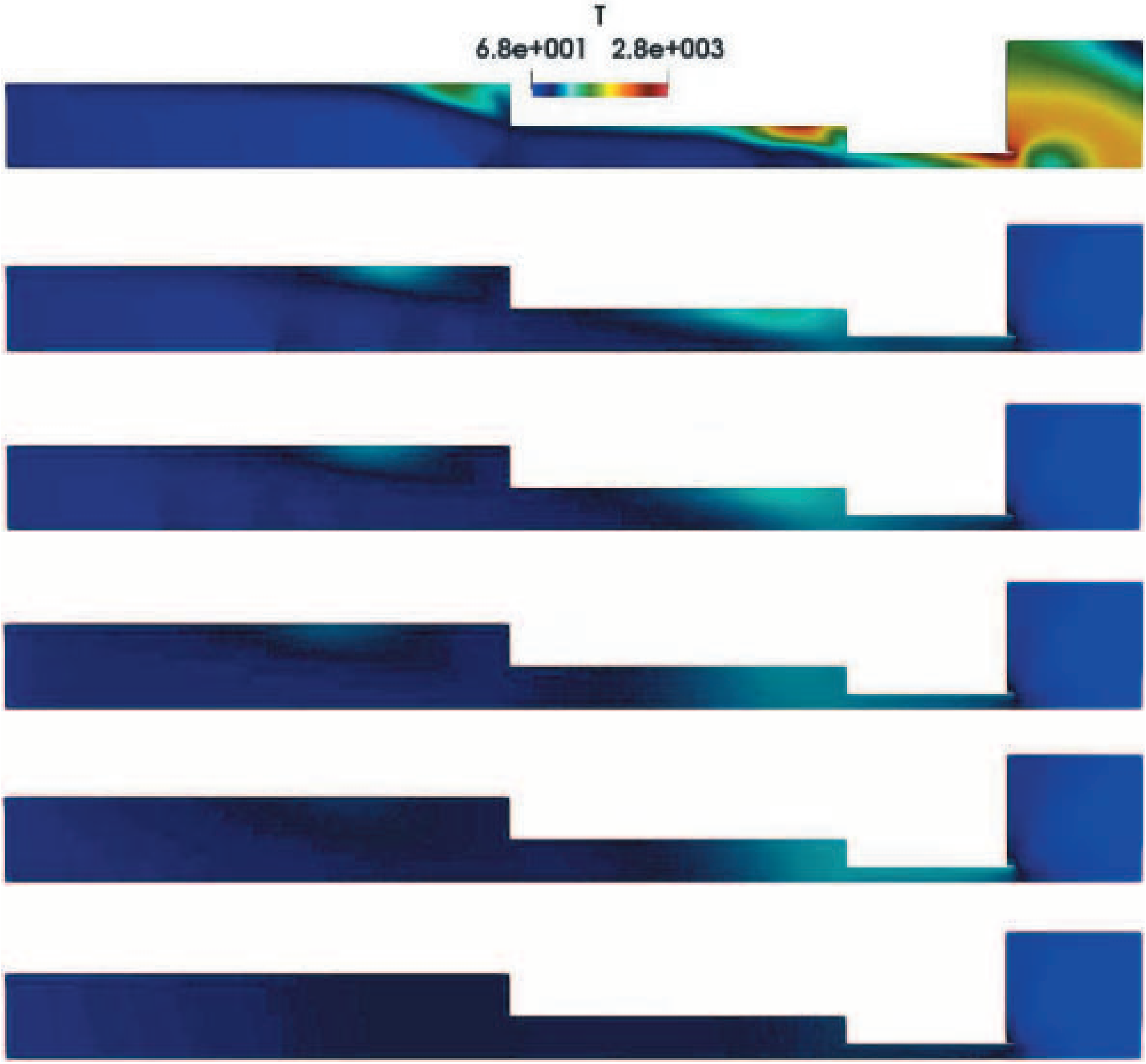

Рис. 7. Развитие течения в сопле: температура T при $t = 4 \cdot 10^{-6}$, $8 \cdot 10^{-6}$, $1 \cdot 10^{-5}$, $1.4 \cdot 10^{-5}$, $2.5 \cdot 10^{-5}$, $7.5 \cdot 10^{-5}$, $\alpha = 0.5$

