

УДК 519.6

**МОДЕЛИ ЗАМЫКАНИЯ УРАВНЕНИЙ
ЛАГРАНЖЕВОЙ ГАЗОДИНАМИКИ И УПРУГОПЛАСТИКИ
В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ЯЧЕЙКАХ.
ЧАСТЬ 1. ИЗОТРОПНЫЕ МОДЕЛИ**

Ю. В. Янилкин
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлена первая часть работы, посвященной обзору моделей замыкания уравнений лагранжевой газовой динамики и упругопластики в многокомпонентных (смешанных) ячейках, содержащих два и более компонентов. В этой части приводятся описания изотропных моделей замыкания и дано краткое изложение методов, основанных на этих моделях, многие из которых реализованы в методике ЭГАК. В силу большого количества моделей и методов результаты их тестирования приводятся во второй части работы.

Ключевые слова: многокомпонентная газовая динамика и упругопластика, разностная схема, смешанная ячейка, модели замыкания, методика ЭГАК.

Введение

Многокомпонентные (далее *смешанные*) ячейки в лагранжево-эйлеровых (ALE) или эйлеровых методах содержат в себе различные вещества, разделенные контактными границами (КГ), или смесь веществ. Не будем делать разницы между этими двумя типами методов, имея в виду, что в обоих случаях необходимо решать уравнение адвекции, в том числе в смешанных ячейках. Многие из этих методов при аппроксимации уравнений используют двухэтапный подход. На первом этапе рассматриваются уравнения газовой динамики или упругопластики без конвективных членов, т. е. аппроксимируются члены уравнений, содержащие давление и напряжения. Учет конвективного переноса осуществляется на втором этапе. Из множества подобных методов ниже будем рассматривать лишь ALE-методы, содержащие лагранжеву газовую динамику и упругопластику в чистом виде, и именно проблема смешанных ячеек на первом этапе исследуется в данной работе. Отметим, что смешанные ячейки могут содержаться даже в чисто лагранжевых методиках, так что проблемы, связанные с их наличием, должны решаться и в этом случае.

Далее будем употреблять термин *лагранжева газовая динамика* (или для краткости *газодинамика*), имея в виду, что в случае упругопластики сюда включаются члены уравнений, связанные с дивергентом тензора напряжений. Исторически рассматривалось несколько подходов к проблеме смешанных ячеек в газодинамике, связанных с выделением веществ в таких ячейках. В данной работе рассматривается только односкоростная модель среды. Подход, предложенный в [1–3], который стал главенствующим в настоящее время, основан на полном термодинамическом выделении веществ¹. Далее будем использовать термин *компонент*, имея в виду, что КГ математически может

¹На ранних этапах развития эйлеровых методов использовалось меньшее количество параметров для выделения компонентов, например, в [4, 5] — массовые доли компонентов и средняя энергия среды. Соответственно брались другие замыкающие соотношения, которых в этом случае требуется на единицу больше, чем при полном выделении компонентов. Были рассмотрены модели *isobar-isothermal*, *isobar-iso δQ* , которые при определенных успехах их использования, тем не менее, в общем случае не позволяли получать приемлемого по точности результата.

разделять одинаковые вещества; кроме того, одним из компонентов может быть вакуум и (или) абсолютно твердое тело.

В газодинамике термодинамическими параметрами являются плотность, внутренняя энергия и давление. Если моделируются другие процессы, то количество параметров увеличивается: например, для упругопластики это еще компоненты девиатора тензора напряжений. Кроме указанных параметров, в каждой смешанной ячейке задаются объемные доли компонентов, по которым может быть определено геометрическое положение КГ внутри смешанной ячейки, используемое в некоторых моделях замыкания².

Данный подход выделения компонентов среды позволяет моделировать смешанные ячейки, содержащие не только компоненты, разделенные КГ, но и смеси компонентов. При использовании смешанных ячеек для уравнений газодинамики необходимы дополнительные замыкающие соотношения, которые по сути определяют внутриячеечное (подсеточное) движение компонентов. Для большинства известных моделей достаточно информации об объемных (или массовых) долях компонентов и их термодинамическом состоянии [1, 13–26]. Такие модели можно разделить на два класса по количеству вычислительных этапов³.

Первый класс основан на одноэтапном введении моделей замыкания; второй является двухэтапным, в котором второй этап является дополнением к первому и на нем осуществляется дополнительное взаимодействие компонентов внутри смешанной ячейки (так называемое подсеточное взаимодействие).

Ниже будем употреблять термины *модель* и *метод*, зачастую не делая между ними разницы. Здесь надо иметь в виду, что под методом понимается алгоритм, реализованный в виде программы, в основе которого лежит некоторая физическая модель.

Основные *одноэтапные* методы замыкания следующие:

- 1) на основе модели равенства давлений компонентов (метод P) [13];
- 2) метод Типтона [14];
- 3) метод Делова [15], основанный на модели решения акустической задачи Римана (на этой модели основаны разработанные позже методы DSS [22] и KSR [24]);
- 4) K&S, основанный на решении локальной задачи Римана [16]. Данный метод не описывается в настоящей работе в силу присущей ему непрактичности, однако для сравнения приводятся результаты тестовых расчетов;
- 5) на основе равенства дивергенций скорости компонентов ($\nabla \cdot \mathbf{u}$) [1];
- 6) на основе равенства приращений давлений компонентов (Δp) [18];
- 7) на основе равенства массовых скоростей компонентов после прохождения слабой волны (Δu) [19].

Отметим, что первые четыре метода и модели, на основе которых они разработаны, являются релаксационными относительно давления. Методы 5–7, предложенные в нескольких работах, — нерелаксационные.

Двухэтапные модели замыкания включают в себя этап подсеточного взаимодействия компонентов, поэтому на первом этапе здесь могут быть использованы лишь модели 5–7. Подобный подход для моделей замыкания был предложен независимо в [20] и [21]. Метод подсеточной релаксации давлений (PR — Pressure Relaxation) из [20] является универсальным и используется совместно с моделями 5–7. Полученные сочетания методов далее обозначаются соответственно как 5+PR, 6+PR и 7+PR.

Все указанные выше методы не используют информацию о положении КГ внутри смешанной ячейки. Однако имеются такие, для которых эта информация существенна. Впервые подобный метод был предложен в [21], затем он развивался в [24, 25] (метод IA-SSD — Interface-Aware Sub-Scale Dynamics) для случая нескольких компонентов в ячейке. Это двухэтапный метод, на первом

²Задача определения положения КГ по полю объемных долей компонентов выходит за рамки данного исследования, это отдельная проблема, которой посвящены специальные работы (см., например, [2–4, 6–12]).

³При классификации и описании моделей ограничимся случаем двух компонентов в ячейке, хотя многие формулы ниже пригодны и для большего их количества. Часть моделей, разработанных специально для случая нескольких компонентов в ячейке, остаются вне данного обзора.

этапе которого используется модель 5 ($\nabla \cdot \mathbf{u}$). На втором этапе происходит движение КГ между компонентами по нормали к ней под действием индивидуальных давлений компонентов. При этом положение КГ восстанавливается по объемным долям, а ее движение осуществляется на основе решения акустической задачи Римана (модели 3).

Отметим одно общее свойство (вследствие принятых в моделях предположениях) всех указанных выше методов замыкания. В них движение происходит по нормали к КГ (определенной или воображаемой) независимо от ее положения по отношению к вектору скорости. По сути они являются изотропными в том смысле, что сжатия (расширения) компонентов полагаются одинаковыми во всех направлениях. Можно отметить еще ряд методов замыкания [27–32], близких к указанным выше. Данное свойство методов вполне приемлемо в большинстве приложений, однако имеются задачи, когда оно приводит к существенной погрешности при моделировании.

