Международная конференция
XVI Забабахинские научные чтения
г. Снежинск, РФЯЦ-ФНИИТФ, 2023

Татьяна Геннадьевна Елизарова

О регуляризованных уравнениях газовой динамики и их приложениях к численным расчетам

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

telizar@mail.ru

http://elizarova.imamod.ru/

План доклада

- 1. Квазигазодинамические уравнения, метод описания газодинамических течений
- 2. Пример моделирования взаимодействия вихревого течения с ударной волной
- 3. Модель для описания течений смеси газов на примере задачи о взаимодействии пузырька с ударной волной
- Заключительные замечания

История развития КГД подхода

1982 - КГД система выведена из уравнения Больцмана

1997 - КГД система выписана в виде законов сохранения

КГД системы уравнений развиваются в стенах ИПМ им. М.В. Келдыша более 20 лет и могут применяться для моделирования различных течений
https://keldysh.ru/

Система уравнений газовой динамики в виде законов сохранения

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0 \\[2ex]
\dfrac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \operatorname{div} \Pi \\[2ex]
\dfrac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}\left[\dfrac{\mathbf{j}_m}{\rho} \left(E + p \right) \right] + \operatorname{div} \mathbf{q} = \operatorname{div}\left(\Pi \mathbf{u} \right)
\end{cases}
$$

Здесь

ρ – плотность среды,

u – газодинамическая скорость,

p – давление,

E – полная энергия,

$\mathbf{j}_m$ – вектор плотности потока массы,

Π – тензор вязких напряжений,

q – вектор теплового потока

j, П и **q** следует выбрать таким образом, чтобы система уравнений газовой динамики являлась диссипативной и для нее были справедливы законы сохранения:

- массы
- импульса
- полной энергии
- момента импульса

Для уравнений газовой динамики должен выполняться второй закон термодинамики в виде теоремы о балансе энтропии

Традиционный способ замыкания - Система уравнений Навье-Стокса

$$\mathbf{j}_m^{NS} = \rho \mathbf{u}$$

$$\Pi_{NS} = \mu \left[\left(\nabla \otimes \mathbf{u} \right) + \left(\nabla \otimes \mathbf{u} \right)^T - \frac{2}{3} \operatorname{div} \mathbf{u} \right] + \xi I \operatorname{div} \mathbf{u}$$

$$\mathbf{q}_{NS} = -\kappa \nabla T$$

Уравнение баланса энтропии s

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho s)+\mathrm{div}(\mathbf{j}_m s)=-\mathrm{div}\left(\frac{\mathbf{q}}{T}\right)+X$$

$$X=\kappa\left(\frac{\nabla T}{T}\right)^2+\frac{(\Pi_{NS}:\Pi_{NS})}{2\mu T},$$

где

$$(\Pi_{NS}:\Pi_{NS})=\sum_{i,j=1}^{3}\Pi_{ij}^{NS}\Pi_{ij}^{NS}$$

Попытки расширить возможности системы уравнений Навье-Стокса и построить новые вычислительные алгоритмы вызывают постоянный интерес исследователей

Квазигазодинамические уравнения и другие модели – семейство так называемых двухскоростных (“two-velocity”) гидродинамических моделей

u – скорость, связанная с переносом импульса жидкой частицы

J/ ρ – скорость, связанная с переносом массы

Работы Н.А.Слезкина и С.В.Валландера (1951), Ю.Л.Климонтовича (1992), Б.В.Алексеева (1997), Brenner (2004), Ottinger (2005), Streater (2006) … и наши работы начиная с 1992 г.

Нетрадиционный способ замыкания - Система квазигазодинамических (КГД) уравнений

$$\mathbf{j}_m \neq \rho \mathbf{u}$$

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$$

$$\Pi = \Pi_{NS} + \Pi_{QGD}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_{NS} + \mathbf{q}_{QGD}$$

Как

найти

добавки?

Представляя уравнения в виде законов сохранения, получаем вид добавок для КГД уравнений

$$\mathbf{j}_m = \mathbf{j}_{NS} - \tau\left(\operatorname{div}\left(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}\right) + \nabla p\right)$$

$$\Pi = \Pi_{NS} + \tau\mathbf{u}\otimes\left[\rho\left(\mathbf{u}\cdot\nabla\right)\mathbf{u} + \nabla \boldsymbol{p}\right] +$$

$$+\tau \mathrm{I}\left[\left(\mathbf{u}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{p} + \gamma\boldsymbol{p}\operatorname{div}\mathbf{u}\right]$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_{NS} - \tau\rho\mathbf{u}\left[\left(\mathbf{u}\cdot\nabla\right)\varepsilon + p\left(\mathbf{u}\cdot\nabla\right)\left(\frac{1}{\rho}\right)\right]$$

Уравнение баланса энтропии s

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho s)+\mathrm{div}(\mathbf{j}_m s)=-\mathrm{div}\left(\frac{\mathbf{q}}{T}\right)+X$$

$$X=\kappa\left(\frac{\nabla T}{T}\right)^2+\frac{(\Pi_{NS}:\Pi_{NS})}{2\mu T}+\frac{p\tau}{\rho^2 T}\left[\mathrm{div}(\rho\mathbf{u})\right]^2+$$

$$+\frac{\tau}{\rho T}\left[\rho(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}+\nabla p\right]^2+\frac{\tau}{\rho\varepsilon T}\left[\rho(\mathbf{u}\cdot\nabla)\varepsilon+p\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}\right]^2,$$

где

$$(\Pi_{NS}:\Pi_{NS})=\sum_{i,j=1}^{3}\Pi_{ij}^{NS}\Pi_{ij}^{NS}$$

- Уравнение неразрывности:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_m = 0, \quad \vec{j}_m = \rho \left(\vec{U} - \vec{w} \right), \vec{w} = \frac{\tau}{\rho} \left(\nabla \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) + \nabla p \right)$$

- Уравнение импульса: $$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\vec{j}_m \otimes \vec{U} \right) + \nabla p = \nabla \cdot \hat{\Pi},$$

$$\hat{\Pi} = \hat{\Pi}_{NS} + \tau \vec{U} \otimes \left(\rho \left(\vec{U} \cdot \nabla \right) \vec{U} + \nabla p \right) + \tau \hat{I} \left(\left(\vec{U} \cdot \nabla \right) p + \gamma p \nabla \vec{U} \right)$$

$$\hat{\Pi}_{NS} = \mu \left((\nabla \otimes \vec{U}) + (\nabla \otimes \vec{U})^T - \frac{2}{3} \hat{I} \mathrm{div} \tilde{\mathrm{U}} \right)$$

