МЕТОД КОНЦЕНТРАЦИЙ РАСЧЕТА НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕЧЕНИЙ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

С.М. БАХРАХ, В.Ф. СПИРИДОНОВ

РФЯЦ – ВНИИЭФ, Саров, Россия

e-mail: smb@vniief.ru

The problems are discussed of localizing interfaces, not coinciding with computational grid lines. This brings up two main problems: computing quantities in the grid meshes, containing several agents, and computing convectional flows from such meshes. The principles of solving the above problems, used in LEGAK technique are presented. Those principles allow computing interfaces with large distortions. The examples of the above problems computation are offered.

Численное моделирование нестационарных течений неоднородной (многокомпонентной) сплошной среды, как известно, сопряжено с большими трудностями. Они порождаются двумя противоречивыми требованиями к численным методикам: возможностью расчета течений с большими деформациями контактных границ и необходимостью обеспечения высокой (диктуемой конкретными прикладными задачами) точности расчетов.

Можно выделить две группы конечно-разностных методов, использующих регулярную счетную сетку для расчета нестационарных течений сплошной среды. Методы первой группы [1-5] характеризуются тем, что границы раздела сред совпадают с линиями счетной сетки, через которые не допускается перетекание веществ (лагранжевы линии). Счетная сетка исходной системы полностью (на лагранжевых линиях) или частично (внутри однородной среды между лагранжевыми линиями) увлекается веществом, адаптируясь к течению. Это обеспечивает высокую точность расчетов при таком числе счетных точек, которое было бы недостаточным при использовании счетных сеток, не адаптирующихся к течению. Однако использование методов этой группы для описания течений с большими деформациями границ раздела сред встречает серьезные трудности.

Стремление преодолеть эти трудности привело к созданию методов, использующих нерегулярную счетную сетку [6-8].

Ко второй группе принадлежат методы, в которых границы раздела сред не совпадают с линиями счетной сетки. При таком подходе возникает проблема локализации контактных границ.

Для выделения контактных границ применяется ряд способов. В методике [9], например, граница раздела сред аппроксимируется некоторой линией, движение которой определяется в процессе счета. В методах "частиц в ячейках" [10, 11] сплошная среда представляется совокупностью различных частиц, которые движутся относительно счетной сетки.

В тех случаях, когда контактные границы (границы раздела различных веществ) не совпадают с линиями счетной сетки, появляются счетные ячейки, содержащие несколько различных веществ (смешанные ячейки). Естественным является введение массовых и объемных долей (каждого вещества в счетной ячейке - массовых $\alpha_i = \frac{m_i}{m}$ и объемных $\beta_i = \frac{V_i}{V}$ концентраций.

Использование концентраций явилось исходной идеей алгоритмов ЭГАК [12,13] и ЛЭГАК [14], которые разрабатываются в РФЯЦ-ВНИИЭФ с начала 70-х годов.

Для всех методов, использующих регулярную счетную сетку, линии которой не совпадают с границами раздела веществ, возникают две проблемы, от решения которых зависит эффективность алгоритма.

Первая из этих проблем заключается в том, что необходима модель для расчета состояния веществ в смешанных ячейках. Эта модель включает соотношения для расчета величин, определяющих состояние каждого из веществ, находящихся в смешанной ячейке: массовых и объемных концентраций, удельной внутренней энергии e_i , определенной на единицу массы данного вещества, и плотности $\rho_i = \frac{m_i}{V_i}$ компонентов. Кроме того, должен быть указан алгоритм для расчета давления в смешанных ячейках.

Вторая проблема - это счет потоков компонентов из смешанных ячеек. Дело в том, что если для счета конвективных потоков используется схема первого порядка по пространству, то из-за счетной диффузии контактная граница будет размываться, причем число смешанных ячеек будет увеличиваться в процессе счета.

---

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 99-01-00812).