В [33] предложена анизотропная модель замыкания (АСМ-1 — Anisotropic Closure Model), представляющая собой дальнейшее развитие моделей 5–7. Она обладает всеми достоинствами методов 5–7, являющихся основными для методики ЭГАК [34], при моделировании течений, в которых приемлемо предположение об изотропности, и имеет существенное преимущество перед ними при моделировании более сложных течений. В данной работе описана и другая анизотропная модель — АСМ-2, разработанная автором совместно с В. Ю. Колобяниным и О. О. Топоровой и предложенная в [33].

Кроме основного метода замыкания, в смешанных ячейках необходимы дополнительные соотношения, касающиеся способов вычисления давления, искусственной вязкости и скорости звука для всей ячейки, а также искусственной вязкости для компонентов. Способы вычисления искусственной вязкости компонентов и скорости звука ячейки рассмотрены соответственно в [35] и [19].

Данная работа посвящена описанию и сравнительному теоретическому и численному анализу указанных выше методов замыкания. Она состоит из двух частей. В первой части приводится описание изотропных моделей. Вторая часть [36] содержит описание анизотропных моделей, способов определения искусственной вязкости и скорости звука в смешанных ячейках и результаты тестовых расчетов по всем методам. Кроме того, во второй части приводится алгоритм расчета смешанных ячеек, содержащих вакуум.

1. Исходные уравнения многокомпонентной упругопластики

Исходная система уравнений, решаемая на лагранжевом этапе, для двумерных упругопластических течений имеет следующий вид:

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T}; \quad (1)$$

$$\frac{d\rho_\xi}{dt} = -\rho_\xi \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi; \quad (2)$$

$$\frac{d\beta_\xi}{dt} = \beta_\xi (\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi - \nabla \cdot \mathbf{u}); \quad (3)$$

$$\frac{de_\xi}{dt} = \frac{1}{\rho_\xi} \text{Sp}(\mathbf{T}_\xi \mathbf{D}_\xi); \quad (4)$$

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

Здесь $\mathbf{u}(u_x, u_y)$ — скорость; ρ — плотность; \mathbf{T} — тензор напряжений; \mathbf{D} — тензор скоростей деформации; e — удельная внутренняя энергия; β — объемная доля вещества ($\beta_\xi = V_\xi/V$); $\mathbf{r}(x, y)$ — радиус-вектор. Индекс $\xi = \overline{1, N}$ означает номер компонента в ячейке; отметим, что в выражении для дивергенции скорости (для краткости далее просто дивергенции) он относится не к скорости, а к дивергенции в целом.

Уравнение (3) можно получить из уравнения неразрывности (2), подставив вместо плотности компонента ее выражение в виде $\rho_\xi = M_\xi/V_\xi$, (M_ξ и V_ξ — масса и объем компонента в ячейке), а затем вместо V_ξ — выражение $V_\xi = \beta_\xi V$.

Тензоры напряжений и скоростей деформаций задаются выражениями

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{xx} & T_{xy} & 0 \\ T_{yx} & T_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & T_{\varphi} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_{xx} & d_{xy} & 0 \\ d_{yx} & d_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & d_{\varphi} \end{pmatrix}.$$

Тензор напряжений представляется суммой шаровой части (давление P) и девиатора $\mathbf{S}(S_{xx}, S_{yy}, S_{xy}, S_{\varphi})$. Компоненты девиатора определяются соотношением $S_{ij} = T_{ij} + \delta_{ij}P$. Для компонентов среды определяются уравнения состояния (УРСы)

$$p_{\xi} = P_{\xi}(\rho_{\xi}, e_{\xi})$$

и уравнения, выражающие зависимость девиатора \mathbf{S}_{ξ} от тензора скоростей деформации \mathbf{D}_{ξ} :

$$f_{\xi}(\mathbf{S}_{\xi}, \mathbf{D}_{\xi}) = 0. \quad (6)$$

Конкретный вид формулы (6) определяется принятой моделью среды.

В методике ЭГАК используется метод расщепления по физическим процессам, в котором величины, изменяющиеся за счет действия давления, аппроксимируются на газодинамическом этапе, а остальные — на другом этапе вычислений. В описываемой методике компонентами могут быть как различные материалы со своими УРСами, так и вакуум.

2. Конечно-разностная аппроксимация уравнений упругопластики

В методике ЭГАК счетная сетка — четырехугольная, скорость определена в ее узлах, а остальные величины ($\rho_{\xi}, \beta_{\xi}, e_{\xi}, p_{\xi}, \mathbf{S}_{\xi}$) — в центрах ячеек и для каждого компонента в отдельности. Отметим также, что при программной реализации в системе (1)—(5) вместо давления используется сумма давления и искусственной (счетной) вязкости: $p \rightarrow p + q$ и $p_{\xi} \rightarrow p_{\xi} + q_{\xi}$ соответственно для среды в целом и для компонентов. Известными величинами (основными переменными) в системе (1)—(5) в двумерном случае являются $u_x, u_y, \rho_{\xi}, \beta_{\xi}, e_{\xi}, p_{\xi}, \mathbf{S}_{\xi}$, а величины $p, \mathbf{S}, q, q_{\xi}, \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}, \mathbf{D}_{\xi}$ должны быть определены. Далее в формулах нижний индекс означает дискретизацию по пространству и номер компонента (ξ) в случае нескольких компонентов, верхний индекс применяется для дискретизации по времени. Ячеечные величины обозначаются полуцелыми индексами (например, $i + 1/2, j + 1/2$), узловые — целыми (i, j). Если в формуле из контекста ясно, что индексы для всех величин совпадают, то они опускаются. Массы ячеек в лагранжевой газодинамике в процессе счета не меняются, поэтому в их обозначениях нет временного индекса. Опускается также индекс суммирования ξ .

Разностная схема для упругопластики. Пусть известны все основные величины на момент времени t^n и необходимо определить их значения на момент времени $t^{n+1} = t^n + \tau$, где τ — временной шаг, выбираемый из условия устойчивости разностной схемы (в данной работе этот вопрос не рассматривается). Запишем разностную схему для случая многокомпонентной среды.

Для первого полушага (определение спрогнозированного давления)

$$\mathbf{r}^{n+1/2} = \mathbf{r}^n + \tau \mathbf{u}^n; \quad (7)$$

$$V_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} = V \left(\mathbf{r}_{i+1, j+1}^{n+1/2}, \mathbf{r}_{i, j+1}^{n+1/2}, \mathbf{r}_{i+1, j}^{n+1/2}, \mathbf{r}_{i, j}^{n+1/2} \right); \quad (8)$$

$$p_{\xi}^n = P \left(\rho_{\xi}^n, e_{\xi}^n \right); \quad (9)$$

$$\overline{\nabla \cdot \mathbf{u}^n} = \frac{V^{n+1/2} - V^n}{\tau V^n}; \quad (10)$$

$$p_{\xi}^{n+1/2} = p_{\xi}^n - \chi \rho_{\xi}^n (c_{\xi}^n)^2 \tau \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}^n}. \quad (11)$$

В уравнении (11) $\chi = 0,6$ (такое значение выбрано в [1]); c — скорость звука.