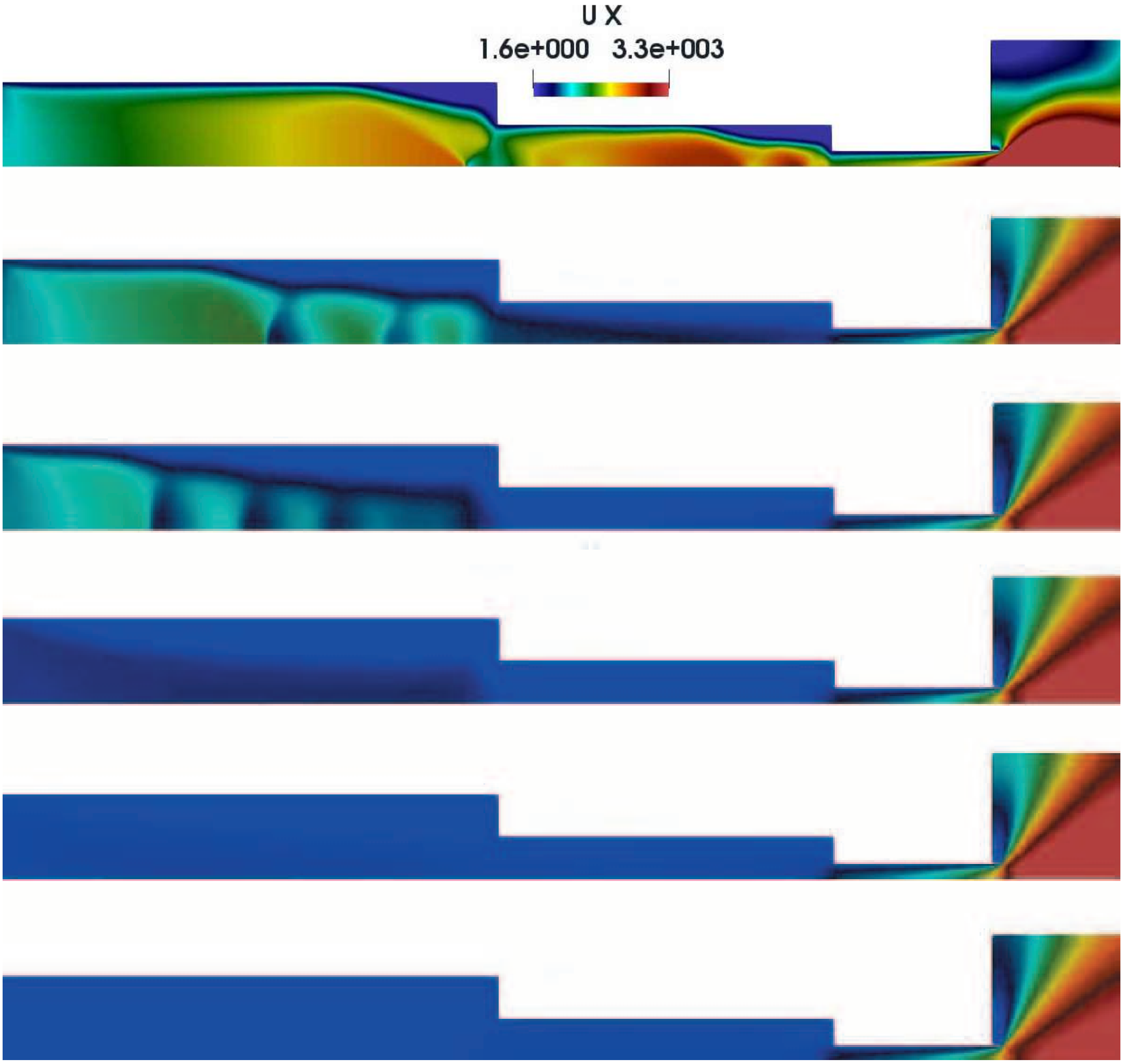

Рис. 8. Развитие течения в сопле: скорость U_x вдоль направления распространения струи при $t = 4 \cdot 10^{-6}$, $8 \cdot 10^{-6}$, $1 \cdot 10^{-5}$, $1.4 \cdot 10^{-5}$, $2.5 \cdot 10^{-5}$, $7.5 \cdot 10^{-5}$, $\alpha = 0.5$

