

УДК 519.6

## МЕТОД ЗАМЫКАНИЯ УРАВНЕНИЙ ЛАГРАНЖЕВОЙ ГАЗОДИНАМИКИ В СМЕШАННЫХ ЯЧЕЙКАХ, ОСНОВАННЫЙ НА РАВЕНСТВЕ СКОРОСТЕЙ КОМПОНЕНТОВ

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

Предлагается новый метод распределения дивергенции скорости смешанной ячейки по компонентам, основанный на выравнивании массовых скоростей компонентов после прохождения возмущений по гетерогенной смеси. На тестовых задачах исследуется точность результатов расчетов с использованием данного метода, дополненного алгоритмом выравнивания давлений компонентов.

### Введение

Использование эйлеровых и произвольно-лагранжево-эйлеровых (ALE) методов для ударноволновых течений многокомпонентной сплошной среды приобретает все больший вес из-за присущих им по сравнению с лагранжевыми методами преимуществ. Наиболее важными из них являются безавостность, более простая подготовка начальных данных, меньшая трудоемкость проведения расчетов и меньшая зависимость результатов от квалификации исполнителя расчетов.

Однако использование ALE-методов при всей их привлекательности сопряжено с рядом сложных проблем. Одной из таких проблем является аппроксимация уравнений лагранжевой газодинамики для многокомпонентной среды из-за появления так называемых смешанных ячеек, содержащих два и более компонентов. Смешанные ячейки в расчетах могут появляться в двух случаях: во-первых, при движении контактной границы по эйлеровой сетке и, во-вторых, если в задаче имеются зоны смешения разных веществ.

От решения указанной проблемы зависят эффективность и точность как составной части ALE-метода, отвечающей за расчет лагранжевой газодинамики, так и всего ALE-метода в целом.

Система уравнений газодинамики для многокомпонентной среды не замкнута, поэтому в смешанных ячейках приходится привлекать те или иные замыкающие соотношения. К основным методам распределения полной дивергенции ско-

рости смешанной ячейки по компонентам можно отнести методы, использующие предположения равенства дивергенций компонентов [1], давлений компонентов [2], приращений давлений компонентов [3] с безытерационным алгоритмом выравнивания давлений [4], а также метод, основанный на распаде разрыва [5].

Отметим, что приведенные методы замыкания имеют вполне конкретные физические обоснования. Равенство дивергенций компонентов корректно при близких сжимаемостях компонентов. Равенство давлений и равенство приращений давлений с алгоритмом выравнивания давлений отражают происходящий в действительности процесс релаксации давлений после прохождения по гетерогенной смеси волн сжатия и разрежения. В методе, основанном на распаде разрыва, который возникает при появлении по каким-либо причинам различия в давлениях компонентов, также происходит выравнивание давлений компонентов.

В настоящей работе предлагается новый метод распределения дивергенции скорости смешанной ячейки по компонентам, основанный на таком физическом явлении, как выравнивание массовых скоростей компонентов после прохождения возмущений по гетерогенной смеси. Рассмотрение данного метода производится в рамках методики ЭГАК [6], в которой уже реализовано большинство из описанных выше методов. Отметим, что метод, основанный на распаде разрыва, реализован в методике Д [5], использующей чисто лагранжевы координаты, и не приме-

нялся в расчетах в эйлеровых или лагранжево-эйлеровых переменных.

### Описание метода замыкания

**Основные уравнения многокомпонентной газодинамики.** Предполагается, что в счетной области может быть несколько компонентов (веществ) с различными уравнениями состояния (УРСами). При этом границы веществ могут не совпадать с линиями счетной сетки. Более того, в области возможно наличие гетерогенных смесей, в которых границы между веществами практически невозможно установить.

Используется односкоростная модель многокомпонентной среды, каждый компонент которой выделяется полным набором термодинамических параметров: плотностью, удельной внутренней энергией и объемной долей (концентрацией).

