

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

УДК 519.634

КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ
АЛГОРИТМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ СМЕСЕЙ РАЗНОРОДНЫХ ФЛЮИДОВ

© 2023 г. Т. Г. Елизарова^{1,*}, Е. В. Шильников^{1,**}

¹ 125047 Москва, Миусская пл., 4, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Россия

*e-mail: telizar@mail.ru

**e-mail: shilnikov@imamod.ru

Поступила в редакцию 14.11.2022 г.
Переработанный вариант 14.11.2022 г.
Принята к публикации 30.03.2023 г.

Приведены способ построения и апробация изящного и простого в реализации численного алгоритма для моделирования течений гомогенной смеси газов в предположении равенства температур и скоростей компонент. Алгоритм позволяет получать монотонные профили плотности компонент даже при сильном отличии их показателей адиабаты. Этот же алгоритм позволяет моделировать некоторые течения смеси газ–жидкость. Библ. 20. Фиг. 8. Табл. 2.

Ключевые слова: гомогенная смесь газов, одножидкостное приближение, конечно-разностный алгоритм, регуляризованные уравнения.

DOI: 10.31857/S0044466923070050, EDN: ZXOZPY

ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование поведения разнородных флюидов и, в частности, смесей газов, газов и жидкостей в различных режимах течения широко востребовано во многих областях науки и техники, включая актуальные в настоящее время задачи, связанные с производством составляющих для микроэлектронных приборов. В силу своей относительной простоты для практических применений особенно востребовано описание гомогенных смесей в так называемом одножидкостном приближении. Под гомогенными смесями понимается смесь, в которой отсутствуют выделенные поверхности раздела между компонентами.

В одножидкостном приближении полагается, что скорости и температуры компонент смеси находятся в термодинамическом равновесии. Многочисленные варианты соответствующих систем уравнений опубликованы во многих монографиях (см., например, [1–3]). Рассмотрение двухжидкостных моделей смесей предполагает, что компоненты смеси обладают индивидуальными макроскопическими скоростями и температурами, что приводит к значительному усложнению математической модели процесса за счет увеличения числа уравнений в системе. Кроме того, необходимо учитывать обменные слагаемые в уравнениях переноса импульса и энергии, которые обеспечивают взаимодействие между компонентами смеси. Описание таких смесей оказывается значительно более громоздким и с алгоритмической точки зрения. В то же время применимость таких моделей существенно ограничена рамками применимости самих газодинамических моделей для неравновесных течений (см., например, [4]). Числа Кнудсена, для которых возможно описание газов в рамках двухжидкостного приближения, соответствуют течениям умеренно-разреженного газа и лежат в достаточно узком диапазоне значений. В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением одножидкостного приближения для описания гомогенной смеси флюидов.

Численные алгоритмы для описания гомогенных одножидкостных смесей достаточно многочисленны как в плане записи исходной системы уравнений, так и ее численной реализации. В частности, в [5–7] были выписаны и протестированы алгоритмы для моделирования смеси газов, основанные на регуляризованных или квазигазодинамических (КГД) уравнениях в одно-температурном и односкоростном приближении для смеси. Первый вариант такой системы для разреженных течений был представлен в [4].

Однако, как показала практика численных расчетов, в рамках этого подхода при моделировании течений смесей с сильно отличающимися показателями адиабаты компонент возникают нефизические осцилляции плотностей компонент смеси, в то время как общая плотность смеси остается достаточно гладкой (см. [7], [8]). В частности, нефизические осцилляции плотностей отдельных компонент могут приводить к отрицательным значениям плотностей в областях, где эти плотности малы. Аналогичная проблема возникает и при использовании других численных алгоритмов. Устранение этого недостатка приводит к существенному усложнению вычислительных схем (см. [9–12]). Например, в [9], [12] для устранения этого недостатка применяется метод двойного потока, в котором для аппроксимации конвективных потоков на границах ячеек применяются специальные модификации численных методов.

В недавней работе [13] был предложен новый вариант регуляризованных или КГД уравнений для смеси газов в двухжидкостном и одножидкостном приближениях, удовлетворяющих условию неубывания энтропии для смеси. Уравнения для одножидкостного приближения построены путем агрегирования уравнений для двухжидкостной модели. Построенные на основе этих уравнений энтропийно-корректные разностные схемы показали свою применимость для расчетов задач с большими перепадами давлений и плотностей компонент, обеспечивая их неотрицательность. Однако результирующий алгоритм является достаточно сложными из-за использования специального вида осреднений газодинамических величин при вычислении потоков на границах ячеек.

В настоящей работе впервые приведены способ построения и апробация изящного и весьма простого в реализации КГД-алгоритма для моделирования течений гомогенной смеси газов в предположении равенства температур и скоростей компонент. Этот алгоритм позволяет получать монотонные профили плотности компонент даже при сильном отличии их показателей адиабаты. Вариант этого алгоритма в недавнее время был реализован в рамках открытого программного комплекса OpenFOAM (см. [14]). Описание реализации КГД-решателя для однокомпонентного газа в рамках платформы OpenFOAM приведено в [15].

В последнем разделе работы показано, что близкий по структуре алгоритм позволяет моделировать класс задач о взаимодействии существенно разнородных флюидов, когда один из флюидов является газом, а другой – жидкостью. При этом для обоих флюидов сохраняются уравнения состояния, но для жидкой компоненты используется уравнение состояния в виде упрощенного варианта уравнения Ван-дер-Ваальса.

В качестве примеров применения алгоритма приводятся результаты решения одномерных задач о распаде разрыва, которые наглядно показывают особенности, преимущества и ограничения изложенного подхода.

1. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ДВУХКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА В ОДНОЖИДКОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В одножидкостной модели предполагается, что газовая смесь имеет единую скорость \mathbf{u} и температуру T , а плотность смеси, ее давление, удельная полная энергия и другие параметры определяются через параметры ее компонент как

$$\rho = \rho_a + \rho_b, \quad p = p_a + p_b,$$

уравнения состояния компонент

$$p_k = \rho_k R_k T, \quad \varepsilon_k = C_{V_k} T, \quad k = a, b. \quad (1)$$

Здесь R_k – газовая постоянная, ε_k – удельная внутренняя энергия компоненты смеси. Параметры смеси вычисляются как взвешенные величины в виде

$$R = \frac{R_a \rho_a + R_b \rho_b}{\rho} = C_p - C_v, \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v}, \quad \gamma - 1 = \frac{R}{C_v}, \quad (2)$$

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_a \rho_a + \varepsilon_b \rho_b}{\rho}, \quad C_v = \frac{C_{V_a} \rho_a + C_{V_b} \rho_b}{\rho}.$$

Полная энергия имеет вид

$$E = \rho \varepsilon + \rho \frac{\mathbf{u}^2}{2}.$$

Скорость звука в смеси газов a и b вычисляется по формуле

$$\rho c_s^2 = \gamma_a p_a + \gamma_b p_b. \tag{3}$$

Следуя [3–8], исходную систему уравнений для описания гомогенной смеси двух газов выберем в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_a \mathbf{u}) = 0, \tag{4}$$

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_b \mathbf{u}) = 0, \tag{5}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \operatorname{div} \Pi + \rho \mathbf{F}, \tag{6}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}((E + p)\mathbf{u}) = -\operatorname{div} \mathbf{q} + \operatorname{div}(\Pi \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{F} + Q. \tag{7}$$

Здесь \mathbf{F} и Q обозначают удельную мощность внешних сил и тепловых источников соответственно.