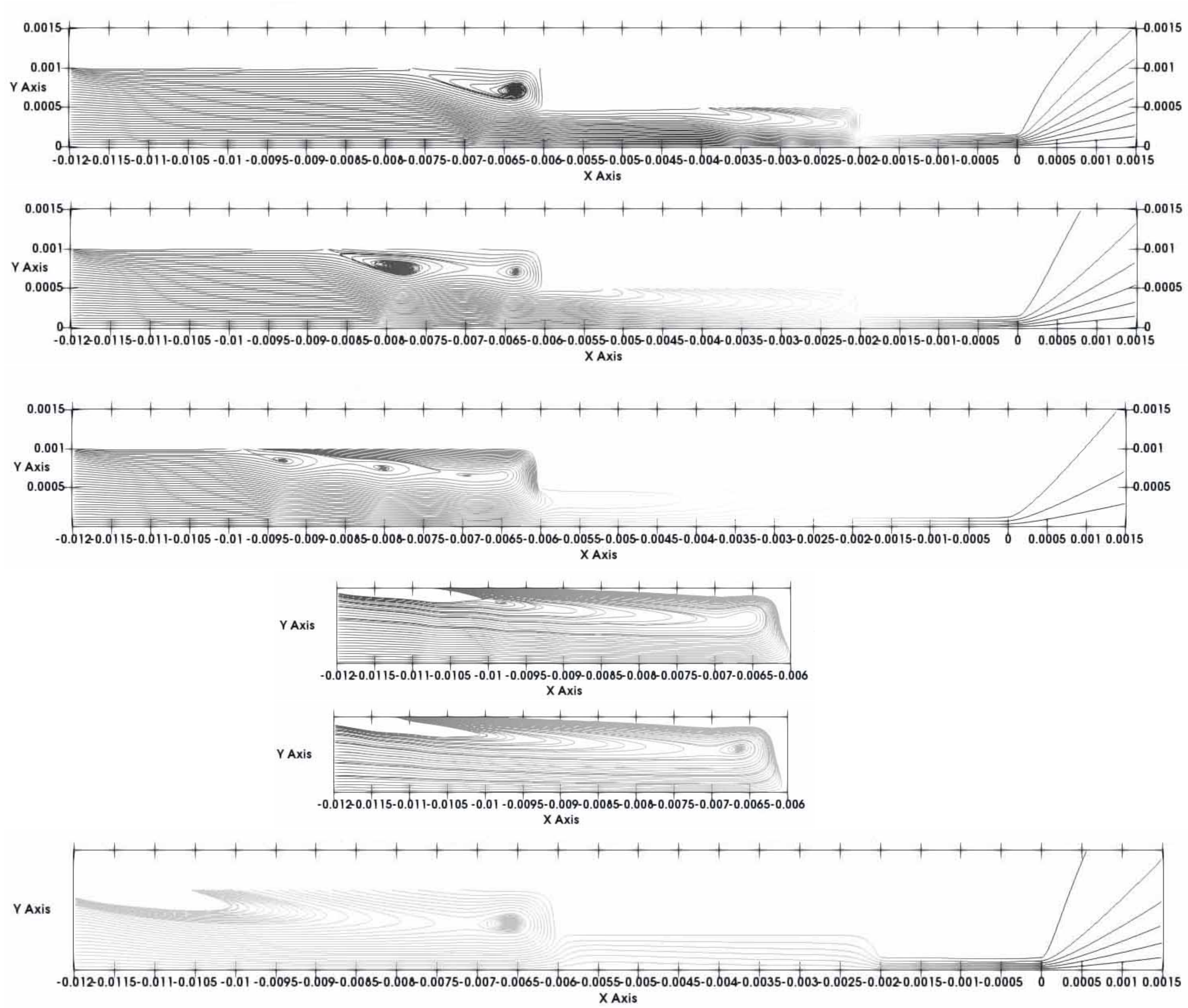

Рис. 9. Развитие вихря в зоне сопла: $t = 5\cdot10^{-6}$, $7\cdot10^{-6}$, $9\cdot10^{-6}$, $1.1\cdot10^{-5}$, $1.2\cdot10^{-5}$, $1.5\cdot10^{-5}$, $\alpha = 0.5$

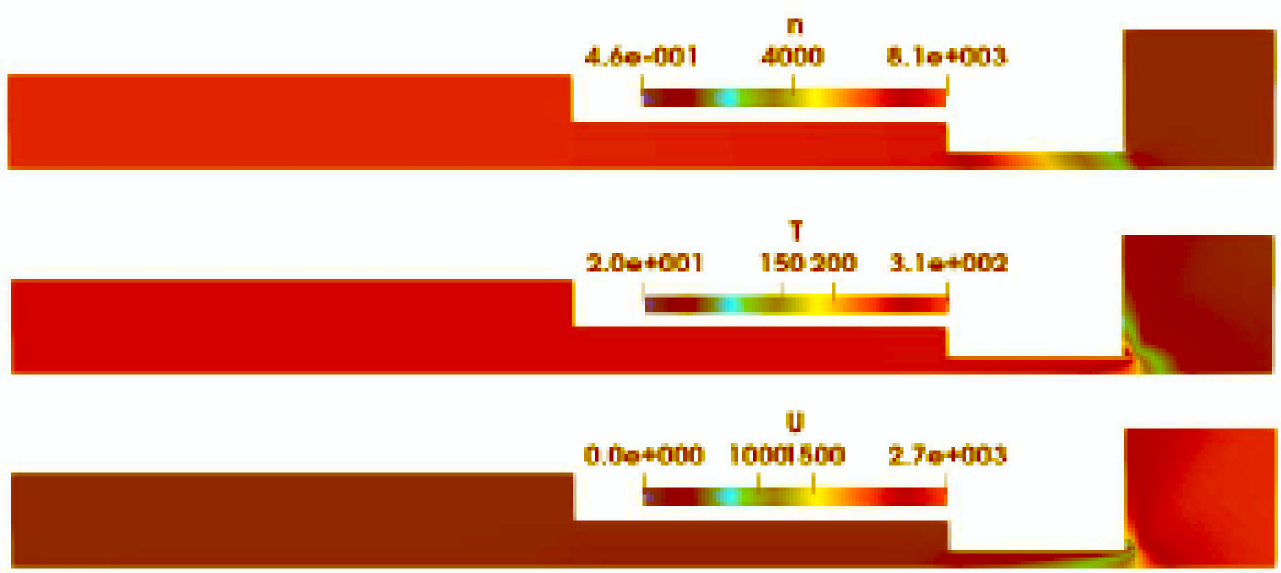

Рис. 10. Стационарная картина: плотность n, температура T и скорости U вдоль распространения струи при $t = 2 \cdot 10^{-3}$, $\alpha = 0.5$

