

УДК 519.6

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВ В СМЕШАННЫХ ЯЧЕЙКАХ

Е. А. Гончаров, Ю. В. Янилкин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Предлагается новый алгоритм расчета в лагранжевых переменных термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках. В основе алгоритма лежит предположение о равенстве приращений давлений компонентов за временной шаг. Распределение общего сжатия (расширения) ячейки между компонентами дополнено безытерационным механизмом выравнивания давлений компонентов. При этом условие аддитивности внутренних энергий компонентов используется для определения добавок к внутренней энергии веществ для поддержания баланса энергии. Приводятся результаты тестовых расчетов, которые показывают высокую точность и эффективность алгоритма.

Введение

В настоящей работе рассматриваются проблемы численного моделирования в односкоростном приближении газодинамических течений многокомпонентной среды, каждый компонент которой представляет собой невязкую и нетеплопроводную жидкость (газ). Предполагается, что компоненты могут как иметь выделенные границы разделов, так и быть в перемешанном состоянии, когда фрагменты компонентов заметно меньше счетных ячеек. При численном моделировании таких течений неизбежно появление так называемых *смешанных ячеек*, содержащих два и более компонентов. В этом случае возникает ряд проблем, одной из которых является корректный расчет термодинамического состояния компонентов в смешанных ячейках при отсутствии полной информации, необходимой для точного распределения сжатия (расширения) всей ячейки между заполняющими ее компонентами.

В расчетах задач с четко выделенными границами раздела между веществами достаточно точной может, например, оказаться методика, использующая адаптивно-встраивающуюся дробную сетку. В этом случае смешанная ячейка дробится в несколько раз так, что образующиеся приблизительно в том же количестве, но существенно более мелкие смешанные ячейки практически не будут оказывать влияния на

точность счета задачи. Однако существуют задачи, в которых целые области могут состоять из смешанных ячеек (ниже для краткости смешанные ячейки в таких областях обозначаются как ячейки, содержащие "смесь"). Например, грунт, особенно насыпной, близок к гетерогенной смеси воздуха с другим веществом, описывающим твердую составляющую грунта. Вторым примером — зона турбулентного перемешивания разных веществ. Поэтому корректность счета газодинамики в смешанных ячейках в задачах такого типа может существенно влиять на точность счета.

Теоретически можно придумать довольно много методов для замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках, обладающих разной степенью физической обоснованности. Однако большинство этих методов представляют лишь исторический интерес, и в настоящее время применяются в основном три физически ясных способа распределения сжатия (расширения) смешанной ячейки между заполняющими ее компонентами.

В методе 1 считается, что относительные сжатия (расширения) веществ одинаковы [1]. Так как

$$\operatorname{div} \vec{u} \approx \frac{\Delta V}{V\tau},$$

где V — объем, занимаемый веществом, ΔV — изменение объема на временном шаге τ , то из

равенства относительных сжатий (расширений) следует

$$\operatorname{div} \vec{u} = \operatorname{div} \vec{u}_1 = \operatorname{div} \vec{u}_2 = \dots$$

Здесь и ниже индексы относятся к дивергенции в целом, а не к скоростям. Как показывает практика, данный способ позволяет проводить расчеты широкого класса задач, однако в случае смесей (при большом количестве смешанных ячеек) при сильно отличающихся уравнениях состояния веществ он имеет значительную погрешность [2]. Поэтому имеет смысл применять его лишь для гетерогенной смеси веществ с близкими свойствами.

В методе 2 распределение сжатий (расширений) осуществляется исходя из равенства давлений веществ в смешанной ячейке [3, 4]

$$P = P_1 = P_2 = \dots$$

В этом случае на каждом счетном шаге необходима достаточно дорогостоящая (особенно, когда в ячейке больше чем два вещества) итерационная процедура выравнивания давлений веществ. Приближение равенства давлений веществ справедливо как для гомогенной смеси, так и для гетерогенной, когда размеры частиц различных веществ заметно меньше размеров счетной ячейки.

В обоих случаях давление в ячейке вычисляется по формуле

$$P = \sum_i \beta_i P_i, \quad (1)$$

где β_i — объемная концентрация веществ; i — номер вещества. Формула (1), используемая обычно для гомогенной смеси идеальных газов, для гетерогенной смеси является просто математическим способом усреднения давлений. Однако для случая равенства давлений компонентов с учетом того, что

$$\sum_i \beta_i = 1,$$

формула (1) оказывается точной.

В работе [2] рассмотрен еще один способ (метод 3) распределения сжатия (расширения) смешанной ячейки между веществами, основанный на предположении об одинаковом приращении давлений компонентов.

Сравнение расчетов по указанным методам (см. [2]) показало, что в случае многокомпонентной среды с четко выделенными границами раз-

делов все три метода имеют приемлемую точность. Однако в расчетах смесей метод 1 значительно уступает двум другим методам. Сравнение методов 2 и 3 показало, что метод 3 по точности близок к методу 2, однако имеет преимущество перед ним простотой реализации и экономичностью.

При всей привлекательности метода 3 проведенные в последнее время численные исследования по комплексу программ ЭГАК показали и некоторые его недостатки. Описанию этих недостатков и соответствующих алгоритмов, позволяющих преодолеть их, посвящена данная работа. Отметим, что здесь не рассматриваются методы 1 и 2, они подробно рассмотрены в работе [2].

Алгоритм, основанный на предположении об одинаковом приращении давлений компонентов

Кратко повторим описание алгоритма метода 3.

Дивергенцию скорости, представляющую собой скорость относительного изменения объема, можно представить в виде

$$\operatorname{div} \vec{u} \approx \frac{\Delta V}{V\tau} \approx -\frac{\Delta\rho}{\rho\tau} = -\frac{\Delta\rho\Delta P}{\rho\tau\Delta P} = -\frac{\Delta P}{\tau\rho\frac{\Delta P}{\Delta\rho}}. \quad (2)$$

Здесь ρ — плотность вещества. Аналогичную формулу можно записать и для $\operatorname{div} u_i$, снабдив индексом i все средние величины в формуле (2).

Если предположить, что на счетном шаге приращение давления для всех веществ в ячейке одинаково, т. е. $\Delta P_i = \Delta P_k = \Delta P$, то для адиабатических течений из (2) следует

$$\operatorname{div} \vec{u}_i \sim \frac{1}{\rho_i c_i^2}. \quad (3)$$

Учитывая также (из условия аддитивности объемов компонентов), что

$$\sum_i \beta_i \operatorname{div} \vec{u}_i = \operatorname{div} \vec{u}, \quad (4)$$

получаем замкнутую систему уравнений (3), (4) для нахождения $\operatorname{div} \vec{u}_i$. Решение этой системы дает

$$\operatorname{div} \vec{u}_i = \xi_i \operatorname{div} \vec{u}, \quad \xi_i = \frac{1}{\rho_i c_i^2 \sum_k \frac{\beta_k}{\rho_k c_k^2}}. \quad (5)$$

Отметим, что из (4) и (5) следует

$$\sum_i \beta_i \xi_i = 1.$$

Если начальные давления веществ в смешанной ячейке задать одинаковыми, то для адиабатических течений давления будут оставаться приблизительно одинаковыми и в процессе счета. Таким образом, данный способ распределения сжатий (расширений) между веществами в смешанной ячейке фактически близок к способу, основанному на равенстве давлений компонентов, но не требует дорогостоящего итерационного процесса выравнивания давлений.

Однако из-за погрешностей аппроксимации уравнений газодинамики разностными уравнениями, наличия ударных волн и конвективных членов при решении задач на эйлеровой сетке давления компонентов могут стать заметно отличающимися. Кроме того, большое различие в давлениях компонентов может быть задано уже в начальный момент времени. Такая ситуация возникает, например, в задачах с заданием мгновенного энерговыделения.