Одним из способов ограничения счетной диффузии является использование схем высокого порядки точности для счета конвективных потоков. На этом пути, однако, возникают свои трудности. В частности, возникает необходимость обеспечения монотонности решения. Это может достигаться введением алгоритмов корректировки потоков. Примером использования такого подхода является работа [15]. Однако при таком подходе число смешанных ячеек, возникающих в окрестности контактной границы, является относительно большим (порядка пяти).

В методах частиц счет конвективных потоков определяется движением дискретных частиц.

При непрерывном представлении потоков для ограничения счетной диффузии был предложен донорно-акцепторный алгоритм, основанный на анализе поля концентраций. Идея этого алгоритма заключается в том, что при определении потока из смешанной ячейки (донорная ячейка) анализируется ячейка, в которую втекает поток (акцепторная ячейка). Алгоритм счета потоков предусматривает, что из донорной ячейки вытекает то вещество, которое содержится в акцепторной, и только по исчерпании первого вещества из смешанной ячейки начинает вытекать второе.

Этот алгоритм обеспечивает в одномерном случае локализацию контактной границы с точностью до одной ячейки. В многомерном случае проводится более детальный анализ поля концентраций для определения потока вещества из смешанной ячейки.

Остановимся несколько подробнее на алгоритмах расчета состояния в смешанных ячейках.

Многокомпонентность может являться следствием физических процессов, таких как химические и термоядерные реакции, фазовые переходы, турбулентное перемешивание.

Однако, как указывалось выше, существует другой, "нефизический", механизм появления смешанных ячеек. Такие ячейки могут возникнуть тогда, когда линии счетной сетки не совпадают с границами раздела сред. Смесь веществ возникает из-за отказа от информации о точном положении контактной границы. Правила расчета состояния смеси в этих случаях определяются как особенностями численных методик, так и физическими соображениями. Основным критерием применимости той или иной модели является сопоставление результатов расчетов с известными решениями.

Рассматривались различные модели для расчёта состояния вещества в смешанных ячейках. Основными среди этих моделей являются:

1. Условия теплового и динамического равновесия (равенство температур и давлений компонентов смеси) [16]. Такая модель использовалась в методике СИГМА [3] и на начальном этапе в методике ЭГАК. Применение этой модели в в ряде задач приводило к счетным "феноменам", что ограничило ее использование.
2. Условия динамического равновесия (равенство давлений компонентов). Эта модель используется в методике ЭГАК [12, 13]. Однако этот алгоритм также приводит к счетным феноменам.
3. Условие одинакового удельного сжатия компонентов в смешанной ячейке. Это условие следует из предположения, что скорость контактной границы $\vec{u}_i$, находящейся внутри смешанной ячейки, определяется по скоростям $\vec{u}$ в узлах счетной сетки с помощью линейной интерполяции, откуда следует, что

$$\operatorname{div} \vec{u}_i = \operatorname{div} \vec{u}.$$

Изменение плотности компонентов определяется соотношениями

$$\frac{1}{\rho_i}\frac{d\rho_i}{dt} = -\operatorname{div} \vec{u}_i \to \frac{1}{\rho_i}\frac{d\rho_i}{dt} = -\operatorname{div} \vec{u} = \frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt}.$$

Основные идеи метода концентраций наиболее полно и последовательно реализованы в методике ЛЭГАК [4]. Методика ЛЭГАК - это конечно-разностная методика. Для разностной аппроксимации исходных интегродифференциальных уравнений используется регулярная четырех угольная счетная сетка. При этом временная и пространственная аппроксимации строятся на основе принципа полной консервативности.

Базовые принципы конструирования методики ЛЭГАК в известной мере традиционны. Как и во многих других методиках, это:

1. Разбиение физической области решения задачи на математические подобласти, в каждой из которых задается счетная сетка со своими параметрами. На границах между счетными областями задаются внутренние граничные условия.

2. Расщепление по физическим процессам.