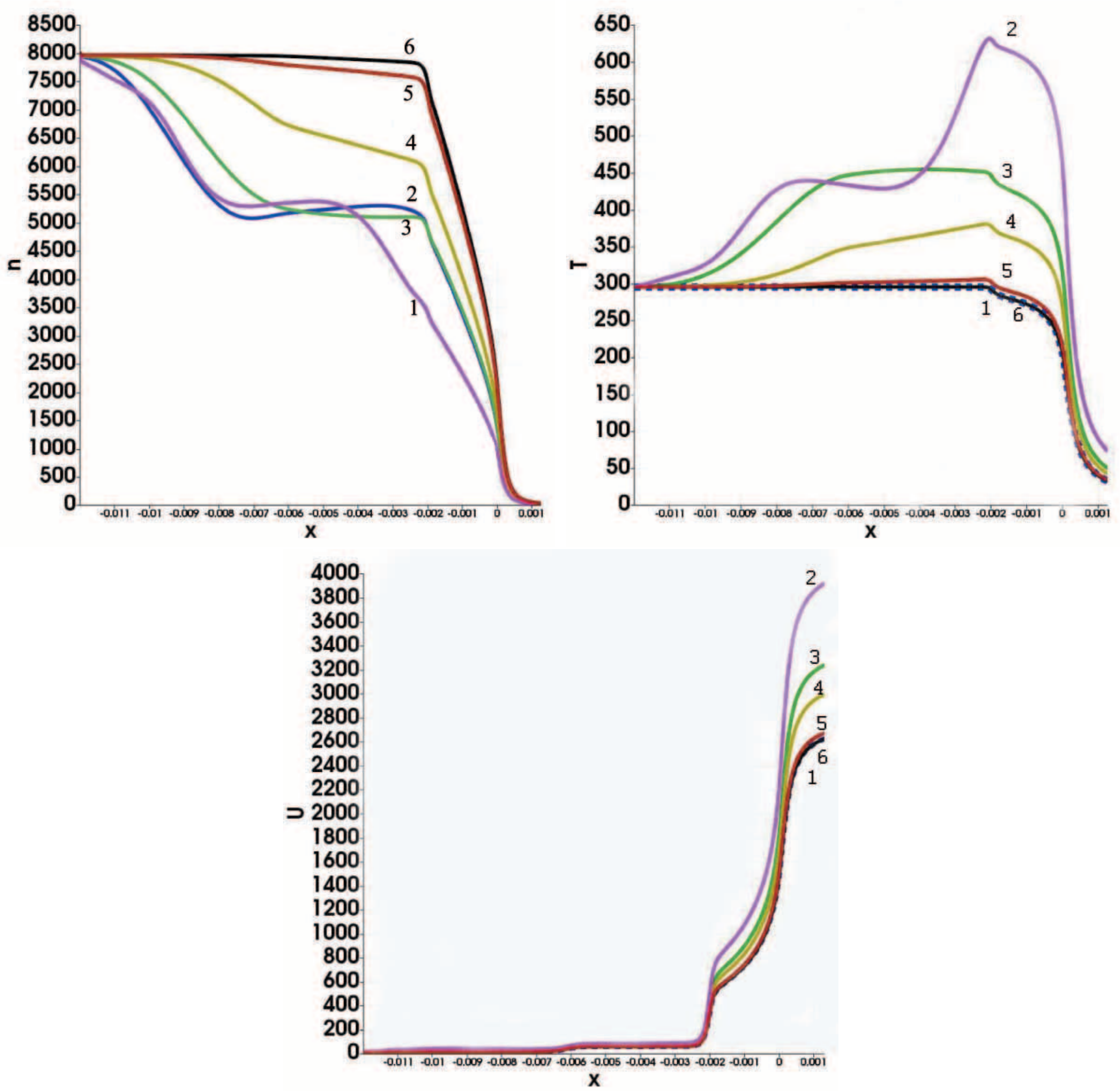

Рис. 11. Развитие плотности n, температуры T и скорости U_x вдоль оси x при $y = 7.5 \cdot 10^{-5}$, $z = 0$ на моменты времени $t = 4 \cdot 10^{-5}$, $1 \cdot 10^{-4}$, $2 \cdot 10^{-4}$, $5 \cdot 10^{-4}$, $1 \cdot 10^{-3}$, $2 \cdot 10^{-3}$, $\alpha = 0.3$