При разных давлениях компонентов требуется алгоритм получения среднего давления, которое используется в уравнении движения. В [2] среднее давление получается из условия аддитивности энергий компонентов, которое имеет вид

$$\Delta e = \sum_i \alpha_i \Delta e_i, \quad (6)$$

где α_i и Δe_i — соответственно массовая концентрация и изменение удельной внутренней энергии компонента; Δe — изменение энергии всей ячейки. Условие (6) равносильно утверждению, что сумма изменений внутренних энергий компонентов равняется изменению внутренней энергии всей ячейки.

Если в (6) использовать применяющуюся в комплексе ЭГАК разностную аппроксимацию уравнения энергии для компонентов [5]

$$\Delta e_i = -\tau \frac{\tilde{P}_i + q_i}{2\rho_i^n} (\operatorname{div} \vec{u}_i^n + \operatorname{div} \vec{u}_i^{n+1}) \quad (7)$$

и распределение дивергенций компонентов (5), то условие аддитивности энергии преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{\tau}{\rho} (\tilde{P} + q) \frac{\operatorname{div} \vec{u}^n + \operatorname{div} \vec{u}^{n+1}}{2} = \\ = \frac{\tau}{\rho} \sum_i \beta_i \xi_i (\tilde{P}_i + q_i) \frac{\operatorname{div} \vec{u}^n + \operatorname{div} \vec{u}^{n+1}}{2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь \tilde{P}_i — предвычисленное давление компонента, определяемое по формуле

$$\tilde{P}_i = P_i^n - \kappa \rho_i^n (c_i^n)^2 \operatorname{div} \vec{u}_i^n \quad (\kappa = 0, 6); \quad (9)$$

\tilde{P} — среднее предвычисленное давление; ρ — средняя плотность; q и q_i — искусственные вязкости, средняя и компонента соответственно. При получении уравнения (7) также использовалось тождество $\frac{\alpha_i}{\rho_i} \equiv \frac{\beta_i}{\rho}$.

Условию (8) можно удовлетворить, если предположить, что среднее давление определяется соотношением

$$\tilde{P} + q = \sum_i \beta_i \xi_i (\tilde{P}_i + q_i). \quad (10)$$

Применение рассматриваемого способа расчета смешанных ячеек в реальных задачах выявило вопросы, требующие разрешения:

1. В расчетах задачи о взрыве в воздухе на неподвижной эйлеровой сетке в продуктах взрыва было задано мгновенное энерговыделение, а потоки веществ через границы ячеек считались пропорциональными концентрациям компонентов, т. е. рассматривалась задача без сохранения границы между веществами (см. ниже). Вскоре все ячейки вблизи центра взрыва оказались смешанными. После этого отдача энергии, заданной в продуктах взрыва, в окружающий воздух практически прекратилась. Поэтому оказалось, что в расчете фактически использовалось только $\approx 20\%$ энергии взрыва. Такой счетный эффект стал возможным из-за отсутствия в расчетах механизма выравнивания давлений компонентов.
2. Возникает вопрос о корректности использования формулы (10) для получения среднего давления. Рассмотрим смешанную ячейку, состоящую из двух идеальных газов с одинаковыми уравнениями состояния, но сильно различающимися давлениями. Пусть $P_1 = 1000$ атм., $\beta_1 = 0,9$; $P_2 = 1$ атм., $\beta_2 = 0,1$. Легко сосчитать, используя формулы (5) и (10), а также справедливое для идеальных газов соотношение $\rho_i c_i^2 = \gamma P_i$ (γ — адиабатическая постоянная), что $\tilde{P} \approx 10$ атм. Таким образом, оцениваемое по формуле (10) среднее давление в ячейке в 100 раз меньше давления в веществе, которое занимает почти всю счетную ячейку.

Для устранения выявленных проблем потребовалась существенная переработка метода расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках, основанного на предположении об одинаковом приращении давлений компонентов. В результате разработан метод, который по сути является новым. Описанию алгоритмов этого метода посвящены следующие разделы.

Об усреднении давления в смешанных ячейках

Проблема получения среднего давления в смешанной ячейке с гетерогенной смесью веществ относится к решению подсеточной задачи, когда отсутствует полная информация, необходимая для получения точного решения. Обычно неизвестны как пространственное расположение компонентов, так и профили давлений внутри смешанной ячейки. Отсюда и возникают неопределенности во взаимодействии веществ между собой при различных давлениях компонентов как внутри смешанной ячейки, так и в соседних ячейках. Действительно, при наличии разницы в давлениях компонентов внутри ячейки происходят процессы, направленные на выравнивание давлений. Если при этом один или несколько компонентов сжимаются, то в них из-за неадиабатичности выделяется энергия. В силу этих процессов также происходит внутрисеточное (т. е. внутри ячейки) движение компонентов друг относительно друга, которое, не меняя импульса всей ячейки, приводит к появлению внутрисеточной кинетической энергии.

Понятно, что при имеющихся неопределенностях нельзя предложить точный способ усреднения давлений в смешанной ячейке. Наиболее привычно выглядит формула следующего вида:

$$\tilde{P} + q = \sum_i \beta_i (\tilde{P}_i + q_i). \quad (11)$$

В частности, для приведенного в предыдущем разделе примера по формуле (11) получается среднее давление, равное ≈ 900 атм, которое близко к давлению (1 000 атм) компонента, занимающего 90 % объема ячейки.

При внимательном рассмотрении оказывается, что и усреднение давления по формуле (10) также не противоречит здравому смыслу. В этой формуле весовые коэффициенты ξ_i пропорциональны сжимаемости компонентов, т. е., чем

лучше сжимается вещество, тем с большим весом его давление входит в формулу для усреднения.

То, что данная ситуация вполне логична, хорошо видно на следующем примере. Пусть в смешанной ячейке есть два компонента, один из которых практически не сжимаем. Тогда очевидно, что общее сжатие (расширение) смешанной ячейки будет определяться сжатием (расширением) другого компонента и взаимодействие между ячейками будет происходить в соответствии с разностью давлений именно этого компонента. При этом практически не важно, какое давление будет в "несжимаемом" веществе. Именно такая ситуация реализуется в рассмотренном в предыдущем разделе примере. Так как для идеального газа справедливо соотношение $\rho_i c_i^2 = \gamma P_i$, то сжимаемость компонента с давлением 1 000 атм в тысячу раз меньше, чем сжимаемость компонента с давлением 1 атм. То есть, несмотря на малую долю объема (10 %), занимаемого в смешанной ячейке, вещество с меньшим давлением обеспечивает ≈ 99 % изменения объема всей смешанной ячейки.

Таким образом, среднее давление в гетерогенной смеси может зависеть от рассчитываемого физического процесса. По-видимому, для "чистой" газодинамики наиболее подходящим является усреднение по формуле (8), так как этот способ усреднения опирается на физически понятный принцип равенства приращений давлений компонентов за временной шаг. Этот принцип полностью справедлив, когда давления компонентов равны, а совместно с процедурой выравнивания давлений компонентов он должен "хорошо работать" и при разных давлениях веществ.

Если в рассматриваемых задачах наиболее важными будут другие процессы, например энерговыделение во взрывчатом веществе в зависимости от давления, то может оказаться, что усреднение давления необходимо проводить по другой формуле, возможно, отличающейся и от (10), и от (11).

Обратим еще раз внимание на то, что усреднение давления по формулам (10) и (11) не является абсолютно правильным. Можно лишь говорить о разумном качественном подходе при использовании этих формул. Однако проблема, связанная со способом усреднения давлений компонентов в смешанной ячейке, возникает только тогда, когда давления компонентов заметно различаются. В случае равенства давлений формулы (10) и (11) дают одинаковые значения. При

наличии в методике процедуры выравнивания давлений компонент выбор способа нахождения среднего давления должен слабо влиять на результаты счета.

Условие аддитивности внутренней энергии компонентов

Обычно условие аддитивности энергии компонентов используется для получения формального способа усреднения давления компонентов при заданном распределении общего сжатия (расширения) смешанной ячейки по компонентам. Из равенства дивергенций компонентов для усреднения давления следует формула (11). При распределении дивергенций по формуле (5) получается среднее давление по выражению (10).