3. Расчет течения сплошной среды, который, как и во многих других методиках, осуществляется в два этапа:

- на первом (лагранжевом) этапе на каждом временном шаге сетка увлекается веществом и рассчитываются изменения величин за счет действующих сил (давления, девиатора тензора напряжений, внешних сил и т. д.);
- на втором (эйлеровом) этапе происходит перестроение счетной сетки по некоторым законам, и рассчитываются конвективные потоки величин с одной сетки на другую.

В предельных случаях счетная сетка на втором этапе может не двигаться (соответствует расчету в лагранжевых переменных) или возвращаться в первоначальное положение (соответствует расчету в эйлеровых переменных).

Одной из основных особенностей методики ЛЭГАК является возможность расчета течений с большими деформациями контактных границ и способ реализации этой возможности.

Для расчета течений с большими деформациями в методике ЛЭГАК в соответствии с идеями метода концентраций происходит отказ от лагранжева представления контактных границ. В этом случае возникают ячейки, содержащие несколько веществ, вводятся в рассмотрение массовые и объемные концентрации веществ, а также другие величины, характеризующие каждое вещество (e_i, Y_i, σ_i и т. д.). Для расчета конвективных потоков из смешанных ячеек на втором этапе используется специальный донорно-акцепторный алгоритм, ограничивающий счетную диффузию, так что контактная граница локализована внутри одной ячейки.

Методика ЛЭГАК реализована в настоящее время на языке Fortran-90, функционирует на ЭВМ, поддерживающих стандарт F-90, обладает развитым сервисом (в свое время на БЭСМ-6 она была реализована в рамках комплекса программ СИГМА). Методика ЛЭГАК успешно применяется для расчетов сложных нестационарных течений сплошной среды.

Для обеспечения точности используются согласованные разностные аппроксимации. Так, на лагранжевом этапе интегрирование всех уравнений системы производится по элементу пространства и используется аппроксимация по времени, повышающая порядок сохранения полной энергии [17,18].

Для пересчета величин на новую счётную сетку используется согласованная с потеками массы аппроксимация потоков количества движения [19]. Для учета различных физических процессов последовательно используется метод расщепления.

Примером может служить реализация счета упругопластических и вязкостных течений [20-22].

В случае неоднородной среды для расчета упругопластических течений возможно использование двух подходов.

Первый подход предполагает, что напряженное состояние каждого вещества характеризуется своим девиатором тензора напряжений; в случае смеси веществ девиатор тензора напряжений среды определяется через девиаторы тензора напряжений компонентов и объемные концентрации компонентов по тем же правилам, что и давление смеси.

Второй подход исходит из того, что имеется общий для всех веществ девиатор тензора скоростей деформаций, а при счете девиатора тензора напряжений смеси веществ модуль сдвига и предел текучести смеси вычисляются через модули сдвига и пределы текучести компонентов с учетом концентраций веществ.

Исходя из односкоростного приближения, принятого для описания смеси, предпочтение было отдано второму подходу.

Метод концентраций оказался очень эффективным для расчета течений сплошной среды. Примером могут служить результаты расчетов, представленные в названных выше работах.

