

PHƯƠNG PHÁP DISCONTINUOUS GALERKIN TRONG TÍNH TOÁN MÔ PHÒNG DÒNG KHÍ LOÃNG TỐC ĐỘ CAO

DISCONTINUOUS GALERKIN METHOD IN HIGH-SPEED RAREFIED GAS SIMULATIONS

Trần Hà Nam¹, Lê Tuấn Phương Nam²

¹Trường Đại học Bách khoa - Đại học Quốc Gia Thành Phố Hồ Chí Minh

²Trường Đại học Tôn Đức Thắng; letuanphuongnam@tdtu.edu.vn

Tóm tắt - Trong bài báo này, một sơ đồ giải thuật số của phương pháp Discontinuous Galerkin (DG) được đề xuất cho phương trình Navier-Stokes-Fourier mở rộng, mà xem đến hiện tượng khuếch tán khối lượng trong mô phỏng tính toán dòng khí loãng ở tốc độ cao. Hai trường hợp cơ bản trong khí động lực học là dòng khí loãng đi qua tấm phẳng và đi ngang hình trụ tròn được lựa chọn cho tính toán mô phỏng để kiểm chứng sơ đồ giải thuật số của phương pháp DG đề xuất trên. Mỗi trường hợp mô phỏng được thực hiện với phương trình N-S-F và phương trình N-S-F mở rộng. Tất cả kết quả tính toán được đi so sánh với dữ liệu mô phỏng thống kê Monte-Carlo (DSMC), và cho thấy rằng kết quả dùng phương trình N-S-F mở rộng đã cho kết quả tính toán gần với dữ liệu DSMC hơn so với kết quả dùng phương trình N-S-F, đặc biệt là trong trường hợp dòng qua tấm phẳng.

Từ khóa - Khuếch tán khối lượng; phương trình N-S-F mở rộng; Discontinuous Galerkin (DG); dòng khí loãng; sóng (shock).

1. Giới thiệu

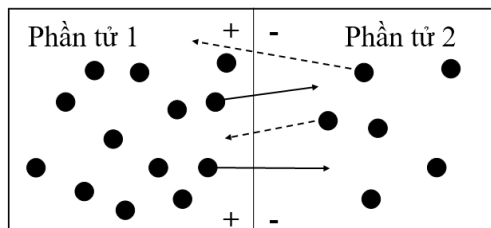
Dòng khí loãng được đặc trưng bởi số Knudsen, Kn , là tỉ lệ giữa khoảng cách chuyển động tự do trung bình trước khi va chạm của các hạt khí, λ , trên chiều dài đặc trưng L của vật thể. Với các trường hợp mà mật độ hạt khí cao, trị số λ nhỏ, dẫn tới số Kn nhỏ nên các trường hợp này có thể được mô phỏng bằng cách giải phương trình Euler ($Kn < 0,001$) hoặc phương trình Navier-Stokes-Fourier (N-S-F) ($0,001 \leq Kn \leq 0,01$). Khi mật độ hạt khí thấp, giá trị λ lớn dẫn đến số Kn lớn và sự mất cân bằng của khí trở nên đáng kể. Lúc này phương trình N-S-F trở nên không còn thích hợp để tính toán cho dòng khí loãng. Việc áp dụng điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ ở bề mặt có thể giúp cải thiện phương trình N-S-F sử dụng trong vùng trượt ($0,01 \leq Kn \leq 0,1$) [1]. Khi số Kn nằm trong khoảng ($0,1 \leq Kn \leq 10$), là vùng chuyển tiếp, và trường hợp $Kn > 10$, vùng này được gọi là vùng phân tử chuyển động tự do. Phương trình N-S-F không thể dùng để tính toán mô phỏng dòng khí loãng cho hai trường hợp sau cùng. Một phương pháp số khác là mô phỏng thống kê Monte-Carlo (DSMC) có thể mô phỏng chính xác tất cả các trường hợp của dòng khí loãng nêu trên nhưng thời gian tính toán của phương pháp DSMC rất lâu so với phương pháp tính toán động lực học lưu chất (CFD) mà giải bằng phương trình N-S-F.

Trong dòng khí loãng sự chênh lệch về phân bố mật độ hạt khí của chúng dẫn đến sự khuếch tán các hạt khí di chuyển từ vùng có mật độ hạt khí cao đến vùng có mật độ hạt khí thấp hơn cho đến khi chúng đạt được sự cân bằng về mật độ hạt khí, quá trình này được gọi là khuếch tán khối lượng. Hình 1 mô tả quá trình khuếch tán khối lượng của hạt khí. Ban đầu, ô bên trái có mật độ hạt khí cao hơn, ngăn cách với ô bên phải có mật độ hạt khí thấp hơn bằng vách ngăn. Khi vách ngăn được bỏ đi, các hạt khí khuếch tán từ ô bên trái (nơi mật độ khí cao) sang ô bên phải và các hạt

Abstract - In this paper, a numerical scheme of the Discontinuous Galerkin (DG) method is proposed for the extended Navier-Stokes-Fourier equations in high-speed rarefied gas simulations. Two basic configurations in aerodynamics such as rarefied gas flows over the flat plate and past a circular cylinder in cross-flow, are adopted to verify the DG scheme aforementioned. Each configuration is simulated using the classical N-S-F and the extended N-S-F equations. All calculated results are compared with the Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC) data, and show that those using the extended N-S-F equations are close to the DSMC data while those using the classical N-S-F equations are not, especially in the flat plate case.