Для полного шага

$$M_{i,j} = 0,25 \sum_{\xi} (M_{\xi,i-1/2,j-1/2} + M_{\xi,i-1/2,j+1/2} + M_{\xi,i+1/2,j-1/2} + M_{\xi,i+1/2,j+1/2}), \quad M_{\xi} = \rho_{\xi} \beta_{\xi} V; \quad (12)$$

$$M_{i,j} \frac{\mathbf{u}_{i,j}^{n+1} - \mathbf{u}_{i,j}^n}{\tau} = \left(\overline{\nabla g^{n+1/2}} + \overline{\nabla \cdot \mathbf{S}^n} \right)_{i,j}, \quad (13)$$

$$\Rightarrow \mathbf{u}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{u}_{i,j}^n - \frac{\tau}{M_{i,j}} \left(\overline{\nabla g^{n+1/2}} + \overline{\nabla \cdot \mathbf{S}^n} \right)_{i,j}; \quad (14)$$

$$\mathbf{u}^{n+1/2} = \frac{\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n+1}}{2}; \quad (15)$$

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \tau \mathbf{u}^{n+1}; \quad (16)$$

$$V_{\xi}^{n+1} = V_{\xi}^n + \tau V_{\xi}^{n+1} \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}^{n+1}}; \quad (17)$$

$$\rho_{\xi}^{n+1} = \frac{M_{\xi}}{V_{\xi}^{n+1}}; \quad (18)$$

$$\beta_{\xi}^{n+1} = \frac{V_{\xi}}{V^{n+1}}; \quad (19)$$

$$e_{\xi}^{n+1} = e_{\xi}^n - \frac{\tau g_{\xi}^{n+1/2}}{\rho_{\xi}^n} \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}^{n+1/2}} + \frac{\tau}{\rho_{\xi}^n} \left[S_{\xi,xx}^n \overline{d_{\xi,xx}^{n+1/2}} + S_{\xi,yy}^n \overline{d_{\xi,yy}^{n+1/2}} + 2S_{\xi,xy}^n \overline{d_{\xi,xy}^{n+1/2}} - (S_{\xi,xx}^n + S_{\xi,yy}^n) \overline{d_{\xi,\varphi}^{n+1/2}} \right]. \quad (20)$$

В уравнении (20) $g_{\xi}^{n+1/2} = p_{\xi}^{n+1/2} + q_{\xi}^n$. Способы определения искусственной вязкости компонентов q_{ξ}^n рассматриваются в разд. 2 работы [36]. Надчеркивание сверху означает разностный аналог соответствующего оператора (полные формулы не приводятся, они общеизвестны). Далее надчеркивание использовать не будем, полагая, что все операторы являются разностными. Определение напряжений компонентов на новый момент времени, т. е. аппроксимация уравнения (6), не приводится, это выходит за рамки данной работы. Отметим только, что в эти уравнения входят компоненты тензора \mathbf{D}_{ξ} .

Формулы давления, вязкости и дивергента напряжений для ячейки в целом имеют следующий вид:

$$p^{n+1/2} = \sum \psi_{\xi} p_{\xi}^{n+1/2}; \quad q^n = \sum \psi_{\xi} q_{\xi}^n; \quad \mathbf{S}^n = \sum \psi_{\xi} \mathbf{S}_{\xi}^n, \quad (21)$$

где коэффициент ψ_{ξ} определяется принятой моделью замыкания (см. ниже).

Таким образом, в уравнениях (12)–(20) остались не определены величины $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$, ψ_{ξ} , q_{ξ} , \mathbf{D}_{ξ} . Для их вычисления необходимы те или иные замыкающие соотношения, являющиеся следствием различных предположений (моделей) относительно термодинамического состояния компонентов в смешанных ячейках.

При вводе замыкающих соотношений необходимо выполнить некоторые условия, вытекающие из законов сохранения.

Первое условие — это условие аддитивности объемов ("закон сохранения объема")

$$V = \sum V_{\xi}, \quad \text{или} \quad \sum \beta_{\xi} = 1,$$

следствием которого является соотношение

$$\Delta V = \sum \Delta V_{\xi}, \quad \text{или} \quad \sum \beta_{\xi} \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (22)$$

Естественным обобщением соотношения (22) является $\mathbf{D} = \sum \beta_{\xi} \mathbf{D}_{\xi}$, которое выполняется при

$$\mathbf{D}_{\xi} = \mathbf{D} \cdot \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}}{\nabla \cdot \mathbf{u}}. \quad (23)$$

Формула (23) используется для определения \mathbf{D}_ξ в уравнении (20) и при аппроксимации уравнения (6).

Второе условие — условие аддитивности энергий (закон сохранения энергии)

$$e = \sum \alpha_\xi e_\xi, \quad (24)$$

где массовая доля $\alpha_\xi = M_\xi/M$ определяется выражением

$$\alpha_\xi = \frac{\beta_\xi \rho_\xi}{\rho}, \quad \rho = \sum \beta_\xi \rho_\xi. \quad (25)$$

Условие (24) можно также записать для приращений удельных энергий:

$$\Delta e = \sum \alpha_\xi \Delta e_\xi, \quad (26)$$

где Δe_ξ относится к компоненту, а Δe — ко всей ячейке.

Кроме указанных двух условий для замыкания уравнений, необходимы дополнительные соотношения, которые вводятся следующим образом. Разностное уравнение энергии (20) для компонентов имеет вид

$$\Delta e_\xi = -\tau \frac{g_\xi^{n+1/2}}{\rho_\xi^n} \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^{n+1/2}. \quad (27)$$

Подставим в (26) вместо Δe_ξ выражение (27). Используя соотношение (25), а также справедливое для средней энергии ячейки соотношение $\Delta e = -\tau g^{n+1/2}/\rho^n (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2})$, получаем

$$-\frac{\tau}{\rho} g^{n+1/2} \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} = -\frac{\tau}{\rho} \sum \beta_\xi g_\xi^{n+1/2} \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^{n+1/2} + \sum \alpha_\xi \Delta e'_\xi, \quad (28)$$

где $\Delta e'_\xi$ обозначают дополнительные приращения внутренней энергии компонентов для обеспечения баланса энергии в ячейке.

Из (28) при использовании соотношений (21) и заданных способах получения $\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi$ можно находить значения $\Delta e'_\xi$.

При условии $g_\xi^{n+1/2} = g^{n+1/2}$ из (28) следует, что $\sum \alpha_\xi \Delta e'_\xi = 0$. Таким образом, этот член представляет собой добавки к внутренней энергии компонентов за счет процесса релаксации их давлений. Если релаксация давлений не используется, т. е. $\Delta e'_\xi = 0$, то способы определения ψ_ξ из (21) однозначно следуют из условий замыкания.

В общем случае неравных давлений условию (28) можно удовлетворить при выполнении некоторых условий, налагаемых на функцию ψ_ξ , — они рассматриваются в разд. 4.

3. Изотропные одноэтапные релаксационные методы замыкания

Единственного метода замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках, который был бы пригоден для всех течений, не существует. Применялось достаточно большое количество замыкающих соотношений, однако многие из них вышли из употребления и представляют лишь исторический интерес. Ниже рассматриваются наиболее часто используемые методы замыкания, значительная часть которых реализована в методике ЭГАК. Некоторые методы замыкания удобно будет вводить, рассматривая одномерную задачу, представленную на рис. 1. Ячейка $i - 1/2$ является сме-



Рис. 1. Расчетная сетка

шанной, содержащей два компонента, граница раздела обозначена точкой A . В зависимости от способа определения скорости в точке A можно получить тот или иной метод вычисления дивергенций (и плотностей) компонентов в смешанной ячейке.

3.1. Метод замыкания на основе модели равенства давлений компонентов. Метод 1 (см. список методов замыкания во Введении) использует предположение о равенстве давлений компонентов [1], а также дополнительно предполагается равенство искусственных вязкостей:

$$p_\xi = p; \quad q_\xi = q. \quad (29)$$

Метод 1 на основе модели (29), разработанный в методике ЭГАК, описан в [37].