Отметим, что наличие жесткой зависимости (через условие аддитивности энергии) между способом получения среднего давления и распределением общего сжатия (расширения) смешанной ячейки по компонентам совершенно не обязательно. К тому же эту зависимость трудно установить, так как в процессе выравнивания давлений часть внутренней энергии переходит в подсеточную кинетическую энергию компонентов.

Покажем это на следующем примере. Пусть в смешанной ячейке находятся вещества с различными давлениями. Предположим, что за счетный шаг объем ячейки не изменился. Тогда изменение полной внутренней энергии ячейки будет равно нулю. Но за счет процесса выравнивания давлений произойдет изменение объемов, занимаемых веществами, и соответственно изменение их внутренних энергий. Представим суммарное изменение внутренних энергий компонентов в виде

$$\Delta E = -P_+ \Delta V_+ - P_- \Delta V_-, \quad (12)$$

где P_+ — среднее давление тех компонентов, у которых давление превышает общее среднее давление, ΔV_+ — изменение объема этих компонентов. При выравнивании давлений такие вещества расширяются, поэтому $\Delta V_+ > 0$. Аналогично определены P_- и ΔV_- . При этом $\Delta V_- < 0$. Так как по условию задачи объем всей ячейки не изменился, то $\Delta V_+ = |\Delta V_-|$. По определению $P_+ > P_-$. Таким образом, при проведении процедуры выравнивания давлений изменение внутренней энергии ячейки, определяемое по сумме приращений энергий компонентов по форму-

ле (12), будет всегда отрицательным, в то время как изменение энергии ячейки за счет полной дивергенции будет равно нулю. Появление дисбаланса связано с тем, что, как указывалось ранее, возникают внутренние движения в ячейке. То есть при выравнивании давлений компонент часть внутренней энергии ячейки перейдет во внутрисеточную кинетическую. При этом некоторая часть внутрисеточной кинетической энергии за счет вязкости перейдет обратно во внутреннюю энергию. Чтобы избежать потерь внутренней энергии будем всю внутрисеточную кинетическую энергию возвращать в виде добавок к внутренней энергии компонентов.

Таким образом, предлагается записать закон аддитивности энергий компонентов в виде

$$\begin{aligned} & -\frac{\tau}{\rho} \left(\tilde{P} + q \right) \frac{\operatorname{div} \vec{u}^n + \operatorname{div} \vec{u}^{n+1}}{2} = \\ & = -\frac{\tau}{\rho} \sum_i \beta_i \left(\tilde{P}_i + q_i \right) \frac{\operatorname{div} \vec{u}_i^n + \operatorname{div} \vec{u}_i^{n+1}}{2} + \\ & + \sum_i \alpha_i \Delta e'_i, \end{aligned} \quad (13)$$

из которого при заданных способах получения $\tilde{P} + q$ и распределения общего сжатия (расширения) смешанной ячейки по компонентам будем находить значения $\Delta e'_i$, которые представляют собой дополнительные приращения внутренней энергии компонентов для обеспечения баланса энергии. В уравнении (13) q и q_i — счетные вязкости (средняя и для компонентов), которые определяются так же, как в работе [2]. Отметим, что при равенстве давлений компонент и при использовании вязкости, одинаковой для всех компонент, $\sum_i \alpha_i \Delta e'_i = 0$, так как по определению

$$\frac{\operatorname{div} \vec{u}^n + \operatorname{div} \vec{u}^{n+1}}{2} = \sum_i \beta_i \frac{\operatorname{div} \vec{u}_i^n + \operatorname{div} \vec{u}_i^{n+1}}{2}.$$

Расчет изменения плотности и внутренней энергии компонентов с учетом процедуры выравнивания давлений

Разобьем процесс расчета распределения сжатия (расширения) смешанной ячейки между компонентами на временном шаге на два условных этапа:

1. Используется предположение о равном приращении давлений. Дивергенции компонен-

тов $\text{div } \vec{u}_{i1}$ вычисляются по формуле (5). То есть в предлагаемом алгоритме принцип равенства приращений давлений компонентов считается физически наиболее корректным, и именно в соответствии с ним задается распределение общего сжатия (расширения) смешанной ячейки по компонентам независимо от способа усреднения давлений веществ.

2. На этом этапе проводится процедура выравнивания давлений. Так как полная дивергенция ячейки, обусловленная уравнением движения, уже учтена, то при выравнивании давлений суммарная дивергенция компонентов должна равняться нулю. Основываясь на формуле (2), дивергенцию каждого компонента, появляющуюся в процессе выравнивания давлений, представим в виде

$$\text{div } \vec{u}_{i2} = -\frac{\Delta P_i}{\tau \rho_i c_i^2}, \quad (14)$$

где

$$\Delta P_i = A \frac{c\tau}{h} (\bar{P} - P_i). \quad (15)$$

Множитель $\frac{c\tau}{h}$, равный отношению временного шага к характерному для данной смешанной ячейки времени выравнивания давлений h/c (c — скорость звука, h — характерный размер ячейки), определяет долю от разницы в давлениях компонентов, на которую произойдет выравнивание давлений компонентов за один временной шаг. По смыслу выражения (15) значение множителя A порядка единицы. То есть нет необходимости стремиться уравнивать давления компонентов за один временной шаг, так как возникшая в действительности по каким-либо причинам разница в давлениях компонентов релаксирует не мгновенно, а с указанным выше характерным временем, которое обычно в два и более раз превышает шаг по времени.

Если \bar{P} взять из выражения (10), то условие неизменности полного объема ячейки на этом этапе

$$\sum_i \beta_i \text{div } \vec{u}_{i2} = 0$$

будет выполняться автоматически. То, что \bar{P} в выражении (15) может отличаться от среднего давления, использованного в уравнении движения и в условии аддитивности

энергий компонентов, в данном случае не имеет значения. При сильно различающихся давлениях компонентов все равно происходит их выравнивание, а при слабом отличии в давлениях средние значения, сосчитанные по обеим формулам, будут близки.

Таким образом, дивергенция компонентов на момент времени t^n будет выражаться суммой

$$\text{div } u_i = \text{div } u_{i1} + \text{div } u_{i2}. \quad (16)$$

В уравнение энергии входит еще дивергенция с $(n+1)$ -го момента времени. В настоящей работе величину $\text{div } \vec{u}_{i2}^{n+1}$ предлагается взять в виде

$$\text{div } \vec{u}_{i2}^{n+1} \approx \text{div } \vec{u}_{i2}^n \left(1 - A \frac{c\tau}{h}\right), \quad (17)$$

который согласуется с формулами (14) и (15). Отметим, что вместо (17) возможно использование и других оценочных выражений, например, можно брать значение дивергенции с n -го момента времени.

Теперь из уравнения (13) определим дополнительные изменения внутренних удельных энергий компонентов $\Delta e'_i$. Как и в случае усреднения давлений, невозможно указать точный способ распределения величин $\Delta e'_i$ между компонентами. Наиболее корректным представляется способ, также опирающийся на предположение об одинаковом приращении давлений компонентов, в данном случае при изменении их внутренних энергий. При этом, во-первых, не происходит "перехлестов" давлений компонентов, т. е. смены знака у разности давлений веществ. Во-вторых, процедура выравнивания давлений остается контролируемой, так как выравнивание давлений полностью определяется величинами $\text{div } \vec{u}_{i2}$. Если при этом зафиксировать распределение сжатия (расширения) компонентов по формуле (16), то действуя таким же образом, как при выводе формулы (5), получаем

$$\Delta e'_i = \frac{\Delta e}{\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \Big|_{\rho} \sum_k \frac{\alpha_k}{\frac{\partial P_k}{\partial e_k} \Big|_{\rho}}}, \quad (18)$$

где $\Delta e = \sum_i \alpha_i e'_i$ — разность между левой частью и первым членом в правой части уравнения (13). Отметим, что если усреднение давлений компонентов производится по формуле (10), то всегда $\Delta e \geq 0$.