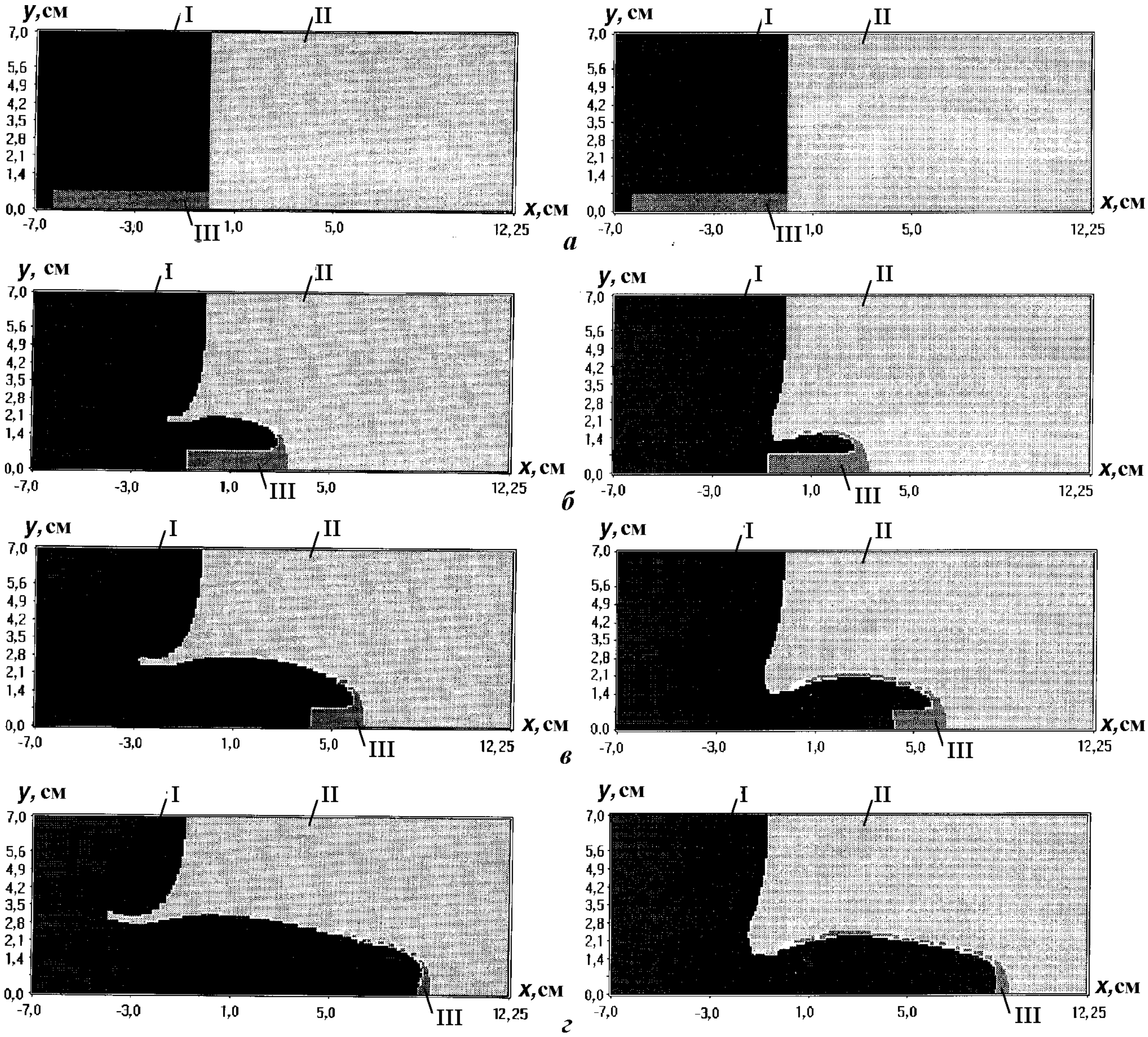
В качестве еще одного примера численных расчетов приведем следующую задачу: железный цилиндрический ударник внедряется под углом 90° в грунт; исследуется зависимость диаметра образующейся каверны от диаметра ударника.

Из теории известно, что в чисто газодинамическом приближении существует подобие в отношении диаметра каверны и диаметра ударника. Вместе с тем из экспериментов по внедрению ударников в грунт следует, что подобие при малых диаметрах ударника нарушается. Диаметр каверны оказывается меньшим, чем по теории. Это указывает на влияние вязкостных свойств грунта.

Проведены серии расчетов с различными диаметрами ударника в чисто газодинамическом приближении, а также с учетом вязкостных свойств грунта, результаты которых качественно подтверждают экспериментальные закономерности.

Проведены расчеты с тремя диаметрами ударника (14, 60, 114 мм). Скорость ударника 2.0 км/с, сетка была выбрана квадратная, число точек 221 x 84. При больших диаметрах ударника диаметры каверн в идеальной и вязкой средах практически совпадают.