Скорость  $\vec{u}$  определена в узлах счетной сетки. Скалярные величины для каждого компонента: плотности  $\rho_i$ , удельные внутренние энергии  $e_i$ , давления  $P_i$ , объемные концентрации  $\beta_i = V_i/V$  ( $i = 1, \dots, K$  — номер компонента), а также давление  $P$  для среды в целом определены в центрах ячеек.

Исходная система дифференциальных уравнений многокомпонентной газодинамики имеет следующий вид:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \text{grad } P; \quad (1)$$

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \text{div } \vec{u}_i; \quad (2)$$

$$\frac{d\beta_i}{dt} = \beta_i (\text{div } \vec{u}_i - \text{div } \vec{u}); \quad (3)$$

$$\frac{de_i}{dt} = -\frac{P_i}{\rho_i} \text{div } \vec{u}_i; \quad (4)$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{u}. \quad (5)$$

Уравнения (1)—(5) замыкаются УРСами компонентов среды

$$P_i = P_i(\rho_i, e_i). \quad (6)$$

Уравнение (3) является следствием уравнения (2), оно приведено только для того, чтобы подчеркнуть, что в случае многокомпонентной среды объемные концентрации тоже должны быть определены на новый момент времени.

При численной реализации системы в уравнение (1) к давлению добавляется счетная вязкость  $q$  для среды в целом, а в уравнение (4) — счетная вязкость компонента  $q_i$ .

В настоящей работе рассматриваются лишь проблемы, связанные с расчетом смешанных ячеек, поэтому разностные уравнения приводятся ниже только в необходимом объеме (например, опускаются все детали пространственной аппроксимации дифференциальных операторов).

Как указывалось выше, система (1)—(6) не замкнута, в частности, в ней не определены среднее давление  $P$ , дивергенции компонентов  $\text{div } \vec{u}_i$  (здесь и в дальнейшем под дивергенцией понимается дивергенция скорости), искусственные вязкости компонентов  $q_i$  и искусственная вязкость  $q$  для ячейки в целом. Для замыкания системы необходимы дополнительные предположения относительно состояния смеси в ячейках.

Предлагаемый ниже метод распределения полной дивергенции смешанной ячейки по компонентам основан на равенстве массовых скоростей компонентов после прохождения малого возмущения:

$$u_i = u_j. \quad (7)$$

### Определение дивергенций компонентов.

При малых возмущениях модуль дивергенции компонентов равен

$$|\text{div } u_i| \approx \left| \frac{\Delta \rho_i}{\rho_i \tau} \right| \approx \left| \frac{\Delta p_i}{c_i^2 \rho_i \tau} \right| \approx \left| \frac{\rho_i c_i u_i}{c_i^2 \rho_i \tau} \right| = \left| \frac{u_i}{c_i \tau} \right|, \quad (8)$$

где  $u_i$  — массовая скорость компонента в возмущении;  $c_i$  — скорость звука в  $i$ -м веществе;  $\tau$  — шаг по времени;  $i$  — номер компонента. В предположении, что выполнено условие (7), из (8) следует, что  $\text{div } u_i \sim 1/c_i$ , или

$$\text{div } u_i = \frac{B}{\rho c_i},$$

что вместе с условием аддитивности объемов

$$\sum_i \beta_i \text{div } u_i = \text{div } u$$

составляет замкнутую систему. Решение этой системы имеет вид

$$\text{div } u_i = \xi_i \text{div } u, \quad (9)$$

где

$$\xi_i = \frac{1}{c_i \sum_k \frac{\beta_k}{c_k}}.$$

Дополнив метод (9) безытерационным алгоритмом выравнивания давлений, описанным в работе [4], получим следующую формулу для определения дивергенций компонентов:

$$\operatorname{div} u_i = \xi_i \operatorname{div} u + \frac{\Delta P_i}{\tau \rho_i c_i^2},$$

где

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

$\bar{P}$  — среднее давление в ячейке, при этом  $\sum_i \frac{\Delta P_i}{\tau \rho_i c_i^2} = 0$ . Множитель  $\frac{c\tau}{h}$ , равный отношению временного шага к характерному для данной смешанной ячейки времени выравнивания давлений  $h/c$  ( $c$  — средняя скорость звука;  $h$  — характерный размер ячейки), определяет долю от разницы давлений компонентов, на которую произойдет выравнивание этих давлений за один временной шаг. Это означает, что давления компонентов не выравниваются за один временной шаг, так как возникшая по каким-либо причинам разница их значений релаксирует не мгновенно, а с указанным выше характерным временем, которое в два и более раз может превышать величину шага по времени.