Таким образом, полное изменение внутренней энергии компонентов будет определяться суммой приращений, получаемых по формулам (7) и (18). Изменение плотностей будем находить в соответствии с формулой (16).

Укажем некоторые возможные проблемы и способы их устранения, полезные при программной реализации алгоритма.

Замечание 1. Следующие из формул (14), (15) дивергенции компонентов получаются не в результате счета газодинамики внутри ячейки, а являются некоторой приближенной оценкой. Их величины определяются отношением

$$\operatorname{div} \vec{u}_{i2} \sim \frac{\bar{P} - P_i}{\rho_i c_i^2}.$$

Так как для идеальных газов $\rho_i c_i^2 = \gamma_i P_i$ (любое уравнение состояния в небольшой области переменных можно интерполировать уравнением состояния идеального газа) и $\gamma_i > 1$, то для веществ, у которых $P_i > \bar{P}$, указанное отношение меньше единицы. Но для компонентов с $P_i < \bar{P}$ это отношение может получиться достаточно большим. При этом $\operatorname{div} \vec{u}_{i2} < 0$ и по абсолютной величине может превышать $\operatorname{div} \vec{u}_{i1}$. В этом случае изменение объема такого компонента, вычисленное по явной схеме по полной дивергенции (16),

$$\Delta V_i = V_i^n \tau \operatorname{div} \vec{u}_i,$$

может оказаться больше объема компонента и новый объем окажется отрицательным.

Чтобы избежать этого, укажем два метода.

В первом из них для веществ, у которых $P_i < \bar{P}$ и $\operatorname{div} \vec{u}_i < 0$, вычисление изменения объема можно производить по неявной схеме

$$\Delta V_i = V_i^{n+1} \tau \operatorname{div} \vec{u}_i,$$

что приводит к формуле

$$\Delta V_i = V_i^n \frac{\tau \operatorname{div} \vec{u}_i}{1 - \tau \operatorname{div} \vec{u}_i}.$$

При определении предвычисленного давления по формуле (9) и уравнения энергии (7) необходимо использовать скорректированные значения $\operatorname{div} u_i$, которые должны определяться по формуле

$$\overline{\operatorname{div} \vec{u}_i} = \frac{\Delta V_i}{V_i^n \tau}.$$

Новые значения $\operatorname{div} u_i$ получаются следующим образом:

$$\bar{V}_i^{n+1} - V_i^n = \bar{V}_i^{n+1} \tau \operatorname{div} \vec{u}_i,$$

откуда

$$\bar{V}_i^{n+1} = V_i^n \frac{1}{1 - \tau \operatorname{div} \vec{u}_i}. \quad (19)$$

С другой стороны,

$$\bar{V}_i^{n+1} - V_i^n = V_i^n \tau \overline{\operatorname{div} \vec{u}_i},$$

откуда

$$\bar{V}_i^{n+1} = V_i^n (1 + \tau \overline{\operatorname{div} \vec{u}_i}). \quad (20)$$

Приравняв выражения (19) и (20), получим формулу для определения новой дивергенции:

$$\overline{\operatorname{div} \vec{u}_i} = \frac{\operatorname{div} \vec{u}_i}{1 - \operatorname{div} \vec{u}_i}. \quad (21)$$

Полученные по формулам (19) и (21) значения приращений объемов и дивергенций уже не будут удовлетворять условию сохранения изменения полного объема и соответственно условию (4), поэтому необходимо сделать перенормировку этих величин. С этой целью можно использовать два способа.

В первом способе перенормировка производится для всех компонентов по формулам

$$\Delta \tilde{V}_i = \lambda \Delta V_i; \quad \operatorname{div} \tilde{u}_i = \lambda \overline{\operatorname{div} \vec{u}_i}, \quad (22)$$

где

$$\lambda = \frac{\Delta V}{\sum_i \Delta V_i} = \frac{\operatorname{div} \vec{u}}{\sum_i \beta_i \overline{\operatorname{div} \vec{u}_i}}.$$

Однако при использовании (22) при равенстве нулю общего изменения объема будут равны нулю и изменения объемов для компонентов, т. е. в этом случае выравнивание давлений компонентов производиться не будет.

Во втором способе, свободном от указанного выше недостатка, перенормировка производится только для компонентов, для которых изменения объемов и соответствующие дивергенции вычисляются по явной схеме. В этом случае новые значения указанных величин вычисляются по тем же формулам (22), в которых, однако, величина λ определяется следующим образом:

$$\lambda = \frac{\Delta V^-}{\Delta V - \sum_i \Delta V_i^+} = \frac{\sum_i \beta_i \operatorname{div} u_i^-}{\operatorname{div} u - \sum_i \beta_i \overline{\operatorname{div} \vec{u}_i^+}},$$

где знак "-" означает, что данные величины берутся только для компонентов, у которых $P_i < \bar{P}$ и $\text{div } \vec{u}_i < 0$, а знак "+" — в противном случае.

Описанный метод в общем случае не спасает положения, так как при перенормировке могут появиться отрицательные объемы уже у других компонентов с отрицательной дивергенцией.

Более надежен для предотвращения нежелательных ситуаций второй метод. Он заключается в том, что при возникновении отрицательных объемов компонентов уменьшается коэффициент A в формуле (15), например, исходя из условия $\tau |\text{div } \vec{u}_{i2}| \leq 0,5$, и все вычисления повторяются. Отметим, что в нижеприведенных тестовых расчетах использовался коэффициент $A = 1$ и необходимость в его уменьшении не возникала.

Замечание 2. Оно касается применения формулы (18). При вычислении по этой формуле, когда усреднение давлений осуществляется не по выражению (10), отрицательные дополнительные приращения энергии могут привести к ее отрицательным значениям для некоторых компонентов (что имело место в ряде расчетов). Если отрицательные значения энергии в методике не допускаются, что означает их зануление, это ведет к дисбалансу энергии, а именно к ее увеличению. Чтобы избежать такой ситуации, отрицательные энергии, обязанные своим происхождением отрицательным $\Delta e'_i$, алгебраически добавляются к энергии какого-либо другого компонента; при этом также контролируется ее положительность.

В формульном виде это выглядит следующим образом.

После определения новых энергий компонентов находим суммарные значения отрицательных энергий в ячейке (если они есть):

$$e^- = \sum_i e_i^{n+1} \alpha_i^{n+1},$$

где суммирование производится для компонентов с отрицательными значениями энергии ($e_i^{n+1} < 0$); α_i^{n+1} — массовые концентрации.

Затем для какого-либо компонента j с $e_j^{n+1} > 0$ производим корректировку:

$$\tilde{e}_j^{n+1} = e_j^{n+1} - \frac{e^-}{\alpha_j^{n+1}}. \quad (23)$$

При $\tilde{e}_j^{n+1} < 0$ процедуру повторяем до выполнения условия положительности всех e_i^{n+1} . Легко показать, что условие сохранения энергии при использовании формулы (23) не нарушается:

$$\sum_i \alpha_i^{n+1} \tilde{e}_i^{n+1} = \sum_i \alpha_i^{n+1} e_i^{n+1}.$$

Тестовые расчеты

В данном разделе приводятся результаты расчетов на основе предположения о равенстве приращений давлений компонентов в смешанной ячейке как без выравнивания давлений, так и с выравниванием. В силу того, что полное представление об особенностях разработанного алгоритма легче всего получить в лагранжевой газодинамике, большинство расчетов проводились в лагранжевой постановке. Однако для полноты картины некоторые расчеты проведены в эйлеровой постановке.

Ниже в подрисуночных подписях расчеты без использования выравнивания давлений будут называться расчетами по методу 3 (по терминологии работы [2]), с выравниванием давлений и способом усреднения $\bar{P} = \sum \beta_i P_i$ — по методу 3_{-P β} , а с выравниванием давлений и способом усреднения $\bar{P} = \sum \beta_i \xi_i P_i$ — по методу 3_{-P $\beta\xi$} . В некоторых случаях приводятся результаты расчетов из работы [2] с использованием предположения о равенстве дивергенций и без выравнивания давлений, которые будут называться расчетами по методу 1.