- Уравнение энергии: $$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\vec{j}_m \left(e + \frac{p}{\rho} \right) \right) = \nabla \cdot \left(\hat{\Pi} \cdot \vec{U} \right) - \nabla \vec{q}$$
$$\vec{q} = \vec{q}_{NS} - \tau \rho \vec{U} \left(\left(\vec{U} \cdot \nabla \right) \vec{U} + p \left(\vec{U} \cdot \nabla \right) \frac{1}{\rho} \right)$$

- Идеальный газ: $$p = \rho R T, \quad u = e - \frac{1}{2} \vec{U} \cdot \vec{U}$$

Параметр регуляризации

Значение коэффициента τ выбирается равным или меньше, чем некоторое характерное время, зависящее от скорости звука **c** и шага пространственной сетки Δx :

$$\tau = \frac{\mu}{pSc} \sim \frac{\lambda}{c} \qquad \mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\omega} \sim p\tau Sc \qquad \kappa = \frac{\mu \gamma R}{\Pr(\gamma - 1)}$$

$$\lambda \to \Delta x \qquad \mu^{QGD} = p\tau Sc^{QGD} \qquad \kappa^{QGD} = \frac{\mu^{QGD} \gamma R}{\Pr^{QGD}(\gamma - 1)}$$

$$\tau = \alpha^{QGD} \frac{\Delta x}{c}$$

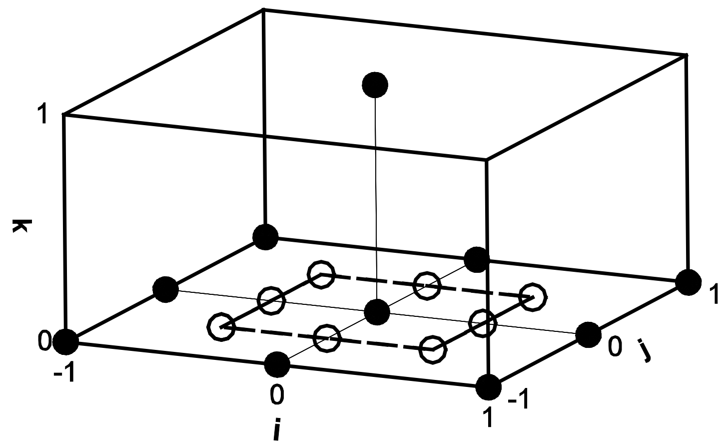
Шаг по времени выбирается в соответствии с условием Куранта

$$\Delta t < \beta \tau, \quad \beta \sim 0.5$$

Численный алгоритм

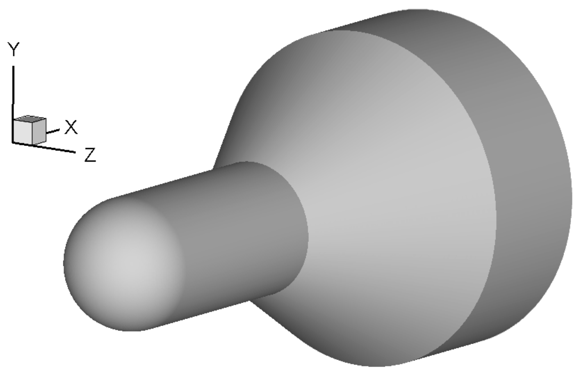
- КГД система – более сложная, чем система НС
- При τ=0 получаем уравнения НС
- При малых τ получаем дополнительную вязкость – бесплатный регуляризатор
- Практические преимущества – простой и однородный численный алгоритм для расчета широкого круга задач – в частности, явная разностная схема с центральными разностями
- Алгоритм хорошо распараллеливается
- Нежесткое условие на шаг по времени

Разностная аппроксимация на прямоугольных сетках



- Для решения начально-краевой задачи используется явная по времени разностная схема. Пространственные производные аппроксимируются центральными разностями со вторым порядком точности, производные по времени – разностями вперед с первым порядком.
- 3D случай – шаблон из 27 точек.

Постановка задачи моделирования обтекания модели летательного аппарата (Houtman et al, 1995) - Широков И.А. МГУ



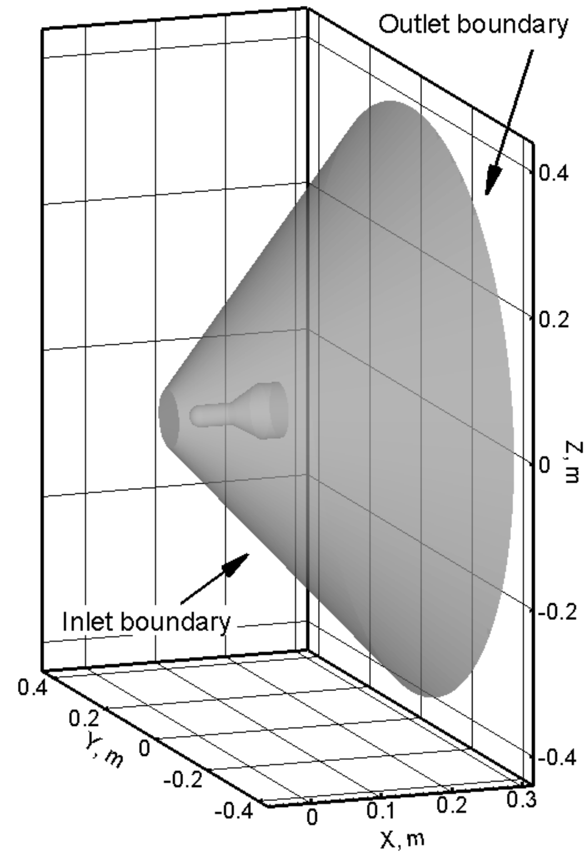
Модель: общий вид

Число Маха: $Ma = 3, \;\; Ma = 4$

Число Рейнольдса, вычисленное по длине модели L=0.127 м:

