



**ĐÁNH GIÁ CÁC MÔ HÌNH CFD CHO CẤU TRÚC SÓNG SỐC
VỚI HỆ SỐ ĐỘ NHỚT THỰC TẾ**

*ASSESSMENT OF CFD MODELS FOR SHOCK WAVE STRUCTURES
WITH REALISTIC VISCOSITY COEFFICIENT*

Lê Tuấn Phương Nam^{1*}, Đặng Lê Quang², Nguyễn Trọng Sơn Hà³

¹ Trường Đại học Công Nghệ Thành phố Hồ Chí Minh

² Phân hiệu Trường Đại học Ngoại Thương tại Thành phố Hồ Chí Minh

³ Trường Đại học Cửu Long

DOI: <https://doi.org/10.65934/mkusj.2026.44.991>

**Email:* lt.p.nam@hutech.edu.vn

Ngày nhận bài: 24/04/2026

Ngày phản biện: 18/05/2026

Ngày duyệt bài: 28/08/2026

TÓM TẮT

Cấu trúc sóng sốc một chiều là trường hợp điển hình cho việc kiểm chứng các mô hình tính toán động lực học lưu chất (CFD) dựa trên lý thuyết cơ học môi trường liên tục trong việc mô tả chính xác các hiện tượng vật lý xảy ra bên trong cấu trúc sóng sốc. Các mô hình CFD được đánh giá trong công việc nghiên cứu hiện tại là mô hình Navier-Stokes-Fourier (NSF) tiêu chuẩn, NSF mở rộng thông qua khuếch tán khối được xem xét và mô hình ứng suất và thông lượng nhiệt phi tuyến (NCCR) cho khí argon với cùng một hệ số độ nhớt thực tế $\omega = 0,72$ trong tính toán độ nhớt theo định luật Power. Hệ số này được chọn vì nó tiệm cận với dữ liệu thực nghiệm trong tính toán độ nhớt của khí argon. Hai mô hình NSF mở rộng dựa trên khuếch tán khối là NSF-Brenner và NSF-Reddy et al. đều làm tăng độ dày sóng sốc thông qua việc tăng cường vận chuyển khuếch tán khối, mang lại sự cải thiện về các biên dạng phân bố mật độ, nhiệt độ và vận tốc trong cấu trúc sóng sốc. Trong đó, mô hình NSF-Reddy et al. cho sự tiệm cận tốt nhất đối với các kết quả tính toán đạt được so với dữ liệu thực nghiệm và kết quả tính toán từ phương pháp mô phỏng thống kê Monte Carlo (DSMC).

Từ khóa: cấu trúc sóng sốc, khuếch tán khối, mật độ, nhiệt độ, vận tốc, độ dày sóng sốc.

ABSTRACT

The one-dimensional shock wave structure is a fundamental case study to evaluate whether computational fluid dynamics (CFD) models based on continuum mechanics assumptions accurately describe the physical phenomena within the shock structure. CFD models are evaluated in the current work, including the classical Navier-Stokes-Fourier (NSF) model, the extended NSF model with molecular diffusion, and the Nonlinear Coupled Constitutive Relation (NCCR) model for argon gas, all using the same actual viscosity exponent coefficient $\omega = 0.72$. This coefficient was chosen because it approximates experimental viscosity data for argon gas. Two extended NSF models based on the molecular diffusion, NSF-Brenner and NSF-Reddy et al., both increase the shock wave thickness by enhancing the diffusion transport, resulting in improvements in the density, temperature, and velocity distribution profiles within the shock structure. Among CFD models, the extended NSF-Reddy et al. model approximates the calculated results well compared with experimental data and results from the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method.

Keywords: shock structure, molecular diffusion, density, temperature, velocity, inverse shock thickness.

MỞ ĐẦU

Việc dự đoán chính xác cấu trúc sóng sốc một chiều trong dòng khí loãng trên âm và bất cân bằng vẫn là một thách thức cơ bản trong tính toán số

động lực học lưu chất (CFD). Mặc dù các mô hình CFD như mô hình Navier-Stokes-Fourier (NSF) tiêu chuẩn đã mô tả đầy đủ cho các chế độ dòng khí gần cân bằng, nhưng chúng không thể nắm bắt

được cấu trúc bên trong sóng sốc ở số Mach cao, Ma , cụ thể là $Ma > 2,0$ (Greenshields & Reese, 2007). Khi đó, mô hình NSF chuẩn thường không dự đoán chính xác độ dày và các biên dạng cấu trúc sóng sốc thông qua các đại lượng vĩ mô như mật độ hạt khí, nhiệt độ và vận tốc khi so sánh chúng với các dữ liệu thực nghiệm và kết quả mô phỏng theo thống kê Monte Carlo (DSMC). Để giải quyết những thiếu sót này, một số mô hình CFD mở rộng dựa trên mô hình NSF chuẩn đã được đề xuất (Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005), (Reddy & Dadzie, 2021), (Le *et al.*, 2014), (Trần & Lê, 2020). Trong số đó, mô hình Brenner đưa ra một thuật ngữ khuếch tán khối thông qua một thông lượng khuếch tán khối mà tỷ lệ với *gradient* mật độ hạt khí, làm thay đổi hiệu quả mối quan hệ ứng suất và thông lượng nhiệt trong tính toán. Tương tự, mô hình Reddy *et al.* mở rộng (Reddy & Dadzie, 2021), bằng cách kết hợp điều chỉnh các hệ số qua công thức khuếch tán khối, nhằm mục đích cải thiện dự đoán các hiện tượng vận chuyển bất cân bằng trong dòng khí. Ngược lại, mô hình ứng suất và thông lượng nhiệt phi tuyến (NCCR – Nonlinear Coupled Constitutive Relations) (Le *et al.*, 2014) được phát triển từ phương trình thủy động lực học tổng quát của Eu vốn có khả năng giải thích sự sai lệch mạnh mẽ so với trạng thái cân bằng cục bộ. Trong đó, mô hình NCCR cung cấp một mô tả nhất quán về mặt nhiệt động lực học, có khả năng nắm bắt hành vi vận chuyển phi tuyến trong các *gradient* của vận tốc và nhiệt độ.

