

## МЕХАНИКА

## MECHANICS

Научная статья

УДК 533.7

doi: 10.17223/19988621/81/5

## Определение значений переносных характеристик в многокомпонентных средах на основе анализа микропроцессов

Ирина Викторовна Анисимова<sup>1</sup>, Виктор Николаевич Игнатьев<sup>2</sup>,  
Елена Юрьевна Лаптева<sup>3</sup>

<sup>1, 2, 3</sup> Казанский национальный исследовательский технический университет  
им. А.Н. Туполева – КАИ, Казань, Россия

<sup>1, 2</sup> [anisimovaiv1@rambler.ru](mailto:anisimovaiv1@rambler.ru)

<sup>3</sup> [lapti.daleko@mail.ru](mailto:lapti.daleko@mail.ru)

**Аннотация.** Предлагается двухуровневый подход математического моделирования в многокомпонентных газовых смесях. Он основан на сочетании описания законов сохранения на базе макроуравнений и определения в них коэффициентов переноса, исходя из анализа микропроцессов. Основной целью работы является разработка алгоритма определения транспортных характеристик в многокомпонентных средах. Для этого используется молекулярно-кинетическая теория газов и жидкостей, а именно столкновительная часть уравнения Больцмана. В ней содержатся кратные несобственные интегралы, учитывающие влияние микропроцессов в среде на значения коэффициентов переноса. При интегрировании уравнения Больцмана методом Чепмена–Энскога коэффициенты переноса выражаются через интегральные скобки полиномов Сонина, которые являются линейными комбинациями интегралов столкновения молекул. Их вычисление требует использования эффективных математически обоснованных алгоритмов, включая элементы параллельных вычислений.

**Ключевые слова:** многокомпонентная среда, коэффициенты переноса, уравнение Больцмана, потенциал взаимодействия молекул, интегралы с осциллирующими подынтегральными функциями, параллельные вычисления

**Для цитирования:** Анисимова И.В., Игнатьев В.Н., Лаптева Е.Ю. Определение значений переносных характеристик в многокомпонентных средах на основе анализа микропроцессов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2023. № 81. С. 49–56. doi: 10.17223/19988621/81/5

## Determination of the values of transfer characteristics in multicomponent media on the basis of micro-process analysis

Irina V. Anisimova<sup>1</sup>, Victor N. Ignat'ev<sup>2</sup>, Elena Yu. Lapteva<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup> Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev – KAI,  
Kazan, Russian Federation

<sup>1,2</sup> [anisimovaiv1@rambler.ru](mailto:anisimovaiv1@rambler.ru)

<sup>3</sup> [lapti.daleko@mail.ru](mailto:lapti.daleko@mail.ru)

**Abstract.** This paper proposes a two-level approach for mathematical modeling of processes in multicomponent gas mixtures. It involves a combination of the description of conservation laws based on macro-equations and the determination of the corresponding transfer coefficients using the analysis of micro-processes. The main purpose of this work is to develop an algorithm for determining transport characteristics in multicomponent media based on the analysis of inner micro-processes. Hence, the kinetic molecular theory of gases and liquids is used, namely, the collision part of the Boltzmann equation. It includes multiple improper integrals taking into account the effect of micro-processes in the medium on the values of transport coefficients. When integrating the Boltzmann equation by the Chapman-Enskog method, the transport coefficients are expressed through integral brackets of the Sonin polynomials, which represent the linear combinations of molecular collision integrals. Their calculations require the use of efficient mathematically sound ways including the elements of parallel computing.

**Keywords:** multicomponent medium, transport coefficients, Boltzmann equation, interaction potential of molecules, integrals with oscillating integrands, parallel computing

**For citation:** Anisimova, I.V., Ignat'ev, V.N., Lapteva, E.Yu. (2023) Determination of the values of transfer characteristics in multicomponent media on the basis of micro-process analysis. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 81. pp. 49–56. doi: 10.17223/19988621/81/5

### 1. Математическое описание микропроцессов в многокомпонентных газовых средах

Уравнения, полученные на основе корпускулярного (молекулярного) описания процессов в многокомпонентных средах, содержат коэффициенты переноса, характеризующие транспортные характеристики сред [1, 2]. Так, вязкость зависит от вязкоупругих и геометрических характеристик молекул в смеси. Аналогично значения других коэффициентов переноса, используемых в макроуравнениях, должны определяться на основе анализа микропроцессов в смеси. В связи с этим при численном моделировании задач прикладной гидроаэромеханики на основе макроуравнений для определения значений полуэмпирических коэффициентов переноса в этих уравнениях необходимо использовать результаты кинетической теории газов и жидкостей [3–6].