На рисунке приводятся картины внедрения ударника с d = 14 мм в различные среды: слева среда - идеальная жидкость, справа - вязкая жидкость. Диаметры каверн - 54 и 36 мм соответственно.



Внедрение ударника в грунт: слева - грунт-идеальная среда; справа - грунт-вязкая среда; а -t = 0; б -t = 28 мкс; в -t = 53 мкс; г -t = 78 мкс; I – вакуум; II - грунт, III – ударник.

Таким образом, результаты прямого численного моделирования процесса проникания ударника в грунт свидетельствуют, что отмеченное в экспериментах нарушение подобия может быть объяснено наличием вязкостных свойств грунта.

Авторы благодарят Е.В. Шувалову за предоставление результатов расчетов.

Литература

1. Дмитриев Н.А., Дмитриева Л.В., Малиновская Е.В., Софронов И.Д. Методика расчета двумерных нестационарных задач газодинамики в переменных Лагранжа: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР.1976.
2. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
3. Баталова М.В., Бахрах С.М., Винокуров 0.А. и др. // Тр. Всес. семинара по численным методам механики вязкой жидкости. Новосибирск, 1969. С. 285.
4. Шульц У.Д. // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 9.
5. Hirt C.W., Amsden A.A., Cook J.L. // J. Comp. Phys. 1974. Vo1. 14 P. 3.

6. Глаголева Ю.П., Жогов Б.М, Софронов И.Д. и др. // Числ. методы мех. спл. среды. 1972. Т. 3, № 2. С. 18.
7. Дьяченко В.Ф. // Докл АН СССР. 1967. Т. 174, № 4. С. 401.
8. Sofronov J.D., Rasskasova V.V., Nesterenko L.V. // Numerical Methods in Fluid Dynamics / Ed. N.N. Yanenko, Yu.l. Shokin. M.: Mir Publishers, 1984. P. 82.
9. Нох В.Ф. // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир. 1967. С. 128.
10. Харлоу Ф.Х. // Там же. С. 316.
11. Анучина Н.Н., Петренко В.Е., Шокин Ю.И., Яненко Н.Н. // Числ. методы мех. спл. среды. 1970. Т.1, №1.С. 3.
12. Бахрах С.М., Глаголева Ю.П. , Самигулин С.М. и др. // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566
13. Bakhrah.S.M., Samigulin M.S., Sevastianov V.P., Yanilkin Yu. V. // Numerical Methods in Fluid Dynamics / Ed. N.N. Yanenko, Yu.I. Shokin. M: Mir Publishers, 1984. P. 122.
14. Бахрах СМ, Спиридонов ВФ, Шанин АА // Докл. АН СССР. 1984. Т. 278, № 4. С. 566.
15. Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф., Трофимова Л.Я., Шанин А.А. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 2. С. 76.
16. Бахрах С.М., Зубарев В.Н., Шанин А.А. // Горение и взрыв. М.: Наука, 1972. С. 554.
17. Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф., Ладагин В.К. Математические модели течений жидкости. // Тр. VI Всес, семинара по численным методам механики вящей жидкости. Новосибирск, 1978. С. 51.
18. Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф. // Вопросы атомной науки техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1987. Вып. 2. С. 11.
19. Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф. // Там же. 1988. Выл. 4. С. 38.
20. Бахрах С.М., Ковалев Н.П. // Тр. II Всес. конф. по численным методам решения задач теории упругости и пластичности. Новосибирск: Наука, 1971. С. 68.
21. Бахрах С.М., Ковалев Н.П., Павлуша И.Н. // Тр. III Всес. конф. по численным методам решения задач теории упругости и пластичности. Новосибирск: Наука, 1974. С. 22.
22. Бахрах С.М., Ковалев Н.П., Торопова Т.А. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 4. С. 53.