Тензор вязких напряжений Навье–Стокса в форме закона вязкого трения Ньютона Π_{NS} и вектор теплового потока в форме закона Фурье \mathbf{q}_{NS} имеют традиционный вид

$$\Pi_{\text{NS}} = \mu \left((\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} I \operatorname{div} \mathbf{u} \right), \quad \mathbf{q}_{\text{NS}} = -\kappa \nabla T,$$

где I – единичная матрица, μ , κ – коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности смеси.

2. ПОСТРОЕНИЕ РЕГУЛЯРИЗОВАННЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СМЕСИ ГАЗОВ

Для построения регуляризованного варианта исходной системы воспользуемся приемом сглаживания газодинамических величин по малому промежутку времени, согласно, например, [16]. Аналогичное осреднение газодинамических уравнений, выполненное по малому объему и приводящее к построению регуляризованных газодинамических уравнений, выписано в [4, 17]. Аналогично [16] осредним систему уравнений по малому промежутку времени Δt и воспользуемся предположением о том, что решение системы уравнений существует и обладает достаточной гладкостью. Применяя теорему о среднем при вычислении интегралов по времени и полагая, что интервал осреднения невелик, представим изменение параметров газа на промежутке времени $\Delta t \sim \tau$ в виде первого члена разложения в ряд Тейлора:

$$\tilde{\rho}_a = \rho_a + \tau \frac{\partial \rho_a}{\partial t}, \quad \tilde{\rho}_b = \rho_b + \tau \frac{\partial \rho_b}{\partial t}, \quad \tilde{\rho} = \rho + \tau \frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad \tilde{p} = p + \tau \frac{\partial p}{\partial t}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \tau \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}.$$

Подставим приведенные разложения в исходные уравнения (4)–(7). При этом первое уравнение системы примет вид

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_a}{\partial t} + \operatorname{div}(\tilde{\rho}_a \tilde{\mathbf{u}}) = 0. \tag{8}$$

Для вычисления осредненных величин в уравнении (8) преобразуем производные по времени с использованием исходных уравнений (4) и (6). Из уравнений (4), (5) и определений (1) следует уравнение для общей плотности смеси

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0. \tag{9}$$

Тогда уравнение импульса (6) с использованием уравнения (9) преобразуется к недивергентному виду

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p = \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \Pi + \mathbf{F}. \tag{10}$$

Пренебрегая вязкими слагаемыми из уравнения (10), найдем производную скорости $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$.

Тогда в осредненном уравнении (8)

$$\tilde{\rho}_a \tilde{\mathbf{u}} = (\rho_a - \tau \operatorname{div}(\rho_a \mathbf{u})) \left(\mathbf{u} - \tau \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \mathbf{F} \right).$$

Это определит регуляризирующую добавку в регуляризованном уравнении (8) для плотности компоненты a . Вид добавок в уравнениях импульса и энергии остается таким же, как для КГД-уравнений для однокомпонентного газа. Детали этой процедуры приведены в [16].

Полученная регуляризованная система уравнений для описания течения двух флюидов—газов имеет вид

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_a(\mathbf{u} - \hat{\mathbf{w}})) = \nabla(\tau \mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\rho_a \mathbf{u})), \quad (11)$$

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_b(\mathbf{u} - \hat{\mathbf{w}})) = \nabla(\tau \mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\rho_b \mathbf{u})), \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \operatorname{div} \Pi + (\rho - \tau \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})) \mathbf{F}, \quad (13)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}((E + p)(\mathbf{u} - \mathbf{w})) = -\operatorname{div} \mathbf{q} + \operatorname{div}(\Pi \cdot \mathbf{u}) + \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{F} + Q. \quad (14)$$

Вспомогательные КГД-величины являются малыми добавками к скорости, тензору вязких напряжений и тепловому потоку и имеют вид

$$\mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho} (\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p - \rho \mathbf{F}) = \hat{\mathbf{w}} + \frac{\tau}{\rho} \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}), \quad (15)$$

$$\hat{\mathbf{w}} = \frac{\tau}{\rho} (\rho(\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \rho \mathbf{F}), \quad (16)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\text{NS}} + \mathbf{q}^\tau, \quad -\mathbf{q}^\tau = \tau \rho \mathbf{u} \left(\mathbf{u} c_V \nabla T + p(\mathbf{u} \nabla) \left(\frac{1}{\rho} \right) - \frac{Q}{\rho} \right), \quad (17)$$

$$\Pi = \Pi_{\text{NS}} + \rho \mathbf{u} \otimes \hat{\mathbf{w}} + \tau(\mathbf{u} \nabla p + \gamma p \operatorname{div} \mathbf{u} - (\gamma - 1)Q). \quad (18)$$

При суммировании уравнений (11) и (12) получается регуляризованное уравнение неразрывности КГД-системы для однокомпонентного газа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) = 0.$$

Система уравнений (11)–(14) отличается от системы, использованной в [6–8], в первую очередь, способом вычисления КГД-добавок в уравнениях неразрывности компонент. Именно это изменение и обеспечивает отсутствие осцилляций за контактным разрывом в численных экспериментах. Другие изменения, такие как замена $\nabla \varepsilon$ на $C_V \nabla T$ в (19), менее существенны, хотя тоже ведут к улучшению качества разностного решения.

Параметр регуляризации свяжем с шагом пространственной сетки h и скоростью звука в смеси в виде

$$\tau = \alpha \frac{h}{c_s}. \quad (19)$$

При решении уравнений Эйлера коэффициенты вязкости и теплопроводности смеси μ и κ рассматриваются как искусственные регуляризаторы и вычисляются следующим образом:

$$\mu = \tau p \operatorname{Sc}, \quad \kappa = \frac{\mu C_p}{\operatorname{Pr}}. \quad (20)$$

Таким образом, у нас имеется три свободных числовых параметра для настройки диссипативных свойств алгоритма: коэффициент α , число Шмидта Sc и число Прандтля Pr . Базовыми значениями являются $\alpha = 0.5$, $\operatorname{Sc} = \operatorname{Pr} = 1$.

Численный алгоритм для расчета течений смеси газов на ортогональной сетке строится непосредственно путем разностной аппроксимации системы уравнений (11)–(19) с применением центральных разностей для всех пространственных производных. Таким образом, схема имеет второй порядок аппроксимации. Использование диссипативных коэффициентов вида (19), (20), которые пропорциональны шагу пространственной сетки h , приводят к понижению порядка аппроксимации уравнений до первого. Отметим, что дополнительная диссипация схемы носит сильно нелинейный характер и существенно зависит от решения задачи, автоматически подстраиваясь под него. В расчетах применялась явная по времени условно-устойчивая разностная схема.

В представленных далее расчетах внешняя сила F и источники тепла Q отсутствуют.