Поскольку в уравнении Больцмана столкновительная часть описывает процессы, связанные со взаимодействием молекул, то будем ее использовать в алго-

ритме определения переносных характеристик многокомпонентных смесей. Столкновительная часть уравнения Больцмана состоит из восьмикратных несобственных интегралов, содержащих осциллирующие подынтегральные функции. Одним из них является несобственный интеграл, описывающий угол рассеяния взаимодействующих молекул [3, 4]:

$$\chi(b, g) = \pi \mp 2b \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \left(1 - \frac{\varphi(r)}{g^2}\right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (1)$$

где  $b$  – прицельный параметр,  $g$  – относительная скорость взаимодействующих молекул,  $r$  – межмолекулярное расстояние,  $r_0$  – минимальное положительное значение корня нелинейного алгебраического уравнения [7, 8]:

$$r_0^2 - b^2 - \frac{r_0}{g} \left( f(n) \cdot \left( \frac{AI}{r_0} \right)^{2(n+3)} - \left( \frac{AI}{r_0} \right)^6 \right) = 0. \quad (2)$$

Функция  $\varphi(r)$ , входящая в подынтегральное выражение (1), описывает процесс взаимодействия молекул в газовой среде.

Рассмотрим газовые смеси, в которых силы притяжения определяются зависимостью [3, 4]

$$\varphi(r) = -c \cdot r^{-6}, \quad (3)$$

где  $c$  – некоторая постоянная. Соотношение (3) является степенной функцией и, как отмечается в [3, 4], удовлетворительно аппроксимирует кривую графика сил притяжения взаимодействующих молекул.

Проводя анализ сил, действующих на молекулы как в простых, так и многокомпонентных средах, можно предположить, что сила притяжения взаимодействующих молекул обладает свойством «автомодельности» и удовлетворительно аппроксимируется степенной зависимостью (3) [3].

В отличие от силы притяжения сила отталкивания, действие которой велико при малых  $r$ , зависит не только от электромагнитных полей, но и от вязкоупругих свойств взаимодействующих молекул. Эти свойства молекул и их влияние на значение силы отталкивания наряду с силой электромагнитных полей будем учитывать при аппроксимации степенной функцией [7, 8]

$$\varphi(r) = \varepsilon f(n) \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{2(n+3)} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (4)$$

где  $\sigma$  – расстояние от начала координат до точки пересечения функции (4) с осью абсцисс, т.е.  $\varphi(\sigma) = 0$ , а  $\varepsilon$  характеризует максимальное значение глубины потенциальной ямы. Функция  $f(n)$  в (4) определяется выражением

$$f(n) = \frac{\left( \frac{n+3}{3} \right)^{\frac{3}{n}}}{1 - \left( \frac{n+3}{3} \right)^{-1}} \quad (5)$$

и является монотонно убывающей для  $\forall n > 0$ . Параметр  $n$  в (4) характеризует суперпозицию сил, влияющих на процесс отталкивания взаимодействующих мо-

лекул в смеси (в частности, вязкоупругих свойств молекул), и электромагнитных сил. Для каждой газовой смеси параметр  $n$  в (4) определяется минимизацией квадратичного функционала ошибки между расчетным и экспериментально определенным значением одного (любого) коэффициента переноса в смеси. Отметим, что при  $n = 3$  потенциал (4) содержит в своем семействе потенциал Леннарда-Джонса (12,6), который не всегда корректно используется в программных продуктах, предназначенных для проведения расчетов в области механики многокомпонентных жидкостей и газов: STAR-CD, FLUENT и CFX компании ANSYS и др.

Введем новые переменные  $r^* = \frac{r}{d_{12}}$ ,  $d_{12} = \frac{d_1 + d_2}{2}$ ,  $b^* = \frac{b}{d_{12}}$ ,  $\varphi^* = \frac{\varphi}{\varepsilon}$  в которых выражение (1) имеет вид:

$$\chi(b^*, g^*) = \pi \mp 2b^* \int_{r_0^*}^{\infty} \frac{dr^*}{r^{*2} \left( 1 - \frac{\varphi_{eff}^*(n, AI, b^*, g^*)}{g^{*2}} \right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (6)$$

Подынтегральная функция, входящая в несобственный интеграл (6), содержит  $\varphi_{eff}^*$ :

$$\varphi_{eff}^*(n, AI, b^*, g^*) = f(n) \left( \left( \frac{AI}{r^*} \right)^{2(n+3)} + \left( \frac{AI}{r^*} \right)^6 \right), \quad (7)$$

где безразмерное число  $AI = \frac{2\sigma}{d_1 + d_2}$  характеризует геометрические параметры молекул.