При описании постановки и результатов расчетов размерность переменных не указывается, так как в чисто математическом смысле в этих расчетах она не имеет значения.

Задача 1. Установление термодинамического равновесия без газодинамического движения. Имеется область, в которой задана в равных долях (т. е. с объемными концентрациями, равными 0,5) смесь двух покоящихся веществ со следующими начальными данными: вещество 1 — плотность $\rho_1 = 1,25$, энергия $e_1 = 200\,000$; вещество 2 — $\rho_2 = 50$, $e_2 = 5\,000\,000$. Уравнение состояния обоих веществ — идеальный газ с $\gamma = 5/3$. Таким образом, давления веществ в каждой ячейке различаются и через некоторое время должны прийти в равновесное состояние, при этом пространственное движение отсутствует. Это тест на "работу" алгоритма вы-

равнивания давлений, а именно выяснение, как будет происходить выравнивание при отсутствии каких-либо других процессов.

На рис. 1 приводятся графики зависимостей давлений компонентов от числа счетных шагов, на рис. 2 — аналогичные зависимости для плотностей компонентов. Видно, что через 20 шагов давления компонентов практически выравнены для обоих рассмотренных способов усреднения давлений. При этом для метода 3_P_β среднее давление остается неизменным, а для метода $3_P_{\beta\xi}$ оно со временем меняется, но выходит после выравнивания давлений компонентов на то же значение, что и в методе 3_P_β . Плотности компонентов также меняются со временем и выходят на постоянные значения, одинаковые в обоих методах.

Для методов 1 и 3 (без выравнивания давлений) термодинамическое состояние компонентов меняться не будет.

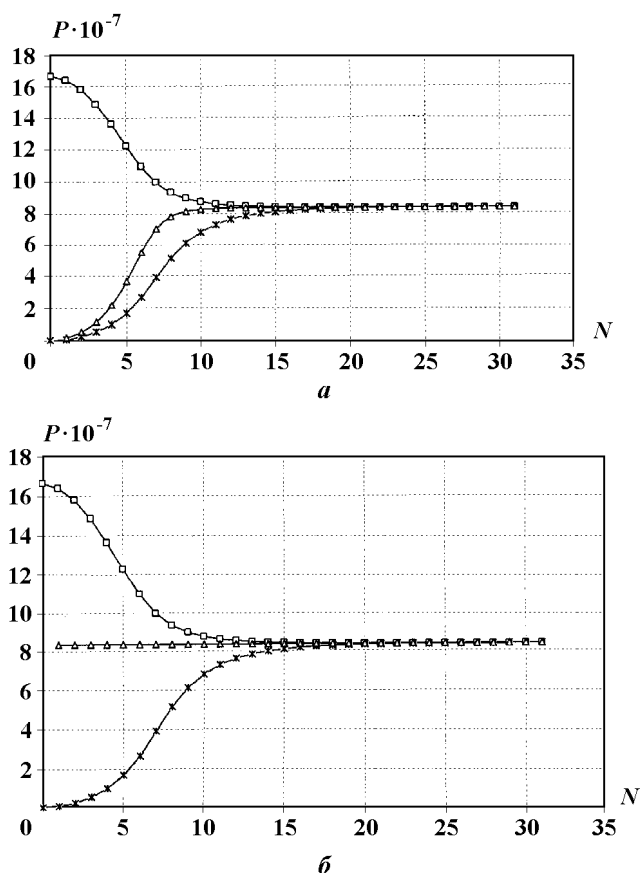


Рис. 1. Зависимости давлений компонентов (P_1, P_2) и среднего давления (P_{cp}) от числа счетных шагов N в задаче 1: a — расчет по методу $3_P_{\beta\xi}$; b — расчет по методу 3_P_β ; $- \times -$ — P_1 ; $- \square -$ — P_2 ; $- \Delta -$ — P_{cp}

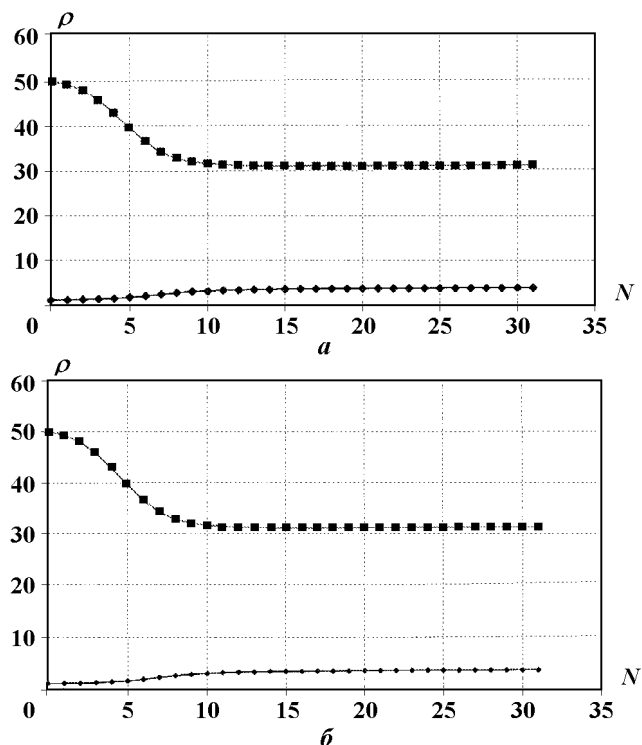


Рис. 2. Зависимости плотностей компонентов от числа счетных шагов N в задаче 1: a — расчет по методу $3_P_{\beta\xi}$; b — расчет по методу 3_P_β ; $- \blacklozenge -$ — плотность первого компонента; $- \blacksquare -$ — плотность второго компонента

Задача 2. Прохождение УВ по смеси двух газов. В области $0 < x < 100$ имеется смесь двух газов, находящихся в полностью перемешанном и равновесном состоянии ($P = 0, u = 0$); объемные концентрации газов равны 0,5. Первый газ имеет плотность $\rho = 1$, показатель адиабаты $\gamma = 3$, второй — $\rho = 1, \gamma = 1,2$. На левой границе задана постоянная скорость $u = 2$. По смеси газов идет ударная волна (УВ), на которой должны достигаться максимальные сжатия для каждого газа в отдельности, т. е. $\rho = 2$ для первого газа и $\rho = 11$ — для второго при условии отсутствия адиабатического обмена энергиями между газами. При этом давления компонентов должны быть одинаковыми.

Вся область разбивалась равномерно на 100 ячеек. Расчеты проводились в лагранжевой постановке.

Результаты расчетов приводятся на рис. 3 в виде давлений — среднего и компонентов — в зависимости от расстояния на момент времени $t = 25$ для четырех методов (среднее давление на рис. 3, v, z не приводится, так как совпадает с давлениями компонентов). На рис. 4 приводятся аналогичные профили плотностей компонентов.