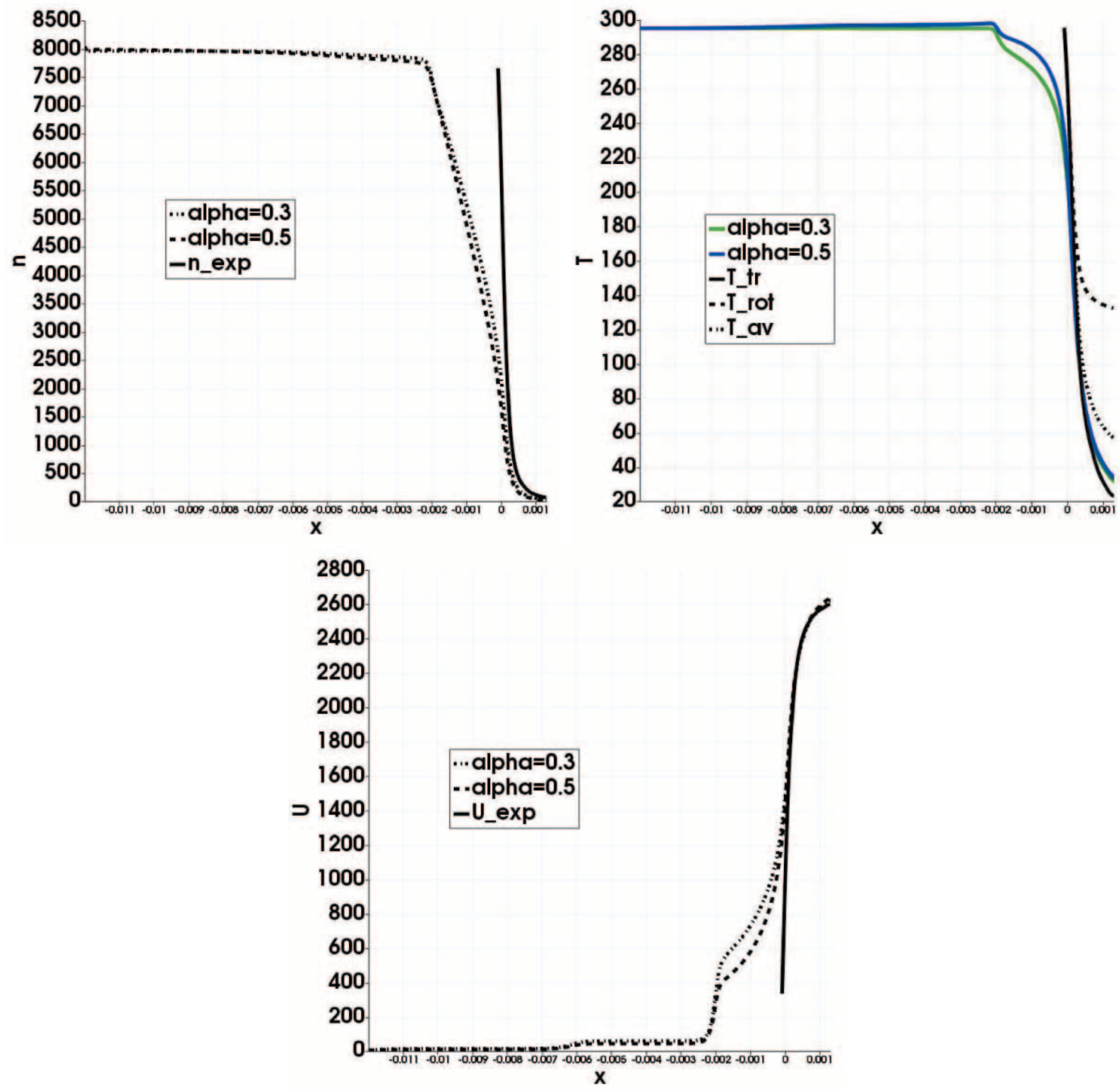

Рис. 12. Стационарное течение для $\alpha = 0.3,\ 0.5$ при $t = 2 \cdot 10^{-3}$: плотность n в эксперименте (n_{exp}) и при численном расчете, температуры T_{av}, T_{tr} и T_{rot}, рассчитанные исходя из экспериментальной плотности (n_{exp}) и численные расчеты в установившемся течении, скорость U_x, рассчитанная исходя из экспериментальной плотности (n_{exp}) и численные расчеты

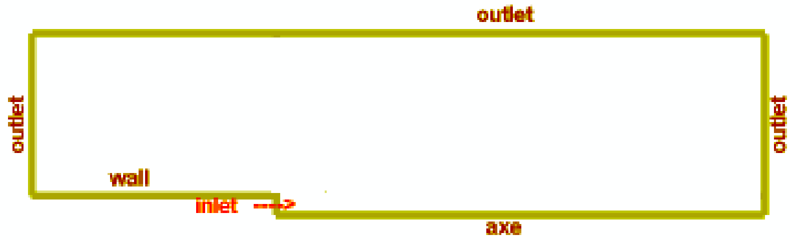

Рис. 13. Схема расчетной области для упрощенной постановки

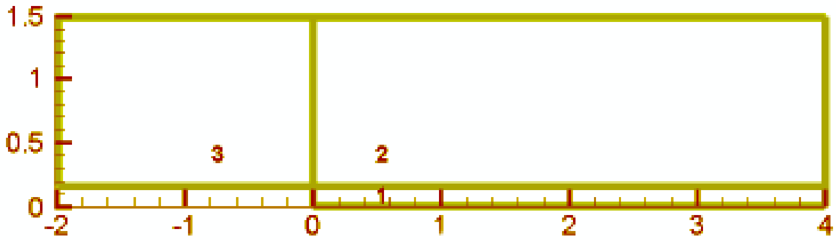

Рис. 14. Схема разбиения расчетной области на зоны для построения сетки в упрощенной постановке

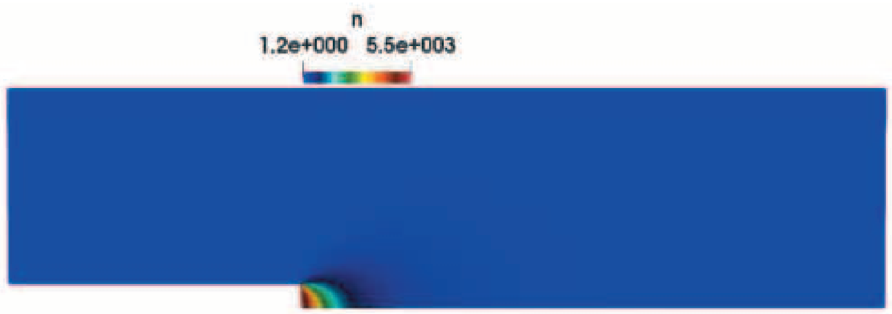

Рис. 15. Протность n для установившегося течения при $t = 5{\cdot}10^{-5}$ сек, $\alpha = 0.5$