Для описания взаимодействия молекул в  $N$ -компонентной среде ( $N > 2$ ) воспользуемся теорией аппроксимации и обобщением кинетической теории газов при создании алгоритма вычисления значений коэффициентов переноса в газовой среде с учетом микропроцессов. Такой подход позволяет учитывать геометрические и вязкоупругие свойства взаимодействующих в смеси молекул. С этой целью исходную  $N$ -компонентную смесь аппроксимируем газовой средой, состоящей из молекул максимальной концентрации в смеси диаметром  $d_1$ . Остальную часть исходной смеси аппроксимируем средой с молекулами с осредненным диаметром

$$d_2^* = \frac{\sum_{i=2}^{N-1} d_i}{N-1}.$$

Введем безразмерное число  $AI^*$  соотношением

$$AI^* = \frac{\sigma}{\sum_{i=1}^N d_i} = \frac{\sigma}{d^* \sum_{i=1}^N d_i} = \frac{AI}{\sum_{i=1}^N d_i / d^*}, \quad (8)$$

где  $d^* = \frac{d_1 + d_2^*}{2}$ .

Соотношение (8) позволяет установить взаимосвязь между безразмерными числами где  $AI$  и где  $AI^*$  :

$$AI = AI^* \cdot \sum_{i=1}^N d_i . \quad (9)$$

Подставляя (9) в (7), получаем выражение, описывающее взаимодействие молекул в  $N$ -компонентной газовой среде, которое учитывает их геометрические и вязко-упругие свойства:

$$\varphi_{eff}^* (r^*, n, AI, d_i^*) = f(n) \left( \left( \frac{AI^* \cdot \sum_{i=1}^N d_i}{r^*} \right)^{2(n+3)} - \left( \frac{AI^* \cdot \sum_{i=1}^K d_i}{r^*} \right)^6 \right) . \quad (10)$$

Следуя кинетической теории газов [3, 4], коэффициенты переноса в  $N$ -компонентной газовой среде определяются в результате решения систем линейных алгебраических уравнений. Коэффициенты данных систем уравнений пропорциональны интегральным скобкам полинома Сонина. Вводя понятие угла рассеяния взаимодействующих молекул, удастся упростить интегральные скобки и свести их к выражениям многочленов, зависящих от несобственного интеграла:

$$\Omega^{(l,r)} = \left( \frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2r+3} Q^{(l)} d\gamma , \quad (11)$$

в котором

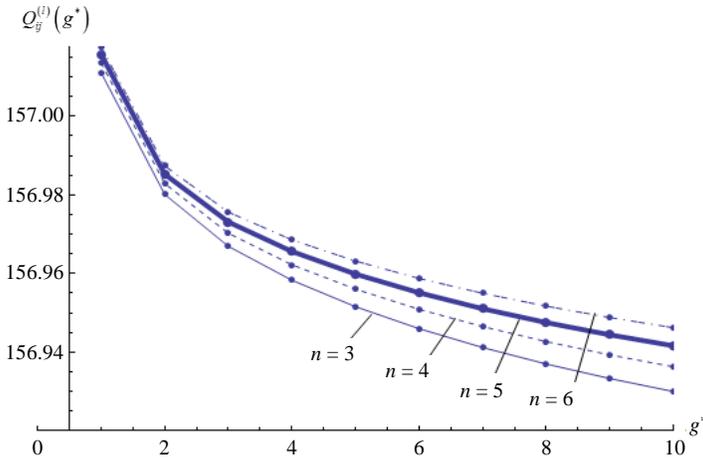
$$Q^{(l)}(g^*) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l(\chi(g^*, b^*))) b^* db^* \quad (12)$$

Таким образом, чтобы определить значение интеграла (11), необходимо найти значение несобственного интеграла (12), который содержит осциллирующую функцию  $(1 - \cos^l(\chi(g^*, b^*))) b^*$ . Данная функция зависит от потенциала  $\varphi_{eff}^* (r^*, n, AI, d_i^*)$  (10), который описывается кривой взаимодействия молекул в  $N$ -компонентной смеси. Данная кривая содержит подобласть потенциальной ямы. Геометрические характеристики этой подобласти описывают микропроцессы, которые существенно влияют на определение значений интегралов (11) и (12), а следовательно, коэффициентов переноса. Микропроцессы в потенциальной яме, как правило, приводят к уменьшению значений переносных характеристик среды: вязкости, теплопроводности, диффузии и др.

