

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 52 за 2021 г.</u>

ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

#### И.Р. Хайталиев, Е.В. Шильников

Исследование свойств квазигазодинамической системы уравнений на решении задачи Римана для смеси газов

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Хайталиев И.Р., Шильников Е.В. Исследование свойств квазигазодинамической системы уравнений на решении задачи Римана для смеси газов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 52. 12 с. https://doi.org/10.20948/prepr-2021-52 https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-52

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

И.Р. Хайталиев, Е.В. Шильников

## Исследование свойств квазигазодинамической системы уравнений на решении задачи Римана для смеси газов

#### Хайталиев И. Р., Шильников Е. В.

# Исследование свойств квазигазодинамической системы уравнений на решении задачи Римана для смеси газов

На примере решения задачи Римана о распаде газодинамического разрыва между разными газами исследуется точность и устойчивость явного численного алгоритма моделирования течений смеси сжимаемых газов в околозвуковом режиме. Алгоритм построен с помощью метода конечных объемов на основе регуляризованных уравнений газовой динамики для смеси газов. Найден способ подавления нефизических осцилляций, возникающих за контактным разрывом.

*Ключевые слова:* регуляризованные уравнения газовой динамики, смеси газов, задача Римана, точность решения, контактный разрыв, устойчивость алгоритма

#### Evgeny Vladimirovich Shilnikov, Ismatullo Ramazanovich Khaytaliev

### 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

The accuracy and stability of an explicit numerical algorithm for modeling the flows of a mixture of compressible gases in the transonic regime are investigated by the example of solving the Riemann problem on the decay of a gas-dynamic discontinuity between different gases. The algorithm is constructed using the finite volume method based on the regularized gas dynamics equations for a mixture of gases. A method for suppressing nonphysical oscillations occurring behind the contact discontinuity is found.

*Key words:* regularized equations of gas dynamics, gas mixtures, Riemann problem, solution accuracy, contact discontinuity, algorithm stability

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 19-01-00262-а.

## Введение

Квазигазодинамическая (КГД) или регуляризованная система уравнений газовой динамики [1] в настоящее время широко используется в ряде научных и инженерных приложений. Особенно этот подход эффективен для численного моделирования нестационарных течений. Многие инженерные задачи, такие как задачи о перемешивании газовых потоков в реакторах и камерах сгорания двигателей, о вытекании струй при авариях газопроводов, о процессах горения и детонации, а также множество других, включают в себя моделирование течений газовых смесей разного состава. Поэтому практическая важность моделирования таких течений не вызывает сомнений.

Построение КГД моделей для нестационарных течений газовых смесей стало естественным расширением имеющегося семейства КГД алгоритмов. Два варианта таких моделей были использованы для моделирования чрезвычайно медленного процесса неустойчивости Рэлея–Тейлора в двухкомпонентных газовых смесях в широком диапазоне чисел Атвуда [2]. В работе [3] на основе КГД системы уравнений для смеси нереагирующих газов проведено моделирование взаимодействия плоской ударной волны, распространяющейся в воздухе, с цилиндрическим пузырьком другого газа. Были рассмотрены два случая плотности газа в пузырьке: более тяжелый и более легкий, чем воздух.

Результаты, полученные в этих работах, показывают хорошие свойства КГД подхода. Общая картина течения и основные характерные особенности сложных течений находятся в хорошей корреляции как с экспериментами, так и с численными результатами других авторов. Отмечено улучшение качества получаемого решения при дроблении разностной сетки. Однако детальный анализ точности алгоритма на таких задачах затруднен отсутствием точных решений указанных задач. В данной работе алгоритм, предложенный в [3], апробирован на решении одномерной задачи Римана о распаде разрыва между различными газами. Основное внимание уделено экспериментальному исследованию точности и устойчивости алгоритма.

## Математическая модель и компьютерная реализация

Для моделирования используется одножидкостная КГД система уравнений для смеси газов, описанная в [3]. Рассматривается газовая смесь без химических реакций. Уравнение неразрывности расщеплено на уравнения для плотностей отдельных компонент, без явного выделения межфазных границ. Границы между компонентами смеси формируются автоматически в областях больших градиентов концентраций компонент. Считается, что локальное равновесие между молекулами разного сорта наступает практически мгновенно, поэтому скорость и температура в поле течения одинаковы для всех компонент смеси. Тем самым уравнения импульса и полной энергии записываются для смеси в целом. Процессы физической вязкости и теплопроводности, если они учитываются, рассматриваются на уровне всей смеси в целом и определяются коэффициентами вязкости и теплопроводности для смеси. Взаимная диффузия между компонентами смеси не учитывается.