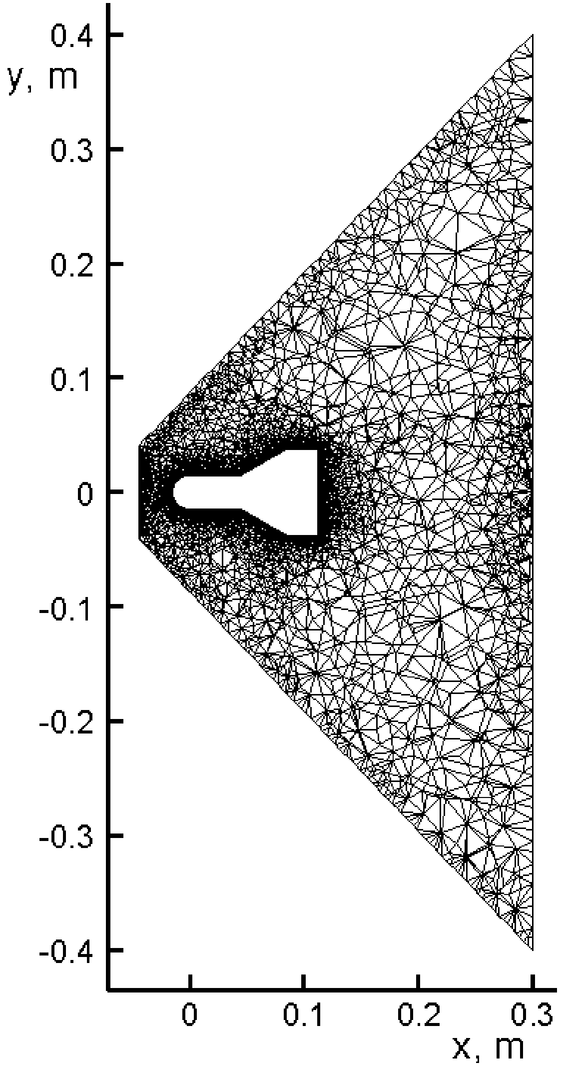
$$\mathrm{Re} = 6 \cdot 10^6, \quad \mathrm{Re} = 7.6 \cdot 10^6$$