## 2. Квадратура Гаусса–Кристоффеля в алгоритме расчета интегралов столкновения молекул

Поскольку расчет интегралов (11), (12) является основной частью алгоритма определения переносных характеристик смесей, то необходимо использовать математически обоснованные численные алгоритмы. Для численного интегрирования интегралов (11), (12) предлагается квадратура Гаусса–Кристоффеля, построенная на теории ортогональных многочленов [9]. Построение узлов разбиения на исходном отрезке интегрирования и значений весов в них происходит из условия минимизации функционала для погрешности квадратуры. Использо-

ние квадратуры такого типа для определения значений интегралов (11), (12) позволяет учесть микропроцессы в потенциальной яме и их влияние на значения коэффициентов переноса. На рис. 1 приведена графическая иллюстрация наиболее сложного интеграла (12) с осциллирующей подынтегральной функцией для различных значений параметра  $n$ , который влияет на геометрию потенциальной ямы. Расчеты и построение графиков осуществлялись с помощью пакета Wolfram Mathematica [10].



**Рис. 1.** Значение интеграла (12) при различных  $n$   
**Fig. 1.** The value of integral (12) at various  $n$

В предложенном методе определения коэффициентов переноса в  $N$ -компонентных газовых смесях необходимо использовать алгоритмы параллельных вычислений, что связано с необходимостью решений систем алгебраических уравнений. Количество систем зависит от числа определяемых коэффициентов переноса в  $N$ -компонентной среде. Алгоритм распараллеливания решения совокупности систем уравнений зависит от структуры вычислительного комплекса и представляет научный интерес авторов в будущих работах.

### Заключение

Для качественного моделирования газодинамических процессов в газожидкостных смесях необходимо формирование адекватной математической модели, которая базируется на взаимосвязи макроуравнений теплопереноса с переносными характеристиками среды из кинетической теории, а также создание эффективных вычислительных технологий для определения значений коэффициентов переноса. В работе предложено определение значений коэффициентов переноса (вязкости, теплопроводности, диффузии и др.) в  $N$ -компонентных газовых смесях с учетом анализа микропроцессов. С этой целью введено понятие аппроксимации исходной многокомпонентной смеси бинарной средой, состоящей из молекул двух типов. Одну часть среды формировали молекулы с максимальной концентрацией, другую часть — остальные молекулы с осредненным диаметром.

При математическом описании взаимодействия молекул в среде кроме сил притяжения, отталкивания и электромагнитных сил учитывались геометрические и вязкоупругие характеристики молекул. При использовании в уравнении Больцмана столкновительной части, состоящей из восьмикратных интегралов, и теории многочленов Сониная задача определения коэффициентов переноса сводится к отысканию решения систем линейных алгебраических уравнений для каждого коэффициента переноса. В данных системах коэффициентами являются многочлены, которые зависят от значений трехкратных несобственных интегралов с осциллирующими подынтегральными функциями. Эти интегралы описывают микропроцессы в среде. Для вычисления данных интегралов была предложена квадратурная формула, основанная на теории ортогональных многочленов и минимизации ее погрешности. Такой подход позволил определять значения коэффициентов переноса, используемых в макроуравнениях гидродинамики, на основе анализа микропроцессов среды.

#### Список источников

1. *Нигматуллин Р.И.* Динамика многофазных сред. М. : Наука, 1987. 464 с.
2. *Соу С.* Гидродинамика многофазных систем. М. : Мир, 1983. 536 с.
3. *Гиришфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М. : Изд-во иностр. лит., 1961. 929 с.
4. *Ферцигер Дж., Канер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М. : Мир, 1976. 554 с.
5. *Chapman S., Cowling T.G.* The mathematical theory of non-uniform gases. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases. Cambridge : Cambridge University Press, 1952. 423 p.
6. *Яненко Н.Н.* Проблемы вычислительной механики // Николай Николаевич Яненко : очерки, статьи, воспоминания / сост. Н.Н. Бородина. Новосибирск : Наука, Сиб. отд-ние, 1988. С. 72–100.
7. *Анисимова И.В., Игнатьев В.Н.* Вычислительные и компьютерные технологии определения коэффициентов переноса в моделях многокомпонентных смесей. Казань : Казан. гос. техн. ун-т им. А.Н. Туполева, 2019. 256 с.
8. *Анисимова И.В., Игнатьев В.Н., Ю.Ф. Гортышов, Аристова Е.Ю.* О потенциале взаимодействия молекул в многокомпонентных газовых средах // Известия вузов. Авиационная техника. 2018. № 4 С. 69–71. doi: 10.3103/S1068799816030193
9. *Анисимова И.В., Гиниятуллина Р.Р., Игнатьев В.Н.* Об одном методе вычисления узлов и весов квадратур Гаусса-Кристоффеля // Математическое моделирование. 2013. Т. 25, № 3. С. 3–13. doi: org/10.1134/S2070048213050025
10. *Мовчан Л.Ш., Карчевский М.М., Игнатьев В.Н., Анисимова И.В.* Компьютерная система Mathematica и расчетно-графические работы по высшей математке. Казань : Казан. гос. техн. ун-т им. А.Н. Туполева, 2008. 96 с.