В этом методе сначала вычисляется приращение энергии для всей ячейки

$$\begin{aligned} \Delta E &= \left(e^{n+1/2} - e^n \right) M = -\tau \frac{p^{n+1/2} + q^n}{\rho^n} \left(\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \right) M = \\ &= -\tau \left(p^{n+1/2} + q^n \right) \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} V^n = \left(p^{n+1/2} + q^n \right) \mu \Delta V, \end{aligned} \quad (30)$$

где $\mu = -\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \frac{V^n \tau}{\Delta V}$.

По аналогии с уравнением (30) можно записать уравнение для приращения энергий компонентов, добавив в обозначениях величин ΔV и ΔE соответствующий индекс компонента. Тогда, используя выражения (22) и (29), получаем следующую замкнутую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \Delta E_\xi &= \left(p^{n+1/2} + q^n \right) \mu \Delta V_\xi; \\ \Delta V &= \sum \Delta V_\xi; \\ p^{n+1/2} &= P \left(\frac{M_\xi}{V_\xi^n + \Delta V_\xi}, \frac{E_\xi + \Delta E_\xi}{M_\xi} \right). \end{aligned} \quad (31)$$

Система (31) содержит $2N + 1$ уравнение относительно $2N + 1$ неизвестной величины ΔV_ξ , ΔE_ξ и $p^{n+1/2}$ и может быть решена итерационными методами. После решения системы получаем новые значения удельных энергий и объемных долей компонентов:

$$e_\xi^{n+1/2} = e_\xi + \frac{\Delta E_\xi}{M_\xi}; \quad \beta_\xi^{n+1/2} = \frac{V_\xi + \Delta V_\xi}{V + \Delta V}.$$

К недостаткам этого метода следует отнести его затратность из-за необходимости использования итерационных методов для решения системы (31) при сложных УРСах. Нужно также отметить, что предположение о равенстве давлений может оказаться некорректным в задачах, связанных с энерговыделением на каждом счетном шаге.

3.2. Метод Типтона. Модель, лежащая в основе метода Типтона (модель 2), близка к модели 1. Рассмотрим метод 2 для разностной схемы, реализованной в [22] и слегка отличающейся от схемы (7)–(20). На первом полушаге вместо уравнения (7) используется уравнение $\mathbf{r}^{n+1/2} = \mathbf{r}^n + (\tau/2)\mathbf{u}^n$, а в уравнении (11) $\chi = 1,0$. Тогда

$$p_\xi^{n+1/2} = p_\xi^n - \rho_\xi^n (c_\xi^n)^2 \tau \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n. \quad (32)$$

В этом методе полагается, что давления компонентов на полушаге должны равняться среднему давлению $p^{n+1/2}$, а значит, требуется выполнение условия

$$p^{n+1/2} = p_\xi^{n+1/2} + R_\xi^{n+1/2}, \quad (33)$$

где значения $R_\xi^{n+1/2}$ отличаются для разных компонентов. Для определения этой величины используется следующее уравнение:

$$R_\xi^{n+1/2} = -\rho_\xi^n c_\xi^n h^n \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n}, \quad (34)$$

где h^n — характерный размер ячейки.

Уравнения (32)–(34) могут быть заключены в одном уравнении

$$p^{n+1/2} = p_\xi^n - \tilde{B}_\xi^n \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n, \quad \text{где } \tilde{B}_\xi^n \equiv (c_\xi^n)^2 \rho_\xi^n \tau \left(1 + \frac{h^n}{\tau c_\xi^n} \right). \quad (35)$$

Уравнения (35) вместе с условием (22) составляют замкнутую систему алгебраических уравнений с неизвестными $\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n$ и $p^{n+1/2}$. Как и в подразд. 3.1, система может быть решена. Для $\xi = 1, 2$ решение имеет вид

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n = \frac{(p_\xi^n - \bar{p}^n) + \bar{B}^n \nabla \cdot \mathbf{u}^n}{\tilde{B}_\xi^n}, \quad p^{n+1/2} = \bar{p}^n - \bar{B}^n \nabla \cdot \mathbf{u}^n, \quad (36)$$

где надчеркнутые члены означают средние значения величин:

$$\bar{p}^n \equiv \sum \frac{\beta_\xi^n p_\xi^n}{\tilde{B}_\xi^n} / \sum \frac{\beta_\xi^n}{\tilde{B}_\xi^n}; \quad \bar{B}^n \equiv \left(\sum \frac{\beta_\xi^n}{\tilde{B}_\xi^n} \right)^{-1}.$$

Из (36) следует выражение для изменений объемных долей

$$\Delta \beta_\xi^{n+1/2} = \beta_\xi^n \frac{p_\xi^n - \bar{p}^n}{\tilde{B}_\xi^n} + \beta_\xi^n \tau \left(\frac{\bar{B}^n}{\tilde{B}_\xi^n} - 1 \right) \nabla \cdot \mathbf{u}^n.$$

Чтобы получить значения величин на момент времени t^{n+1} , делается еще предположение, что приращения величин за полный шаг равны удвоенному приращению на полушаге, т. е.

$$\Delta \beta_\xi^{n+1} = 2\Delta \beta_\xi^{n+1/2} \quad \text{и} \quad \beta_\xi^{n+1} = \beta_\xi^n + 2\Delta \beta_\xi^{n+1/2}.$$

Разностное уравнение энергии для компонентов в ячейке имеет следующий вид:

$$e_\xi^{n+1} = \frac{e_\xi^n - p^{n+1/2} \Delta V_\xi^{n+1}}{M_\xi},$$

где $\Delta V_\xi^{n+1} = \Delta \beta_\xi^{n+1/2} V^{n+1}$.

3.3. Метод Делова. Метод 3 основан на модели решения акустической задачи Римана и предложен в [15]. Рассмотрим данный метод на примере одномерной задачи (см. рис. 1) с одной компонентой скорости u . Рассматривается следующая задача о распаде произвольного разрыва в смешанной ячейке в акустическом приближении:

$$\begin{aligned} p &= p_1^n, & u &= u_{i-1}^{n+1/2} & \text{при } m < m_A; \\ p &= p_2^n, & u &= u_i^{n+1/2} & \text{при } m \geq m_A, \end{aligned}$$

где m — масса (m_A — масса ячейки).

Система уравнений для величин, аналогичных инвариантам Римана вдоль опережающей и запаздывающей характеристик, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} u_A^{n+1/2} + \frac{p_A^{n+1/2}}{(\rho c)_1^n} &= u_{i-1}^{n+1/2} + \frac{p_1^n}{(\rho c)_1^n}; \\ u_A^{n+1/2} - \frac{p_A^{n+1/2}}{(\rho c)_2^n} &= u_i^{n+1/2} - \frac{p_2^n}{(\rho c)_2^n}. \end{aligned}$$

Решением данной системы является следующее выражение для скорости $u_A^{n+1/2}$:

$$u_A^{n+1/2} = \frac{u_{i-1}^{n+1/2} (\rho c)_1^n + u_i^{n+1/2} (\rho c)_2^n + p_1^n - p_2^n}{(\rho c)_1^n + (\rho c)_2^n}. \quad (37)$$

Выпишем теперь для рассматриваемой задачи уравнение неразрывности. Заменяя дивергенцию соответствующим выражением, получим следующее уравнение:

$$\frac{1}{\rho^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho^n} = \tau \frac{u_i^{n+1/2} - u_{i-1}^{n+1/2}}{M}, \quad (38)$$

где $M = \rho h$ — линейная масса ячейки.

Аналогичное уравнение для компонентов получаем, заменяя одну из скоростей на скорость в точке A и используя для плотности и массы соответствующий индекс. После подстановки выражения скорости (37) в уравнение неразрывности (38) получим

$$\frac{1}{\rho_{\{1\}2}^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho_{\{1\}1}^n} = \frac{\tau}{M_{\{1\}2}} \left[\frac{(\rho c)_{\{1\}2}^n}{(\rho c)_1^n + (\rho c)_2^n} (u_i^{n+1/2} - u_{i-1}^{n+1/2}) + \frac{p_1^n - p_2^n}{(\rho c)_1^n + (\rho c)_2^n} \right]. \quad (39)$$

Таким образом, в отличие от моделей 5–7 в этой модели релаксация давлений происходит без применения алгоритма выравнивания, так как изменение объема компонентов определяется и давлениями веществ.