3. РАСПАД РАЗРЫВА МЕЖДУ ДВУМЯ РАЗНОРОДНЫМИ ГАЗАМИ

В качестве первого примера численного моделирования решалась задача Римана о распаде разрыва между двумя различными газами. Постановка задачи соответствует [12]. Детали постановки и результаты численных экспериментов для упрощенного вида регуляризации из [6] приведены в препринте [8].

Начальные условия в левой и правой частях области $0 \leq x \leq 1$ различаются не только давлением, плотностью и скоростью газа, но и свойствами самих газов, которыми являются воздух – газ a , и гелий – газ b . Соответствующие величины приведены в табл. 1.

На фиг. 1 приведены результаты расчета данной задачи в виде распределения плотности компонент газов a и b и их суммарной плотности, рассчитанные по методикам из [6] и с применением системы (11)–(14). Видно, что расчеты по методу из [6] приводят к появлению сильных колебаний плотности компонент и появлению отрицательных значений плотности газа b . Результаты, полученные с применением системы (11)–(14), оказались свободными от этих недостатков (фиг. 1б).

Приведены результаты расчетов на равномерной расчетной сетке из 400 ячеек с параметрами регуляризации $\alpha = 0.13$, $Sc = Pr = 1$. Число Куранта $\beta = 0.2$. Расчет проводится до времени $t_{fin} = 2.0 \times 10^{-4}$.

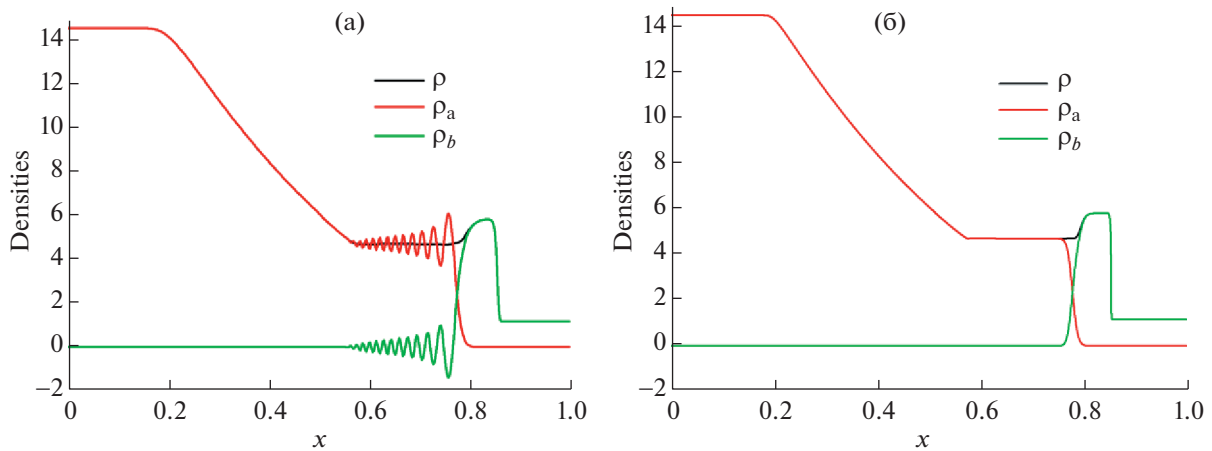
В качестве второго примера решался вариант задачи Сода с большим перепадом давлений на интерфейсе между компонентами в постановке, изложенной в [9], [13]. В начальный момент времени разрыв расположен в точке $x = 0.5$, разделяя смеси газов a и b , как и в предыдущей задаче, с параметрами $\gamma_a = 1.4$, $C_{va} = 1$ и $\gamma_b = 1.6$, $C_{vb} = 1$. Скорость смеси $u_{beg} = 0$. При $x < 0.5$ плотности компонент $\rho_a = 1$, $\rho_b = 0$, давления компонент $p_a = 500$, $p_b = 0$. Справа от разрыва, при $x > 0.5$ плотности $\rho_a = 0$, $\rho_b = 1$, давления $p_a = 0$, $p_b = 0.2$. Таким образом, давление смеси слева от разрыва в 2500 раз выше, чем справа. Во всей расчетной области температура вычисляется из уравнений состояния.

Расчеты проводились до момента времени $t_{fin} = 0.011$ при следующих параметрах настройки схемы: $\alpha = 0.4$, $\beta = 0.2$, $Sc = 1$, $Pr = 4$. Сравнение результатов расчетов на трех пространственных сетках ($N = 500, 2000$ и 4000) представлены на фиг. 2. На нем хорошо видны основные газодинамические особенности течения, а также сходимость метода при сгущении пространственной сетки. Решение на грубой сетке оказывается сглаженным, при числе узлов 2000 и 4000 отличия в профилях становятся незначительными. Результаты расчетов близко соответствуют эталонным данным из работ [9], [13].

Подбор параметров настройки алгоритма позволяет найти оптимальное численное решение. Увеличение α приводит к сглаживанию разрывов, изменение числа Шмидта Sc в пределах 0.1–10 практически не влияет на результат расчета, увеличение числа Прандтля Pr от 1 до 4 незначи-

Таблица 1. Начальные значения параметров смеси в задаче о распаде разрыва

| Область | ρ_{He} | ρ_{Air} | U | Молекулярные массы | P | γ |
|---------------------|-------------|--------------|-----|--------------------|--------|----------|
| $0 \leq x \leq 0.5$ | 14.54903 | 0.0 | 0.0 | He, 4.003 | 10^7 | 5/3 |
| $0.5 \leq x \leq 1$ | 0.0 | 1.16355 | 0.0 | Воздух, 28.96 | 10^5 | 7/5 |



Фиг. 1. (а) – Расчет по схеме из [6], (б) – расчет по схеме из настоящей работы.

тельно меняет форму профиля температуры в зоне контактного разрыва. Небольшой дефект в профиле скорости в окрестности точки $x = 0.6$ отражает энтропийный след в зоне контактного разрыва, вносимый использованным здесь разностным алгоритмом. В энтропийно-согласованном алгоритме (см. [13]) этот дефект схемы оказывается почти незаметным.

4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ С ГРАНИЦЕЙ РАЗДЕЛА РАЗНОРОДНЫХ ГАЗОВ

Решается задача о взаимодействии ударной волны с границей раздела газов с сильно отличающимися показателями адиабаты, описанная в [10], [11].