**Определение среднего давления в ячейке.** Кроме дивергенций компонентов, в каждой смешанной ячейке необходимо также определить среднее давление для аппроксимации уравнения движения (1). Формула для его вычисления получается из указанных выше замыкающих соотношений с использованием условия аддитивности энергий компонентов.

Среднее давление определяется по формуле

$$\bar{P} = \sum_i \psi_i P_i.$$

Здесь  $\psi_i$  — некоторая функция, для определения которой привлекается условие аддитивности энергий компонентов, имеющее вид

$$\Delta e = \sum_i \alpha_i \Delta e_i, \quad (10)$$

где  $\alpha_i$  и  $\Delta e_i$  — соответственно массовая концентрация и изменение удельной внутренней энергии компонента;  $\Delta e$  — изменение энергии всей ячейки.

Как показано в работе [3], в общем случае неравных давлений можно удовлетворить условию (10) при

$$\psi_i = \beta_i \xi_i.$$

### Определение искусственной вязкости.

Как для компонентов, так и для ячейки в целом определение искусственной вязкости производится по тем же формулам, что и для метода 3, описанного в [3], т. е. полагается

$$q_i = k \rho_i (h \operatorname{div} \vec{u})^2, \quad k = 2;$$

$$q = \sum_i \psi_i q_i.$$

### Тестовые расчеты

**Задача 1. Точечный взрыв.** Рассматривается задача Седова о сферически-симметричном движении газа, возникающем в результате взрыва в однородном веществе без противодействия. Задача взята из работы [7]. Расчеты проводились в постановке, описанной в работе [5], в которой также приводятся результаты сравнения различных методов замыкания термодинамического состояния компонентов в смешанных ячейках. При этом использовалась лагранжева счетная сетка с одной смешанной ячейкой на фронте ударной волны (УВ).

Расчеты проводились с использованием и без использования алгоритма выравнивания давлений компонентов. В расчете без выравнивания давлений фронт УВ в момент времени  $t = 3,5$  располагается на отметке 13,25 (теоретическое значение 14,32), т. е. погрешность составляет  $\sim 10\%$ . В расчете с алгоритмом выравнивания давлений фронт УВ оказывается на расстоянии 14,4, погрешность данного расчета меньше 1%.

**Задача 2. Установление термодинамического равновесия без газодинамического движения.** Постановка задачи взята из работы [4]. Имеется область, в которой задана смесь двух покоящихся веществ со следующими начальными данными:  $\rho_0 = 1,25$ ;  $e_0 = 0,2$ ;  $\beta_0 = 0,5$  для вещества 0;  $\rho_1 = 50$ ;  $e_1 = 50$ ;  $\beta_1 = 0,5$  для вещества 1. УРС обоих веществ соответствует идеальному газу с  $\gamma = 5/3$ . Таким образом, давления веществ в каждой ячейке различаются, и через некоторое время они должны прийти в равновесное состояние, при этом пространственное движение отсутствует. Это тест на "работу" алгоритма выравнивания давлений, а именно выясняется, как будет происходить выравнивание при отсутствии каких-либо других процессов.