Отметим, что такая модель описания течений смеси газов является весьма распространенной. В частности, она применяется в ряде работ Р. Абгралла и С. Карни, например, [4-6], в которых разностная аппроксимация проводится на основе TVD-MUSCL схемы. Аналогичный подход в сочетании с методом типа метода Годунова применен в работах [7-8].

В научной литературе распространены и другие модели смеси газов. Так, например, в [9] рассматривается многожидкостная модель, когда каждая из компонент смеси имеет не только свою собственную плотность, но и свои скорости и давления. В результате в правых частях уравнений появляются обменные члены. Такая модель хорошо справляется с моделированием течений смеси жидкостей и газов. Однако наличие обменных членов приводит к необходимости интегрирования на каждом временном шаге системы ОДУ, которая, как правило, оказывается жесткой. Это приемлемо в случае моделирования течений реагирующих газов [10], когда сильно различающиеся скорости химических реакций в любом случае приводят к жесткой системе ОДУ. При отсутствии химических реакций представляется предпочтительным обойтись без этого усложнения.

В одномерной постановке при отсутствии внешних сил и источников энергии КГД система для смеси газов имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho^k (u - w)) = 0, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u (u - w)) + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \Pi}{\partial x}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}((E+p)(u-w)) = -\frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\Pi \cdot u).$$
(3)

Здесь использованы стандартные обозначения для газодинамических переменных,  $E = \rho(\varepsilon + u^2/2)$  – полная энергия, плотность  $\rho = \sum_k \rho^k$ , и давление  $p = \sum_k p^k$  смеси – суммы парциальных плотностей и давлений. k – номер компоненты газовой смеси. Потоки массы (а с ними и поток импульса), тепла и тензор вязких напряжений содержат регулиризирующие добавки с множителем  $\tau$ :

$$w = \frac{\tau}{\rho} \left( \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) + \frac{\partial p}{\partial x} \right),$$

$$q = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} - \tau \rho u^2 \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + p \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\rho} \right) \right),$$

$$\Pi = \frac{4}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x} + \tau \left[ 2u \frac{\partial p}{\partial x} + (\rho u^2 + \gamma p) \frac{\partial u}{\partial x} \right].$$
(4)

Коэффициент  $\tau$  имеет размерность времени и может быть представлен в виде:

$$\tau = \alpha \frac{h}{c},\tag{5}$$

где с – это скорость звука, h – шаг пространственной сетки,  $\alpha$  – численный коэффициент, который выбирается из соображений точности и устойчивости численного алгоритма. Все газовые компоненты считаются идеальными газами, то есть  $p^k = \rho^k R^k T$ , где  $R^k$  – газовая постоянная k-ой компоненты смеси. Параметры газовой смеси (газодинамические и термодинамические) зависят от массовых долей частиц и рассчитываются обычным способом [2, 4]. Для случая двухкомпонентной смеси имеем:

$$p = p^{a} + p^{b} = \rho RT = \rho \varepsilon(\gamma - 1),$$

$$R = \frac{R_{a}\rho_{a} + R_{b}\rho_{b}}{\rho} = c_{p} - c_{v}, \quad \gamma = \frac{c_{p}}{c_{v}}, \quad \gamma - 1 = \frac{R}{c_{v}}$$

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_{a}\rho_{a} + \varepsilon_{b}\rho_{b}}{\rho} = c_{v}T, \quad c_{v} = \frac{c_{va}\rho_{a} + c_{vb}\rho_{b}}{\rho}.$$

Для численной реализации используется явная по времени консервативная разностная схема со вторым порядком аппроксимации всех пространственных производных [11], построенная по методу конечных объемов. Все газодинамические переменные отнесены к центрам ячеек. Их значения на границах ячеек рассчитываются с использованием линейной интерполяции. Шаг по времени вычисляется по формуле

$$\Delta t = \beta \cdot \min_{i} \frac{h}{c_i + |u_i|},\tag{6}$$

где минимум берется по всем ячейкам сетки на данный момент времени, i – номер ячейки,  $\beta < 1$  – числовой коэффициент (число Куранта), который подбирается экспериментально.

### Тестовая задача и анализ результатов моделирования

В качестве теста решается одномерная задача Римана о распаде разрыва между двумя различными газами, не находящимися в начальный момент в состоянии газодинамического равновесия. Постановка задачи взята из [8]. Начальные условия в области  $0 \le x \le 1$  различаются не только давлением, плотностью и скоростью в двух частях расчетной области, но и свойствами газа (воздуха и гелия) в этих частях (см. табл. 1).