Обобщение уравнения (39) в многомерном случае и без ограничения на количество компонентов можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{\rho_\xi^{n+1/2}} = \frac{1}{\rho_\xi^n} + \frac{\lambda_\xi^n}{\alpha_\xi^n} \left(\frac{1}{\rho^{n+1/2}} - \frac{1}{\rho^n} \right) + \frac{\omega \tau}{\beta_\xi^n \rho_\xi^n h^n} (p_\xi^n - p_\Sigma^n) \frac{1}{(\rho c)_\Sigma^n}, \quad (40)$$

где $p_\Sigma^n = \frac{1}{N} \sum p_\xi^n$; $(\rho c)_\Sigma^n = \frac{1}{N} \sum (\rho c)_\xi^n$; $\lambda_\xi^n = \frac{1}{N-1} \left(1 - \frac{(\rho c)_\xi^n}{\sum (\rho c)_\zeta^n} \right)$; h^n — характерный размер ячейки; $\omega \sim 1$ — коэффициент, вводимый для улучшения условий устойчивости разностной схемы. Из формулы (40) можно получить выражение для дивергенций, воспользовавшись соотношением (10):

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n = \frac{\lambda_\xi^n}{\beta_\xi^n} \nabla \cdot \mathbf{u}^n + \frac{p_\xi^n - p_\Sigma^n}{\beta_\xi^n h^n (\rho c)_\Sigma^n}. \quad (41)$$

Рассмотрим теперь величину λ_ξ^n . Изменение объема каждого компонента, как видно из уравнения (40), можно записать следующим образом:

$$V_\xi^{n+1} - V_\xi^n = \frac{\lambda_\xi^n}{\beta_\xi^n} (V^{n+1} - V^n) + \omega \tau \frac{p_\xi^n - p_\Sigma^n}{(\rho c)_\Sigma^n}.$$

Отсюда, используя условия (22), получаем, что должно выполняться равенство $\sum_{\xi=1}^N \lambda_{\xi}^n / \beta_{\xi}^n = 1$. Нетрудно видеть, что в одномерном случае при $\omega = 1$ и $N = 2$ уравнение (40) включает в себя уравнения (39).

Покажем, что величину $\lambda_{\xi}^n / \beta_{\xi}^n$ можно брать в качестве функции ψ_{ξ} ($\psi_{\xi} = \lambda_{\xi}^n / \beta_{\xi}^n$) для определения среднего давления по формуле (21). Рассмотрим случай равных давлений компонентов. Тогда второй член в выражении (41) равен нулю и для выполнения условия аддитивности энергий (28) достаточно положить в формуле (21)

$$\psi_{\xi} = \frac{\lambda_{\xi}^n}{\beta_{\xi}^n}. \quad (42)$$

В случае неравных давлений компонентов при использовании формулы (42) в правую часть уравнения энергии необходимо прибавить поправку $\Delta e'_{\xi}$, например, в виде

$$\Delta e'_{\xi} = \frac{\omega \tau}{\alpha_{\xi} \rho^n h^n} \frac{\psi_{\xi}}{(\rho c)_{\Sigma}^n} \sum_{\xi} p_{\xi}^n (p_{\xi}^n - p_{\Sigma}^n).$$

Замечание. Данный метод обеспечивает хорошие результаты в лагранжевых расчетах, когда в ячейке объемные доли компонентов не меняются и близки между собой, т. е. $0 \leq \beta_{\xi} \leq 1$. Однако в ALE-расчетах значения β могут находиться в пределах $0 < \beta < 1$ без ограничений, и при значениях β , близких к нулю, метод имеет заметную погрешность, поскольку формула (42) содержит деление на β . Физически эта ситуация связана с тем, что при расчете распада разрыва распространение волн происходит на определенное расстояние, которое должно быть меньше или равно размеру области, занимаемой каждым из компонентов. Так как выбор счетного шага осуществляется исходя из курантовского ограничения, то необходимое условие может быть нарушено, что приводит к нефизичным результатам (например, отрицательному значению нового объема компонента). Для устранения этого недостатка необходимы дополнительные ограничители для приращений объемов.

4. Изотропные одноэтапные нерелаксационные методы замыкания

Прежде чем перейти к рассмотрению нерелаксационных методов, запишем выражение для ψ_{ξ} из (21) в виде

$$\psi_{\xi} = \beta_{\xi} \lambda_{\xi}, \quad (43)$$

где величина λ_{ξ} определяется принятой моделью распределения полной дивергенции смешанной ячейки по компонентам из соотношения

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \lambda_{\xi} \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (44)$$

4.1. Метод замыкания на основе модели одинаковой сжимаемости компонентов. Метод 5 основан на наиболее часто используемой модели одинаковой сжимаемости компонентов, или по-другому, равенства дивергенций компонентов. Модель предложена в [1], она рассматривалась также в [38, 39] и имеет следующий формульный вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}.$$

Естественно, при этом предполагается также, что $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1}$.

Этот метод замыкания получается в предположении, что скорость в точке A (см. рис. 1) определяется линейной по расстоянию интерполяцией по скоростям в узлах сетки. В двумерном случае данный метод обобщается в предположении линейной по объему интерполяции.

В этом методе $\lambda_{\xi} = 1$, и формула (43) дает

$$\psi_{\xi} = \beta_{\xi},$$

что обеспечивает выполнение условия (28) при $\Delta e'_\xi = 0$. Тогда из (21)

$$p = \sum \beta_\xi p_\xi. \quad (45)$$

Таким образом, для решения системы (7)–(20) все величины определены.

Естественная для однородной смеси идеальных газов формула (45) имеет простую трактовку для гетерогенной смеси веществ. Рассмотрим смешанную ячейку из двух компонентов, имеющую объем V_0 (рис. 2). Отнесем p_ξ к центрам объемов компонентов. Если в качестве переменной использовать объем, то линейную интерполяцию давления по объему ячейки можно записать в виде

$$p(V) = 2 \frac{p_2 - p_1}{V_0} \left(V - \frac{V_1}{2} \right) + p_1. \quad (46)$$

Если в формулу (46) подставить значение $V = V_0/2$, то как раз получится формула (45). Легко показать, что и в случае произвольного числа компонентов давление в точке $V_0/2$ будет определяться формулой (45) (сначала рассматриваются два компонента, а затем к ним по одному добавляются остальные). Таким образом, для гетерогенной смеси при линейной интерполяции давления по давлениям компонентов формула (45) определяет давление в центре объема смешанной ячейки. Так как при аппроксимации уравнения движения используются давления, отнесенные к ячейкам, то формула (45) является достаточно корректной для определения среднего давления в смешанной ячейке.

Достоинства и недостатки метода 5 очевидны. Он прост в реализации и дешев в эксплуатации, однако может приводить к нефизичному состоянию компонентов смеси. Дело в том, что компоненты в смешанной ячейке в расчетах по этому методу сжимаются одинаковым образом, а это приводит к различным давлениям компонентов, которые не релаксируют с течением времени (см. тестовые расчеты в [36]). Тем не менее метод дает вполне приемлемые результаты при его использовании для моделирования течений с четко выделенными КГ.