На рис. 1 приведены графики зависимостей давлений компонентов, а на рис. 2 — плотностей

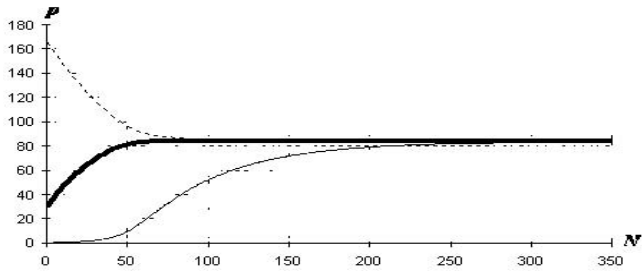


Рис. 1. Зависимости давлений компонентов и среднего давления от числа шагов: — — вещество 0; - - - — вещество 1; — — среднее значение

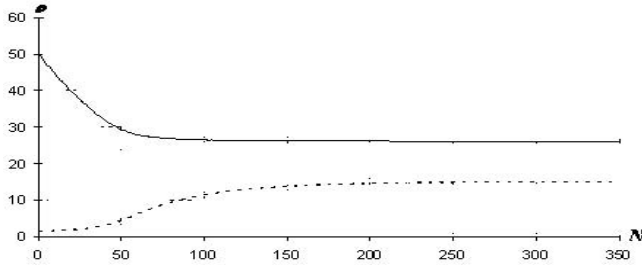


Рис. 2. Зависимости плотностей компонентов от числа шагов: - - - — вещество 0; — — вещество 1

компонентов от числа счетных шагов. Давления компонентов меняются со временем и "выходят" приблизительно на одно и то же значение, равное среднему давлению. Исходя из законов сохранения энергии, массы и объема, можно показать, что для гетерогенной смеси веществ с УРСом, описывающим идеальный газ с постоянной теплоемкостью, среднее давление после выравнивания давлений компонентов будет равно

$$\bar{P} = \beta_{00} P_{00} + \beta_{10} P_{10}, \quad (11)$$

где используются объемные концентрации и давления компонентов на начальный момент времени (до выравнивания). При этом выражение (11) не зависит от способа замыкания уравнений газодинамики для расчета термодинамических величин компонентов.

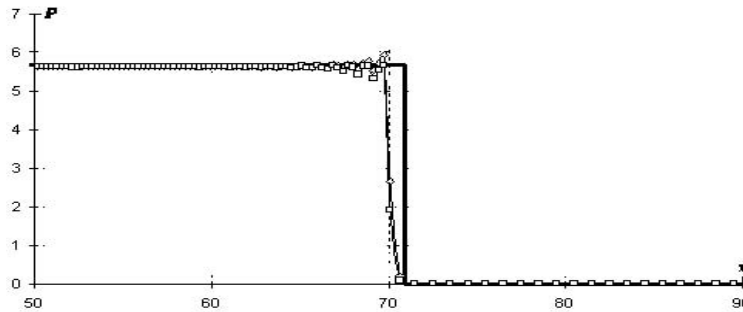


Рис. 3. Профили давления в задаче 3 на момент времени  $t = 25$ :  $\diamond$  — для вещества 0;  $\square$  — для вещества 1; — — аналитическое решение

**Задача 3. Прохождение УВ по смеси двух газов.** Постановка задачи взята из работы [3]. В области  $0 < x < 100$  имеется смесь двух идеальных газов:  $\rho_0 = 1$ ;  $e_0 = 0$ ;  $\beta_0 = 0,5$ ;  $\gamma = 3$  для вещества 0;  $\rho_1 = 1$ ;  $e_1 = 0$ ;  $\beta_1 = 0,5$ ;  $\gamma = 1,2$  для вещества 1. На левой границе задана постоянная скорость  $u_0 = 2$ . Вся область разбивается равномерно на 100 ячеек. Расчеты проводились в лагранжевой постановке.