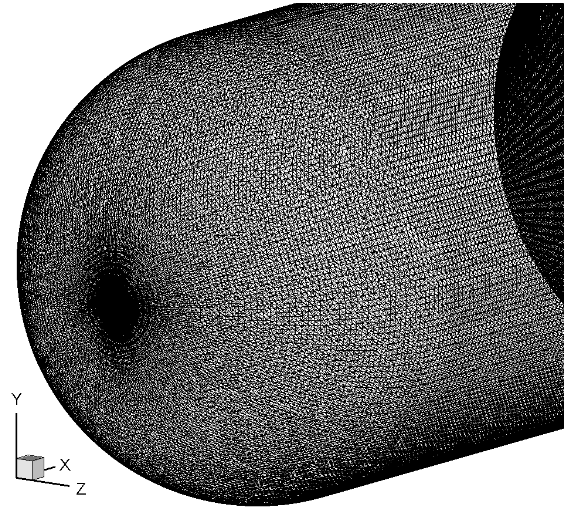
Угол атаки $10^0, \;\; 20^0$

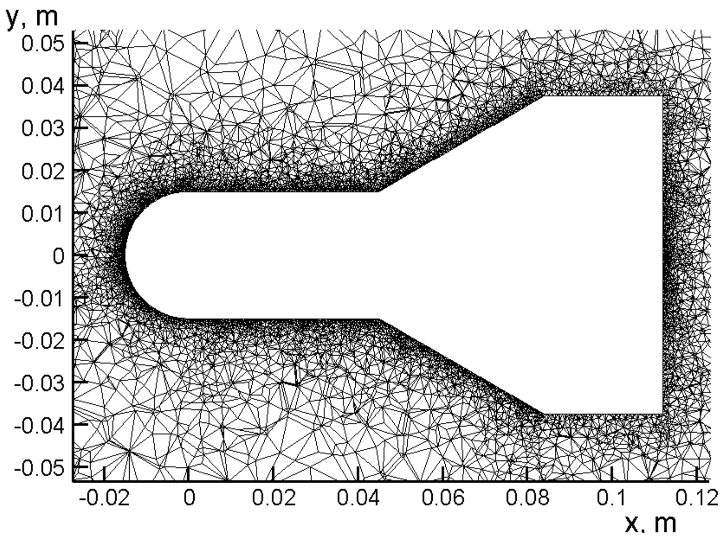


Расчетная область

Расчетная сетка для модели ЛА, построенная с помощью пакета TetGen

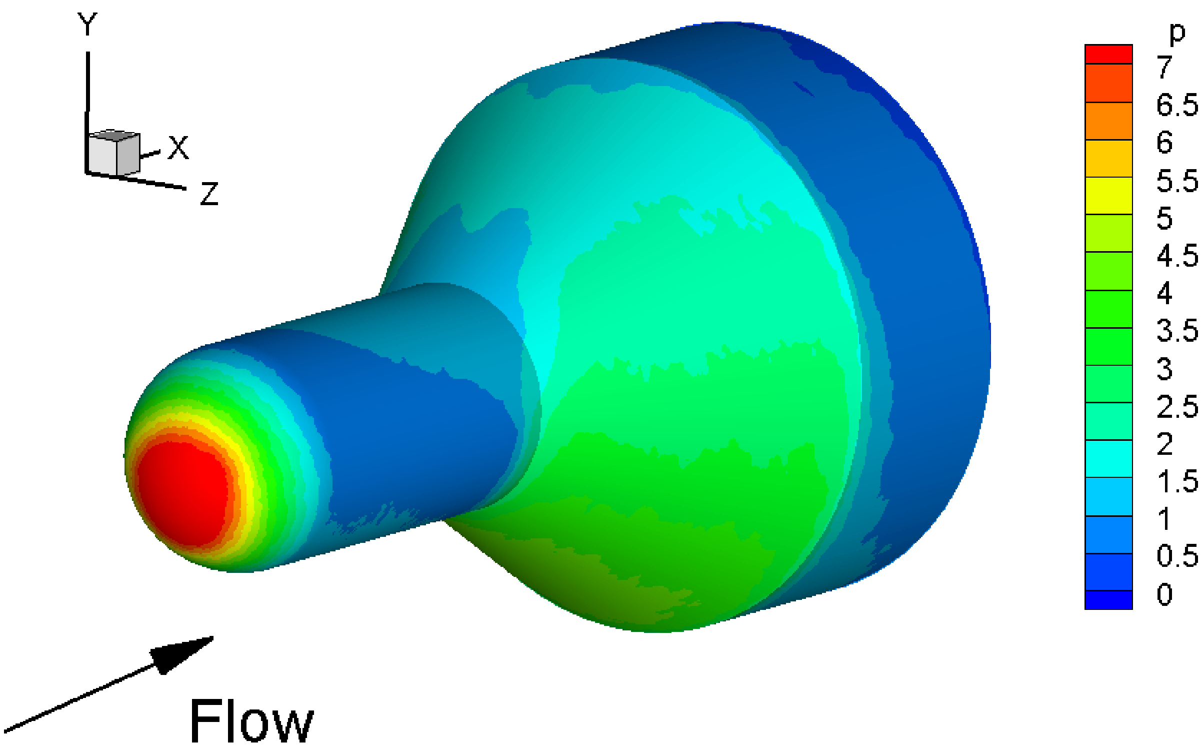






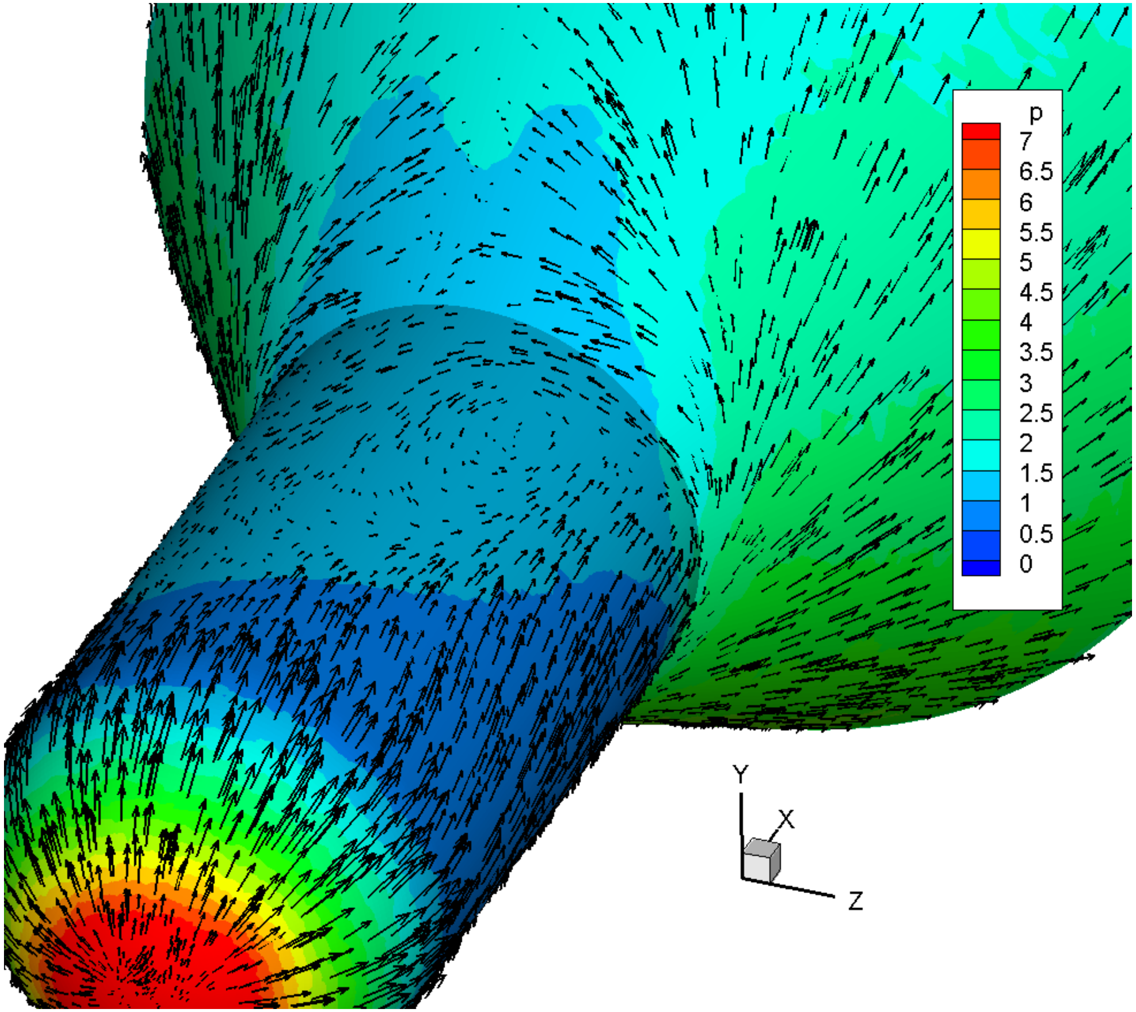
Результаты моделирования при $Ma=3$, $Re=6\cdot10^6$, угол атаки $AoA=10^0$