Key words - Extended Navier-Stokes-Fourier equations; Discontinuous Galerkin (DG); rarefied gas flow; shock.

khí ở ô bên phải khuếch tán theo chiều ngược lại cho đến khi mật độ hạt khí của hai bên cân bằng. Phương trình N-S-F bỏ qua quá trình khuếch tán khối lượng này vì chúng được phát triển trên lý thuyết dòng liên tục. Tuy nhiên, trong dòng khí loãng, mật độ hạt khí thấp nên việc khuếch tán khối lượng trở nên có ảnh hưởng lớn trong quá trình bảo toàn khối lượng. Hơn nữa trong trường hợp dòng khí loãng ở tốc độ cao, ảnh hưởng của thành phần khuếch tán khối lượng tăng lên (do sự tăng lên của gradient mật độ hạt khí) do đó cần được xem xét trong phương trình N-S-F trong tính toán mô phỏng dòng khí loãng.



Hình 1. Quá trình khuếch tán khối lượng

Hai phương pháp tính toán số thường được dùng cho khí động lực học là phương pháp thể tích hữu hạn (FVM), và phần tử hữu hạn (FEM). Tuy nhiên, phương pháp FVM có giới hạn là tính bất ổn định cho các giải thuật số bậc cao và thường giới hạn ở bậc hai [2]. Phương pháp FEM có nhược điểm là tính liên tục lưu chất tại các biên giữa các phần tử. Phương pháp Discontinuous Galerkin (DG) được xem là một phương pháp thay thế cho FVM [3, 4]. Phương pháp này kết hợp các ưu điểm của phương pháp FVM (cho phép sự không liên tục của lưu chất tại các biên giữa các phần tử thông qua việc dùng các hàm thông lượng của FVM) và phương pháp phần tử hữu hạn FEM (cho phép tính toán xấp xỉ ở bậc cao) và đã được ứng dụng để giải quyết nhiều vấn đề trong các lĩnh vực như khí động lực

học, âm học và từ động lực học [3-7]. Phương pháp DG có thể chia thành “modal” và “nodal” tùy thuộc vào hàm dạng được sử dụng [4]. Trong phương pháp DG, hàm dạng được chọn sao cho các biến của trường dòng khí (vận tốc, nhiệt độ, ...), hoặc đạo hàm của chúng, hoặc thường là cả hai, được xem như bất liên tục khi đi ngang qua biên của phần tử, trong khi tính chất liên tục của miền tính toán vẫn được duy trì. Để tính toán trong trường hợp đa chiều (multi-dimensions), cần phải có các hàm dạng hoặc hàm nội suy được định nghĩa trong không gian đa chiều. Các hàm này được xây dựng bằng cách mở rộng các hàm dạng của trường hợp một chiều. Phương pháp DG có thể áp dụng hiệu quả cho các bài toán mà ở đó quá trình đối lưu chiếm ưu thế (các bài toán động học lưu chất và truyền nhiệt), trong khi vẫn duy trì được sự linh hoạt trong khả năng đáp ứng hình học đa chiều và độ chính xác cao thông qua việc sử dụng các phần tử bậc cao. Bên cạnh đó, phương pháp này dễ dàng được lập trình để tính toán song song vì tính chất cục bộ của nó, điều này rất có ích khi tính toán các bài toán đa chiều có số lượng phần tử lớn [4].

Phương pháp số DG đã được dùng để giải phương trình N-S-F cho tính toán khí động lực học [3, 8]. Bài báo này chỉ tập trung vào việc xây dựng sơ đồ tính toán số dùng phương pháp DG để giải phương trình N-S-F mở rộng hai chiều (2D) có xét đến hiện tượng tự khuếch tán (self-diffusion) khối lượng trong mô phỏng dòng khí loãng dùng lưới tam giác. Phương trình N-S-F mở rộng này đã được đề xuất trong [9] để giải quyết bài toán sóng thẳng một chiều (1D) ở tốc độ cao bằng phương pháp FVM. Vì vậy, giới hạn trong bài báo này là các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ không được áp dụng trên bề mặt vật thể trong việc tính toán mô phỏng dòng khí loãng, và khí đơn phân tử argon được lựa chọn cho tính toán. Hai trường hợp cơ bản được xem xét là dòng khí loãng argon đi qua tấm phẳng [1] và đi ngang qua hình trụ tròn [10]. Kết quả tính toán mô phỏng dòng khí loãng đạt được từ phương trình N-S-F và N-S-F mở rộng sẽ được so sánh với dữ liệu DSMC thu được từ sử dụng bộ giải dsmcFoam trong phần mềm mã mở OpenFOAM [11].

2. Phương trình Navier-Stokes-Fourier mở rộng xem xét đến quá trình khuếch tán khối lượng

Quá trình khuếch tán khối lượng xảy ra ngược chiều với chiều giảm của mật độ khí, tức là theo chiều âm của gradient khối lượng riêng và được biểu diễn thông qua định luật Fick [9],

$$\mathbf{j}_d = -D_m \nabla \rho, \quad (1)$$

Trong đó, \mathbf{j}_d là thông lượng do khuếch tán khối lượng, ∇ là gradient, ρ là khối lượng riêng, D_m là hệ số khuếch tán khối lượng [9].

Đối với phương trình bảo toàn khối lượng, khi có sự góp mặt của quá trình khuếch tán khối lượng, thành phần tổng thông lượng khối lượng trên một đơn vị thể tích được viết thành $\rho \mathbf{u}_m = \rho \mathbf{u} + \mathbf{j}_d$, trong đó um được gọi là vận tốc khối lượng trung bình, và \mathbf{u} là vận tốc dòng khí. Dùng định luật Fick để biểu diễn \mathbf{j}_d , lúc này phương trình bảo toàn khối lượng theo thời gian trở thành [9]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{u}] - \nabla \cdot [D_m \nabla \rho] = 0. \quad (2)$$

Giá trị của hệ số D_m phụ thuộc vào tính chất của từng loại khí khác nhau, với khí argon, $D_m \approx 1,32$ [9], đại lượng ν là hệ số nhớt động học, $\nu = \mu/\rho$ với μ là hệ số nhớt động lực học.