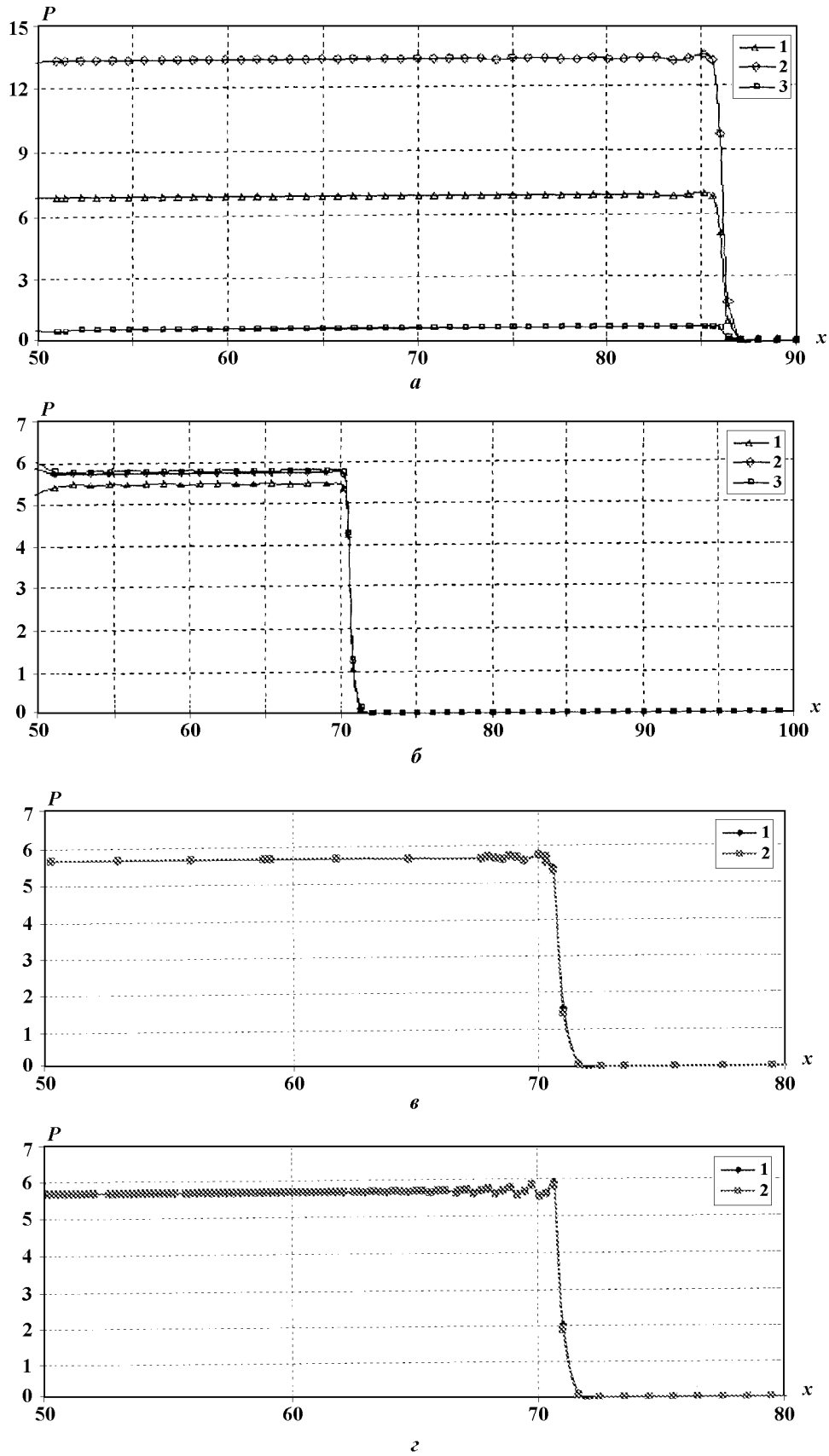


Рис. 3. Профили давлений в задаче 2, $t = 25$: *a* — метод 1; *b* — метод 3; *v* — метод $3_{-P\beta\zeta}$; *z* — метод $3_{-P\beta}$; 1 — давление первого компонента; 2 — давление второго компонента; 3 — среднее давление

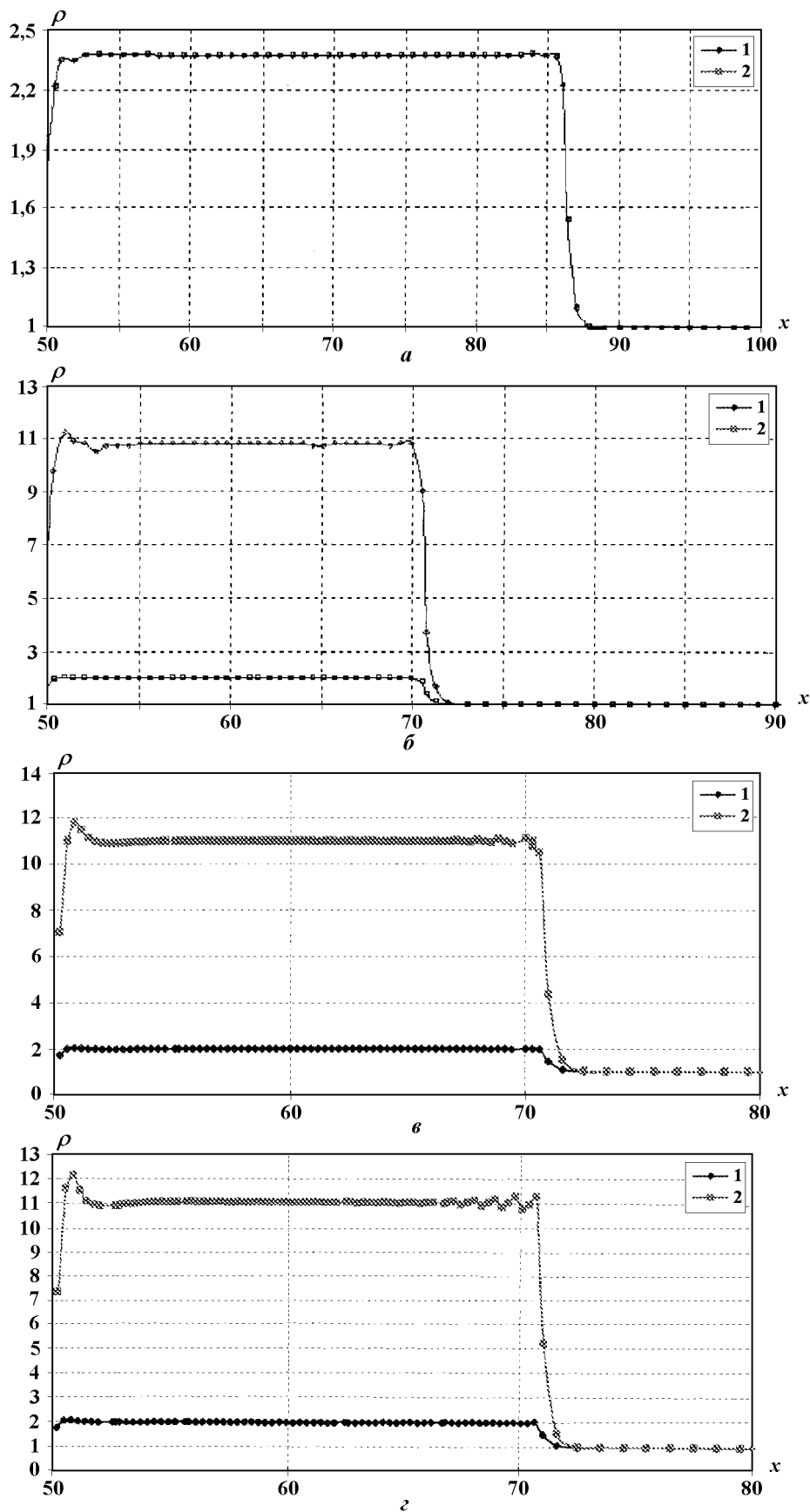


Рис. 4. Профили плотностей в задаче 2, $t = 25$: *a* — метод 1; *б* — метод 3; *в* — метод $3_{-P_{\beta\xi}}$; *г* — метод $3_{-P_{\beta}}$; 1 — плотность первого компонента; 2 — плотность второго компонента

Анализируя результаты расчетов, отметим, что в расчетах по методам 3, $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$ профили среднего давления отличаются друг от друга, однако достаточно близки, близки также и скорости распространения УВ. Расчет по методу 1 дает заметно отличающиеся результаты как по амплитуде давления за фронтом УВ, так и по скорости фронта. В этом расчете давления компонентов резко отличаются друг от друга и от среднего значения, в то время как в расчете по методу 3 они близки, хотя и не полностью совпадают, как это имеет место в расчетах по методам с выравниванием давлений компонентов $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$. Результаты расчетов по методам $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$ практически полностью совпадают с полученными по методу 2 (см. [2]), использующему предположение о равенстве давлений компонентов.