Mặc dù có những cải thiện so với mô hình NSF tiêu chuẩn trong dự đoán cấu trúc sóng sốc (Greenshields & Reese, 2007), (Reddy & Dadzie, 2021), (Le *et al.*, 2014), việc so sánh có hệ thống và nhất quán các mô hình này trong điều kiện giống nhau vẫn chưa được đánh giá. Cụ thể là sự tính toán độ nhớt, μ , được đặc trưng bởi định luật “Power” có dạng $\mu \propto T^w$, trong đó hệ số độ nhớt w đóng vai trò quan trọng trong việc xác định cấu trúc sóng sốc. Nó ảnh hưởng trực tiếp đến sự vận chuyển động lượng và năng lượng qua cấu trúc sóng sốc. Đối với khí đơn nguyên tử như argon, mô hình lý thuyết hạt hình cầu cứng ($w = 0,5$) hoặc mô hình hạt Maxwell ($w = 1,0$) thường được sử dụng trong tính toán. Trong bài báo này, chúng tôi trình bày một đánh giá toàn diện về cấu trúc sóng sốc bằng cách sử dụng các mô hình NSF-Brenner

(Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005), Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021), và NCCR (Le *et al.*, 2014) với một hệ số độ nhớt thực tế đồng nhất. Khí đơn nguyên tử không có chế độ dao động hoặc xoay và không thể phân ly, do đó, ứng xử nhiệt động lực học của nó đơn giản hơn nhiều so với khí đa nguyên tử như ni-tơ. Chính vì lý do này mà khí đơn nguyên tử thường được ưu tiên sử dụng cho các thực nghiệm và mô phỏng tính toán cấu trúc sóng sốc.

Một trong những điểm quan tâm của tính toán mô phỏng về vấn đề cấu trúc sóng sốc là mối quan hệ giữa độ nhớt μ và nhiệt độ T , trong đó độ nhớt được tính như hàm của nhiệt độ, ảnh hưởng đáng kể đến biên dạng của sóng sốc. Thậm chí có thể lập luận rằng mô hình NSF tiêu chuẩn có thể tính toán mô phỏng đối với vấn đề này chỉ bằng cách điều chỉnh mối quan hệ $\mu(T)$ cho đến khi tái tạo được biên dạng cấu trúc sóng sốc (Greenshields & Reese, 2007). Vì vậy, các mô hình toán được dùng với các giá trị w khác nhau trong các công việc trước để tiệm cận biên dạng sóng sốc thực nghiệm như mô hình NSF-Brenner dùng hệ số $w = 0,72$ (Greenshields & Reese, 2007), mô hình NSF-Reddy *et al.* dùng $w = 0,75$ (Reddy & Dadzie, 2021), và mô hình NCCR dùng $w = 1,0$ (mô hình lý thuyết hạt Maxwell) cho kết quả tính toán tốt trong (Le *et al.*, 2014). Do đó, vấn đề cấu trúc sóng sốc như một sự kiểm chứng tốt cho các mô hình CFD phụ thuộc vào việc thiết lập mối quan hệ $\mu(T)$ tốt từ các dữ liệu thực nghiệm đáng tin cậy và đã được thực hiện trong nghiên cứu cho khí argon (Greenshields & Reese, 2007). Trong đó, các giá trị khác nhau của hệ số w được sử dụng để tìm giá trị phù hợp và tiệm cận dữ liệu thực nghiệm. Kết quả là giá trị $w = 0,72$ là giá trị tốt nhất để tiệm cận dữ liệu thực nghiệm (Greenshields & Reese, 2007). Vì vậy, giá trị $w = 0,72$ được dùng để kiểm chứng các mô hình CFD trong công việc hiện tại. Việc đánh giá tập trung vào các đặc điểm cấu trúc sóng sốc bao gồm biên dạng phân bố mật độ, nhiệt độ, vận tốc và độ dày của nó. Kết quả được so sánh với dữ liệu thực nghiệm (Alsmeyer, 1976) và DSMC. Thông qua sự so sánh này, những ưu điểm và hạn chế của các mô hình hiệu chỉnh khuếch tán khối như NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005) và NSF-Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021) so với mô hình

phi tuyến NCCR (Le *et al.*, 2014), được đánh giá đầy đủ. Nghiên cứu này cũng nhằm mục đích làm rõ liệu sự cải thiện trong dự đoán cấu trúc sóng sóc chủ yếu xuất phát từ các cơ chế khuếch tán khối được xem xét hay từ các mô tả vận chuyển phi tuyến tính về ứng suất và thông lượng nhiệt ở cùng một giá trị hệ số $\omega = 0,72$. Các trường hợp cấu trúc sóng sóc của dòng khí argon được xem xét ở các số Mach $Ma = 3,38$ và 10 .

1. Các mô hình CFD trong tính toán dòng khí loãng

Trong phần này, các mô hình CFD trong tính toán cho dòng khí loãng tốc độ cao được trình bày như: mô hình NSF tiêu chuẩn, cùng với các mô hình NSF mở rộng có xem xét đến hiện tượng khuếch tán khối (Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005), (Reddy & Dadzie, 2021) và mô hình phi tuyến NCCR (Le *et al.*, 2014).

Mô hình NSF tiêu chuẩn

Mô hình NSF tiêu chuẩn thường được sử dụng để mô tả dòng khí trong môi trường liên tục, và mô hình này, bỏ qua lực khối, được biểu diễn dưới dạng vector như sau:

Phương trình liên tục,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{u}] = 0, \quad (1)$$

trong đó ρ là mật độ khí, $\mathbf{u}$ là vận tốc dòng khí, t là thời gian, và ký hiệu “ $\cdot$ ” biểu thị tích vô hướng.

Phương trình động lượng,

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{u} \mathbf{u}] + \nabla \cdot \mathbf{p} \mathbf{I} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi} = 0, \quad (2)$$

trong đó p là áp suất, $\mathbf{I}$ là tenxơ đơn vị, và $\mathbf{\Pi}$ là tenxơ ứng suất.

Phương trình năng lượng,

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{u} E + \rho \mathbf{u} p] + \nabla \cdot (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (3)$$

trong đó $E = e + 0,5|\mathbf{u}|^2$ là năng lượng tổng, với nội năng $e = c_v T$, đại lượng c_v là nhiệt dung riêng ở thể tích không đổi, T là nhiệt độ của khí, $\mathbf{q}$ là thông lượng nhiệt. Các đại lượng ten-xơ ứng suất, $\mathbf{\Pi}$, và thông lượng nhiệt, $\mathbf{q}$, cho các mô hình NSF chuẩn và NSF mở rộng sẽ được trình bày chi tiết trong Bảng 1.