Đối với phương trình động lượng, Öttinger [12] cũng định nghĩa thêm động lượng là $\rho \mathbf{u}$ thay vì $\rho \mathbf{u}_m$, vì động lượng chỉ liên quan đến thông lượng khối lượng do đối lưu chứ không phải thông lượng động lượng do khuếch tán. Điều này là hợp lý vì thông lượng do đối lưu gây ra bởi chuyển động tịnh tiến của hạt khí, liên quan đến năng lượng cơ học, trong khi đó thông lượng do khuếch tán gây ra bởi chuyển động ngẫu nhiên của hạt khí, liên quan đến năng lượng do nhiệt. Theo các lập luận trên, phương trình bảo toàn động lượng mở rộng có dạng giống như phương trình bảo toàn động lượng của phương trình N-S-F nhưng vận tốc là \mathbf{u}_m thay vì \mathbf{u} [9].

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_m (\rho \mathbf{u})] + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 0, \quad (3)$$

Trong đó, p là áp suất, $\boldsymbol{\tau}$ là ten-xơ ứng suất và được tính như sau:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \text{Itr}(\nabla \mathbf{u}) \right], \quad (4)$$

Với, T kí hiệu phép toán chuyển vị, \mathbf{I} là ten-xơ đơn vị và tr là phép toán vết.

Đối với phương trình bảo toàn năng lượng, khi có mặt quá trình khuếch tán khối lượng, tổng năng lượng trên một đơn vị khối lượng E bằng tổng của nội năng e , động năng do dòng khí chuyển động với vận tốc \mathbf{u} và cả động năng do sự khuếch tán khối lượng. Phương trình bảo toàn năng lượng là [9],

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}_m (\rho E)] + \nabla \cdot [\rho \mathbf{u} p] - \nabla \cdot [\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}] + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (5)$$

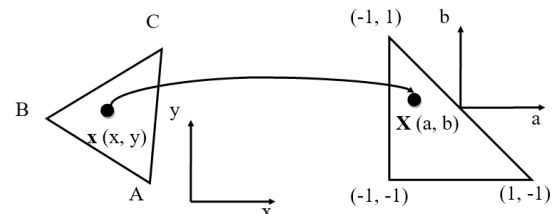
Trong đó, $E = e + |\mathbf{u}|^2/2$; \mathbf{q} là thông lượng nhiệt do khuếch tán và được tính bằng công thức $\mathbf{q} = -k \nabla T$, với T là nhiệt độ và k là hệ số truyền nhiệt và được tính bằng công thức $k = C_p \mu / Pr$ với C_p là nhiệt dung riêng đẳng áp, và Pr là hằng số Prandtl.

3. Phương pháp Discontinuous Galerkin cho phương trình N-S-F mở rộng

Lưới tam giác được sử dụng cho các mô phỏng trong bài báo này. Vì vậy, phép ánh xạ giữa phần tử tam giác thật trên miền tính toán và phần tử tam giác chuẩn [4]:

$$\mathbf{x} = \frac{(1-a)(1-b)}{4} \mathbf{x}_A + \frac{(1+a)(1-b)}{4} \mathbf{x}_B + \frac{(1+b)}{2} \mathbf{x}_C, \quad (6)$$

với, \mathbf{x}_A , \mathbf{x}_B và \mathbf{x}_C là tọa độ 3 đỉnh của phần tử tam giác thật, xem Hình 2 [4].



Hình 2. Ánh xạ giữa phần tử thật và phần tử chuẩn của phương trình N-S-F mở rộng cho trường hợp hai

chiều (2D) được viết dưới dạng véc tơ như sau:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_{inv}(\mathbf{U}) + \nabla \cdot \mathbf{F}_{vis}(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}) = 0, \quad (7)$$

Trong đó, \mathbf{U} là biến bảo toàn; $\mathbf{F}_{inv} = (\mathbf{F}_{inv1}, \mathbf{F}_{inv2})$ với \mathbf{F}_{inv1} và \mathbf{F}_{inv2} là thành phần không nhớt theo 2 phương Ox và Oy, $\mathbf{F}_{vis} = (\mathbf{F}_{vis1}, \mathbf{F}_{vis2})$ với \mathbf{F}_{vis1} và \mathbf{F}_{vis2} là thành phần có độ nhớt theo 2 phương Ox và Oy.

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \mathbf{F}_{inv1} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u u_m + p \\ \rho u v_m \\ (\rho E + p) u_m \end{pmatrix}, \mathbf{F}_{inv2} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho u v_m \\ \rho v v_m + p \\ (\rho E + p) v_m \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\mathbf{F}_{vis1} = \begin{pmatrix} j_{dx} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xx} u + \tau_{xy} v + q_x \end{pmatrix}, \mathbf{F}_{vis2} = \begin{pmatrix} j_{dy} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{xy} v + \tau_{yy} u + q_y \end{pmatrix},$$

Trong đó, u, v, u_m, v_m lần lượt là các thành phần theo phương Ox và Oy của vận tốc \mathbf{u} và \mathbf{u}_m .

Để tính các đạo hàm của biến bảo toàn \mathbf{U} và thông lượng do khuếch tán khối lượng \mathbf{j}_p , các biến phụ lần lượt là

$$\begin{cases} \mathbf{S} = -\mu \nabla \mathbf{U} \\ \mathbf{S}_m = -D_m \nabla \rho \end{cases} \quad (9)$$

Giả thiết rằng miền tính toán được chia thành các phần tử nhỏ không chồng lên nhau. Trong phương pháp DG, các biến \mathbf{U}, \mathbf{S} và \mathbf{S}_m ở tại mỗi phần tử được tính xấp xỉ thông qua các hệ số $\mathbf{U}_h, \mathbf{S}_h$ và \mathbf{S}_{mh} theo công thức