Профили плотностей также показывают, что метод 1 дает неприемлемый по точности результат. Плотности обоих компонентов в этом расчете одинаковы в полном соответствии с принятым предположением, только первый компонент сильно пережат, а второй, наоборот, недожат. Методы 3, $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$ по сравнению с методом 1 значительно более точные. Полученные в расчетах по этим методам сжатия за фронтом УВ близки к ожидаемым. В то же время видно, что следует отдать предпочтение методам $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$ (плотности за фронтом практически совпадают с ожидаемыми).

Таким образом, приведенные результаты расчетов показывают, что по точности методы $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$ несколько лучше метода 3 и имеют несомненные преимущества по сравнению с методом 1.

Задача 3. Перемешивание воздуха и продуктов взрыва при мгновенном энерговыделении. В области $0 < x < 5$, $7 < x < 120$ задано вещество 0 (воздух), в котором плотность равна 1,25, энергия — 200 000. В области $5 < x < 7$ задано вещество 1 (продукты взрыва) с плотностью 50 и энергией 5 000 000. Таким образом в веществе 1 имитируется мгновенное энерговыделение ($E_{\text{внутр}} = 1,5 \cdot 10^9$). Внутренняя энергия в веществе 0 на начальный момент времени равна $7,35 \cdot 10^7$. То есть полная энергия, заданная в расчете, составляет $1,5735 \cdot 10^9$. Уравнение состояния обоих веществ — идеальный газ с $\gamma = 5/3$. На левой границе ($x = 0$) используется граничное условие жесткая стенка.

Проведены расчеты по четырем методам — 1, 3, $3_{P\beta}$ и $3_{P\beta\xi}$. Расчеты проводились в эйле-

ровой постановке на неподвижной сетке без использования метода концентраций для расчета движения границ веществ. Поэтому в процессе счета из-за движения вещества через границы ячеек и наличия счетной диффузии происходит перемешивание веществ и практически все ячейки, охваченные движением, становятся смешанными.

На рис. 5 приводятся распределения концентраций компонентов, полученные в расчетах на момент времени $t = 0,3$.

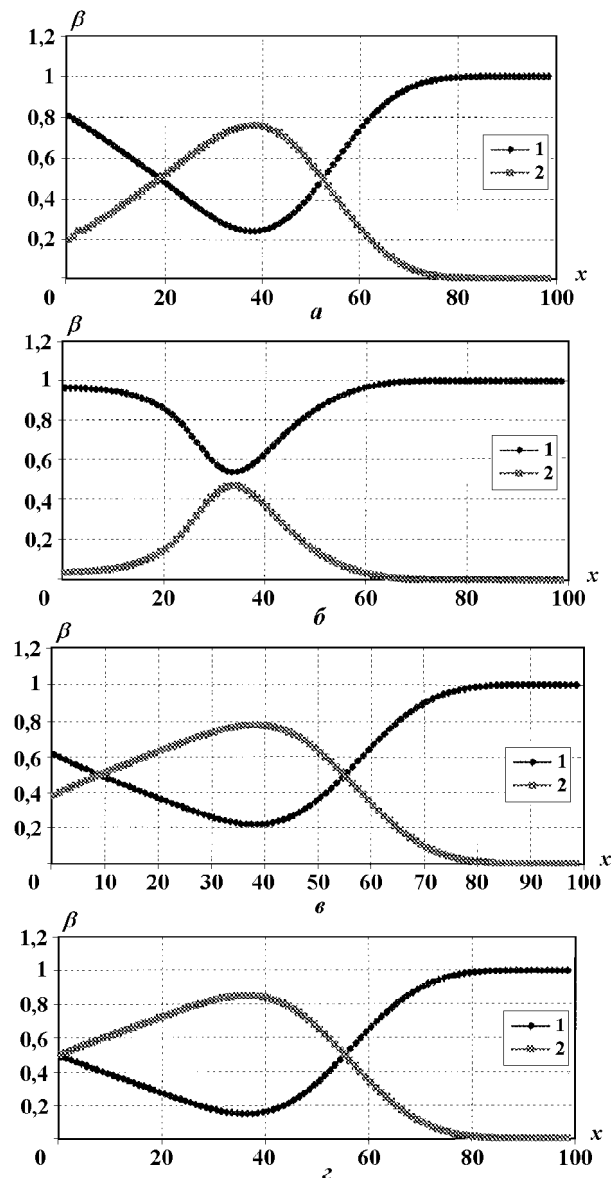


Рис. 5. Профили объемных концентраций компонентов в задаче 3, $t = 0,3$: а — метод 1; б — метод 3; в — метод $3_{P\beta}$; г — метод $3_{P\beta\xi}$; 1 — концентрация первого компонента; 2 — концентрация второго компонента

На рис. 6 и 7 изображены соответственно давления и плотности компонентов в зависимости от координаты x .

В таблице приводятся распределения внутренней и кинетической энергии по компонентам на момент времени $t = 0,4$.

Из приведенной информации следует, что результаты расчетов с выравниванием давления существенно отличаются от результатов, полученных в расчетах без его выравнивания. Количество энергии, переданной от продуктов взрыва воздуху при использовании методов 3_P_β и

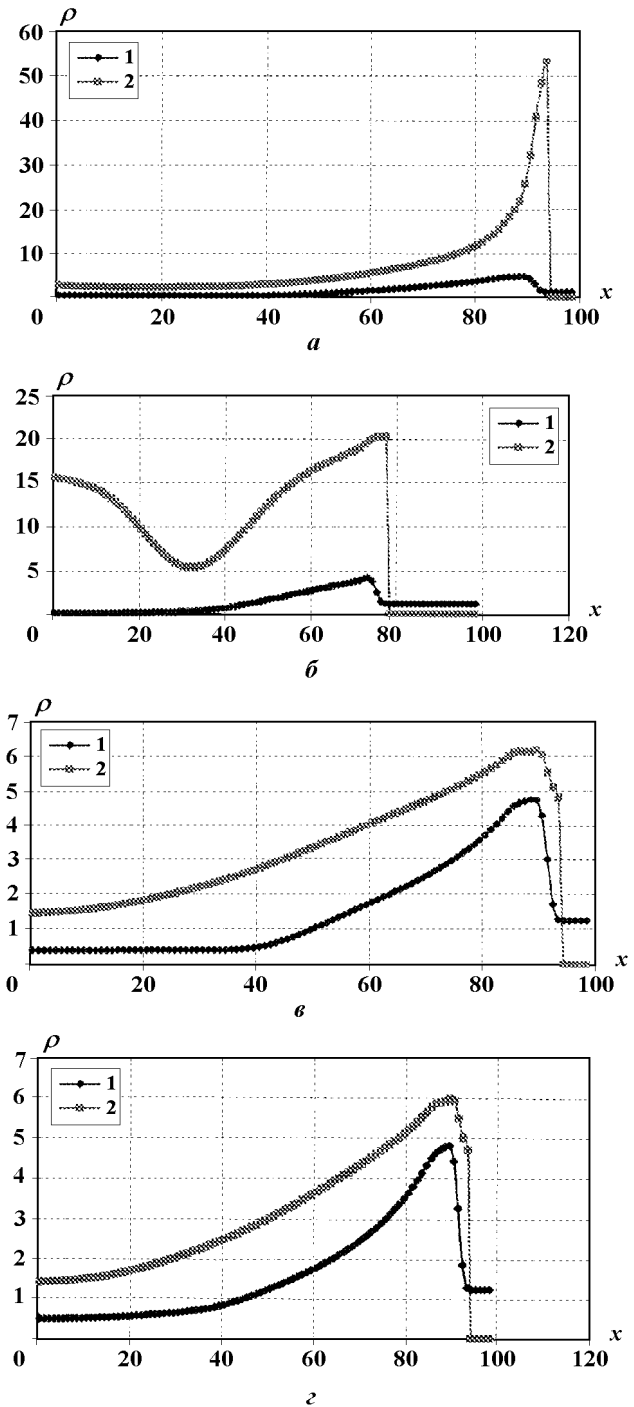
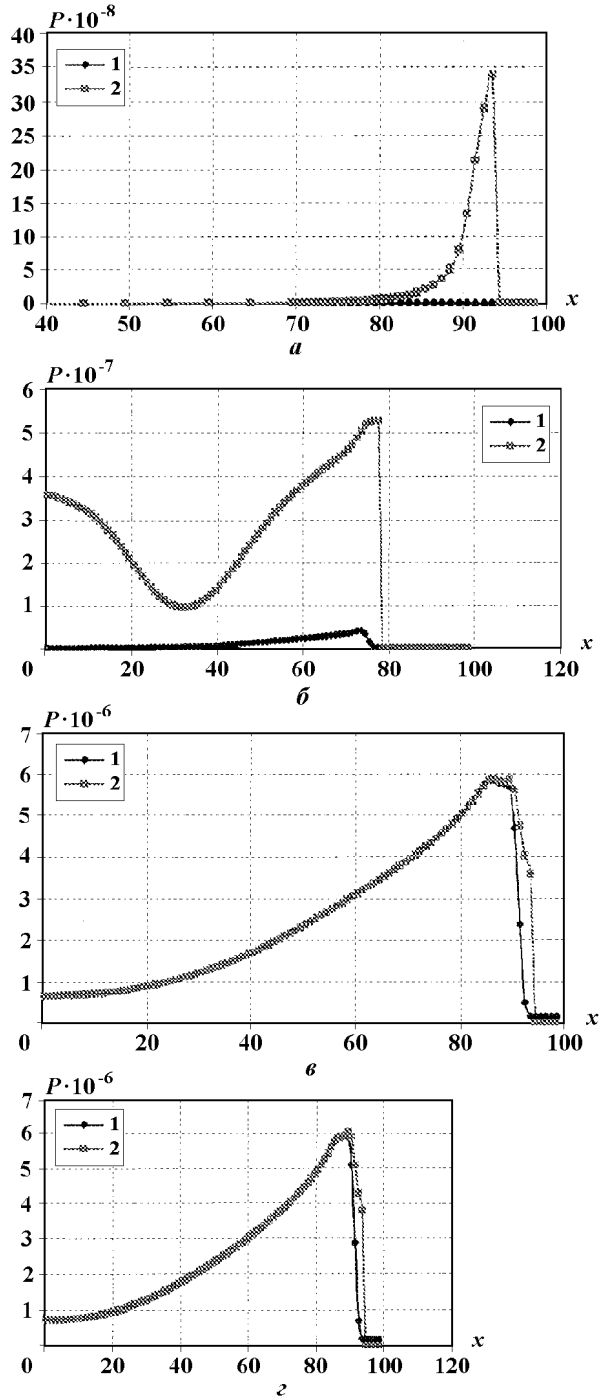