Таблица 1

	$ ho_{_{He}}$	$ ho_{Air}$	и	Молекулярные массы	р	γ
$0 \le x \le 0.5$	14.54903	0.0	0.0	He, 4.003	10 <sup>7</sup>	5/3
$0.5 \le x \le 1$	0.0	1.16355	0.0	Воздух, 28.96	10 <sup>5</sup>	7/5

Начальные значения параметров смеси

Размер расчетной области и конечное время проведения расчета  $(t_{fin} = 2.0 \cdot 10^{-4})$  согласованы таким образом, чтобы возмущения от распада разрыва не дошли до границ. Поэтому на границах области ставятся условия постоянства всех газодинамических величин. Мы пренебрегаем физической вязкостью  $\mu$  и теплопроводностью  $\kappa$  газов и используем уравнения смеси в формулировке Эйлера. Расчеты проводились на четырех равномерных расчетных сетках, состоящих из 100, 200, 400 и 800 ячеек.

На рис. 1 представлен график распределения плотности в конечный момент времени при расчете с параметром регуляризации  $\alpha$  из (5), равным 0.13, на пространственной сетке с количеством ячеек, равным 400. Основные особенности: ударная волна (правый скачок плотности), контактный разрыв, совпадающий с границей раздела газов, волна разрежения (наклонная часть графика) хорошо совпадают с автомодельным решением, за исключением небольших колебаний за контактным разрывом. Они хорошо видны на рис. 2, где эта область изображена в увеличенном масштабе. Такие колебания наблюдались и в двумерных расчетах [3], но там они были едва заметны на фоне ударных волн. Следует отметить, что подавлению таких нефизических осцилляций, в результате которых плотности некоторых компонент могут становиться отрицательными в областях, где эти плотности малы, уделяется большое внимание в научной литературе. Так, в работах [4, 8] для этого применяется метод двойного потока, когда для аппроксимации конвективных специальные потоков границах ячеек применяются модификации на используемых численных методов.



*Рис. 1.* Распределение плотности в конечный момент времени, схема из [3].



Мы попробовали бороться с такими осцилляциями разными способами. Увеличение значения параметра регуляризации  $\alpha$  приводило только к большему размазыванию ударной волны, но на осцилляции практически не влияло. Введение в уравнения ненулевых коэффициентов «физических» вязкости и теплопроводности оказалось более продуктивным. Подбором этих коэффициентов удалось существенно (более чем на порядок) уменьшить амплитуду осцилляций. Однако полностью подавить колебания и избежать возникновения отрицательных плотностей компонент газа удается, только использовав модифицированную схему, в которой конвективный поток в уравнении (1) для воздуха аппроксимируется направленной разностью «против скорости». Результат расчета по схеме, модифицированной таким образом, на сетке из 400 ячеек приведен на рис. 3. Для сравнения на рис. 4 для этого расчета изображена та же область в таком же масштабе, как и на рис. 2. В процессе численных экспериментов было замечено, что аналогичная модификация уравнения для гелия сколько-нибудь существенного эффекта не дает.



*Рис. 3.* Распределение плотности в конечный момент времени, модифицированная схема.



Результаты расчетов на разных сетках представлены на рис. 5. При расчетах на более грубых сетках ударная волна оказывается более пологой, а полочка между ней и контактным разрывом размывается и на сетке из 100 ячеек (см. рис. 5 (а)) превращается в округлую выпуклость.



*Рис. 5.* Распределения плотности смеси, полученные в расчетах по модифицированной схеме при  $\alpha = 0.1$ ,  $\beta = 0.2$  на разных сетках.

## Исследование устойчивости алгоритма

В целях исследования устойчивости схемы были проведены расчеты с разными шагами по времени и по пространству для разных значений параметра  $\alpha$  как для схемы из [3], так и для модифицированной схемы. Для каждого выбранного значения  $\alpha$  проводилась серия расчетов с разными числами Куранта в (6). Выбиралось максимальное значение  $\beta$ , при котором решение задачи сохраняло устойчивость, т.е. не разваливалось и не возникало пилообразных возмущений таких, например, как на рис. 6, являющихся чисто разностным эффектом.