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_h(x, y, t) &= \sum_{i=0}^n U^i(t) \varphi^i(x, y), \\ \mathbf{S}_h(x, y, t) &= \sum_{i=0}^n S^i(t) \varphi^i(x, y), \\ \mathbf{S}_{mh}(x, y, t) &= \sum_{i=0}^n S_m^i(t) \varphi^i(x, y), \end{aligned} \quad (10)$$

Trong đó, φ là hàm dạng, n là bậc của phép xấp xỉ. Hàm dạng được sử dụng trong bài báo này là hàm dạng Dubiner bậc 2 được viết cho hệ tọa độ gắn với phần tử tam giác chuẩn như sau [3]:

$$\varphi^0 = 1, \varphi^1 = a(1 - b), \varphi^2 = \frac{1}{2}(3b + 1). \quad (11)$$

Thay phương trình (11) vào các phương trình (7) và (9), sau đó nhân các phương trình này với φ và lấy tích phân từng phần trên toàn miền tính toán của phần tử I , ta thu được hệ phương trình ghép của phương pháp DG như sau

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_I U \varphi dV - \int_I \nabla \varphi F_{inv} dV + \int_{\partial I} \varphi F_{inv} \cdot n dV \\ - \int_I \nabla \varphi F_{vis} dV + \int_{\partial I} \varphi F_{vis} \cdot n dV = 0 \\ \int_I S \varphi dV - \int_I \mu \nabla \varphi U dV + \int_{\partial I} \mu \varphi U \cdot n dV = 0 \\ \int_I S_m \varphi dV - \int_I D_m \nabla \varphi \rho dV + \int_{\partial I} D_m \varphi \rho \cdot n dV = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

Với, ∂I kí hiệu biên của phần tử I và \mathbf{n} là kí hiệu véc tơ pháp tuyến đơn vị hướng ra ngoài phần tử. Phương trình chứa biến phụ \mathbf{S} và \mathbf{S}_m được giải trước để tìm giá trị đạo hàm của các biến bảo toàn \mathbf{U} . Các tích phân khối trong hệ phương trình (12) được tính xấp xỉ bằng cách sử dụng công

thức Gauss với số điểm Gauss bằng $2n+1$ để đảm bảo độ chính xác. Các hàm thông lượng $\rho \cdot \mathbf{n}, \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{F}_{inv} \cdot \mathbf{n}$ và $\mathbf{F}_{vis} \cdot \mathbf{n}$ trong các tích phân biên được xấp xỉ bằng các hàm thông lượng số.

Hàm thông lượng Lax-Friedrichs (LxF) được sử dụng để tính $\mathbf{F}_{inv} \cdot \mathbf{n}$. Đây là hàm thông lượng đơn giản và được sử dụng phổ biến trong phương pháp DG. Nó là hàm thông lượng có độ tiêu tán lớn nhất, tuy nhiên giúp giải thuật DG ổn định [3].

$$\mathbf{F}_{inv} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}_{inv}(U^+) + \mathbf{F}_{inv}(U^-) - C(U^+ - U^-)], \quad (13)$$

$$C = \max \left(|\mathbf{u}^-| + \frac{a_s^-}{M}, |\mathbf{u}^+| + \frac{a_s^+}{M} \right), \quad (14)$$

với $a_s = \sqrt{\gamma RT}$ là vận tốc âm thanh, trong đó γ là tỉ lệ nhiệt dung, R là hằng số riêng của khí và M là số Mach.

Thông lượng thành phần có nhớt $\mathbf{F}_{vis} \cdot \mathbf{n}$ được tính bằng hàm thông lượng trung tâm [3],

$$\mathbf{F}_{vis} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}_{vis}(U^+, S^+) + \mathbf{F}_{vis}(U^-, S^-)] \cdot \mathbf{n}, \quad (15)$$

Hàm thông lượng cho các biến phụ là

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} [\mu^+ U^+ + \mu^- U^-] \cdot \mathbf{n}, \quad (16)$$

$$\rho \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} [\rho^+ + \rho^-] \cdot \mathbf{n}, \quad (17)$$

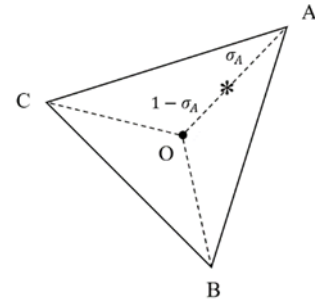
Trong đó, dấu + và - ký hiệu 2 bên của một biên (Hình 1).

Hệ phương trình (12) được giải bằng phương pháp Runge-Kutta bậc 3 với bước thời gian Δt được tính bằng công thức [3]

$$\Delta t = \frac{1}{(n+1)^2} \frac{\Delta x CFL}{|\mathbf{u}| + \frac{a_s}{M} + \frac{\mu}{\Delta x}}, \quad (18)$$

Trong đó, CFL là hệ số Courant-Friedrichs-Lewy ($CFL < 1$), Δx là kích thước phần tử lưới.

Trong trường tính toán ở tốc độ cao, giá trị động năng $|\mathbf{u}_m|^2/2$ có thể đủ lớn để làm cho giá trị nhiệt độ bị âm, do đó cần phải sử dụng hàm giới hạn để đảm bảo nhiệt độ và khối lượng riêng luôn dương trong suốt quá trình tính toán.