По смеси газов идет УВ с массовой скоростью  $u_0$ . На фронте УВ должны достигаться максимальные сжатия для каждого газа в отдельности, т. е.  $\rho'_0 = 2$  для одного газа и  $\rho'_1 = 11$  для другого при условии отсутствия адиабатического обмена энергиями между газами. Исходя из этих ожидаемых результатов, по известным для сильной УВ соотношениям можно оценить плотность и давление за фронтом УВ и скорость ее распространения:

$$\bar{\rho} = \frac{\beta_0 \rho_0 + \beta_1 \rho_1}{\beta_0 \frac{\rho_0}{\rho'_0} + \beta_1 \frac{\rho_1}{\rho'_1}}; \quad P_{\text{фр}} = (\bar{\gamma} + 1) \frac{\bar{\rho}_0 u^2}{2};$$

$$D = (\bar{\gamma} + 1) \frac{u}{2}.$$

Здесь  $\bar{\rho}_0$  — средняя плотность невозмущенной смеси;  $\bar{\gamma} = \frac{\bar{\rho} + \bar{\rho}_0}{\bar{\rho} - \bar{\rho}_0}$  — средняя адиабатическая постоянная. После подстановки численных значений получаем  $\bar{\rho} = 3,385$ ;  $D = 2,836$ ;  $P_{\text{фр}} = 5,672$ .

Результаты расчета в сравнении с аналитическими решениями на момент времени  $t = 25$  представлены на рис. 3 в виде давлений компонентов; среднее давление практически совпадает с ними. На рис. 4 — аналогичные профили для плотностей компонентов. Из рисунков следует, что расчетные значения этих величин близки к их теоретическим значениям.

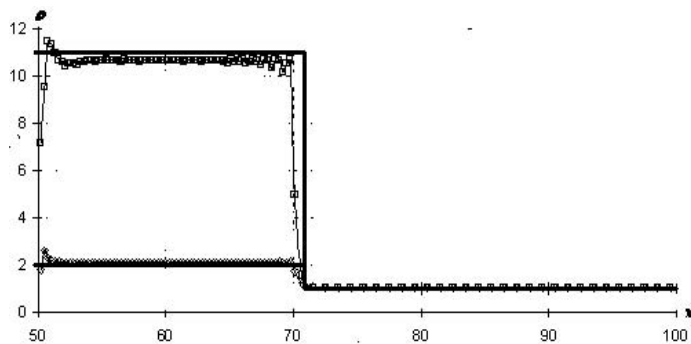


Рис. 4. Профили плотности в задаче 3 на момент времени  $t = 25$ :  $-\diamond-$  — для вещества 0;  $-\square-$  — для вещества 1;  $—$  — аналитические решения для веществ 0 и 1

**Задача 4.** *Прохождение УВ по среде, состоящей из гетерогенных структур.* Постановка задачи взята из работы [8]. Рассматривается двумерная задача в плоской постановке о прохождении УВ по гетерогенной среде, состоящей из цилиндров, заполненных жидкостью. Счетная область  $0 < x < 220$  состоит из стальных цилиндров ( $R_1 = 3,5$ ;  $R_2 = 5,5$ ), заполненных жидкостью; в промежутках между цилиндрами находится вакуум. УВ формируется постоянным давлением  $P = 50$ , приложенным к правой границе области. УРСы жидкости и стали берутся в форме Ми–Грюнайзена со следующими параметрами: сталь —  $\rho = 7,8$ ;  $n = 5$ ;  $\gamma = 2,666$ ;  $c = 5,1$ ; жидкость —  $\rho = 1,3$ ;  $n = 7$ ;  $\gamma = 1,4$ ;  $c = 1,5$ .

В работе [8] приводятся результаты расчетов этой задачи в нескольких постановках, в том числе результаты прямого двумерного моделирования. Задача также может быть смоделирована в одномерном приближении заменой набора цилиндров, жидкости и вакуума смесью, содержащей усредненные по пространству объемные концентрации указанных компонентов. В рабо-

те [8] было показано, что вакуум может быть заменен пористой сталью или жидкостью, причем результаты расчетов от этого не зависят.

В настоящей работе был проведен расчет одномерной задачи. Задавалась прямоугольная область  $0 < x < 220$  с равномерной счетной сеткой из 440 ячеек. В области находилась смесь жидкости ( $\beta_0 = 0,37$ ;  $e_0 = 0$ ) с начальной плотностью  $\rho_0 = 1,3$  и пористой стали ( $\beta_1 = 0,63$ ;  $e_1 = 0$ ) с начальной плотностью  $\rho_1 = 6,65$ . На левой границе задавалось постоянное давление  $P = 50$ . Расчет проведен в лагранжевой постановке.