При расчетах по исходной схеме из [3] исследование устойчивости осложняется наличием в численном решении осцилляций за контактным разрывом, которые надо отличить от неустойчивости. В этом случае расчет считался устойчивым при таком значении  $\beta$ , при котором амплитуда осцилляций переставала меняться при его уменьшении. Результаты расчетов представлены на рис. 7 – 8.



Рис. 7. Зависимость допустимого числа Куранта  $\beta$  от числа ячеек сетки для  $\alpha = 0.13$ 



*Рис.* 8. Зависимость допустимого числа Куранта  $\beta$  от числа ячеек сетки для  $\alpha = 0.3$ 

Из этих графиков можно сделать следующие выводы. Во-первых, модифицированная схема позволяет вести расчет с более высоким значением числа Куранта  $\beta$ . Во-вторых, устойчивость модифицированной схемы действительно определяется условием Куранта (18), в отличие от схемы из [3], для которой максимальное допустимое значение  $\beta$  заметно уменьшается с уменьшением шага по пространству. В-третьих, допустимое число Куранта при расчетах по модифицированной схеме сильнее зависит от параметра

регуляризации  $\alpha$ , чем при расчетах по схеме [3]. Так, при приведенных на рис. 7 и 8 значениях  $\alpha$  допустимые значения  $\beta$  для модифицированной схемы отличаются почти в два раза, в то время как для схемы [3] отличия не превосходят 10%. На рис. 9 представлена зависимость допустимого для модифицированной схемы числа Куранта от параметра  $\alpha$ . Она характерна для схем на основе КГД систем уравнений.



*Рис. 9.* Зависимость допустимого числа Куранта β от параметра регуляризации α при расчетах по модифицированной схеме.

Видно, что наибольшая устойчивость наблюдается при значениях  $\alpha$ , лежащих в диапазоне  $0.2 \div 0.3$ . Однако при таких  $\alpha$  вносимая КГД регуляризаторами диссипация достаточно велика, что ухудшает качество получаемого решения. Поэтому обычно используют наименьшие значения  $\alpha$ , обеспечивающие достаточную устойчивость. Большинство наших расчетов проведено с  $\alpha = 0.13$ , при котором максимальное допустимое число Куранта  $\beta = 0.33$ .

#### Заключение

Проведено исследование точности и устойчивости КГД алгоритма моделирования течений газовых смесей. Показано, что дробление сетки по пространству ведет к повышению качества решения. Указан способ подавления нефизичных осцилляций решения за контактным разрывом. Подтверждена правомерность использования курантовского условия устойчивости.

Тестовые расчёты демонстрируют допустимую точность и надежность используемого подхода при правильном подборе параметров. Отметим, что структура как используемой модели, так и вычислительного алгоритма таковы, что их обобщение на случай многокомпонентной смеси идеальных газов не представляет никаких затруднений.

## Список литературы

1. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.

2. 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 // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2019, V. 59, N 11, pp.1832 -1847.

3. Елизарова Т.Г., Шильников Е.В. Численное моделирование газовых смесей в рамках квазигазодинамического подхода на примере взаимодействия ударной волны с пузырьком газа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2021, т. 61, №1, С. 75-86.

4. Abgrall R., Karni S. Computations of Compressible Multifluids // Journal of Computational Physics. 2001, №2, pp. 594-623.

5. Quirk J., Karni S. On the dynamics of a shock-bubble interaction // Journal of Fluid Mechanics. 1996, V. 318, pp. 129-163.

6. Abgrall R. How to Prevent Pressure Oscillations in Multicomponent Flow Calculations: A Quasi Conservative Approach // Journal of Computational Physics. 1996, V. 125, pp.150-160.

7. Иванов И.Э., Крюков И.А. Численное моделирование течений газа свойств многокомпонентного сильными разрывами среды С Математическое моделирование. 2007, т. 19, № 12, С. 89–100.

8. Борисов В.Е., Рыков Ю.Г. Численное моделирование течений многокомпонентных газовых смесей с использованием метода двойного потока // Математическое моделирование. 2020. т. 32, №9, С. 15-29.

9. Saurel R., Abgrall R. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows // Journal of Computational Physics. 1999, V. 150, pp. 425-467.

10. Lian Y.S., Xu K. A Gas-Kinetic Scheme for Multimaterial Flows and Its Application in Chemical Reactions // Journal of Computational Physics. 2000, V. 163, pp. 349-375.

11. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. 3-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1992.

## Оглавление

Введение	3
Математическая модель и компьютерная реализация	3
Тестовая задача и анализ результатов моделирования	6
Исследование устойчивости алгоритма	8
Заключение	10
Список литературы	11