Распределение безразмерного давления
по поверхности модели ЛА



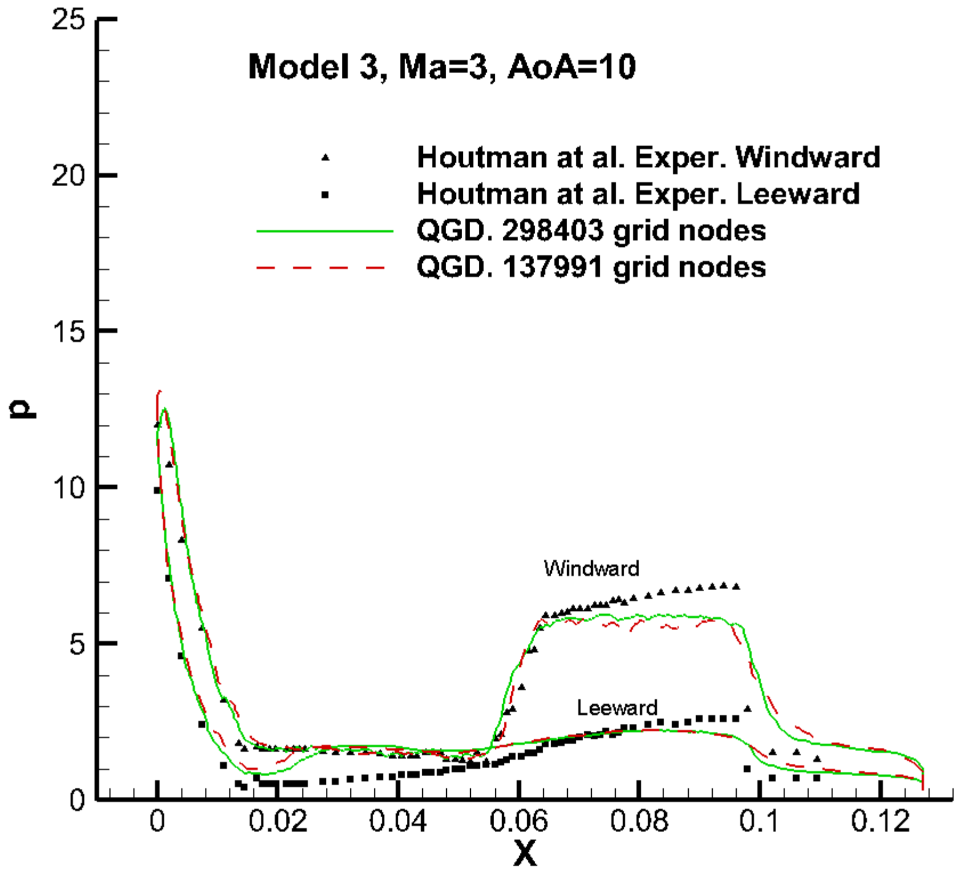
Результаты моделирования при $Ma=3$, $Re=6 \cdot 10^6$, угол атаки $AoA=10^0$

Распределение безразмерного давления и векторы скорости на поверхности модели ЛА



Результаты моделирования при Ma=3, Re=$6\cdot10^6$, угол атаки AoA=10^0

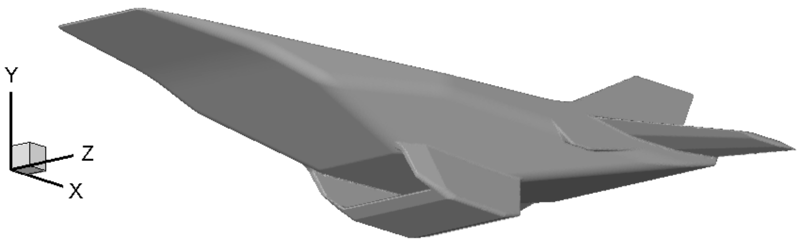
Распределение давления по поверхности модели ЛА в плоскости симметрии Z=0 (линии). По оси ординат отложено отношение давления на поверхности к начальному давлению. Координата X указана в метрах.



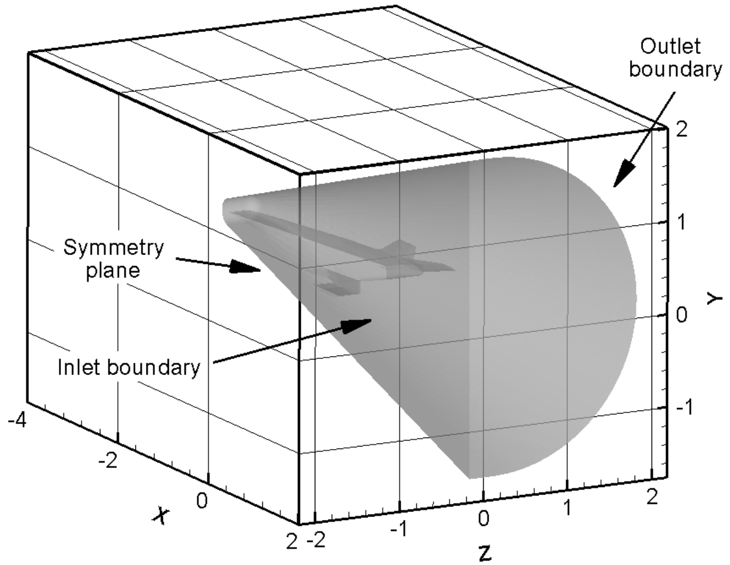
Сравнение с результатами эксперимента (Houtman at al, 1995, символы).

Исследование сходимости по сетке (зеленая линия показывает результаты, полученные на более подробной сетке, а красная на менее подробной).