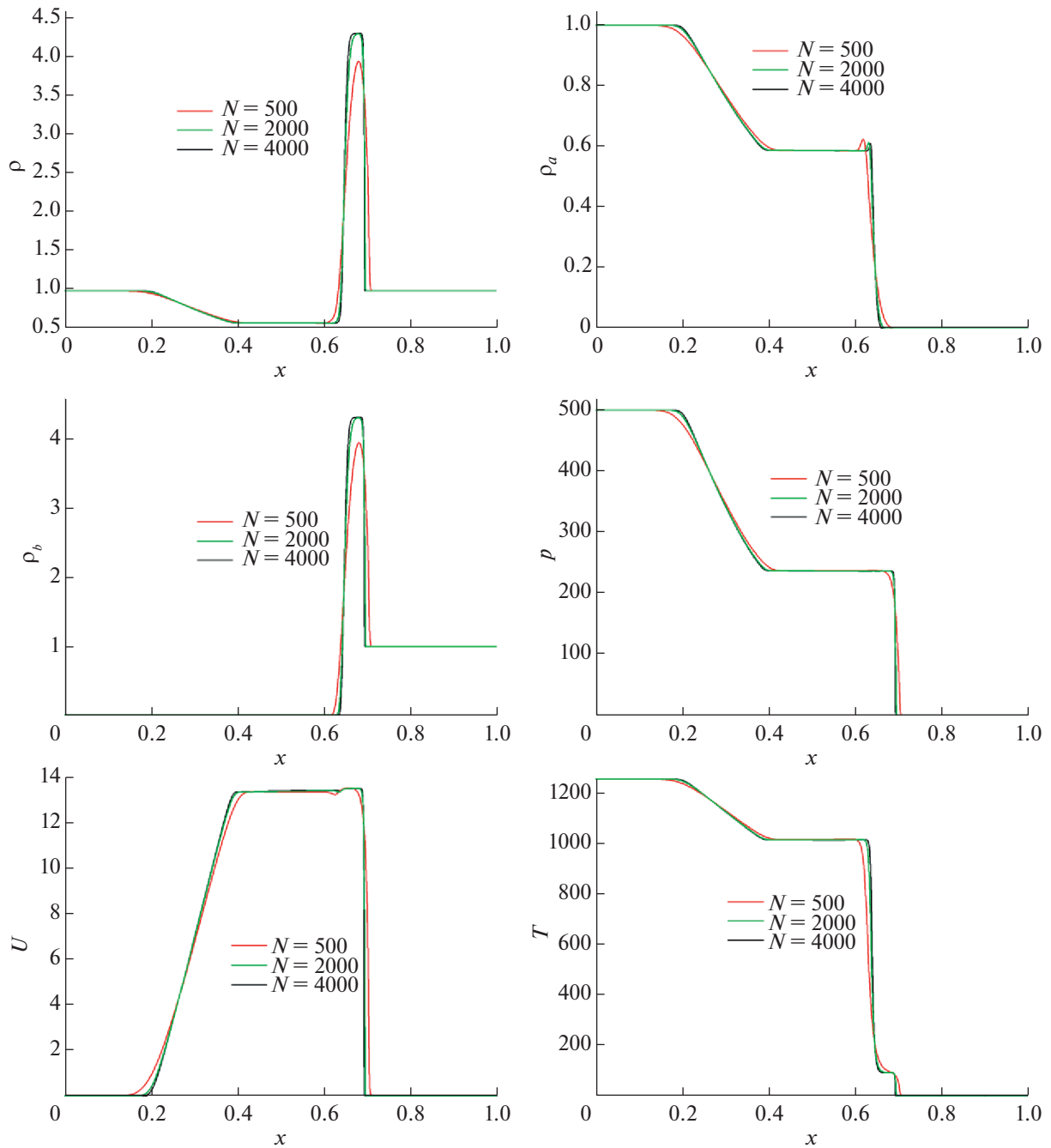
Граница раздела первоначально расположена в точке $x = 0.5$, разделяя материалы с $\gamma_a = 1.35$ и $C_{Va} = 2.4$ слева и $\gamma_b = 5.0$ и $C_{Vb} = 1.5$ справа. Эти значения примерно соответствуют высокозрывчатым продуктам (материал a) и ограничивающему материалу (материал b). В начальный момент слева от границы раздела при $x = 0.1$ в материале a находится ударная волна, движущаяся вправо со скоростью 2.3238 относительно границы раздела. В момент времени $t = 0.1721$ ударная волна сталкивается с границей раздела, в результате чего прошедшая ударная волна распространяется вправо в материале b , а отраженная волна – влево в материале a . На фиг. 3 приведена $x-t$ диаграмма для этой задачи, показывающая расположение ударных волн и границы, разделяющие состояния с постоянными значениями газодинамических величин.

В табл. 2 приведены значения газодинамических параметров в областях, изображенных на фиг. 3. Значение $\phi_a = 0$ означает, что в данной области находится газ a , $\phi_a = 1$ соответствует газу b .

Расчеты проводились до момента времени $t_{\text{fin}} = 0.25$ на двух сетках ($N = 500$ и $N = 4000$) таких же, как и в [10], [11]. Результаты расчетов приведены на фиг. 4. Дальнейшее сгущение сетки на результатах не сказывается. При стандартных значениях искусственных диссипативных параметров $Sc = Pr = 1$ в профиле суммарной плотности образовывался небольшой провал на границе раздела, обусловленный излишним численным размазыванием профилей компонент плотности. Подбором параметров диссипации совместно с уменьшением пространственного шага разностной схемы удалось полностью избавиться от этого дефекта (см. фиг. 4б). Наилучшими

Таблица 2. Значения параметров смеси в областях с однородными состояниями

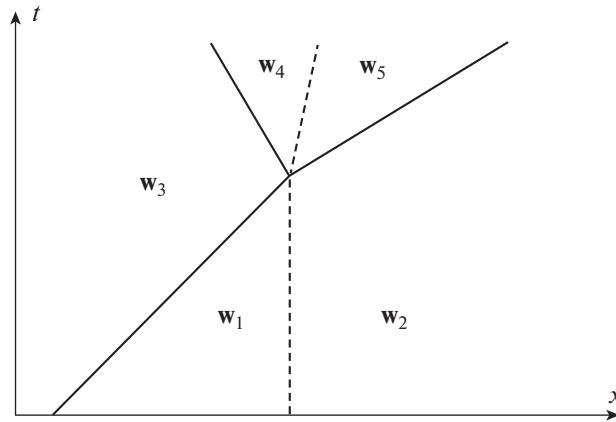
| Параметр | Область 1 | Область 2 | Область 3 | Область 4 | Область 5 |
|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| ρ | 1 | 1.9 | 2.7647 | 3.9581 | 2.5786 |
| u | 0 | 0 | 1.4833 | 0.9304 | 0.9304 |
| p | 1 | 1 | 4.4468 | 7.2498 | 7.2498 |
| ϕ_a | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 |