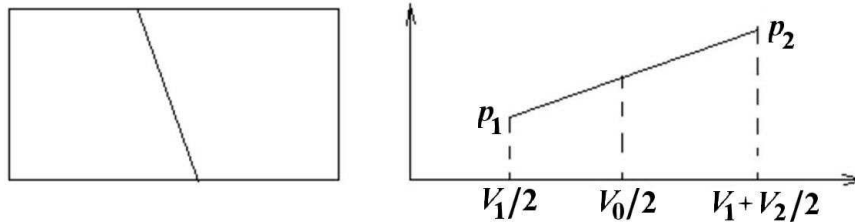


Рис. 2. Графическая иллюстрация формулы (45)

4.2. Метод замыкания на основе модели равенства приращений давлений компонентов. В [18] предложен метод замыкания, основанный на модели равенства приращений давлений компонентов в смешанной ячейке (метод 6). Эта модель математически записывается в виде условия

$$\rho_\xi c_\xi^2 \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi = \rho_\zeta c_\zeta^2 \nabla \cdot \mathbf{u}_\zeta. \quad (47)$$

Условие (47) получается следующим образом. Для адиабатических течений

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = c^2 \rho \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (48)$$

Перейдя в выражении (48) к компонентам и потребовав, чтобы $\frac{\partial p_\xi}{\partial t} = \frac{\partial p_\zeta}{\partial t}$, получим условие (47).

Система алгебраических уравнений (47), (22) замкнута, ее решение имеет вид

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n = \lambda_\xi \nabla \cdot \mathbf{u}^n,$$

где

$$\lambda_\xi = (\rho_\xi c_\xi^2)^{-1} \left(\sum_k \frac{\beta_k}{\rho_k c_k^2} \right)^{-1}.$$

При использовании данной модели в процессе счета для адиабатических течений давления будут оставаться приблизительно одинаковыми, если начальные давления компонентов в ячейке одинаковы. Однако неравенство давлений может возникнуть в ряде случаев: при задании энерговыделения в одном из компонентов; после прохождения по смешанной ячейке сильной УВ, так как условие равенства приращений давлений записано в адиабатическом приближении; после расчета конвективных потоков на эйлеровом этапе вычислений и др. Тогда при использовании данной модели в первоначальном виде возникают некоторые проблемы. Одна из них следующая.

Пусть $p_\xi^n \neq p_\zeta^n$. Для идеального газа справедлива оценка

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi \sim (\rho_\xi c_\xi^2)^{-1} \sim (\gamma_\xi p_\xi)^{-1}. \quad (49)$$

Из (49) следует, что при близких значениях γ_ξ выражения $\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi$ обратно пропорциональны p_ξ . Это приводит к тому, что при общем расширении сильнее расширяется компонент с меньшим давлением, а при сжатии — наоборот. Однако, исходя из физики процесса, в любом случае должна происходить релаксация давлений. Может оказаться, что спрогнозированное давление для компонента с меньшим давлением станет отрицательным. В методе 5 эта ситуация исправлена тем, что в случае расширения ячейки используется условие равенства не абсолютных, а относительных приращений давлений компонентов.

Запишем видоизмененное уравнение (48) в виде

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi \approx -\frac{\Delta p_\xi}{p_\xi} \frac{p_\xi}{\tau \rho_\xi} \frac{d p_\xi}{d \rho_\xi}.$$

Потребовав, чтобы выполнялось условие $\Delta p_\xi / p_\xi = \Delta p_\zeta / p_\zeta$, получим формулу

$$\lambda_\xi = -\frac{p_\xi}{\rho_\xi c_\xi^2} \left(\sum_k \frac{\beta_k p_k}{\rho_k c_k^2} \right)^{-1}. \quad (50)$$

Это значение λ_ξ войдет и в формулу (43) для определения ψ_ξ , что удовлетворяет условию (28) при $\Delta e'_\xi = 0$.

4.3. Метод замыкания на основе модели равенства приращений скорости компонентов. Метод 7 предложен в [19]. Предположение о равенстве приращений скоростей компонентов является следствием того, что система уравнений газовой динамики решается в односкоростном приближении. Так как в любой момент времени скорости компонентов в смешанной ячейке равны, то, естественно, изменения скоростей компонентов за счетный шаг по времени также будут одинаковы. Можно рассматривать изменения физических величин за счетный шаг как происходящие вследствие распространения некоторых возмущений. Если предположить, что эти возмущения являются плоскими акустическими волнами, для которых имеется соотношение $\Delta \rho / \rho = \Delta u / c$, то для $\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi$ можно написать выражение

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi \approx -\frac{\Delta \rho_\xi}{\rho_\xi \tau} = -\frac{\Delta u_\xi}{c_\xi \tau}.$$

Учитывая, что приращения скоростей компонентов Δu_ξ в смешанной ячейке полагаются равными, для $\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi$ получаем соотношение

$$c_\xi \nabla \cdot \mathbf{u}_\xi = c_\zeta \nabla \cdot \mathbf{u}_\zeta. \quad (51)$$

Система алгебраических уравнений (51), (22) замкнута, и ее решение может быть записано в виде

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi^n = \lambda_\xi \nabla \cdot \mathbf{u}^n,$$

где $\lambda_\xi = \left(c_\xi \sum_k \frac{\beta_k}{c_k} \right)^{-1} = \frac{c}{c_\xi}$, $c = \left(\sum_k \frac{\beta_k}{c_k} \right)^{-1}$. Это значение λ_ξ войдет и в формулу (43) для определения ψ_ξ , что удовлетворяет условию (28) при $\Delta e'_\xi = 0$.

5. Методы релаксации давлений компонентов

При использовании моделей 5–7 в качестве одноэтапных в расчетах реальных задач возникает ряд проблем, приводящих в некоторых случаях к получению некорректных результатов. Все эти случаи связаны с отсутствием механизма релаксации давлений компонентов в смешанных ячейках. Анализ показал, что даже в модели 6, несмотря на равные приращения давлений компонентов за счетный шаг, равенство давлений на момент времени t^{n+1} обеспечивается не всегда. В остальных двух моделях ситуация еще хуже.

По этой причине методы 5–7, которые могут использоваться как одноэтапные, как правило, применяются совместно с подсеточными методами релаксации давлений компонентов. Ниже рассматриваются два известных метода релаксации. Во всех двухэтапных изотропных моделях замыкания перераспределение дивергенции ячейки по компонентам происходит только при ненулевом ее значении. Что касается второго (подсеточного) этапа моделей, то на нем осуществляется взаимодействие между компонентами, если они находятся в неравновесном состоянии, без обязательного условия ненулевой дивергенции.

5.1. Метод PR. Рассмотрим метод PR релаксации давлений, предложенный в [20]. Из-за конечности объемов, занимаемых веществами в смешанной ячейке, выравнивание давлений компонентов происходит не мгновенно (мгновенно выравниваются давления только в точках поверхности, вдоль которой соприкасаются вещества), а в течение некоторого времени релаксации за несколько счетных шагов.

При реализации данного метода расчет $\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi$ на временном шаге выполняется в два этапа:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\xi = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 1} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}. \quad (52)$$

В (52) $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 1}$ — дивергенция компонента на первом этапе, получаемая одним из указанных выше методов. На втором этапе происходит релаксация давлений компонентов, при этом накладывается условие, что на данном этапе остаются неизменными как $\nabla \cdot \mathbf{u}$, так и полная внутренняя энергия, т. е. $\Delta E_2 = 0$. Релаксация давлений компонентов осуществляется за счет вычисления дополнительных дивергенций компонентов $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}$ по формуле

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2} = -\frac{\Delta p_\xi}{\tau \rho_\xi c_\xi^2}, \quad (53)$$

где

$$\Delta p_\xi = \frac{A c \tau}{h} (p - p_\xi), \quad (54)$$

p — среднее давление; c — скорость звука среды, формулы для ее определения зависят от моделей замыкания (см. [19] и [36]).