Mô hình NSF mở rộng xem xét hiện tượng khuếch tán khối

Phương trình NSF tiêu chuẩn giả định duy nhất một trường vận tốc $\mathbf{u}$, để đồng thời biểu thị cho sự vận chuyển của dòng khí. Tuy nhiên, khi dòng khí trở nên bất cân bằng và loãng, giả định này trở nên bị hạn chế, vì nó bỏ qua khả năng tách rời giữa sự vận chuyển lưu lượng do đối lưu và sự vận chuyển do khuếch tán được thúc đẩy bởi *gradient* mật độ hạt khí. Điều này rất quan trọng trong mô hình NSF mở rộng của dòng khí loãng vì sự thiếu sót này trở nên đáng kể hơn khi *gradient* của mật độ hạt khí $\nabla \rho$ trở nên lớn hơn. Để giải quyết hạn chế này, các mô hình NSF mở rộng với khái niệm hai vận tốc, ban đầu nó được đề xuất bởi Brenner (Brenner, 2005) và được phát triển thêm bởi Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021). Nó giới thiệu một trường vận tốc bổ sung liên quan đến sự khuếch tán lưu lượng, thường được gọi là vận tốc khuếch tán khối, $\mathbf{J}$. Khi đó, vận tốc lưu lượng dòng, $\mathbf{u}$, sẽ khác với vận tốc khối $\mathbf{u}_v$, thông qua một dòng khuếch tán khối tỷ lệ thuận với *gradient* mật độ, thường được biểu thị là $\mathbf{J} \propto \nabla \rho$. Vận tốc khuếch tán giải thích cho sự vận chuyển lưu lượng so với chuyển động tổng thể và dẫn đến các hiệu chỉnh chỉ cho các đại lượng ứng suất, $\mathbf{\Pi}$ và thông lượng dòng nhiệt, $\mathbf{q}$. Vận tốc $\mathbf{J}$ được định nghĩa ở dạng tổng quát như sau (Reddy & Dadzie, 2021),

$$\mathbf{J} = -k m_0 \frac{\mu}{\rho} \nabla \ln \rho. \quad (4)$$

trong đó $k m_0$ là hằng số dương (Reddy & Dadzie, 2021). Do đó, mô hình NSF mở rộng với hai vận tốc cung cấp một mô tả để thu hẹp khoảng cách giữa các mô hình NSF tiêu chuẩn và lý thuyết động lực học khí như phương trình Boltzmann được giải thông qua phương pháp số DSMC cho dòng khí loãng. Khi đó, vận tốc khối sẽ được biểu diễn như sau $\mathbf{u}_v = \mathbf{u} - \mathbf{J}$ và nó $\mathbf{u}_v$ chỉ được dùng trong các tính toán ứng suất, $\mathbf{\Pi}$, và thông lượng nhiệt, $\mathbf{q}$, để mở rộng mô hình NSF tiêu chuẩn. Brenner chỉ ra rằng sự điều chỉnh này có thể được tích hợp vào bằng cách sử dụng $\mathbf{u}_v$ trong phương trình tính toán ten-xơ ứng suất $\mathbf{\Pi}$, của định luật độ nhớt Newton (Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005) và sự hiện diện của dòng khuếch tán khối $\mathbf{J}$ cho phép năng lượng được vận chuyển qua bề mặt bằng cách truyền công khuếch tán với một lượng là $+p\mathbf{J}$ (Greenshields & Reese, 2007),

(Brenner, 2005) bên cạnh thông lượng nhiệt được tính bởi định luật Fourier, $-k\nabla T$. Trong đó p là áp suất và k là hệ số dẫn nhiệt. Trong mô hình mở rộng NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005), giá trị $km_0 = 1,0$ và trong mô hình NSF-Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021), giá trị $km_0 = 0,5$ để đảm bảo sự ổn định số trong hiệu chỉnh thông lượng nhiệt (Reddy & Dadzie, 2021). Hơn nữa, mô hình mở rộng Reddy *et al.*, thông lượng nhiệt $\mathbf{q}$ được hiệu chỉnh bởi thông số $\gamma/[(\gamma-1)Pr]$

thông qua việc xem xét hệ số khuếch tán nhiệt, là $\gamma/[(\gamma-1)Pr]$, trong đó γ là tỷ số nhiệt dung riêng và Pr là hằng số Prandtl, với $\gamma = 1,67$ và $Pr = 0,67$ cho khí argon. Chi tiết các đại lượng ứng suất, Π và thông lượng nhiệt, $\mathbf{q}$ cho các mô hình NSF tiêu chuẩn, mở rộng NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), (Brenner, 2005) và NSF-Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021), khi xem xét hiện tượng khuếch tán khối được trình bày trong Bảng 1.

Bảng 1: Ứng suất, Π và thông lượng nhiệt, $\mathbf{q}$ trong các mô hình CFD.

Mô hình	Ứng suất Π	Thông lượng nhiệt $\mathbf{q}$
NSF tiêu chuẩn	$\Pi = -\left[\mu\nabla\mathbf{u} + \mu[\nabla\mathbf{u}]^T - \frac{2}{3}\mathbf{I}tr[\nabla\mathbf{u}]\right]$	$\mathbf{q} = -k\nabla T$
NSF-Brenner	$\Pi = -\left[\mu\nabla\mathbf{u}_v + \mu[\nabla\mathbf{u}_v]^T - \frac{2}{3}\mathbf{I}tr[\nabla\mathbf{u}_v]\right]$	$\mathbf{q} = -k\nabla T + p\mathbf{J}$
NSF-Reddy <i>et al.</i>	$\Pi = -\left[\mu\nabla\mathbf{u}_v + \mu[\nabla\mathbf{u}_v]^T - \frac{2}{3}\mathbf{I}tr[\nabla\mathbf{u}_v]\right]$	$\mathbf{q} = -k\nabla T + \frac{\gamma}{(\gamma-1)Pr}p\mathbf{J}$

trong đó, tr là ten-xơ *trace* và “ T ” biểu thị phép toán hoán vị.