Постановка задачи моделирования обтекания ГЛА X-43



Модель: общий вид



Расчетная область

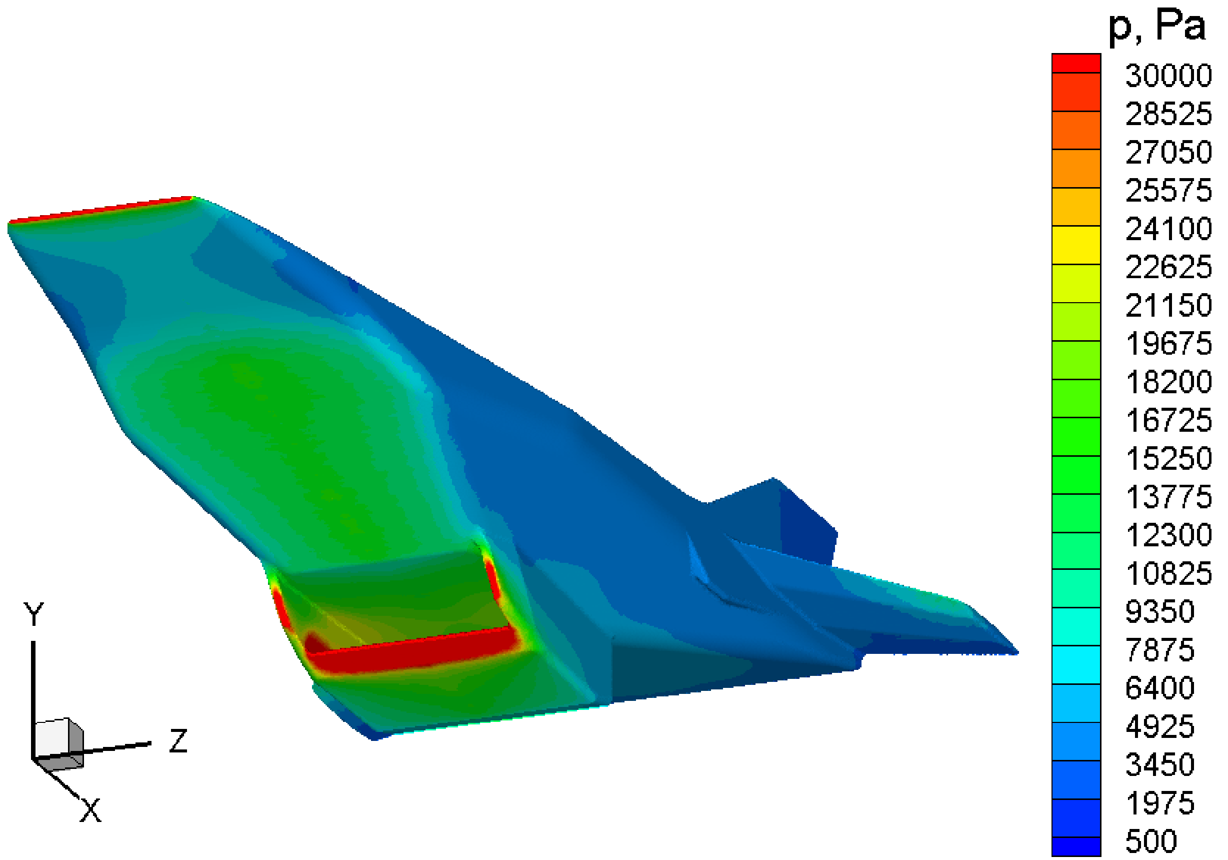
Число Маха $Ma = 7$

Число Рейнольдса $\mathrm{Re} = 3.1 \cdot 10^{6}$

Угол атаки 2^{0}

Высота полета $H = 29$ км

Распределение давления по поверхности модели X-43



Включение КГД алгоритма в открытый программный комплекс OpenFOAM

Борис Николаевич Четверушкин,
Виктор Петрович Иванников,
Арутюн Ишханович Аветисян

OpenFOAM - Open Source Field Operation And Manipulation - динамично развивающееся открытое программное обеспечение для моделирования задач механики сплошных сред, в основе метод конечного объема FVM.

В открытом доступе с 2004 г. на условиях GPL лицензии.

FOAM – предшественник OpenFOAM.

Разработан в Imperial College of Science. London. UK. 1991-2003 (H. Weller and H. Jasak)

Основная версия www.openfoam.org.

SALOME
The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation

OpenFOAM

ParaView

UniHUB 2.0: http://desktop.weblab.cloud.unihub.ru/login

Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН

Включение КГД алгоритма в программный комплекс OpenFOAM

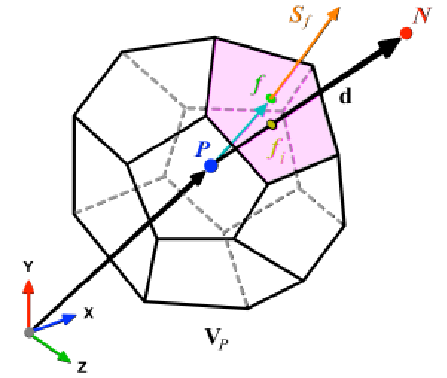
Иерархия решателей в OpenFOAM

Классы решателей OpenFOAM	**Прямое численное моделирование**
	Простейшие уравнения
	Задачи горения
	Сжимаемые течения
	Дискретные методы
	Электромагнетизм
	Экономические задачи
	Тепло- и массообмен
	Несжимаемые течения
	Течения жидкости с учетом движения отдельных частиц
	Многофазные течения
	Задачи прочности

Неструктурированные 3D подвижные сетки

Распараллеливание алгоритма
Использование современных мощных многопроцессорных комплексов
Подключения моделей турбулентности

FVM – метод конечного объема



Теорема Остроградского-Гаусса

$$\int_V \nabla\cdot\mathbf{a}\,dV = \oint_{\partial V} d\mathbf{S}\cdot\mathbf{a}$$

$$\langle a\rangle = \frac{1}{V}\int_V a\,dV$$

$$(\nabla\cdot\mathbf{a})_o \approx \langle\nabla\cdot\mathbf{a}\rangle = \frac{1}{V}\int_V \nabla\cdot\mathbf{a}\,dV = \frac{1}{V}\int_{\partial V}\mathbf{a}\cdot\mathbf{n}\,dS \approx$$

$$\approx \frac{1}{V}\sum_f \mathbf{a}_f\cdot\mathbf{n}\,dS = \frac{1}{V}\sum_f \mathbf{a}_f\cdot\mathbf{S}_f = \frac{1}{V}\sum_f \varphi$$

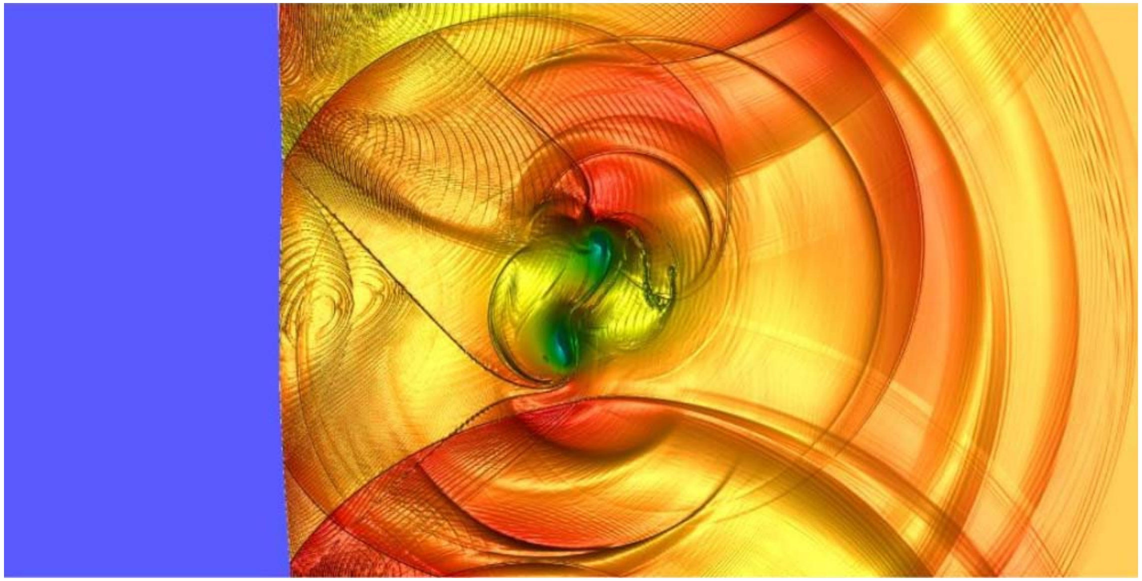
$$\frac{\partial a}{\partial\mathbf{n}} \approx \frac{a_n - a_0}{h}$$

В настоящее время солверы QGDFoam и QHDFoam
для моделирования течений вязкой жидкости
реализованы на 3D неструктурированных сетках,
распараллелен,
выложен на github.