На рис. 5 приводятся расчетные профили среднего давления и давления компонентов. При использовании нового метода вблизи фронта УВ давления компонентов отличаются от среднего давления. Однако с помощью процедуры выравнивания давлений достаточно быстро давления компонентов выходят на среднее давление, равное заданному на границе.

На рис. 6 изображена  $(x, t)$ -диаграмма движения фронта УВ, полученная с использованием предлагаемого метода, которая сравнивается с

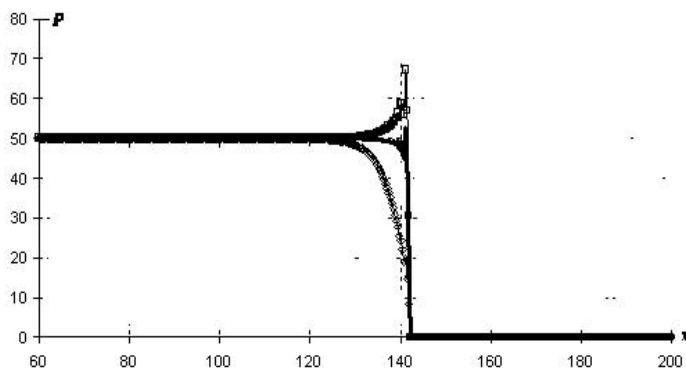


Рис. 5. Профили давления в задаче 4 на момент времени  $t = 25$ :  $-\diamond-$  — жидкость;  $-\square-$  — сталь;  $—$  — среднее давление

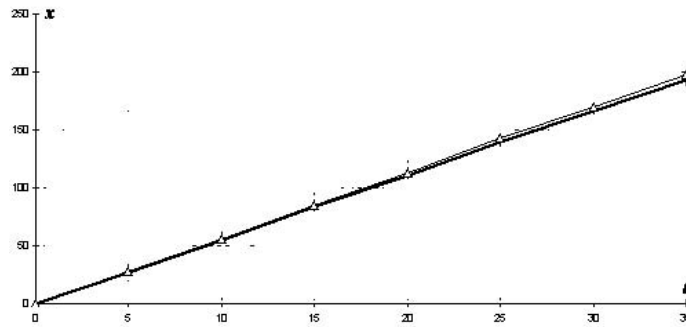


Рис. 6.  $(x, t)$ -диаграмма фронта УВ в задаче 4:  $-\Delta-$  — расчет по новому методу;  $—$  — расчет из работы [8]

результатами прямого двумерного моделирования из работы [8]. Из этого рисунка следует, что скорости распространения УВ хорошо согласуются между собой.

### Заключение

Предложен новый метод замыкания уравнений газодинамики в лагранжевых координатах для смешанных ячеек с гетерогенной смесью веществ, содержащей два и более компонентов. Метод основан на равенстве массовой скорости компонентов после прохождения слабой волны. С помощью тестовых расчетов показано, что данный метод, дополненный алгоритмом выравнивания давлений компонентов, дает приемлемую точность результатов. Определение точности предложенного метода по сравнению с другими аналогичными методами, в частности, на примере распространения слабых волн в гетерогенных средах, будет сделано в следующей работе авторов.

### 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. 278, № 4. С. 829—833.
2. Харлоу Ф. Х. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967.
3. 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.
4. Гончаров Е. А., Янилкин Ю. В. Новый метод расчёта термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках // Там же. 2004. Вып. 3. С. 16—30.
5. Делов В. И., Садчиков В. В. Сравнение некоторых моделей для расчета термодинамических параметров неоднородных по составу лагранжевых ячеек // Там же. 2005. Вып. 1. С. 57—70.
6. 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.
7. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Часть 1. Требования к тестам. Тесты 1—7 // Там же. 1991. Вып. 2. С. 3—9.
8. Жарова Г. В., Янилкин Ю. В. Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках // Там же. 1993. Вып. 3. С. 77—82.