Phương trình NSF mở rộng với các ứng suất và thông lượng nhiệt phi tuyến (NCCR)

Phương trình NSF tiêu chuẩn dựa trên các mối quan hệ tuyến tính của ứng suất và thông lượng nhiệt lần lượt với các *gradient* vận tốc và nhiệt độ ở giả định điều kiện gần cân bằng, hạn chế độ chính xác của chúng trong các chế độ có hiệu ứng bất cân bằng mạnh như dòng khí loãng và tốc độ trên âm. Để mở rộng khả năng của mô hình NSF này, các mô hình Π và $\mathbf{q}$ phi tuyến được đề xuất từ các mối quan hệ đại số phi tuyến bắt nguồn từ nhiệt động lực học bất cân bằng, thay vì các định luật Fourier trong thông lượng nhiệt dựa trên các *gradient* tuyến tính của nhiệt độ. Ban đầu, mô hình phi tuyến được phát triển dựa trên hệ phương trình thủy động lực học tổng quát của (Eu, 1992). Mô hình NCCR tính đến các hiệu ứng vận chuyển bậc cao hơn (bậc hai) (Le *et al.*, 2014) và phi tuyến giữa các dòng nhiệt động lực học và lực, cho phép biểu diễn tốt hơn trong khí loãng và lớp Knudsen gần bề mặt. Kết quả là, NCCR cung cấp một sự mở rộng có hệ thống của NSF trong khi vẫn giữ được mô tả môi trường liên tục. Khi đó các ứng

suất và thông lượng nhiệt phi tuyến NCCR được tích hợp vào phương trình NSF chuẩn như sau: ở lần lặp thứ n trong quá trình tính toán, các giá trị ứng suất và thông lượng nhiệt từ phương trình NSF tiêu chuẩn trong Bảng 1 sẽ lần lượt là Π_0 và $\mathbf{q}_0$ và chúng sẽ được thay thế bởi các ứng suất và thông lượng nhiệt phi tuyến như thể hiện lần lượt trong các phương trình (5) và (6) cho khí đơn nguyên tử argon để tiếp tục giải mô hình NSF chuẩn. Quá trình tính này được tiếp tục thực hiện ở các lần lặp sau trong suốt quá trình giải mô hình NSF chuẩn cho tới khi kết quả tính toán hội tụ (Mankodi, *et al.* 2024),

$$\bar{\Pi}^n = \alpha\bar{\Pi}^{n-1} + (1-\alpha)\frac{\bar{\Pi}_0 + [\bar{\Pi}^{n-1} \cdot \nabla\bar{\mathbf{u}}]^{(2)}}{q\left(c_g\sqrt{\bar{\Pi}^{n-1} : \bar{\Pi}^{n-1} + \bar{\mathbf{q}}^{n-1} \cdot \bar{\mathbf{q}}^{n-1}}\right)}, \quad (5)$$

$$\bar{\mathbf{q}}^n = \alpha\bar{\mathbf{q}}^{n-1} + (1-\alpha)\frac{\bar{\mathbf{q}}_0 + \bar{\Pi}^{n-1} \cdot \bar{\mathbf{q}}_0}{q\left(c_g\sqrt{\bar{\Pi}^{n-1} : \bar{\Pi}^{n-1} + \bar{\mathbf{q}}^{n-1} \cdot \bar{\mathbf{q}}^{n-1}}\right)}. \quad (6)$$

với phép toán $[\dots]^{(2)}$ trong phương trình (5) định nghĩa như sau:

$$[\mathbf{C}]^{(2)} = \frac{1}{2}[\mathbf{C} + \mathbf{C}^T] - \frac{1}{3}\mathbf{I}tr\mathbf{C}$$

trong tính toán mô hình NCCR các đại lượng được tính vô thứ nguyên, $(\bar{\Pi}, \bar{\mathbf{q}})$, được xử lý như sau:

$$\bar{\Pi} = \frac{\Pi}{p}; \quad \bar{q} = \frac{q}{p\sqrt{c_p T / 2Pr}}, \quad (7)$$

trong đó α là hệ số thư giãn “relaxation”, và giá trị $\alpha = 0,01$ được chọn cho mô phỏng cấu trúc sóng sốc trong (Mankodi, *et al.* 2024), và c_p là nhiệt dung riêng ở áp suất không đổi. Trong biểu thức này, hệ số c_g lần đầu tiên được xác định (Mankodi, *et al.* 2024), với các giá trị tham chiếu tương ứng trong công việc hiện tại là $c_g \approx 1,07$. Khi đó, hàm phi tuyến bậc hai $q(\kappa)$ được xác định thông qua hàm “sinh” như trong phương trình (9) (Le *et al.*, 2014), (Eu, 1992), (Mankodi, *et al.* 2024),

$$q(\kappa) = \frac{\sinh(\kappa)}{\kappa}, \quad (8)$$

với hệ số κ được tính từ dạng bậc hai của nó dùng hàm tiêu tán Rayleigh-Onsager như sau (Mankodi, *et al.* 2024),

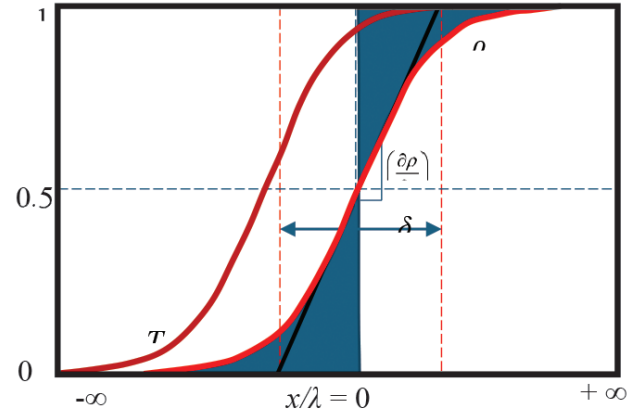
$$\kappa = \frac{\sqrt{4mk_B T}}{\sqrt{2pd}} \sqrt{\frac{\Pi : \Pi}{2\mu} + \frac{q \cdot q}{kT}}, \quad (9)$$

2. Thiết lập mô hình số cho mô phỏng cấu trúc sóng sốc

Để thuận tiện trong mô phỏng cấu trúc sóng sốc một chiều, tập dữ liệu dạng không thứ nguyên giúp giảm thiểu nỗ lực xử lý trước và sau trong tính toán. Các trạng thái trước và sau sóng sốc được ký hiệu lần lượt bằng các chỉ số dưới 1 và 2 tương ứng. Ở đây, để thuận tiện ta đặt nhiệt độ dòng tự do trước sóng sốc là $T_1 = 1,0$ với μ_1 được tính theo định luật “Power” trong phương trình (10) như sau,

$$\mu = AT^\omega. \quad (10)$$

với hệ số tỷ lệ A , khi đó không phụ thuộc vào hệ số ω . Để đơn giản, chọn $A = 1,0$ và khi đó $\mu_1 = 1,0$ trong (Greenshields & Reese, 2007). Hơn nữa, để thuận tiện cho việc thiết lập, vận tốc âm thanh dòng tự do được chọn $c_1 = 1$ (Greenshields & Reese, 2007), để vận tốc dòng tự do u_1 liên quan trực tiếp đến số Mach dòng tự do Ma_1 . Khi đó tỷ số nhiệt dung riêng, $\gamma = 5/3 \approx 1.67$ đối với khí argon, vì vậy hằng số riêng khí $R = c_1^2 / (\gamma T_1) = 0,6$ (Greenshields & Reese, 2007) trong bộ dữ liệu vô thứ nguyên được sử dụng.