Можно пользоваться.

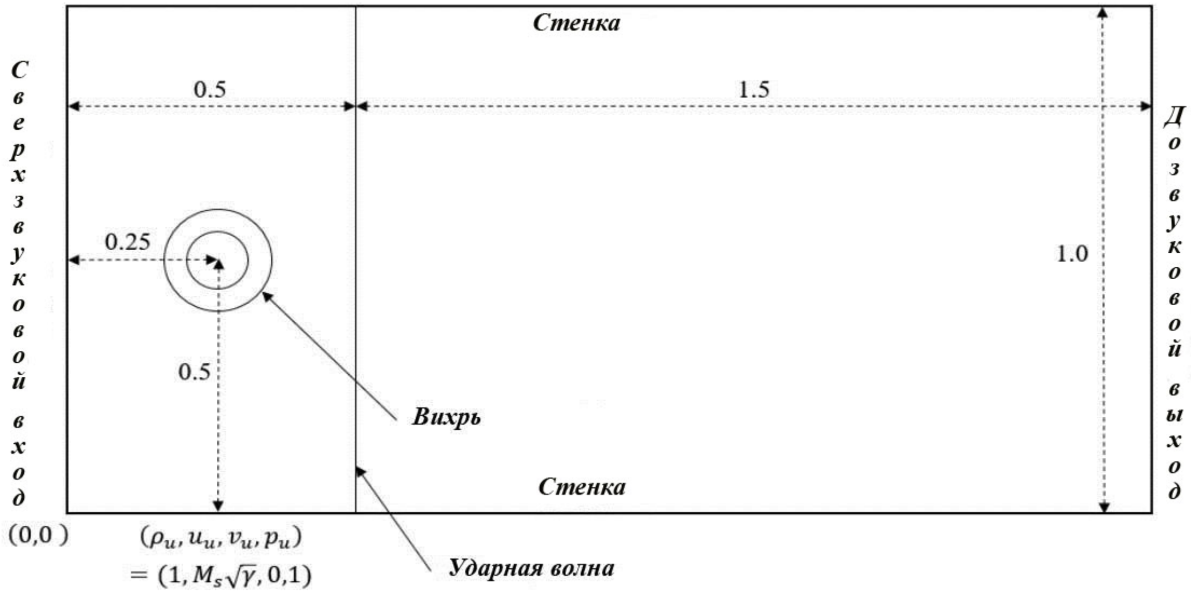
Задача о взаимодействии вихря и ударной волны

Rodionov A.V. Simplified artificial viscosity approach for curing the shock instability // Computers and Fluids 219 (2021) 104873



$$Sch = ln(1 + |\rho|)/ln(10)$$

Постановка задачи



Размер области 2*1

Задание ударной волны

$\gamma = 1.4,\ R = 1$

Слева

$x <= 0.5$

$\rho_u = 1$

$M_s = 1.5$

$u_u = M_s\sqrt{\gamma} =$
1.77482

$v_u = 0$

$p_u = 1$

$T_u = p_u/(\rho R) = 1$

Справа

$x > 0.5$

$\rho_d = \rho_u(\gamma + 1)M_s^2/(2.0 + (\gamma - 1)M_s^2) = 1.862$

$u_d = u_u(2.0+(\gamma-1)M_s^2)/((\gamma+1)M_s^2) = 0.953146$

$v_d = 0,$

$p_d = p_u(1 + 2\gamma(M_s^2 - 1)/(\gamma + 1)) = 2.45833$

$T_d = p_d/(\rho_d R) = 1.32022$

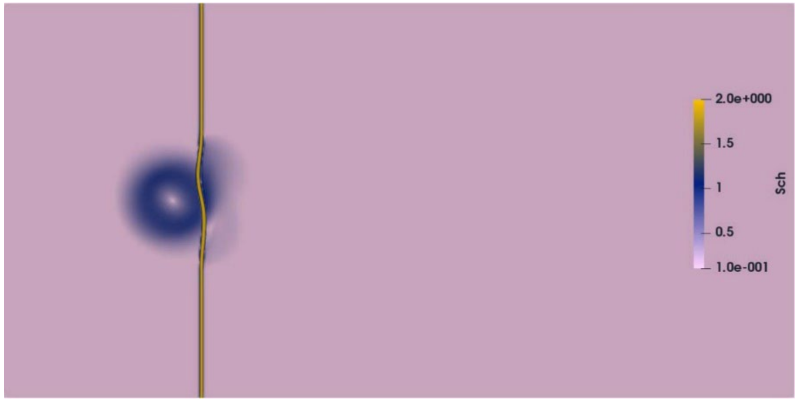
Задание вихря

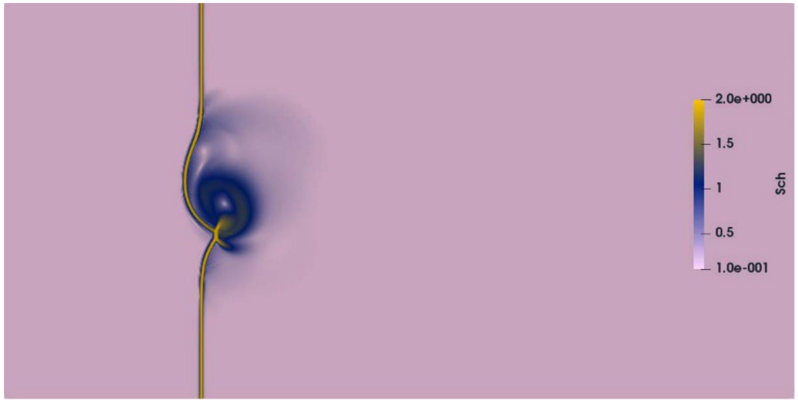
Центр вихря в $(0.25, 0.5)$
Радиусы $a = 0.075$, $b = 0.175$
Параметры вихря $M_v = 0.9$, $v_m = M_v\sqrt{\gamma}$
Поле скорости внутри вихря (u^x_{vor}, u^y_{vor})
$u^x_{vor}(r) = u_u - v_\theta(r)sin(\theta)$, $u^y_{vor}(r) = v_u + v_\theta(r)cos(\theta)$