Hình 3. Hàm giới hạn cho phần tử tam giác

Đầu tiên giá trị khối lượng riêng, ρ , được giới hạn tại tất cả các phần tử lưới. Giá trị ρ_{min} là giá trị khối lượng riêng nhỏ nhất tại 3 đỉnh của phần tử tam giác trong Hình 3, $\rho_{min} = \min(\rho_A, \rho_B, \rho_C)$. Hệ số θ_1 được tính bằng công thức [3]

$$\theta_1 = \min \left(\frac{\bar{\rho} - \omega}{\bar{\rho} - \rho_{min}}, 1 \right), \quad (19)$$

Trong đó, $\omega = \min(10^{-13}, \bar{p}, \bar{p})$ với \bar{p} và \bar{p} lần lượt là khối lượng riêng trung bình và áp suất trung bình trên phần tử lưới đang xét. Khối lượng riêng lúc này được giới hạn bằng công thức,

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho^0(t)\varphi^0(\mathbf{x}) + \theta_1 \sum_{i=1}^n \rho^i(t)\varphi^i(\mathbf{x}), \quad (20)$$

Ở bước kế tiếp, giá trị áp suất được giới hạn tại tất cả các phần tử lưới. Như vậy các biến U còn lại được giới hạn tại bước này. Giá trị áp suất tại 3 đỉnh của phần tử được tính để từ đó tìm được $p_{min} = \min(p_A, p_B, p_C)$. Nếu $p_{min} < \omega$, có thể tìm được giá trị $\sigma_A (0 \leq \sigma_A \leq 1)$ tại điểm * trên đoạn thẳng OA sao cho $p(\mathbf{x}^*) = \omega$ (Hình) với

$$\mathbf{x}^* = \sigma_A \mathbf{x}_A + (1 - \sigma_A)\mathbf{x}_O, \quad (21)$$

Trong đó, \mathbf{x}_A và \mathbf{x}_O lần lượt là tọa độ đỉnh A và tâm O của phần tử tam giác. Lập lại bước trên cho các đoạn thẳng OB và OC để tìm σ_B và σ_C , sau đó tìm $\sigma = \min(\sigma_A, \sigma_B, \sigma_C)$ và hệ số $\theta_2 = (\sigma, 1)$. Giá trị của các biến bảo toàn tại phần tử được hiệu chỉnh bằng các công thức dưới đây.

$$U(\mathbf{x}, t) = U^0(t)\varphi^0(\mathbf{x}) + \theta_2 \sum_{i=1}^n U^i(t)\varphi^i(\mathbf{x}). \quad (22)$$

4. Mô hình tính toán số

Giải thuật của phương pháp DG trình bày ở phần trên được dùng để tính toán cho các trường hợp cơ bản là dòng khí argon tốc độ cao qua tấm phẳng và ngang qua hình trụ. Bậc chính xác sử dụng trong bài báo này là bậc 2. Các kết quả tính toán được xem là hội tụ khi sai số của U nhỏ hơn 10^{-4} . Khí argon trong các trường hợp này được giả thiết là khí lý tưởng, vì vậy ta có phương trình trạng thái $p = \rho RT$. Hệ số nhớt động học được tính bằng phương trình Sutherland [3],

$$\mu = A_S \frac{T^{1.5}}{T + T_S}, \quad (23)$$

mà A_S và T_S là các hằng số cố sẵn đối với từng loại khí. Các hệ số A_S, T_S, R, γ và Pr của argon được trình bày trong Bảng 1 dưới đây.

Bảng 1. Các hệ số A_S và T_S trong phương trình Sutherland [1]

Khí	A_S (Pa.s.K ^{-1/2})	T_S (K)	R (m ² s ⁻² K ⁻¹)	γ	Pr
Argon	1,93e-6	142	208,1	1,67	0,67

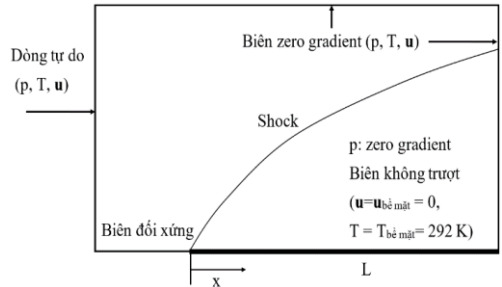
Các điều kiện ban đầu của dòng khí argon cho trường hợp tấm phẳng và hình trụ được trình bày trong Bảng 2.

Bảng 2. Điều kiện ban đầu dòng khí

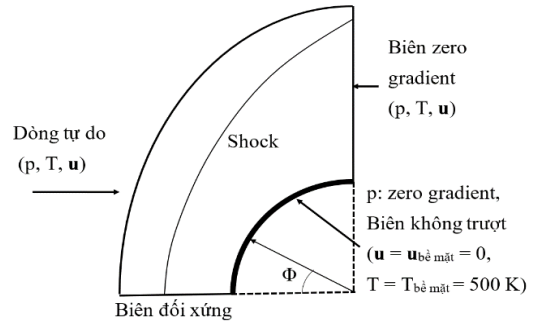
Trường hợp	Ma	T(K)	p (Pa)	$T_{bề\ mặt}$ (K)	$Kn = \lambda/L$ hoặc λ/D
Tấm phẳng [1]	4	64	3,73	292	0,004
Hình trụ [10]	10	200	0,234	500	0,05

Hình 4 và 5, trình bày miền tính toán và các điều kiện biên của bài toán mô phỏng cho cả hai trường hợp: Tấm phẳng và hình trụ. Điều kiện biên trên bề mặt tấm phẳng hoặc hình trụ được áp dụng như sau: Điều kiện biên zero gradient được áp dụng cho áp suất, và điều kiện biên không trượt áp dụng cho vận tốc và nhiệt độ (i.e. $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{bề\ mặt} = 0$ và $T = T_{bề\ mặt}$). Tấm phẳng có chiều dài $L = 0,055m$ và hình trụ có đường kính $D = 0,3m$. Miền tính toán được chọn sao cho

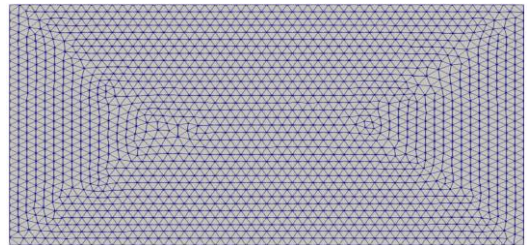
có thể bao được hết sóng. Nhiều kích thước phần tử lưới tam giác được sử dụng để xác định độ hội tụ của lưới, và chỉ trình bày kết quả này cho trường hợp hình trụ như là minh chứng. Lưới tam giác cuối cùng đạt được cho trường hợp tấm phẳng (xem Hình 6) có số lượng phần tử là 9955, và kích thước phần tử lưới là 0,015m. Cho trường hợp hình trụ, lưới được làm mịn tại vùng gần bề mặt hình trụ (kích thước phần tử là 0,003m) để có thể tính toán chính xác áp suất trên bề mặt hình trụ. Vùng lưới thô hơn có kích thước phần tử là 0,012m, xem Hình 7. Việc dùng nhiều kích thước phần tử lưới trên miền tính toán để làm giảm thời gian tính toán.