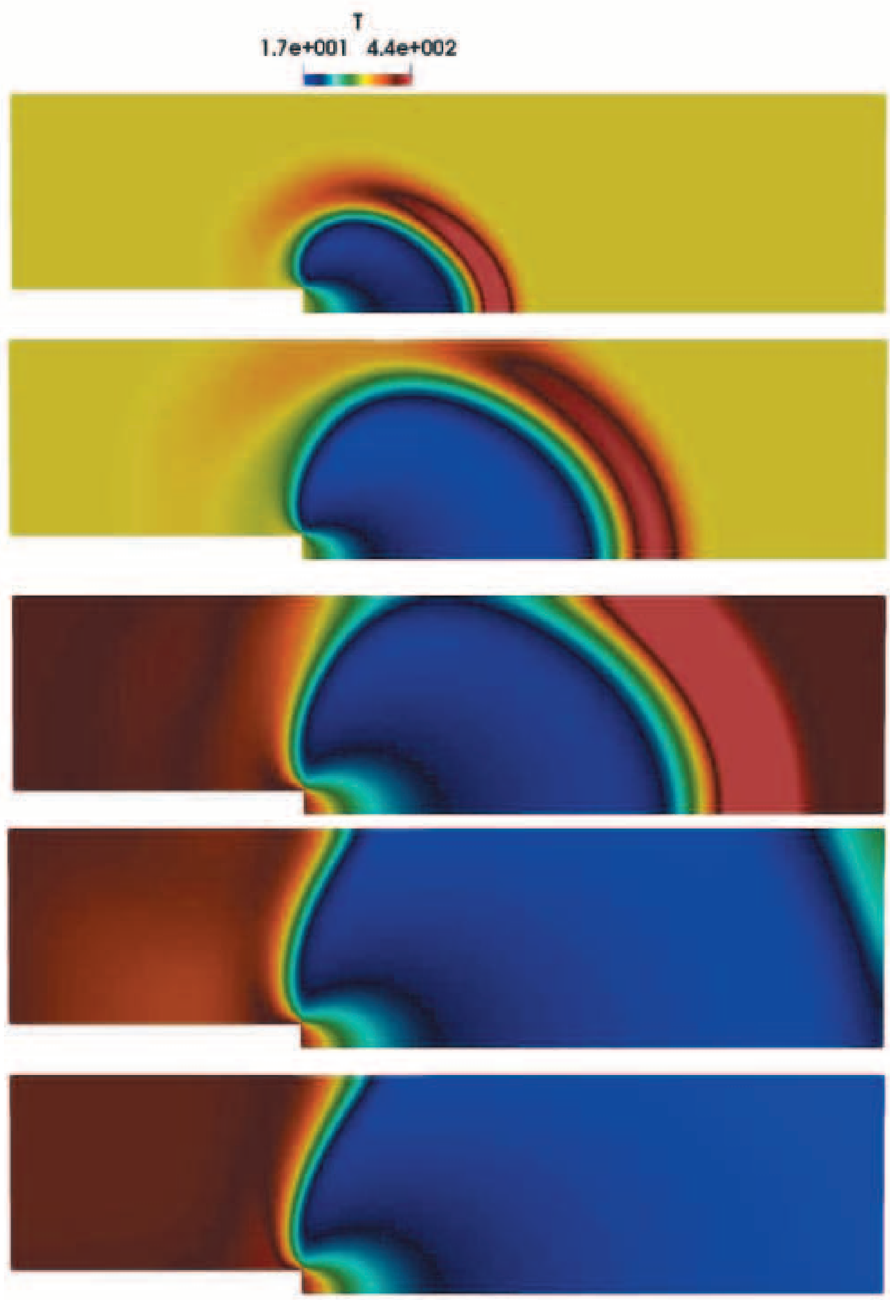

Рис. 16. Температура T при $t = 3 \cdot 10^{-7}$, $7 \cdot 10^{-7}$, $1 \cdot 10^{-6}$, $2 \cdot 10^{-6}$, $5 \cdot 10^{-5}$ сек, $\alpha = 0.5$

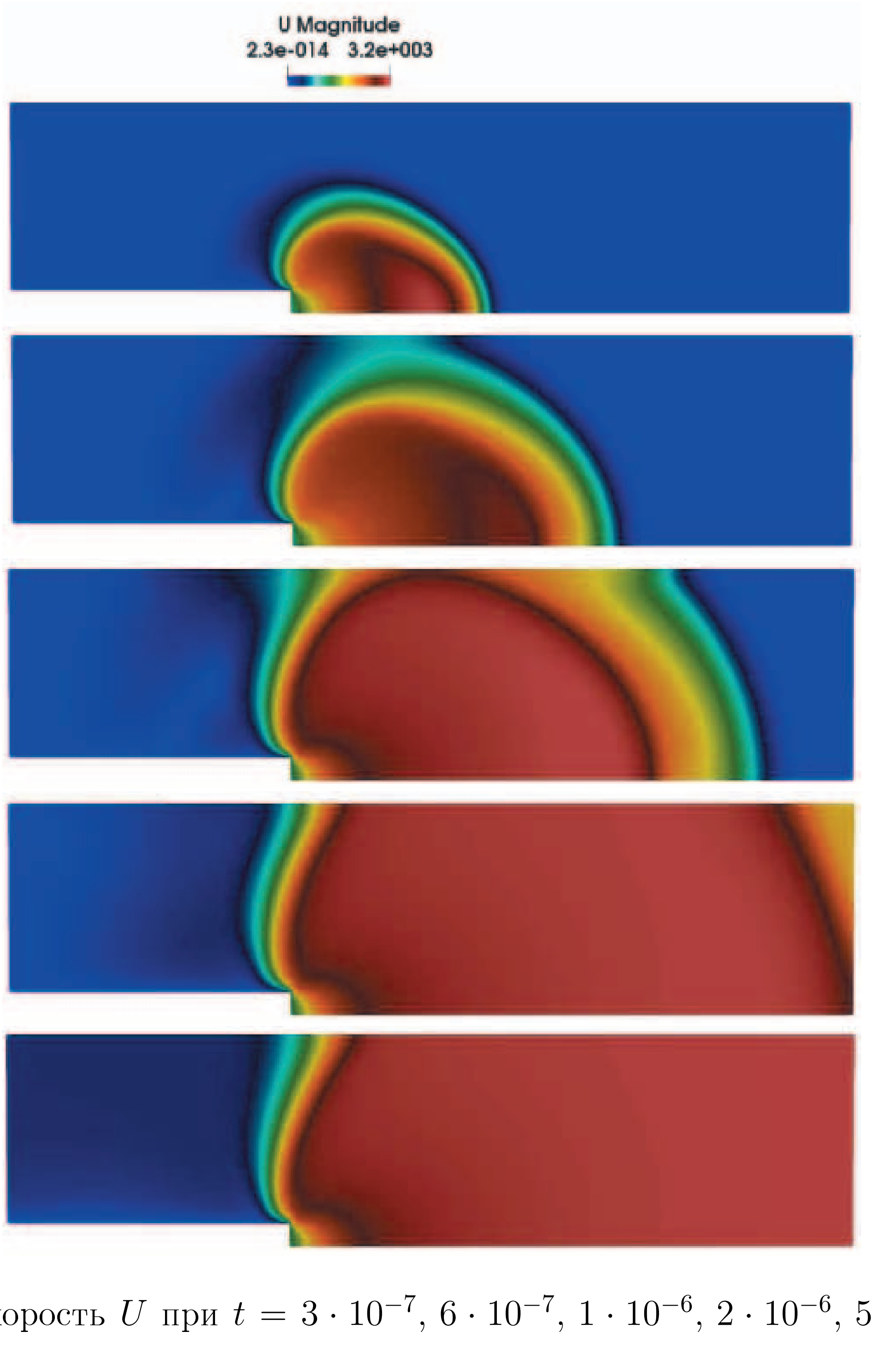

Рис. 17. Скорость U при $t = 3 \cdot 10^{-7}$, $6 \cdot 10^{-7}$, $1 \cdot 10^{-6}$, $2 \cdot 10^{-6}$, $5 \cdot 10^{-5}$ сек, $\alpha = 0.5$