Hình 1. Biên dạng ρ và T trong cấu trúc sóng sốc và độ dày sóng, δ

Bài toán cấu trúc sóng sốc được xem xét ở đây là một vùng dòng khí (dừng) rất mỏng (tính theo tỷ lệ quãng đường tự do trung bình trước khi các hạt va chạm với nhau, λ) nằm giữa vùng trên âm phía trước và vùng cận âm phía sau sóng sốc. Biên dạng cấu trúc sóng sốc điển hình cho mật độ ρ , nhiệt độ T và độ dày sóng δ được thể hiện trên Hình 1. Trong đó, nghịch đảo của độ dày sóng sốc δ , được định nghĩa là,

$$\frac{1}{\delta} = \frac{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{\max}}{\rho_2 - \rho_1}, \quad (11)$$

Các trạng thái trước và sau sóng sốc được thiết lập ban đầu cho mô phỏng được xác định bởi điều kiện Rankine–Hugoniot qua phương trình (12) và được trình bày trong Hình 2 (Greenshields & Reese, 2007),

$$\frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma + 1)Ma_1^2}{(\gamma - 1)Ma_1^2 + 2} = \frac{\rho_2}{\rho_1};$$

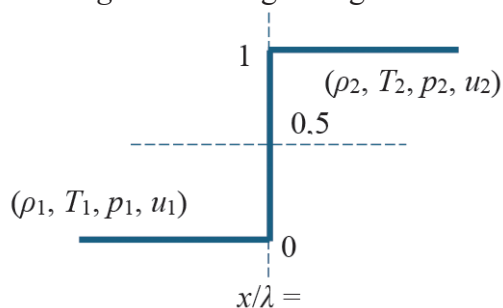
$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma + 1}(Ma_1^2 - 1); \quad \frac{T_2}{T_1} = \frac{p_2}{p_1} \frac{\rho_1}{\rho_2}. \quad (12)$$

Cuối cùng áp suất p tính theo định luật khí lý tưởng cho hệ vô thứ nguyên như sau,

$$p = (\gamma - 1) \left(\rho E - \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 \right). \quad (13)$$

Bộ giải cấu trúc sóng sốc là bộ giải “rhoCentralFoam” trong phần mềm mã nguồn mở OpenFOAM (OpenFOAM, 2026) mà dùng phương pháp số thể tích hữu hạn để rời rạc và giải phương trình NSF tiêu chuẩn thông qua các giản đồ số Kurganov–Tadmor để mô phỏng dòng

khí nén có tính nhớt. Bộ giải *rhoCentralFoam* này được tích hợp các đại lượng Π và $\mathbf{q}$ trong Bảng 1 cùng với mô hình NCCR qua các phương trình (5), (6), (7), (8) và (9) để thực hiện các mô phỏng. Một miền tính toán có kích thước $30\lambda_1$ theo chiều x được sử dụng trong tất cả các mô phỏng, đủ rộng để chứa toàn bộ cấu trúc sóng sốc. Kích thước phần tử lưới được chọn là $0,017\lambda_1$ trong (Greenshields & Reese, 2007) để đảm bảo kết quả hội tụ và chính xác. Các điều kiện biên trước và sau sóng sốc được xác định rõ ràng thông qua các mối quan hệ Rankine–Hugoniot trong phương trình (12), với tất cả các đại lượng (ρ_1, p_1, T_1, u_1) được giữ cố định trong suốt quá trình tính toán cho điều kiện biên trước sóng sốc và đại lượng sau sóng sốc (ρ_2, p_2, T_2, u_2) được thiết lập với điều kiện biên là *gradient* bằng không.



Hình 2. Thiết lập mô hình số mô phỏng cấu trúc sóng sốc

3. Kết quả mô phỏng cấu trúc sóng sốc

Các mô phỏng một chiều về cấu trúc sóng sốc khí argon được thực hiện với các điều kiện dòng tự do có các số Mach là $Ma = 3,38$ và 10 . Các kết quả mô phỏng được chuẩn hóa bằng các giá trị trước và sau sóng sốc sao cho chúng nằm trong phạm vi từ 0 đến 1 và được so sánh với dữ liệu thực nghiệm (Alsmeyer, 1976) và dữ liệu DSMC thu được từ việc thực hiện mô phỏng DSMC ở giá trị $\omega = 0,72$ với bộ giải DSMC cho cấu trúc sóng sốc trong (Bird, 2013). Phương pháp DSMC cung cấp các dự đoán chính xác hơn so với mô hình NSF chuẩn trong tính toán dòng khí loãng vì nó trực tiếp giải phương trình Boltzmann. Trong đó, nó giải quyết các va chạm hạt khí và ảnh hưởng bất cân bằng mà không cần dựa vào các giả định môi trường liên tục. Trong cấu trúc sóng sốc, nơi tồn tại các *gradient* mạnh, dòng khí cách xa trạng thái cân bằng nhiệt động lực học cục bộ. Khi đó, mô hình NSF với các định luật Fourier tuyến tính

cho thông lượng nhiệt và ứng suất cho lưu chất Newton bị phá vỡ. Vì lý do này, dữ liệu DSMC được sử dụng để đánh giá định lượng độ chính xác của các mô hình CFD trong mô phỏng cấu trúc sóng sốc.