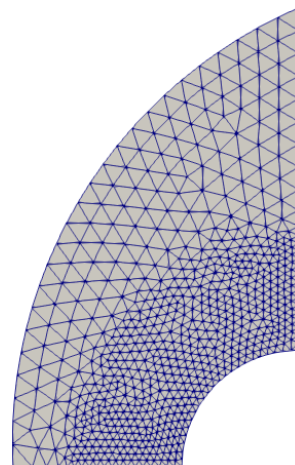
Hình 4. Miền tính toán và điều kiện biên cho tấm phẳng



Hình 5. Miền tính toán và điều kiện biên cho hình trụ



Hình 6. Lưới cho trường hợp tấm phẳng



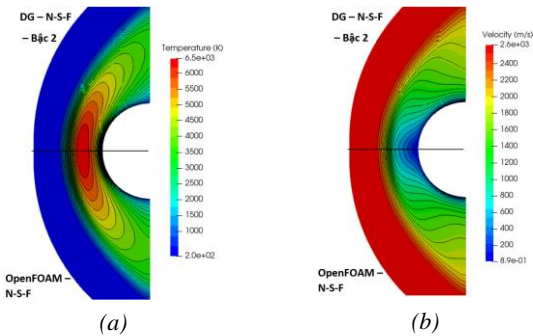
Hình 7. Lưới cho trường hợp hình trụ

5. Kết quả và thảo luận

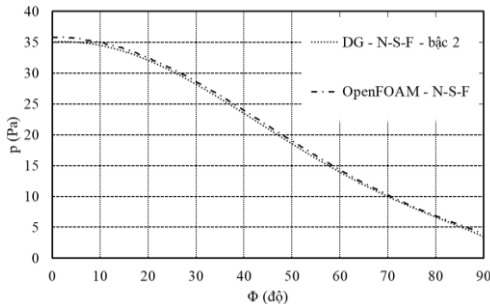
5.1. Trường hợp dòng khí ngang qua hình trụ

5.1.1. Kiểm chứng giải thuật của phương pháp DG với phương pháp FVM

Trong mục này, kết quả tính toán của trường hợp dòng khí loãng qua hình trụ sử dụng phương trình N-S-F, giải bằng phương pháp DG bậc 2 được so sánh với kết quả được tính toán từ phương trình N-S-F từ bộ giải rhoCentralFoam trong phần mềm OpenFOAM để kiểm chứng độ tin cậy giải thuật số của phương pháp DG. Trường nhiệt độ và vận tốc ở Hình 8 có thể thấy vị trí xuất hiện sóng và khoảng cách stand-off (khoảng cách từ bề mặt hình trụ tới sóng) của kết quả tính toán của DG bậc 2 và OpenFOAM là hoàn toàn tương đồng. Hình 9 trình bày sự phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ được vẽ theo góc hình trụ Φ trên trục hoành. Kết quả phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ giữa DG bậc 2 và FVM trong OpenFOAM cũng rất gần nhau. Các kết quả này cho thấy giải thuật DG phát triển trong bài báo này hoàn toàn đủ tin cậy để sử dụng trong mô phỏng dòng khí loãng.



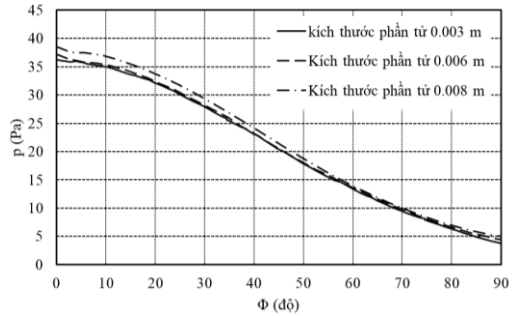
Hình 8. Trường nhiệt độ (a) và vận tốc (b) của trường hợp hình trụ của phương pháp DG bậc 2 và FVM-OpenFOAM



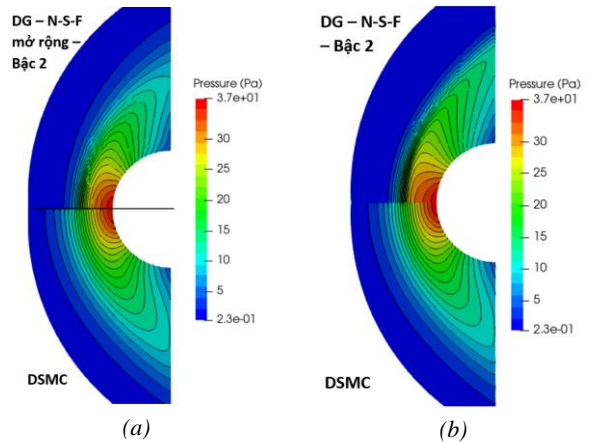
Hình 9. Phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ của DG N-S-F bậc 2 và OpenFOAM N-S-F