Рис. 6. Профили давлений компонентов в задаче 3, $t = 0,3$: a — метод 1; b — метод 3; v — метод 3_P_β ; z — метод $3_P_{\beta\xi}$; 1 — давление первого компонента; 2 — давление второго компонента

Рис. 7. Профили плотностей компонентов в задаче 3, $t = 0,3$: a — метод 1; b — метод 3; v — метод 3_P_β ; z — метод $3_P_{\beta\xi}$; 1 — плотность первого компонента; 2 — плотность второго компонента

Распределение внутренней и кинетической энергии по компонентам на момент времени $t = 0,4$

Физическая величина	Метод 1	Метод 3	Метод 3_ P_β	Метод 3_ $P_{\beta\xi}$
$E_{\text{внутр}}(0)$	$7,254 \cdot 10^8$	$3,9760 \cdot 10^8$	$1,1453 \cdot 10^9$	$1,1208 \cdot 10^9$
$E_{\text{внутр}}(1)$	$6,782 \cdot 10^8$	$9,1280 \cdot 10^8$	$2,5940 \cdot 10^8$	$2,8760 \cdot 10^8$
$E_{\text{кин}}(0)$	$5,020 \cdot 10^7$	$1,8290 \cdot 10^8$	$8,4600 \cdot 10^7$	$8,1890 \cdot 10^7$
$E_{\text{кин}}(1)$	$9,110 \cdot 10^7$	$5,5140 \cdot 10^8$	$6,9500 \cdot 10^7$	$6,6500 \cdot 10^7$
$E_{\text{полн}}(0)$	$7,757 \cdot 10^8$	$5,8050 \cdot 10^8$	$1,2299 \cdot 10^9$	$1,2027 \cdot 10^9$
$E_{\text{полн}}(1)$	$7,693 \cdot 10^8$	$9,6790 \cdot 10^8$	$3,2880 \cdot 10^8$	$3,5410 \cdot 10^8$
$E_{\text{полн}}$	$1,545 \cdot 10^9$	$1,5484 \cdot 10^9$	$1,5587 \cdot 10^9$	$1,5568 \cdot 10^9$

$3_P_{\beta\xi}$, составляет соответственно 78,1 и 76,4% от начальной энергии, заданной в продуктах взрыва, в то время как в методе 1 это 48,7%, а в методе 3 — 35,5%. Это приводит к тому, что в методе 3 УВ заметно отстает от ее положения в расчетах с выравниванием давлений. Отметим, что при адиабатической разгрузке продуктов взрыва до начального давления в воздухе количество энергии, переданной воздуху, составило бы 93,7%. В методе 1 сильно искажаются профили давления и плотности компонентов. Вблизи фронта УВ при малых концентрациях продуктов взрыва давление в них оказывается приблизительно в 20 раз выше начального и плотность также превышает начальную. Очевидно, что из-за разгрузки давление и плотность в продуктах взрыва должны везде иметь значения, меньшие заданных на момент времени $t = 0$.

Заключение

В работе рассмотрен безытерационный метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках в лагранжевой газодинамике, основанный на предположении об одинаковом приращении давлений компонентов, дополненный алгоритмом выравнивания давлений. Метод реализован и опробован в рамках комплекса программ ЭГАК на большом количестве тестовых задач. Расчеты показали, что он позволяет достичь большей точности по сравнению с первоначальным методом без выравнивания давлений. Сравнение с другими методами расчета смешанных ячеек показывает, что в расчетах смесей он также значительно точнее широко применяемого в настоящее время метода, основанного на предположении об одинаковой сжимаемости компонентов, и примерно соответствует по точности методу, основанному на предположении о равенстве давлений компонентов, од-

нако выигрывает у него простотой реализации и экономичностью.

Предложенный авторами алгоритм выравнивания давлений компонентов не нарушает баланс энергии независимо от способа определения среднего давления в смешанных ячейках. Для расчета газодинамических течений без учета каких-либо других физических процессов авторы данной работы рекомендуют способ, основанный на равенстве приращений давлений. Тем не менее предложенный в работе способ использования условия аддитивности внутренней энергии компонентов позволяет достаточно аккуратно проводить расчеты практически для любого способа определения среднего давления смешанной ячейки.

Предложенный алгоритм расчета газодинамики в смешанных ячейках является достаточно общим и может быть использован во многих расчетных методиках, основанных на методах, подобных методу концентраций.

Авторы выражают благодарность И. А. Еричевой и И. П. Тюриной за помощь при обработке результатов расчетов и оформлении работы.

Список литературы

1. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета двумерных осесимметричных газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных // Докл. АН СССР. 1984. Т. 276, № 4. С. 823—833.
2. Бондаренко Ю. А., Янилкин Ю. В. Расчет термодинамических параметров смешанных ячеек в газовой динамике // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 4. С. 12—25.

3. Харлоу Ф. Х. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967.
4. Жарова Г. В., Янилкин Ю. В. Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 3. С. 77–82.
5. Дарова Н. С., Дибиров О. А., Жарова Г. В., Шанин А. А., Янилкин Ю. В. Комплекс программ ЭГАК. Лагранжево-эйлерова методика расчета двумерных газодинамических течений многокомпонентной среды // Там же. 1994. Вып. 2. С. 51–58.

Статья поступила в редакцию 5.02.04.