Kết quả mô phỏng cho mật độ ρ , nhiệt độ T , và vận tốc u sẽ được chuẩn hóa lần lượt là ρ^* , T^* , và u^* cụ thể như sau,

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}; \quad T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}; \quad u^* = \frac{u - u_2}{u_1 - u_2}. \quad (14)$$

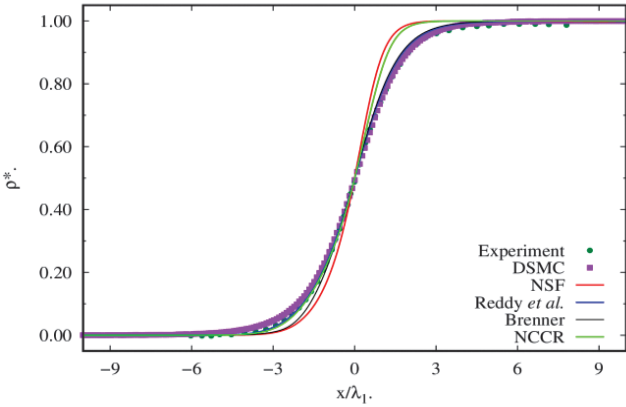
Các kết quả (ρ^*, T^*, u^*) được vẽ trên các biểu đồ với trục hoành chuẩn hóa với quãng đường trung bình tự do trước sóng sốc, x/λ_1 . Vị trí trung tâm $x/\lambda_1 = 0$ được xác định là vị trí mà mật độ cục bộ ρ^* bằng trung bình cộng của mật độ trước và sau sóng sốc (i.e., $\rho^* = 0,5$). Trong các đồ thị, quãng đường tự do trung bình được tính là $\lambda_1 = \mu_1 \sqrt{\pi / (2RT_1)} / \rho_1$ (Greenshields & Reese, 2007), (Le *et al.*, 2014).

Hình 3a và 3b trình bày lần lượt sự phân bố mật độ ρ^* trong cấu trúc sóng sốc ở các số $Ma = 3,38$ và 10 . Tất cả các biên dạng mật độ xung quanh tâm sóng $x/\lambda_1 = 0$ đều không đối xứng. Ở số $Ma = 3,38$ trong Hình 3a, biên dạng mật độ thu được từ hai mô hình NSF-Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021) và NCCR (Le *et al.*, 2014) bắt đầu tăng sớm hơn mật độ được dự đoán bởi các mô hình NSF chuẩn và NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), khi so sánh với dữ liệu thực nghiệm và DSMC cho vùng trước sóng sốc ($x/\lambda_1 < 0$). Tuy nhiên, hai mô hình NSF-Brenner và NSF-Reddy *et al.* cho thấy sự phù hợp tốt với dữ liệu thực nghiệm và DSMC ở vùng trung tâm và sau sóng sốc. Mô hình NSF chuẩn cho thấy lớp sóng sốc hẹp hơn so với những gì các mô hình NSF-Brenner, NSF-Reddy *et al.* và NCCR dự đoán. Tổng quát, biên dạng mật độ ρ^* của mô hình NSF-Reddy *et al.* phù hợp tốt với dữ liệu thực nghiệm và DSMC so với ba mô hình tính toán CFD còn lại.

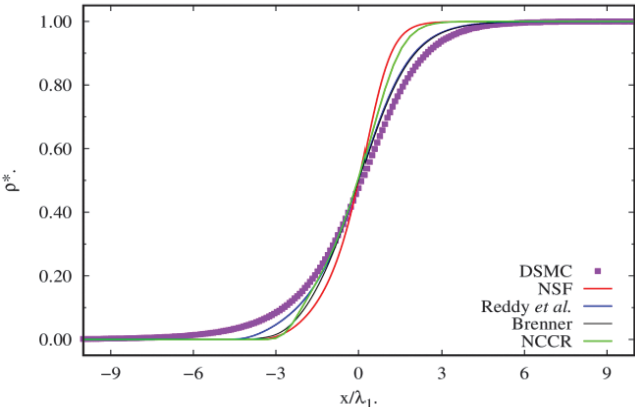
Ở số Mach cao hơn $Ma = 10$ trong Hình 3b, sự khác biệt trở nên rõ ràng hơn do hiệu ứng bất cân bằng trong dòng khí mạnh hơn. Mô hình NSF chuẩn dự đoán độ dày sóng sốc thấp hơn đáng kể so với các mô hình CFD khác, tạo ra sự chuyển tiếp quá dốc và không thể tái tạo ảnh hưởng lan rộng ở phía trước sóng sốc khi so sánh với dữ liệu

DSMC. Mô hình NSF-Brenner cải thiện dự đoán độ dày sóng qua ảnh hưởng của hiệu ứng khuếch tán khối và tiệm cận với dữ liệu DSMC ở phía sau sóng sốc. Mô hình NCCR có sự cải thiện hơn so với mô hình NSF chuẩn nhưng không đáng kể khi so với hai mô hình NSF-Reddy *et al.* và

NSF-Brenner. Cuối cùng, mô hình Reddy *et al.* cho thấy sự phù hợp tốt nhất với DSMC trên toàn bộ sóng sốc, đặc biệt là ở vùng trước sóng, nơi các hiệu ứng bất cân bằng chiếm ưu thế, mang lại sự thể hiện chính xác hơn cả về độ dày sóng sốc và tính bất đối xứng.



a) $Ma = 3,38$.



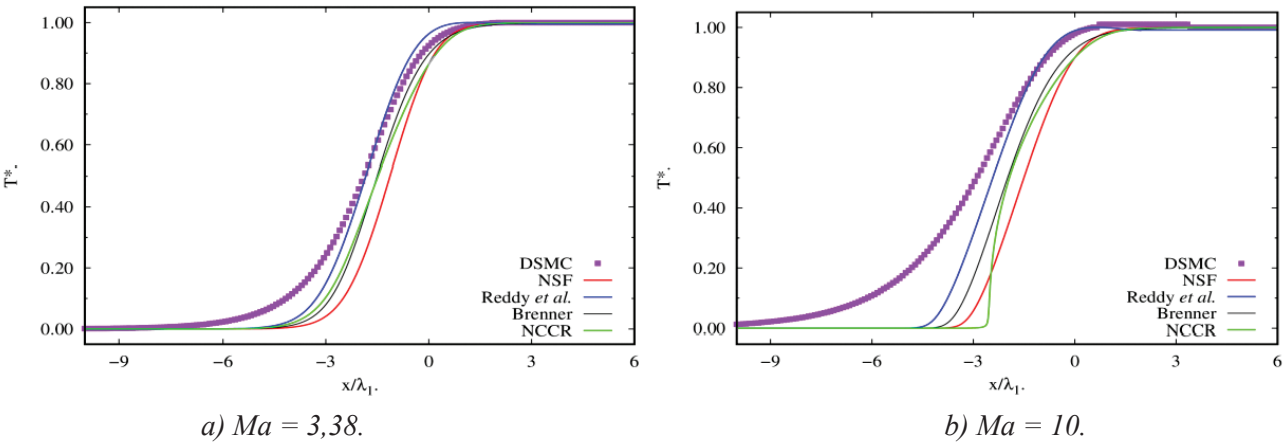
b) $Ma = 10$.