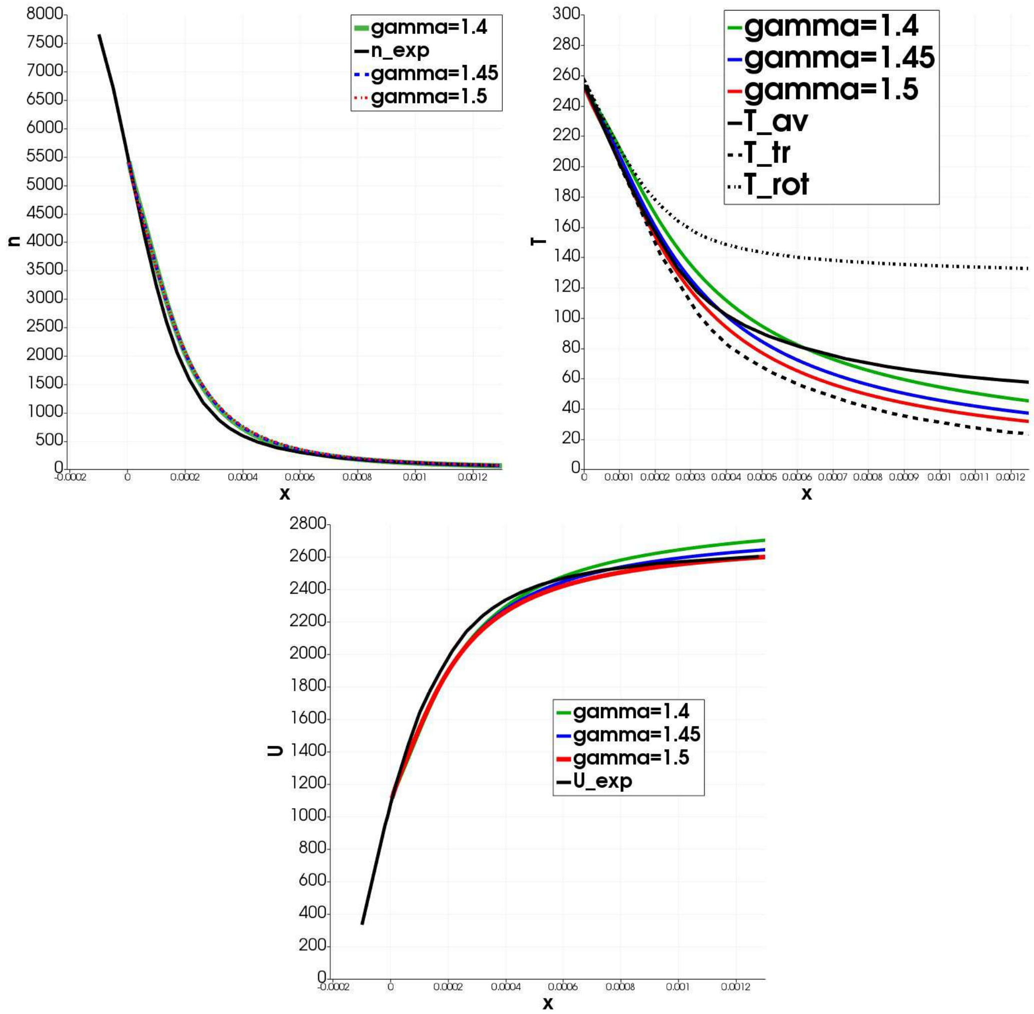

Рис. 18. Стационарный режим: расчеты протности n, температуры T, скорости U при разных γ для установившегося режима $t = 5 \cdot 10^{-5}$ сек и экспериментальные плотность n_{exp}, температуры T_{av}, T_{tr} и T_{rot}, скорость U_{exp}, $\alpha = 0.5$