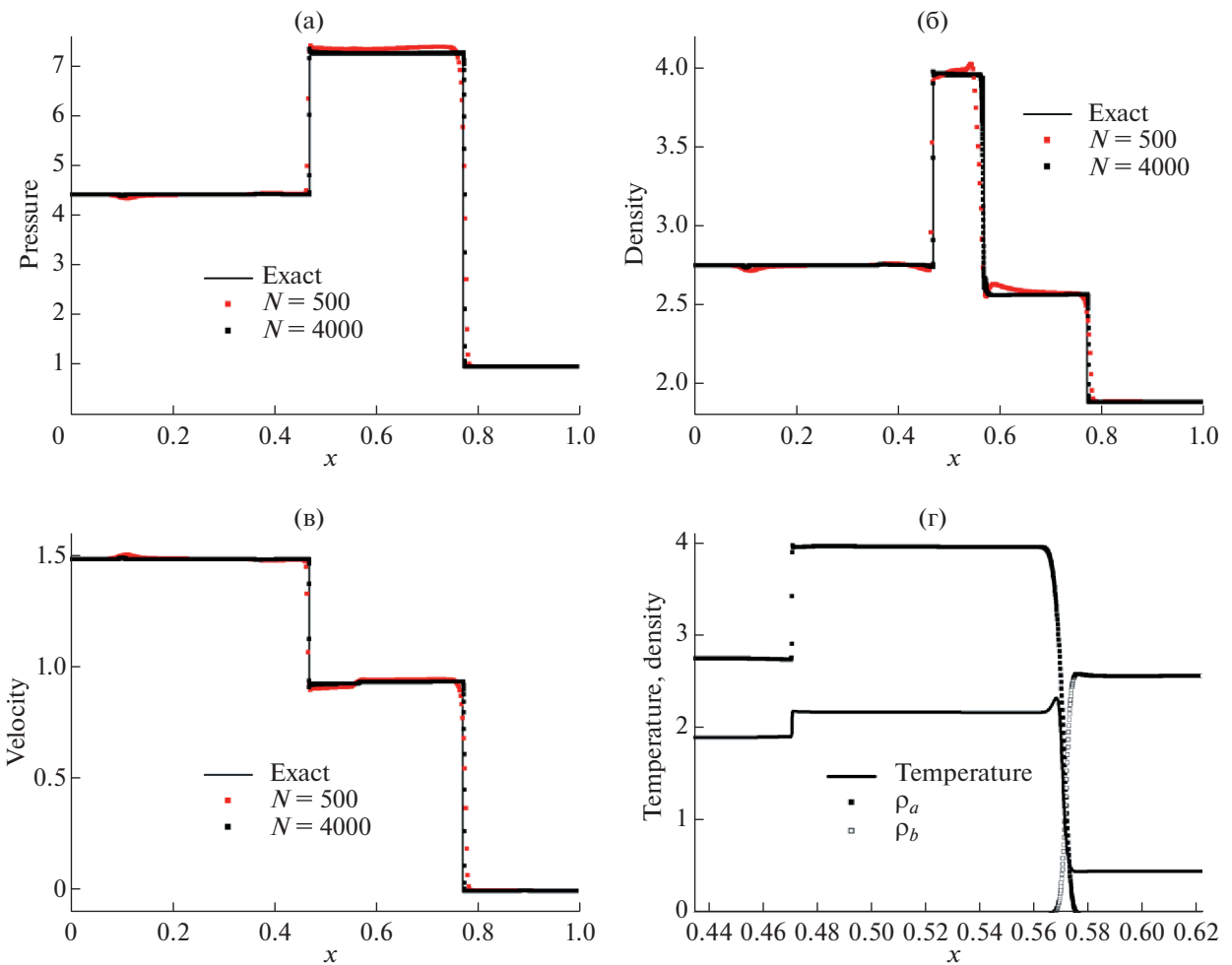
Фиг. 2. Расчет задачи Сода с большим перепадом давлений.

значениями диссипативных параметров являются значения $\alpha = 0.5$, $Sc = 0.3$, $Pr = 5$. Устойчивый расчет с этими параметрами обеспечивается при максимальном числе Куранта $\beta = 0.25$. Заметим, что ударные волны хорошо разрешаются и на грубой пространственной сетке, чего нельзя сказать о контактном разрыве. На грубой сетке в этой области ($x \approx 0.57$) наблюдается немонотонность профилей как общей плотности, так и ее компонент. Там же наблюдается дефект в профиле скорости. При расчетах на подробной сетке эти недостатки становятся почти незаметными, что хорошо видно на фиг. 4б–г.

Результаты КГД-расчетов оказались близки как к автомодельному решению, так и к данным, полученным с помощью алгоритмов второго порядка точности из [10] и [11].



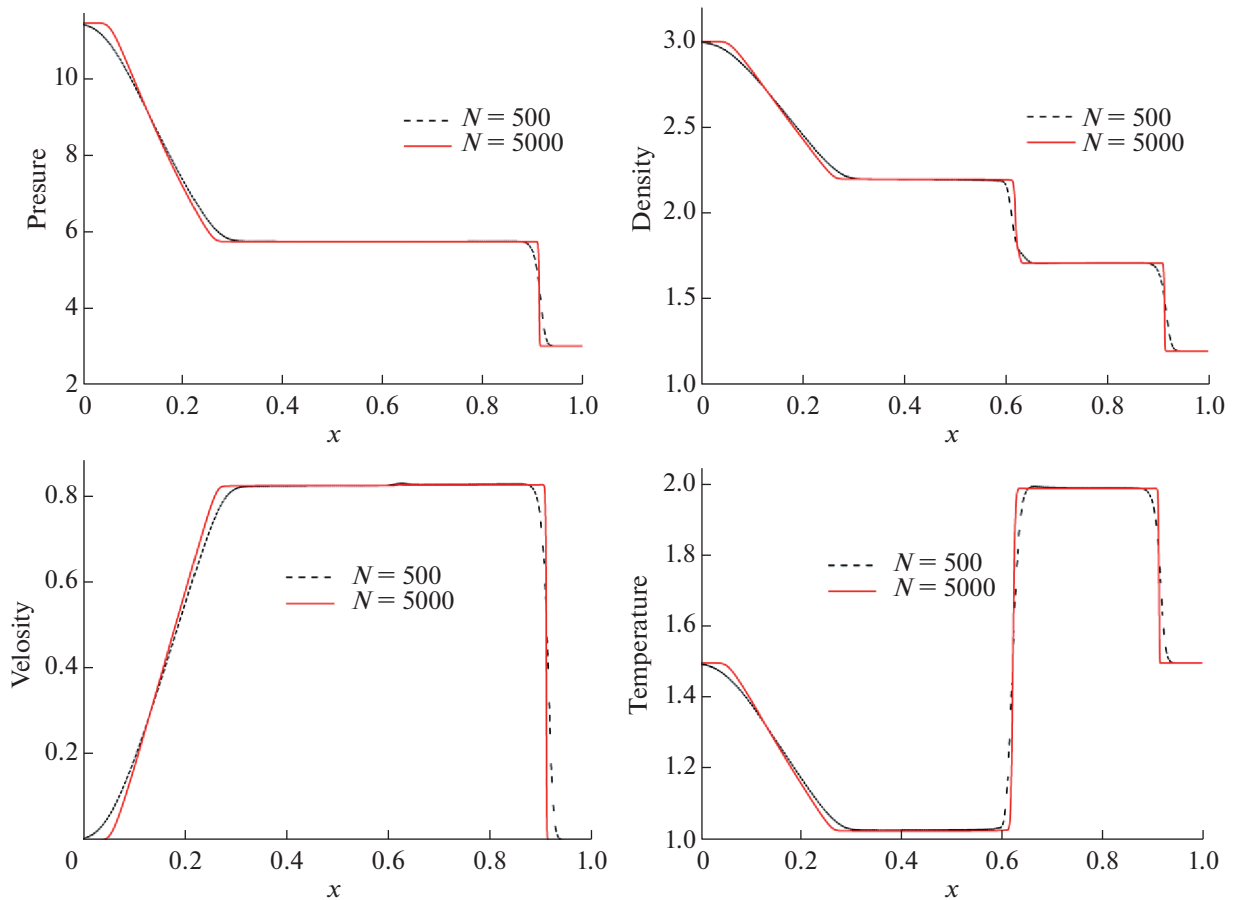
Фиг. 3. Диаграмма $x-t$ задачи о взаимодействии ударной волны с границей раздела газов согласно [10].