Hình 3. Biên dạng mật độ trong cấu trúc sóng sốc

Hình 4a và 4b thể hiện sự phân bố nhiệt độ T^* trong cấu trúc sóng sốc lần lượt ở các số $Ma = 3,38$ và 10. Kết quả mô phỏng cho thấy nhiệt độ phía trước sóng tăng nhanh và tăng sớm hơn mật độ dòng, ρ^* . Tất cả các mô hình CFD và DSMC đều tái tạo được sự gia tăng nhiệt độ đơn điệu nói chung trên toàn bộ vùng cấu trúc sóng sốc, nhưng sự khác biệt rõ ràng xuất hiện ở vùng trước sóng và độ dốc xuyên qua cấu trúc sóng. Ở số $Ma = 3,38$ trong Hình 4a, mô hình NSF chuẩn dự đoán thấp hơn đáng kể sự gia tăng nhiệt độ ở vùng trước sóng so với dữ liệu DSMC. Hai mô hình NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), và NCCR (Le *et al.*, 2014) cải thiện dự đoán này bằng cách thêm sự khuếch tán và tính phi tuyến trong ứng suất và thông lượng nhiệt, dẫn đến sự phù hợp tốt hơn ở vùng trung tâm, mặc dù chúng vẫn hơi chậm trong việc nắm bắt sự gia tăng sớm ở vùng trước sóng sốc. Mô hình NSF-Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021) cho thấy sự cải thiện đáng kể so với các mô hình CFD còn lại khi so với dữ liệu DSMC, đặc biệt là ở vùng trước sóng sốc, nơi nó nắm bắt tốt hơn sự gia tăng nhiệt độ được quan sát thấy trong dữ liệu DSMC. Điều này có thể được giải thích do hệ số $\gamma/[(\gamma-1)Pr] \approx 3,75$ trước hệ số thông lượng nhiệt trong mô hình

NSF-Reddy *et al.*, trong khi hệ số này ở mô hình NSF-Brenner là 1,0.

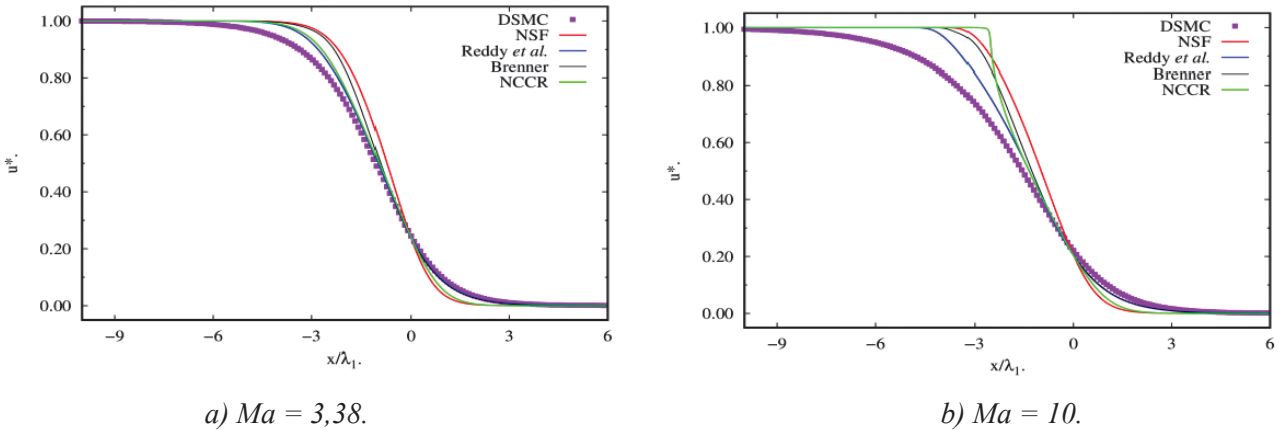
Ở số Mach $Ma = 10$ trong Hình 4b, sự khác biệt trở nên rõ ràng hơn nhiều do sự bất cân bằng nhiệt động lực học mạnh hơn. Mô hình NSF chuẩn dự đoán kém hiệu quả, với sự gia tăng nhiệt độ rất dốc và không thể dự đoán ảnh hưởng mở rộng ở vùng trước sóng được thấy trong dữ liệu DSMC. Mô hình NSF-Brenner có sự cải thiện về dự đoán biên dạng nhiệt độ và độ dày tổng thể so với mô hình NSF chuẩn, nhưng vẫn dự đoán thấp hơn về nhiệt độ ở vùng trước sóng sốc. Cả mô hình NCCR cũng cho thấy những sai lệch trong dự đoán nhiệt độ ở vùng trước sóng và có sự phù hợp với mô hình NSF-Brenner ở vùng trung tâm do sự ảnh hưởng phi tuyến tính trong cấu trúc sóng sốc. Mô hình Reddy *et al.* cho kết quả phù hợp với dữ liệu DSMC hơn ba mô hình NSF chuẩn, NSF-Brenner và NCCR, đặc biệt là trong việc dịch chuyển sự gia tăng nhiệt độ về vùng phía trước sóng sốc, nơi mô hình này tái tạo chính xác hơn sự gia tăng nhiệt độ dần dần và tính bất đối xứng của biên dạng nhiệt độ. Tóm lại, các biên dạng nhiệt độ làm nổi bật những hạn chế của các mô hình CFD trong việc nắm bắt các hiệu ứng gia nhiệt ở vùng trước sóng sốc.



Hình 4. Biên dạng nhiệt độ trong cấu trúc sóng sốc

Hình 5a và 5b thể hiện sự phân bố vận tốc u^* trong cấu trúc sóng sốc lần lượt ở các số $Ma = 3,38$ và 10 . Các biên dạng vận tốc trong cấu trúc sóng sốc thể hiện sự giảm dần đều từ trước đến sau sóng sốc như mong đợi, với sự sai lệch càng tăng lên giữa các mô hình khi số Mach tăng lên. Ở số Mach, $Ma = 3,38$ trong Hình 5a, tất cả các mô hình CFD và DSMC đều nắm bắt được xu hướng chung khá tốt, nhưng sự khác biệt xuất hiện ở độ dày sóng và ảnh hưởng của vùng phía trước sóng. Mô hình NSF dự đoán sự giảm vận tốc tương đối

đột ngột và dày sóng mỏng hơn so với các mô hình CFD còn lại khi so sánh với dữ liệu. Mô hình NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), đưa thêm sự khuếch tán, cải thiện sự phù hợp ở vùng trung tâm. Mô hình NSF-Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021) và NCCR (Le *et al.*, 2014) cung cấp sự cân bằng tốt hơn, nắm bắt cả độ dốc và vị trí của sự suy giảm vận tốc chính xác hơn mô hình NSF chuẩn. Mô hình NSF-Reddy *et al.* cho thấy sự phù hợp gần nhất với dữ liệu DSMC trên toàn vùng sóng sốc, đặc biệt là ở trung tâm sóng sốc.