6 Приложение 1. Задание расчетной области и сетки

Реализация в blockMeshDict выглядит следующим образом

```
convertToMeters 0.001; // from mm
vertices
(
    (0.0   1.724737744145e-4   -3.01054093081985e-6)  //0
    (1.5   1.724737744145e-4   -3.01054093081985e-6)  //1
    (1.5   1.724737744145e-1   -3.01054093081985e-3)  //2
    (0.0   1.724737744145e-1   -3.01054093081985e-3)  //3
    (0.0   1.724737744145e-4    3.01054093081985e-6)  //4
    (1.5   1.724737744145e-4    3.01054093081985e-6)  //5
    (1.5   1.724737744145e-1    3.01054093081985e-3)  //6
    (0.0   1.724737744145e-1    3.01054093081985e-3)  //7
    (0.0   1.5                 -2.618259739233e-2)    //8
    (1.5   1.5                 -2.618259739233e-2)    //9
    (0.0   1.5                  2.618259739233e-2)    //10
    (1.5   1.5                  2.618259739233e-2)    //11
    (-2.0  1.724737744145e-1   -3.010540110431e-3)    //12
    (-0.1  1.5                 -2.618259739233e-2)    //13
    (-2.0  1.724737744145e-1    3.010540110431e-3)    //14
    (-0.1  1.5                  2.618259739233e-2)    //15
    (-2.0  1.724737744145e-4   -3.010540110431e-6)    //16
    (-2.0  1.724737744145e-4    3.010540110431e-6)    //17
    (-0.1  1.824752504629e-1   -3.185117344623e-3)    //18
    (0.0   1.824752504629e-1   -3.185117344623e-3)    //19
    (0.0   1.824752504629e-1    3.185117344623e-3)    //20
    (-0.1  1.824752504629e-1    3.185117344623e-3)    //21
    (1.5   1.824752504629e-1   -3.185117344623e-3)    //22
    (1.5   1.824752504629e-1    3.185117344623e-3)    //23
    (-2.0  4.999238475782e-1   -8.726203218642e-3)    //24
    (-2.0  4.999238475782e-1    8.726203218642e-3)    //25
    (-6.0  1.724737744145e-4   -3.010540110431e-6)    //26
    (-6.0  1.724737744145e-4    3.010540110431e-6)    //27
    (-6.0  4.999238475782e-1   -8.726203218642e-3)    //28
    (-6.0  4.999238475782e-1    8.726203218642e-3)    //29
    (-0.2  1.824752504629e-1   -3.185117344623e-3)    //30
    (-0.2  1.824752504629e-1    3.185117344623e-3)    //31
    (-6.0  1.724737744145e-1   -3.010540110431e-3)    //32
    (-6.0  1.724737744145e-1    3.010540110431e-3)    //33
    (-0.6  1.824752504629e-1   -3.185117344623e-3)    //34
```

```
    (-0.6   1.824752504629e-1    3.185117344623e-3)    //35
    (-0.2   1.724737744145e-1   -3.010540110431e-3)    //36
    (-0.2   1.724737744145e-1    3.010540110431e-3)    //37
    (-12.0  1.724737744145e-4   -3.010540110431e-6)    //38
    (-12.0  1.724737744145e-4    3.010540110431e-6)    //39
    (-12.0  1.724737744145e-1   -3.010540110431e-3)    //40
    (-12.0  1.724737744145e-1    3.010540110431e-3)    //41
    (-12.0  4.999238475782e-1   -8.726203218642e-3)    //42
    (-12.0  4.999238475782e-1    8.726203218642e-3)    //43
    (-12.0  9.998476951564e-1   -1.745240643728e-2)    //44
    (-12.0  9.998476951564e-1    1.745240643728e-2)    //45
    (-6.0   9.998476951564e-1   -1.745240643728e-2)    //46
    (-6.0   9.998476951564e-1    1.745240643728e-2)    //47
);
blocks
(
    hex (16 0 3 12 17 4 7 14) (120 10 1) simpleGrading (1 1 1)        // I
    hex (18 19 8 13 21 20 10 15) (6 100 1) simpleGrading (1 1 1)      // II
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (56 10 1) simpleGrading (3 1 1)             // III
    hex (3 2 22 19 7 6 23 20) (56 1 1) simpleGrading (3 1 1)          // IV
    hex (19 22 9 8 20 23 11 10) (56 100 1) simpleGrading (3 1 1)      // V
    hex (26 16 12 32 27 17 14 33) (240 10 1) simpleGrading (1 1 1)    // VI
    hex (32 12 24 28 33 14 25 29) (240 18 1) simpleGrading (1 1 1)    // VII
    hex (38 26 32 40 39 27 33 41) (360 10 1) simpleGrading (1 1 1)    // VIII
    hex (40 32 28 42 41 33 29 43) (360 18 1) simpleGrading (1 1 1)    // IX
    hex (42 28 46 44 43 29 47 45) (360 28 1) simpleGrading (1 1 1)    // X
);
edges
( );
boundary
(
  inlet
  {    type patch;
       faces
       (
       (38 39 41 40)
       (40 41 43 42)
       (42 43 45 44)
       );
  }
  outlet
```

```
{   type patch;
    faces
    (
    (1 5 6 2)
    (2 6 23 22)
    (22 23 11 9)
    (8 9 11 10)
    (18 21 15 13)
    (13 8 10 15)
    );
}
axes
{   type patch;
    faces
    (
    (0 1 5 4)
    (16 0 4 17)
    (26 16 17 27)
    (38 26 27 39)
    );
}
walls
{   type wall;
    faces
    (
    (12 3 7 14)
    (18 19 20 21)
    (3 7 20 19)
    (12 14 25 24)
    (28 29 25 24)
    (44 45 47 46)
    (28 29 47 46)
    );
}
wedge1
{   type wedge;
    faces
    (
    (0 1 2 3)
    (19 22 9 8)
    (18 19 8 13)
```

```
        (16 0 3 12)
        (3 2 22 19)
        (26 16 12 32)
        (32 12 24 28)
        (38 26 32 40)
        (40 32 28 42)
        (42 28 46 44)
        );
    }
    wedge2
    {   type wedge;
        faces
        (
        (4 5 6 7)
        (7 6 23 20)
        (20 23 11 10)
        (17 4 7 14)
        (21 20 10 15)
        (27 17 14 33)
        (33 14 25 29)
        (39 27 33 41)
        (41 33 29 43)
        (43 29 47 45)
        );
    }
);

mergePatchPairs
( );
```

7 Приложение 2. Задание граничных условий для давления

Граничные условия для давления p задаются в файла p папки 0/:

```
dimensions [1 -1 -2 0 0 0 0];
internalField uniform 160.0; //
boundaryField
  {
  "(inlet).*"
  {
    type uniformFixedValue;
    uniformValue uniform 328800.0;
```

```
    value uniform 328800.0;
  }
  "(outlet).*"
  {
    type              subsonicSupersonicPressureOutlet;
    refValue          uniform 160.0;
    refGradient       uniform 0;
    valueFraction     uniform 1;
    value             uniform 160.0;
    psi               thermo:psi;
    phi               phi;
    U                 U;
    p0                uniform 160.0;
  }
  ".*(walls).*"
  {
    type zeroGradient;
  }
  wedge1
  {
    type wedge;
  }
  wedge2
  {
    type wedge;
  }
  axes
  {
    type slip;
  }
}
```