Фиг. 4. Профили газодинамических величин в задаче о взаимодействии ударной волны с границей раздела.

5. РАСПАД РАЗРЫВА МЕЖДУ ДВУМЯ СМЕСЯМИ РАЗНОРОДНЫХ ГАЗОВ

В предыдущих задачах в начальный момент времени два разных газа находились в разных половинах расчетной области, а смесь газов фактически была только в небольшой области вблизи границы раздела. В следующей задаче рассматривается распад разрыва между смесями газов с разными концентрациями компонент справа и слева от разрыва. Разрыв первоначально распо-



Фиг. 5. Распад разрыва между двумя смесями.

ложен в точке $x = 0.5$, разделяя смеси тех же газов, как и в предыдущей задаче. Напомним параметры этих газов: $\gamma_a = 1.35$, $C_{Va} = 2.4$ и $\gamma_b = 5.0$, $C_{Vb} = 1.5$. Начальные условия задаются следующими: во всей расчетной области температура постоянна и равна $T_{beg} = 1.5$, скорость $u_{beg} = 0$. При $x < 0.5$ плотности компонент $\rho_a = 2$, $\rho_b = 1$. Справа от разрыва при $x > 0.5$ плотности $\rho_a = 1$, $\rho_b = 0.2$. Таким образом, давление слева от разрыва почти в 4 раза выше, чем справа.

Расчеты проводились до момента времени $t_{fin} = 0.15$ при следующих параметрах схемы: $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.2$, $Sc = 0.4$, $Pr = 1$. Сравнение результатов расчетов на двух пространственных сетках ($N = 500$ и $N = 5000$) представлены на фиг. 5, где хорошо видно улучшение качества решения при дроблении сетки.

Для данной задачи мы не располагаем аналитическим решением. Однако из постановки задачи понятно, что вправо должна распространяться ударная волна, а влево – волна разрежения. Между ними располагается контактный разрыв. Все эти характерные особенности достаточно хорошо разрешаются даже на не слишком подробной сетке с $N = 500$.

6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ СМЕСИ ГАЗ–ЖИДКОСТЬ

Предложенный в первых разделах работы численный алгоритм обобщен для моделирования взаимодействия флюидов в виде газа и жидкости в приближении, когда жидкость описывается с помощью модели “замороженного газа” (stiffened gas model) (см., например, [9], [18–20] и обширную библиографию к этим работам).

Данное приближение основано на модификации уравнения состояния для жидкой компоненты путем включения добавки в уравнение состояния идеального газа, полученной на основе

упрощения уравнения состояния вида уравнения Ван-дер-Ваальса. Соответствующие формулы приобретают вид, который здесь выписан в одной из возможных форм, согласно [19]:

$$p_k = \rho_k R_k T - p_{k\infty}, \quad \varepsilon_k = C_{vk} T + \frac{p_{k\infty}}{\rho_k}, \quad k = a, b.$$

Величины добавок к давлению выбираются таким образом, чтобы обеспечить нужную скорость звука в жидком флюиде. Для газов добавки к давлению полагаются равными нулю.

Общая скорость звука вычисляется по формуле

$$\rho c_s^2 = \gamma_a(p_a + p_{a\infty}) + \gamma_b(p_b + p_{b\infty}).$$

Уравнения состояния смеси модифицируются следующим образом:

$$p\varepsilon = T(\rho_a C_{va} + \rho_b C_{vb}) + p_{\infty}, \quad p_{\infty} = \frac{\rho_a p_{a\infty} + \rho_b p_{b\infty}}{\rho}.$$

Предложенный нами вариант вычисления p_{∞} в виде взвешенного значения давлений оказывается эффективным при расчетах смесей, в которых возможно образование областей с нулевыми значениями плотностей компонент флюидов a или b .

Согласно [19] для флюидов воздух и вода соответствующие величины имеют следующие значения:

– воздух (компонента a) – $\gamma = 1.4$, $C_p = 1004.5$ (Дж/(Кг К)), $p_{a\infty} = 0$ (Па).

– вода (компонента b) – $\gamma = 2.8$, $C_p = 4186$ (Дж/(Кг К)), $p_{b\infty} = 8.5 \times 10^8$ (Па).

В качестве примера далее приведены результаты численного моделирования задачи о распаде разрыва в среде воздух–вода. Задача решается в постановке, изложенной в [19].

В соответствии с указанной работой в расчетной области $0 \leq x \leq 10$ м задаются следующие начальные условия:

$$\begin{aligned} (p, U, T)_{\text{воздух}} &= (10^9 \text{ Па}, 0, 308.15 \text{ К}), & \rho_{\text{вода}} &= 0 & \text{при } x \leq 5 \text{ м}, \\ (p, U, T)_{\text{вода}} &= (10^5 \text{ Па}, 0, 308.15 \text{ К}), & \rho_{\text{воздух}} &= 0 & \text{при } x > 5 \text{ м}. \end{aligned}$$

Расчет ведется на сетках с числом узлов 500 и 5000 до момента времени $t_{\text{fin}} = 0.002$ с.

Наилучшими значениями диссипативных регуляризационных параметров являются значения $\alpha = 0.5$, $Sc = 1$, $Pr = 4$. Устойчивый расчет с этими параметрами обеспечивается при максимальном числе Куранта $\beta = 0.2$. Размеры пространственного шага равны соответственно $h = 0.02$ м и 0.002 м. Шаги по времени составляют соответственно, примерно, 2×10^{-6} с и 2×10^{-7} с.

Результаты расчетов на сетках 500 и 5000 приведены на фиг. 6 и 7.