5.1.2. Kết quả tính toán sử dụng phương trình N-S-F mở rộng

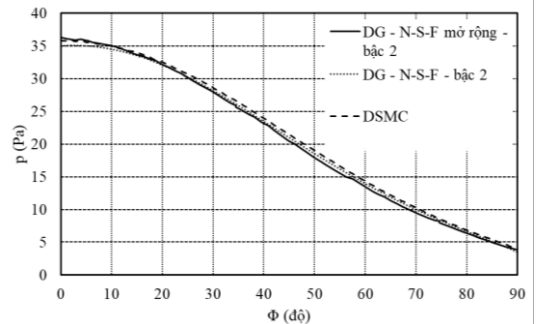
Ở trường hợp này, kết quả tính toán sử dụng phương trình N-S-F mở rộng dùng phương pháp DG bậc 2 được so sánh với dữ liệu DSMC và kết quả sử dụng phương trình N-S-F. Đầu tiên độ hội tụ của lưới được xem xét với 3 lưới có kích thước phần tử khác nhau ở vùng gần bề mặt hình trụ (lần lượt là 0,003 m, 0,006 m và 0,008 m) để kiểm tra độ hội tụ về lưới. Kết quả phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ (Hình 10) cho thấy bài toán hội tụ ở lưới có kích thước phần tử tại vùng gần bề mặt hình trụ là 0,003m. Kết quả của trường áp suất được trình bày ở Hình 11 cho thấy áp suất và khoảng cách stand-off của sóng thu được từ dùng phương trình N-S-F mở rộng gần với DSMC hơn kết quả dùng phương trình N-S-F.



Hình 10. Phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ của các lưới có kích thước phần tử khác nhau



Hình 11. Trường áp suất của dòng qua hình trụ (a) DG bậc 2 N-S-F mở rộng và DSMC, và (b) DG bậc 2 N-S-F và DSMC



Hình 12. Phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ

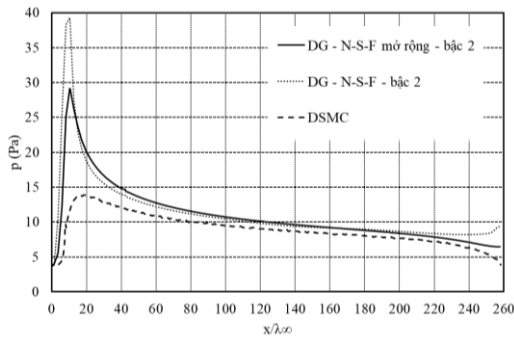
Hình 12 trình bày sự phân bố áp suất trên bề mặt hình trụ của các kết quả tính toán dùng phương trình N-S-F, phương trình N-S-F mở rộng và dữ liệu DSMC. Tại điểm dừng, $\Phi = 0^\circ$, tất cả áp suất đạt giá trị lớn nhất khoảng 36 Pa, và sau đó giảm dần dọc theo bề mặt hình trụ và đạt giá trị nhỏ nhất tại vị trí $\Phi = 90^\circ$, khoảng 3,8 Pa. Không có sự khác biệt trong áp suất tính toán dọc bề mặt hình trụ của phương trình N-S-F, phương trình N-S-F mở rộng và dữ liệu DSMC.

5.2. Trường hợp dòng qua tấm phẳng

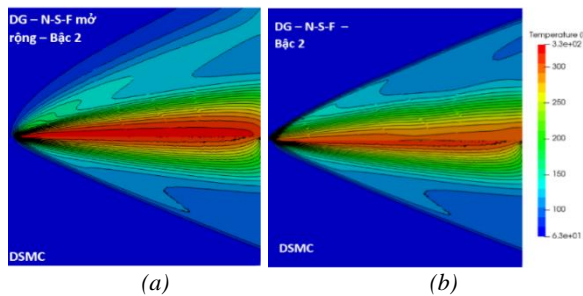
Dòng khí loãng qua tấm phẳng ở tốc độ cao được nghiên cứu chủ yếu tập trung vào tính chất dòng khí tại mũi tấm phẳng. Tại vị trí này, tần số va chạm của hạt khí với tấm phẳng lớn hơn giữa các hạt khí với nhau. Ban đầu có rất ít va chạm giữa hạt khí và tấm phẳng và ứng xử của dòng khí là dạng phân tử chuyển động tự do.

Khi các va chạm xảy ra nhiều hơn, dòng khí dần đạt đến trạng thái cân bằng dọc theo tấm phẳng. Trong trường hợp

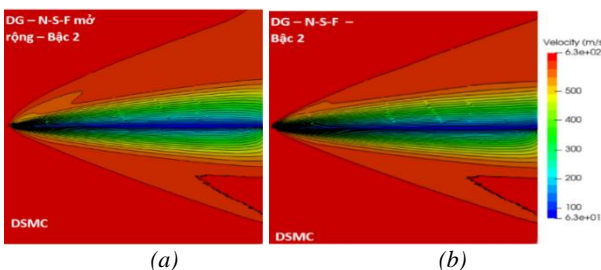
tám phẳng, chúng ta có thể chọn L là chiều dài của tám phẳng trong tính toán Kn , nhưng chiều dài của nó không ảnh hưởng đến độ trượt gần mũi. Vì vậy, Kn có thể được tính thông qua $x/\lambda = Kn^{-1}$, mà x là khoảng cách chạy dọc tám phẳng từ mũi, với giá trị ban đầu cho trước của $\lambda = 0,23\text{mm}$ [1]. Kết quả tính toán áp suất dọc bề mặt tám phẳng được vẽ theo $x/\lambda = Kn^{-1}$ trên trục hoành.