Hình 5. Biên dạng vận tốc trong cấu trúc sóng sốc

Ở số Mach cao hơn $Ma = 10$ trong Hình 5b, các hiệu ứng bất cân bằng trở nên đáng kể hơn nhiều và sự khác biệt giữa các mô hình rõ rệt hơn. Mô hình NSF chuẩn lại tạo ra độ dốc vận tốc quá dốc, không nắm bắt được ảnh hưởng của vùng trước sóng được quan sát thấy trong dữ liệu DSMC. Mô hình NSF-Brenner cải thiện dự đoán biên dạng vận tốc hơn so với mô hình NSF chuẩn, còn mô hình NCCR phù hợp tốt với các mô hình mở rộng NSF-Brenner và NSF-Reddy *et al.* ở vùng trung tâm. Cuối cùng, mô hình Reddy *et al.* cho thấy sự

cải thiện đáng kể so với mô hình NSF chuẩn, đặc biệt là trong việc nắm bắt một phần sự suy giảm vận tốc ở vùng trước sóng, nhưng vẫn sai lệch so với dữ liệu DSMC và phù hợp tốt với dữ liệu DSMC ở cả vùng trung tâm và phía sau sóng sốc.

Cuối cùng, giá trị nghịch đảo của độ dày sóng sốc của các mô phỏng ở số $Ma = 3,38$ và 10 được trình bày trong Bảng 2 và chúng được so sánh với các dữ liệu thực nghiệm (Alsmeyer, 1976) và DSMC. Điều này cho thấy định lượng tốc độ thay

đổi mật độ trên sóng sốc. Nó được tính bằng tỷ lệ giữa *gradient* mật độ lớn nhất trên sóng sốc và sự sai lệch giữa mật độ tự do và sau sóng sốc ($\rho_2 - \rho_1$) trong phương trình (11). Hai mô hình NSF chuẩn và NCCR (Le *et al.*, 2014) dự đoán giá trị này cao hơn nhiều so với các mô hình NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), và NSF-Reddy *et*

al. (Reddy & Dadzie, 2021) và cho thấy sự không phù hợp với dữ liệu thực nghiệm và DSMC. Ngược lại, các mô NSF-Brenner và NSF-Reddy *et al.* cho thấy có sự cải thiện so với hai mô hình NSF chuẩn và NCCR và tiệm cận ở mức độ nào đó với dữ liệu thực nghiệm (Alsmeyer, 1976) và DSMC.

Bảng 2. Giá trị nghịch đảo của độ dày sóng sốc, $1/\delta$.

Số <i>Ma</i>	Giá trị tính toán $1/\delta$					
	Thực nghiệm [6]	DSMC	NSF	Reddy <i>et al.</i>	Brenner	NCCR
<i>Ma</i> = 3,38	0,274	0,281	0,445	0,299	0,308	0,373
<i>Ma</i> = 10	0,219	0,227	0,413	0,264	0,261	0,360

KẾT LUẬN

Trong mô phỏng cấu trúc sóng sốc, các biên dạng mật độ, nhiệt độ và vận tốc cho thấy các mô hình NSF chuẩn bị hạn chế trong việc thể hiện cấu trúc bất cân bằng của sóng sốc. Khi số Mach tăng lên, những hạn chế của các mô hình NSF chuẩn trở nên rõ ràng hơn. Tất cả các mô hình NSF mở rộng và NCCR dự đoán biên dạng mật độ, nhiệt độ, vận tốc trong cấu trúc sóng sốc và nghịch đảo độ dày sóng tốt hơn mô hình NSF chuẩn khi so với dữ liệu thực nghiệm và DSMC. Phân bố, mật độ, nhiệt độ và vận tốc cho thấy dữ liệu DSMC bắt đầu tăng sớm hơn so với dự đoán của tất cả các mô hình CFD xem xét trong công việc hiện tại, dẫn đến cấu trúc sóng sốc DSMC rộng hơn. Mô hình NSF-Brenner (Greenshields & Reese, 2007), và NCCR (Le *et al.*, 2014) cho các dự đoán gần tương tự nhau ở cùng giá trị $\omega = 0,72$. Trong đó, mô hình Reddy *et al.* (Reddy & Dadzie, 2021) cho kết quả dự đoán tốt nhất cho tất cả các biên dạng (ρ_* , T^* , u^*) và độ dày sóng sốc ở cùng một giá trị hệ số độ nhớt thực tế là $\omega = 0,72$.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Alsmeyer, H. (1976). Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam. *Journal of Fluid Mechanics*, 74, 497–513.

Bird, G. A. (2013). *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford University Press.

Brenner, H. (2005). Kinematics of volume transport. *Physica A*, 349, 11–59.

Eu, B. C. (1992). *Kinetic theory and irreversible thermodynamics*. Wiley-Interscience.

Greenshields, C. J., & Reese, J. M. (2007). The structure of shock waves as a test of Brenner’s modifications to the Navier-Stokes equations. *Journal of Fluid Mechanics*, 580, 407–429.

Le, N. T. P., Xiao, H., & Myong, R. S. (2014). A triangular discontinuous Galerkin method for non-Newtonian implicit constitutive models of rarefied and microscale gases. *Journal of Computational Physics*, 273, 160–184.

Mankodi, T. K., Ejtehadi, O., Chourushi, T., Rahimi, A., & Myong, R. S. (2024). nccrFOAM suite: Nonlinear coupled constitutive relation solver in the OpenFOAM framework for rarefied and microscale gas flows with vibrational non-equilibrium. *Computer Physics Communications*, 296, Article 109024.

Tran. H. N, & Le, T. P. N. (2020). Phương pháp discontinuous Galerkin trong tính toán mô phỏng dòng khí loãng tốc độ cao. *Tạp chí Khoa học và Công nghệ - Đại học Đà Nẵng*, 18(7), 62–67.

OpenFOAM. (2026). *OpenFOAM* (Version 10). <https://www.openfoam.org>

Reddy, M. H. L., & Dadzie, S. K. (2021). Effects of molecular diffusivity on shock-wave structures in monatomic gases. *Physical Review E*, 104, Article 035111.