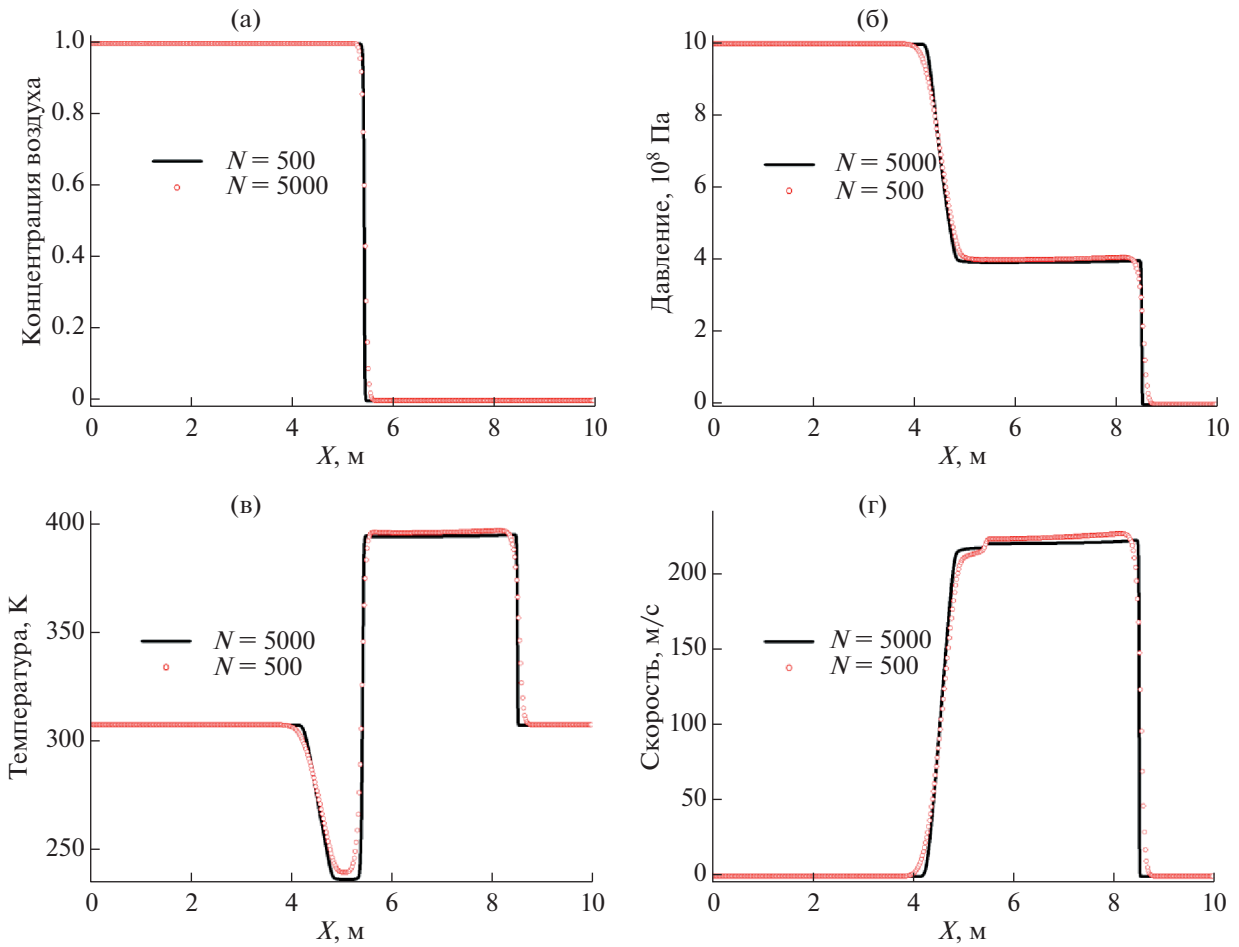
На приведенных распределениях видны характерные особенности течения – волна разрежения в воздухе в зоне x от 4 до 5 м, граница между фазами воздух и вода при $x \sim 5.5$ м и ударная волна в воде при $x \sim 8.5$ м. Хорошо видно достаточно малое отличие результатов, полученных на сетках 500 и 5000 узлов, что говорит о хорошей точности алгоритма. Отметим, что полученные результаты очень близко соответствуют данным из [19], несмотря на то что в цитируемой работе используется метод высокого порядка точности, в то время как КГД-алгоритм формально обладает первым порядком аппроксимации по времени и пространству.

На фиг. 8 дополнительно показана сходимость численного решения при сгущении пространственной сетки до значения 20 000. Приведен фрагмент графика скорости, на котором наиболее заметны отличия в численных результатах. Видно, что нефизичный уступ в распределении скорости в зоне взаимодействия воды и воздуха сглаживается при уменьшении шага по пространству.

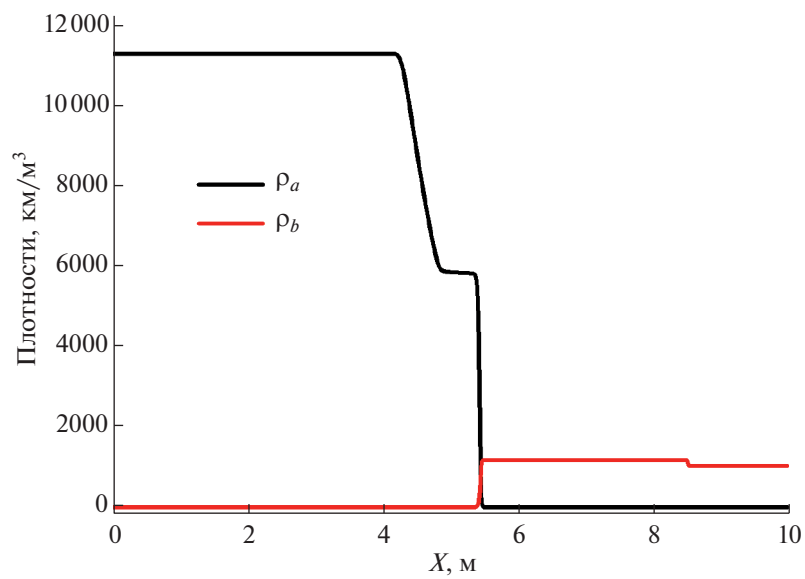
При уменьшении давления воздуха на разрыве численные эксперименты показывают рост неустойчивости скорости на интерфейсе, отмеченной на фиг. 8, что в дальнейшем приводит к неустойчивости счета всей задачи в целом.

Численные эксперименты и анализ алгоритма показали, что для получения устойчивого численного решения в задаче моделирования смеси газ–жидкость необходимо, чтобы давление газа было порядка или больше значения дополнительного давления в жидкости

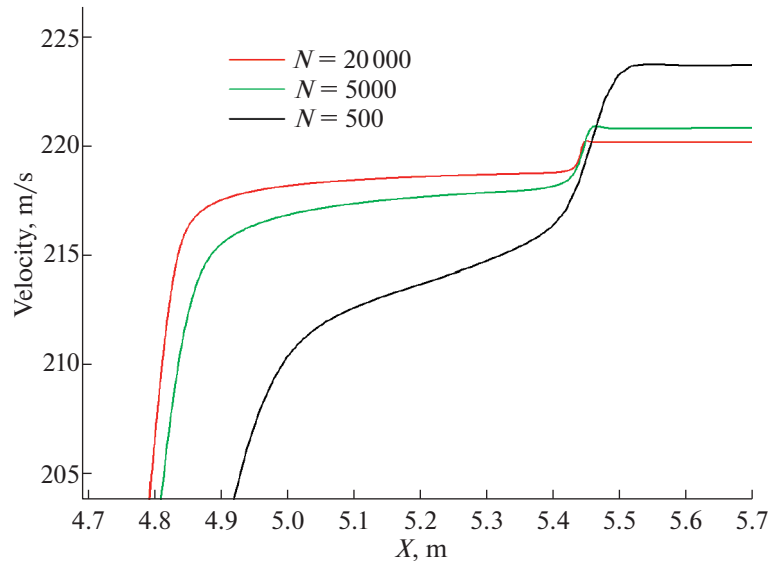
$$p_a \geq p_{b\infty}. \quad (21)$$



Фиг. 6. Распад разрыва в среде воздух–вода.