Hình 13. Phân bố áp suất trên bề mặt tám phẳng



Hình 14. Trường nhiệt độ của dòng qua tám phẳng (a) DG bậc 2 N-S-F mở rộng và DSMC, và (b) DG bậc 2 N-S-F và DSMC



Hình 15. Trường vận tốc của dòng qua tám phẳng (a) DG bậc 2 N-S-F mở rộng và DSMC, và (b) DG bậc 2 N-S-F và DSMC

Hình 13 biểu diễn phân bố áp suất trên bề mặt tám phẳng. Tất cả áp suất đạt giá trị lớn nhất ở gần mũi tám phẳng 1) $p = 39$ Pa cho phương trình N-S-F, 2) $p = 28,5$ Pa phương trình N-S-F mở rộng và 3) $p = 13,6$ cho DSMC. Có sự khác biệt lớn giữa mô phỏng DSMC và phương trình N-S-F và N-S-F mở rộng trong $x/\lambda \leq 10$ (i.e. $Kn \geq 0,1$). Trong vùng này, kết quả sử dụng phương trình N-S-F mở rộng gần với dữ liệu DSMC hơn so với phương trình N-S-F, vì ở vị trí này dòng khí bị nén lại có khối lượng riêng cao nên hiện tượng khuếch tán có ảnh hưởng lớn trong quá trình bảo toàn khối lượng. Thành phần thông lượng do khuếch tán khối lượng trong phương trình N-S-F mở rộng đã giúp giảm khối lượng riêng, dẫn đến giảm áp suất tại mũi tám phẳng. Ở vùng $100 \leq x/\lambda \leq 200$ (i.e. $0,005 \leq Kn \leq 0,001$), kết quả sử dụng phương trình N-S-F mở rộng và N-S-F rất gần nhau và gần với kết quả của DSMC vì trong vùng này độ mất cân bằng

của dòng khí nhỏ, phương trình N-S-F là đủ để cho kết quả tính toán chính xác. Tại đuôi tám phẳng, kết quả phân bố áp suất của phương trình N-S-F mở rộng cũng gần với dữ liệu DSMC hơn là phương trình N-S-F. Nguyên nhân có thể vì tại đuôi tám phẳng bắt đầu có sự chuyển tiếp từ tầng sang rối, hiện tượng dòng rối đã làm gia tăng sự khuếch tán khối lượng bên trong dòng khí, sự ảnh hưởng này được thể hiện rõ hơn trong các trường nhiệt độ và vận tốc trong hai Hình 14 và 15. Trong đó mô phỏng với phương trình N-S-F mở rộng cho kết quả gần với dữ liệu của các trường DSMC tại đuôi tám phẳng. Hai Hình 14 và 15 cũng cho thấy, có sự khác nhau giữa mô phỏng DSMC và phương trình N-S-F không và có mở rộng trong lớp biên và vùng tạo sóng. Ở mũi tám phẳng một lớp biên được phát triển, và sóng cong được hình thành bởi các hiệu ứng nhớt của dòng khí loãng.

6. Kết luận

Bài báo đã xây dựng thành công giải thuật của phương pháp DG cho phương trình N-S-F, và kiểm chứng độ tin cậy bằng việc so sánh kết quả tính toán bằng phương pháp FVM trong phần mềm mã mở OpenFOAM. Nó đã được áp dụng để giải phương trình N-S-F mở rộng có xem xét thành phần khuếch tán khối lượng. Phương trình N-S-F mở rộng đã cho kết quả tính toán gần với DSMC hơn phương trình N-S-F khi mô phỏng dòng khí loãng tốc độ cao vượt âm, đặc biệt là trong trường hợp dòng qua tám phẳng. Trong công việc sắp tới, các điều kiện biên trượt vận tốc và nhay nhiệt độ tại bề mặt sẽ được tích hợp vào chương trình DG của phương trình N-S-F mở rộng để đạt các kết quả tốt hơn trong mô phỏng dòng khí loãng ở tốc độ cao.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Nam T. P. Le, E. Roohi, and T. N. Tran, "Comprehensive assessment of newly-developed slip-jump boundary conditions in high-speed rarefied gas flow simulations", *Aerospace Science and Technology*, Vol. 91, pp. 656-668, 2019.
- [2] F. Moukalled, L. Mangani and M. Darwish, *The Finite volume method in Computational Fluid Dynamic*, Springer, 2016.
- [3] N. Le, H. Xiao and R. Myong, "A triangular discontinuous Galerkin method for non-Newtonian implicit constitutive models of rarefied and microscale gases", *Journal of Computational Physics*, Vol. 273, pp. 160 – 184, 2014.
- [4] G. E. Karniadakis; S. Sherwin; *Spectral/hp Element Methods for Computational Fluid Dynamics*, New York: Oxford University Press, 2004.
- [5] J. Cheng, F. Zhang and T. Liu, "A discontinuous Galerkin method for the simulation of compressible gas-gas and gas-water two-medium flows", *Journal of Computational Physics*, Vol. 403, pp. 25-69, 2020.
- [6] Z. Shijun, Y. Xijun and D. Zihuan, "A positivity-preserving Lagrangian Discontinuous Galerkin method for ideal magnetohydrodynamics equations in one-dimension", *Journal of Computational Physics*, Vol. 405, pp. 109-144, 2019.
- [7] A. Burbeau and P. Sagaut, "Simulation of a viscous compressible flow past a circular cylinder with high-order discontinuous Galerkin methods", *Computers & Fluids*, Vol. 31, pp. 867-889, 2002.
- [8] F. Bassi, S. Rebay, "A high-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier–Stokes equations", *Journal Computational Physics*, Vol. 131, pp. 267–279, 1997.
- [9] C. J. Greenshields and J. M. Reese, "The structure of hypersonic shock wave using Navier-Stokes equations modified to include mass diffusion", in *The 2nd European Conference on Aerospace Sciences*, Belgium, 2007.
- [10] A. J. Lofthouse, L. C. Scalabrin and I. D. Boyd, "Velocity Slip and Temperature Jump in Hypersonic Aerothermodynamics", in *45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Nevada, 2007.
- [11] H. C. Öttinger, *Beyond Equilibrium Thermodynamics*, Wiley, 2005.
- [12] OpenFOAM, www.openfoam.org, 01/2020.