При получении выражения (53) использовалось известное в адиабатическом приближении соотношение $\Delta p = -\rho c^2 \tau \nabla \cdot \mathbf{u}$. Множитель $c \tau / h$, равный отношению временного шага к характерному для данной ячейки времени выравнивания давлений h/c , определяет долю от разницы в давлениях компонентов, на которую произойдет их выравнивание. Из выражения (54) ясно, что $A \sim 1$, в этом случае давления компонентов не релаксируют за один временной шаг. В методике ЭГАК полагается $A = 1$.

Для p в алгоритме выравнивания (не путать со средним давлением на основном этапе, вычисляемым по формуле (21)) берется выражение (45). Тогда условие неизменности объема ячейки на этом этапе $\sum \beta_\xi \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2} = 0$ будет выполняться автоматически. Выбор формулы для определения p неоднозначен. Например, может оказаться неудачным выбор на основе формулы (21). Покажем это на следующем примере.

Пусть в смешанной ячейке имеются два идеальных газа с одинаковыми УРСами $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, но сильно различающимися давлениями и объемными долями: $p_1 = 1\,000$; $\beta_1 = 0,9$ и $p_2 = 1$; $\beta_2 = 0,1$. По формулам (21) и (44), используя соотношение $\rho_\xi c_\xi^2 = \gamma_\xi p_\xi$, для модели замыкания б легко найти, что $p = 10$. Таким образом, получаемое по формуле (21) среднее давление в ячейке оказывается в 100 раз меньше давления в веществе, которое занимает почти всю ячейку.

Формула (45) свободна от этого недостатка и, как показано выше, имеет определенное математическое обоснование. Данный метод приводит к обмену внутренней энергией между компонентами. Действительно, представим суммарное изменение внутренних энергий компонентов в виде

$$\Delta E = -P_+ \Delta V_+ - P_- \Delta V_-, \quad (55)$$

где $P_+ = \sum \beta_\xi p_\xi$, если $p_\xi > p$; $P_- = \sum \beta_\xi p_\xi$, если $p_\xi \leq p$; ΔV_+ и ΔV_- — изменения объема этих компонентов. При выравнивании давлений вещества с P_+ расширяются, поэтому $\Delta V_+ > 0$ и $\Delta V_- < 0$. Так как из условия сохранения объема $\Delta V_+ = |\Delta V_-|$, а по определению $P_+ > P_-$, то при выполнении процедуры выравнивания давлений ΔE , вычисляемое по формуле (55), будет всегда отрицательным. Такая ситуация связана с тем, что при движении КГ возникают внутренние (подсеточные) движения в ячейке и часть внутренней энергии ячейки переходит во внутрисеточную кинетическую энергию. Так как в расчетах внутрисеточная кинетическая энергия не учитывается, то она возвращается веществам в виде добавок к внутренней энергии $\Delta e'_\xi$ в соответствии с уравнением

$$-\frac{\tau}{\rho^n} \sum \beta_\xi \left(p_\xi^{n+1/2} + q_\xi^n \right) \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}^{n+1/2} + \sum \alpha_\xi \Delta e'_\xi = 0. \quad (56)$$

Входящая в это уравнение величина $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}^{n+1}$ вычисляется по формуле

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}^n \left(1 - \frac{Ac\tau}{h} \right).$$

Остается определить, каким образом распределять диссипируемую кинетическую энергию по компонентам (формула (56) определяет только полную диссипируемую энергию $\Delta E = \sum \alpha_\xi \Delta e'_\xi$). В [21] используется предположение $\Delta e'_\xi = \Delta e'$. В этом случае для всех компонентов смешанной ячейки из уравнения (56) получаем

$$\Delta e'_\xi = \Delta e' = \frac{\tau}{\rho^n} \sum \beta_\xi \left(p_\xi^{n+1/2} + q_\xi^n \right) \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2}^{n+1/2}.$$

Отметим, что данный метод релаксации давлений компонентов является универсальным, т. е. не зависит от метода распределения общей дивергенции скорости смешанной ячейки по компонентам. В методике ЭГАК он применяется для трех указанных выше методов 5–7. Однако его использование в случае физически некорректного формирования разницы в давлениях компонентов за счет основного замыкающего соотношения может привести к избыточному обмену энергией между компонентами. Поэтому для каждого из методов 5–7 корректность метода PR необходимо обосновывать на тестовых задачах.

5.2. Метод Барлоу, Хилла и Шашкова (BHS). Данный метод подробно изложен в [25], здесь лишь кратко опишем его основную идею на примере двух компонентов, что является достаточным для понимания общего случая. В полном виде метод разработан для многих компонентов в ячейке.

В этом методе предполагается, что полное изменение объема компонента за временной шаг представляет собой сумму двух составляющих:

$$\Delta V_\xi = \Delta V_{1\xi} + \Delta V_{2\xi}, \quad (57)$$

где индексы 1 и 2 соответствуют двум этапам модели замыкания.

На первом этапе используется модель 5, т. е. предположение о равенстве дивергенций компонентов, что не требует информации о положении КГ в ячейке. Равенство дивергенций означает, что

$$\Delta V_{1\xi} = \beta_{1\xi} \Delta V.$$

На втором (подсеточном) этапе используется модель на основе решения акустической задачи Римана (модель Делова), для чего требуется восстановление положения КГ в смешанной ячейке. На рис. 3 в ячейке 1234 это отрезок AB . Пусть после первого этапа $P_1 > P_2$. Тогда после подсеточного этапа вычислений КГ примет положение CD . Приращение объема — это объем, соответствующий четырехугольнику $ABCD$, который определяется из решения акустической задачи Римана:

$$\Delta V_2 = \frac{p_1 - p_2}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2} S_{AB} \tau^n,$$

где все неиндексированные величины берутся после первого этапа; S_{AB} — площадь границы между компонентами.

Таким образом, $\Delta V_{21} = \Delta V_2$; $\Delta V_{22} = -\Delta V_2$. Новые значения объемов компонентов, вычисленные с учетом приращений объемов по формуле (57), должны удовлетворять неравенству $V^{n+1} > V_\xi^{n+1} > 0$, что, однако, не всегда имеет место по той же причине, что в методе Делова (см. Замечание в конце подразд. 3.3). Поэтому в [25] вводятся ограничители приращений объемов, которые заметно усложняют метод, особенно в случае многокомпонентной ячейки. Детали можно найти в указанной работе.

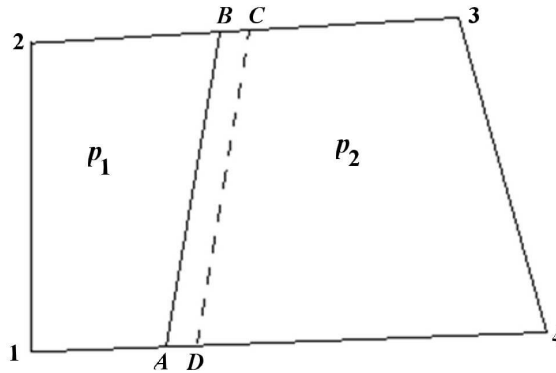


Рис. 3. Восстановленное после первого этапа положение КГ

Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность Е. А. Гончарову, В. Ю. Колобянину за совместную работу над моделями замыкания, Дж. Камму и М. Шашкову за консультации в процессе работы по моделям замыкания, А. О. Наумову за ценные замечания по тексту статьи.

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. 829—833.
2. Hirt C. W., Nicols B. D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // J. Comp. Phys. 1981. Vol. 39. P. 201—225.