Фиг. 7. Плотности компонент ($N = 5000$).



Фиг. 8. Сходимость алгоритма по сетке. Фрагмент распределения скорости.

В случае, когда при выполнении условия (21) давления компонент на границе между газом и жидкостью одинаковы, в численном расчете граница контактного разрыва остается неподвижной, скорости течения остаются строго нулевыми, а сама граница размазывается искусственной вязкостью на одну ячейку пространственной сетки.

В случае, когда соотношение (21) не выполняется, численное решение становится неустойчивым, что связано с упрощенным описанием флюида-жидкости с помощью двучленного уравнения Ван-дер-Ваальса.

В случае, когда требуется численное решение задачи с малыми значениями давления газа, при которых условие (21) не выполняется, возможно искусственно понизить величину $p_{b\infty}$. Однако уменьшение этого значения приводит к нефизичному занижению скорости звука в жидком флюиде, расчет течения остается устойчивым, но его результаты оказываются неадекватными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен чрезвычайно простой математический подход к моделированию течений смеси существенно разных флюидов. Метод описывает течение смеси в рамках уравнений переноса плотностей компонент, общей скорости и общей температуры смеси флюидов. Температуры и скорости компонент предполагаются одинаковыми. Граница между компонентами в явном виде не выделяется.

Для течений смеси газов данный алгоритм позволил моделировать сверхзвуковое нестационарное течение с существенно разными показателями адиабаты компонент без проявления вычислительных колебаний плотности компонент газов в зоне их малых значений.

Модификация метода для расчета неперемешивающихся флюидов типа газ-жидкость была выполнена с применением уравнения состояния в виде упрощенного уравнения Ван-дер-Ваальса. Это позволило проводить расчеты без явного выделения границы раздела при условии соблюдения требований на соотношение давления газа и добавки, определяющей скорость звука в жидкости.

Точность КГД-расчета варьируется в зависимости от выбора коэффициентов регуляризации α , Sc и Pg . Адекватный выбор (tuning) этих коэффициентов позволяет приблизиться по точности к схеме второго порядка. Результаты КГД-расчетов при адекватном выборе диссипативных коэффициентов оказались близки как к автомодельному решению, так и к данным, полученным с помощью алгоритмов второго порядка точности (см. [10], [11], [19]). Наблюдается уверенная сходимость метода по сетке.

Изложенный подход может быть дополнен включением в него реальных коэффициентов вязкости и теплопроводности смеси путем замены искусственных значений соответствующих ко-

эффицентов на реальные величины с сохранением регуляризирующих КГД-добавок. По аналогии с уже работающими КГД-алгоритмами для однокомпонентного газа описанный метод был обобщен на многомерные течения с применением неструктурированных сеток при его реализации в рамках платформы OpenFOAM (см. [14]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2002.
2. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
3. *Головачев Ю.П.* Численное моделирование течений газа в ударном слое. М.: Наука, Физматлит, 1996.
4. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета газодинамических течений. М.: Научный мир, 2007.
5. *Elizarova T.G., Zlotnik A.A., Shil'nikov E.V.* Regularized equations for numerical simulation of flows of homogeneous binary mixtures of viscous compressible gases // *Comp. Math. and Math. Phys.* 2019. V. 59. № 11. P. 1832–1847.
<https://doi.org/10.1134/S0965542519110058>
6. *Elizarova T.G., Shil'nikov E.V.* Numerical simulation of gas mixtures based on the quasi-gasdynamic approach as applied to the interaction of shock wave with a gas bubble // *Comp. Math. and Math. Phys.* 2021. V. 61. № 1. P. 118–128.
<https://doi.org/10.1134/S096554252101004>
7. *Shilnikov E.V., Elizarova T.G.* About one numerical method of compressible multifluid flow modelling in Euler formulation. In: *Proc. IRF2020: 7th Inter. Conf. Integrity–Reliability–Failure*. J.F. Silva Gomes and S.A. Me-guid (ed.), INEGI-FEUP, 2020. P. 613–622.
8. *Хайталиев И.Р., Шильников Е.В.* Исследование свойств квазигазодинамической системы уравнений на решении задачи Римана для смеси газов. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, № 52 2021 г. (перевод: Shilnikov E.V., Khaytaliev I.R. Investigation of the properties of a quasi-gas-dynamic system of equations based on the solution of the Riemann problem for a mixture of gases. Preprints KIAM RAS, 2021, № 52, 12 p).
9. *Abgrall R., Karni S.* Computations of compressible multifluids // *J. Comp. Phys.* 2001. № 2. P. 594–623.
10. *Banks J.W., Schwendeman D.W., Karila A.K., Henshaw W.D.* A high-resolution Godunov method for compressible multi-material flow on overlapping grids // *J. Comp. Phys.* 2007. V. 223. Iss. 1. P. 262–297.
11. *Borisov V.E. and Rykov Yu.G.* Modified Godunov method for multicomponent flow simulation // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. 1250 012006.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1250/1/012006>
12. *Борисов В.Е., Рыков Ю.Г.* Численное моделирование течений многокомпонентных газовых смесей с использованием метода двойного потока // *Матем. моделирование.* 2020. Т. 32. № 9. С. 15–29.
13. *Zlotnik A., Fedchenko A., Lomonosov T.* Entropy correct spatial discretizations for 1D regularized systems of equations for gas mixture dynamics // *Symmetry.* 2022. V. 14. P. 2171.
<https://doi.org/10.3390/sym14102171>
14. github.com/unicfdlab/QGDsolver
15. *Kraposhin M.V., Smirnova E.V., Elizarova T.G., Istomina M.A.* Development of a new OpenFOAM solver using regularized gas dynamic equations // *Comp. & Fluid.* 2018. V. 166. P. 163–175.
<https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.02.010>
16. *Елизарова Т.Г.* Осреднение по времени как приближенный способ построения квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2011. Т. 51. № 11. С. 2096–2105 (перевод: Elizarova T.G. Time averaging as an approximate technique for constructing quasi-gasdynamic and quasi-hydrodynamic equations // *Comp. Math. and Math. Phys.* 2011. V. 51. № 11. P. 1973–1982).
17. *Шеретов Ю.В.* Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.-Ижевск, 2009.
18. *Denner F., Cheng-Nian Xiao, Berend G.M. van Wachem* Pressure-based algorithm for compressible interfacial flows with acoustically-conservative interface discretization // *J. Comp. Phys.* 2018. V. 367. P. 192–234. ISSN 0021-9991.
<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.04.028>
19. *Keiichi Kitamura, Meng-Sing Liou, Chih-Hao Chang* Extension and comparative study of AUSM-family schemes for compressible multiphase flow simulations // *Commun. Comp. Phys.* 2014. V. 16. № 3. С. 632–674.
<https://doi.org/10.4208/cicp.020813.190214a>
20. *Liou, Meng-Sing, Chih Chang, Loc Hoang Nguyen, Theo G. Theofanous* How to solve compressible multifluid equations: a simple, robust and accurate method // *AIAA J.* 2007. V. 46. P. 2345–2356.