#### References

1. Nigmatullin R.I. (1987) *Dinamika mnogofaznykh sred* [Dynamics of multiphase media]. Moscow: Nauka.
2. Sou S. (1983) *Gidrodinamika mnogofaznykh system* [Hydrodynamics of multiphase systems]. Moscow: Mir.
3. Hirschfelder J., Curtiss J, Bird R. (1961) *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkostey* [Molecular theory of gases and liquids]. Moscow: Izdatelstvo inostrannaya literatura.

4. Ferziger J., Kaper G. (1972) *Matematicheskaya teoriya protsessov perenosa v gazakh* [Mathematical theory of transport processes in gases]. Moscow: Mir.
5. Chapman S., Cowling T.G. (1952) *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases. An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction, and Diffusion in Gases*. Cambridge: Cambridge University Press.
6. Yanenko N.N. (1988) *Problemy vychislitel'noy mekhaniki*. In: *Nikolay Nikolaevich Yanenko. Ocherki, stat'i, vospominaniya*. Sost.: N.N. Borodina [Problems in computational mechanics. In: Nikolay Nikolaevich Yanenko. Essays, articles, memoirs. Compiled by: Borodina N.N.]. Novosibirsk: Nauka.
7. Anisimova I.V., Ignat'ev V.N. (2019) *Vychislitel'nye i komp'yuternye tekhnologii opredeleniya koeffitsientov perenosa v modelyakh mnogokomponovannykh smesey* [Computational and computer technologies for determining transfer coefficients in models of multicomponent mixtures]. Kazan: Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev.
8. Anisimova I.V., Ignat'ev V.N., Gortyshov Yu.F., Aristova E.Yu. (2018) The potential of interaction of molecules in multicomponent gaseous media. *Russian Aeronautics*. 59(3). pp. 414–418. doi: 10.3103/S1068799816030193
9. Anisimova I.V., Giniyatullina R.R., Ignat'ev V.N. (2013) On one method for calculating the nodes and weights of the Gauss-Christoffel quadratures. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 5(5). pp. 448–455. doi: 10.1134/S2070048213050025
10. Movchan L.Sh., Karchevskiy M.M., Ignat'ev V.N., Anisimova I.V. (2008) *Komp'yuternaya sistema Mathematica i raschetno-graficheskie raboty po vysshey matematike* ["Mathematica" computer system and computational and graphic efforts on higher mathematics]. Kazan: Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev.

**Сведения об авторах:**

**Анисимова Ирина Викторовна** – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры прикладной математики и информатики Казанского национального исследовательского университета им. А.Н. Туполева, Казань, Россия. E-mail: anisimovaiv1@rambler.ru

**Игнатьев Виктор Николаевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и прикладной механики и математики Казанского национального исследовательского университета им. А.Н. Туполева, Казань, Россия. E-mail: anisimovaiv1@rambler.ru

**Лаптева Елена Юрьевна** – доцент кафедры иностранных языков, русского и русского как иностранного Казанского национального исследовательского технического университета им. Туполева, Казань, Россия. E-mail: lapti.daleko@mail.ru

**Information about the authors:**

**Anisimova Irina V.** (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Department of Applied Mathematics and Informatics, Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev, Kazan, Russian Federation). E-mail: anisimovaiv1@rambler.ru

**Ignat'ev Victor N.** (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Department of Theoretical and Applied Mechanics and Mathematics, Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev, Kazan, Russian Federation). E-mail: anisimovaiv1@rambler.ru

**Lapteva Elena Yu.** (Associate Professor, Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev, Kazan, Russian Federation). E-mail: lapti.daleko@mail.ru

*Статья поступила в редакцию 08.12.2021; принята к публикации 03.02.2023*

*The article was submitted 08.12.2021; accepted for publication 03.02.2023*