3. *Youngs D. L.* Time dependent multi-material flow with large fluid distortion // Numerical Methods for Fluid Dynamics / Ed. by K. W. Morton, M. J. Baines. M.: Academic Press, 1982. P. 273—285.
4. *Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С. и др.* Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566—569.
5. *Despres B., Lagoutiere F.* Numerical solution of two-component compressible fluid model with interfaces // Progress in Computational Fluid Dynamics. 2007. Vol. 7. P. 295—310.
6. *Shashkov M.* Closure models for multimaterial cells in arbitrary Lagrangian-Eulerian hydrocodes // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2007. Vol. 56. P. 1497—1504.
7. *Noh W. F., Woodward P.* SLIC (simple line interface calculation) // Numerical Methods for Fluid Dynamics / Ed. by A. I. van der Vooren, P. J. Zandbergen. Springer-Verlag, 1976. P. 330—340.
8. *Янилкин Ю. В.* Численное моделирование двумерных многокомпонентных течений с учетом некоторых мелкомасштабных процессов // Физическая мезомеханика. 1999. Т. 2, № 5. С. 27—48.
9. *Pillord J. E., Pucke E. G.* Second order accurate volume-of-fluid algorithms for tracing material interfaces // J. Comp. Phys. 2004. Vol. 199. P. 465—502.
10. *Dyadechko V., Shashkov M.* Reconstruction of multi-material interfaces from moment data // Ibid. 2008. Vol. 227. P. 5361—5384.
11. *Kucharic M., Garimella R. V., Schofield S. P., Shashkov M.* A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations // Ibid. 2010. Vol. 229. P. 2432—2452.
12. *Hill R., Shashkov M.* The symmetric moment-of-fluid interface reconstruction algorithm // Ibid. 2013. Vol. 249. P. 180—184.
13. *Харлоу Ф. Х.* Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Methods in Computational Physics Advances in Research and Applications. Vol. 3. Fundamental Methods in Hydrodynamics. New York and London: Academic Press, 1964.
14. *Tipton R.* CALE Mixed Zone Pressure Relaxation. Tech. Rep. Lawrence Livermore National Laboratory, 1989.
15. *Делов В. И., Садчиков В. В.* Сравнение некоторых моделей для расчета термодинамических параметров неоднородных по составу лагранжевых ячеек // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 1. С. 57—70.
16. *Kamm J. R., Shashkov M. J.* Pressure relaxation closure model for one-dimensional, two-material Lagrangian hydrodynamics based on the Riemann problem // Communication in Computational Physics. 2010. 7:927-976.doi:10.4208/cicp.2009.09.032.
17. *Yanilkin Y., Goncharov E., Kolobyanin V.* Multi-material pressure relaxation methods for Lagrangian hydrodynamics // Computers & Fluids. 2013. Vol. 83. P. 137—143.
18. *Бондаренко Ю. А., Янилкин Ю. В.* Расчет термодинамических параметров смешанных ячеек в газовой динамике // Математическое моделирование. 2002. Т. 14. С. 63—81.
19. *Гончаров Е. А., Колобянин В. Ю., Янилкин Ю. В.* Метод замыкания уравнений лагранжевой газодинамики в смешанных ячейках, основанный на равенстве скоростей компонентов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 100—105.
20. *Гончаров Е. А., Янилкин Ю. В.* Новый метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках // Там же. 2004. Вып. 3. С. 16—30.
21. *Barlow A.* A new Lagrangian scheme for multimaterial cells // Proc. European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering. ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference, 2001. P. 235—294.

22. *Kamm J., Shashkov M., Fung J. et al.* A comparative study of various pressure relaxation closure models for one-dimensional two-material Lagrangian hydrodynamics // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. 2010. Vol. 65 (11–12). P. 1311–1324.
23. *Kamm J. R., Shashkov M. M., Rider W. J.* A new pressure relaxation closure model for one-dimensional two-material Lagrangian hydrodynamics // *European Physics Journal Web of Conferences* 2011; doi:10.1051/epjconf/201010000038.
24. *Hill R. N., Barlow A., Shashkov M.* Interface-Aware Sub-Scale Dynamics Closure Model. Tech. Rep. LA-UR-12-21959. Los Alamos National Laboratory, 2012.
25. *Barlow A., Hill R., Shashkov M.* Constrained optimization framework for interface-aware sub-scale dynamics closure model for multimaterial cells in Lagrangian and arbitrary Lagrangian-Eulerian hydrodynamics // *J. Comp. Phys.* 2014. Vol. 216. doi:10.1016/j.jcp.2014.07.031.
26. *Miller D., Zimmerman G.* An Algorithm for Time Evolving Volume Fractions in Mixed Zones in Lagrangian Hydrodynamics Calculations. Tech. Rep. UCRL-PRES-223908. Lawrence Livermore National Laboratory, 2006.
27. *Baer M., Nunziato J.* A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials // *Int. J. Multiphase Flow*. 1986. Vol. 12. P. 861–889.
28. *Murrone A., Guillard H.* A five equation reduced model for compressible two phase flow problems // *J. Comp. Phys.* 2005. Vol. 202. P. 664–698.
29. *Francois M., Shashkov M., Dendy E., Lowrie R.* Mixture Models for Multimaterial Eulerian and Lagrangian Hydrocodes. Tech. Rep. LAUR-10-03391. Los Alamos National Laboratory, 2010.
30. *Grove J. W.* Pressure-velocity equilibrium hydrodynamic models // *Acta Mathematica Scientia*. 2010. Vol. 30B (2). P. 563–594.
31. *Sun M.* A thermodynamic and dynamic subgrid closure model for two-material cells // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. 2013. Vol. 73 (2). P. 130–151.
32. *W. Rider, E. Love, M. Wong et al.* Adaptive methods for multi-material ALE hydrodynamics // *Int. J. Math. Fluids*. 2011. Vol. 65 (11–12). P. 1325–1337.
33. *Yanilkin Yu. V., Goncharov E. A., Toporova O. O., Kolobyanin V. Yu.* Closure methods for the lagrangian gas dynamics and elasto-plasticity equations in mixed cells // *Int. Conf. on New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes. PETER 2016*. St. Malo, France, 30 May — 3 June 2016.
34. *Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А. и др.* Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // *Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ*. 2008. Вып. 12. С. 54–65.
35. *Гончаров Е. А., Колобянин В. Ю., Янилкин Ю. В.* Об определении искусственной вязкости для компонентов смешанных ячеек // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2010. Вып. 2. С. 15–29
36. *Янилкин Ю. В., Топорова О. О., Колобянин В. Ю.* Модели замыкания уравнений лагранжевой газодинамики и упругопластики в многокомпонентных ячейках. Часть 2. Анизотропные модели // *См. настоящий выпуск*. С. 21–37.
37. *Жарова Г. В., Янилкин Ю. В.* Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках // *Там же*. 1993. Вып. 3. С. 77–81.
38. *Benson D. J.* Computational methods in lagrangian and eulerian hydrocodes // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1992. Vol. 99 (23). P. 235–235.

39. *Weseloh W. N., Glancy S. P., Painter J. W.* PAGOSA Physics Manual. Tech. Rep. LA-14225-M. Los Alamos National Laboratory, 2010.

Статья поступила в редакцию 09.02.17.

CLOSING MODELS FOR LAGRANGIAN GAS DYNAMICS AND ELASTOPLASTICITY EQUATIONS IN MULTICOMPONENT CELLS. PART 1. ISOTROPIC MODELS / Yu. V. Yanilkin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod region)

This paper describes the first part of the work, which overviews models of closing the Lagrangian gas dynamics and elastoplasticity equations in multicomponent (mixed cells) containing two and more components. Part 1 describes isotropic models and gives a brief description of the methods based on these models, many of them have been implemented in the EGAK code. In view of a large number of various models and methods, results of testing them are presented in Part 2.

Keywords: multicomponent gas dynamics and elastoplasticity, difference scheme, mixed cell, closing models, the EGAK code.