$$v_\theta(r) = \begin{cases} v_1 = v_m\dfrac{r}{a}, r \leq a, \\ v_2 = v_m\dfrac{a}{a^2 - b^2}\left(r - \dfrac{b^2}{r}\right), a < r \leq b, \\ 0, r > b. \end{cases}$$

Результаты расчета. Сетка

Развитие течения (Schlieren), слева-направо, при t=0.1, 0.2.





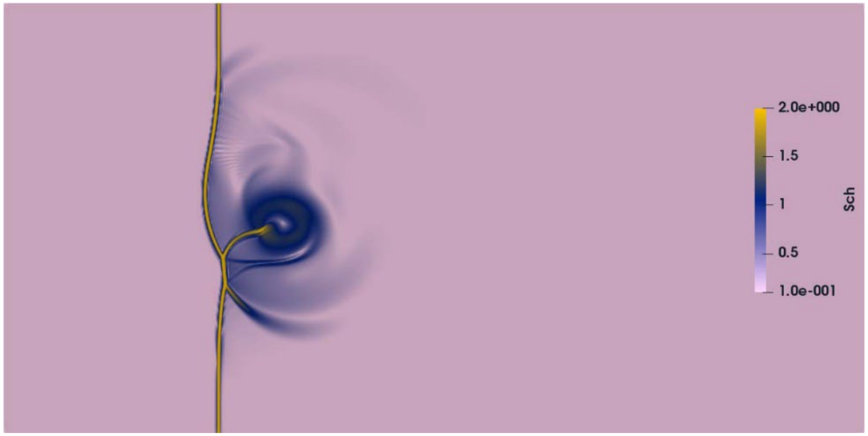
$$1/400$$

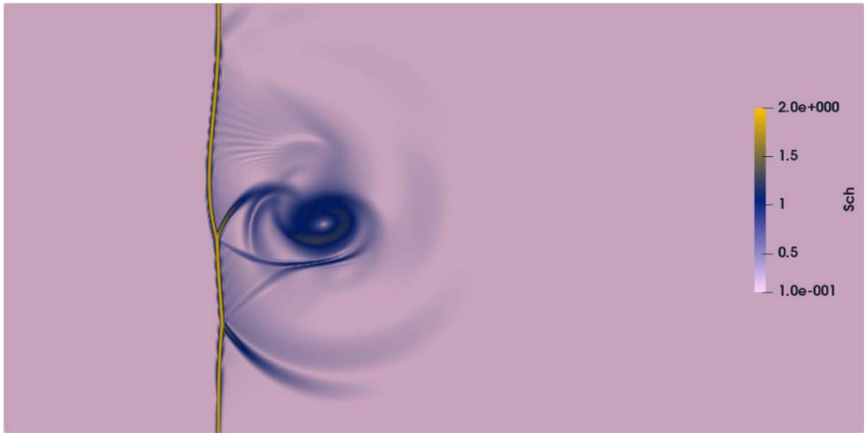
$$\alpha = 0.5$$

$$Sc = 0.0$$

Результаты расчета

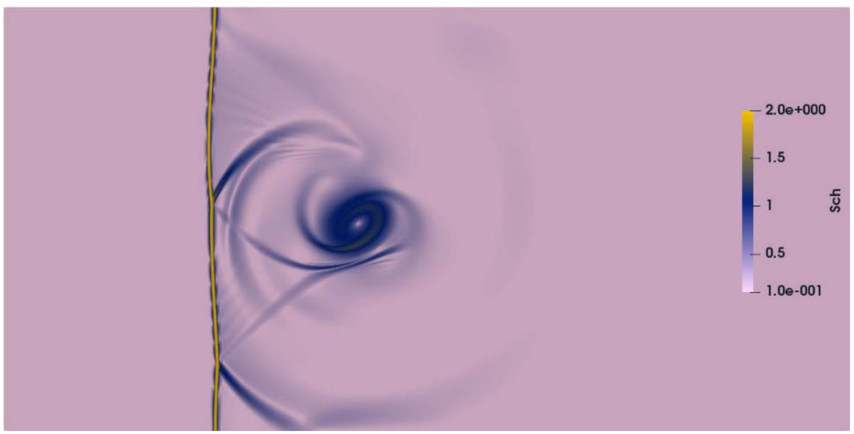
Развитие течения (Schlieren), слева-направо, при t=0.3, 0.4.

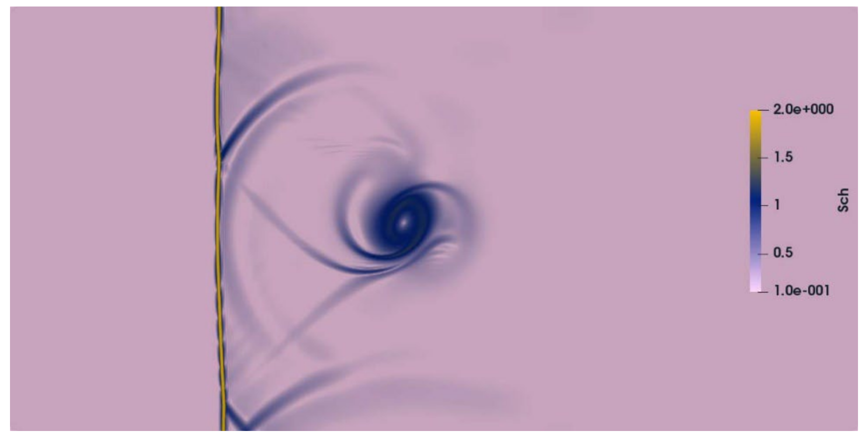




Результаты расчета

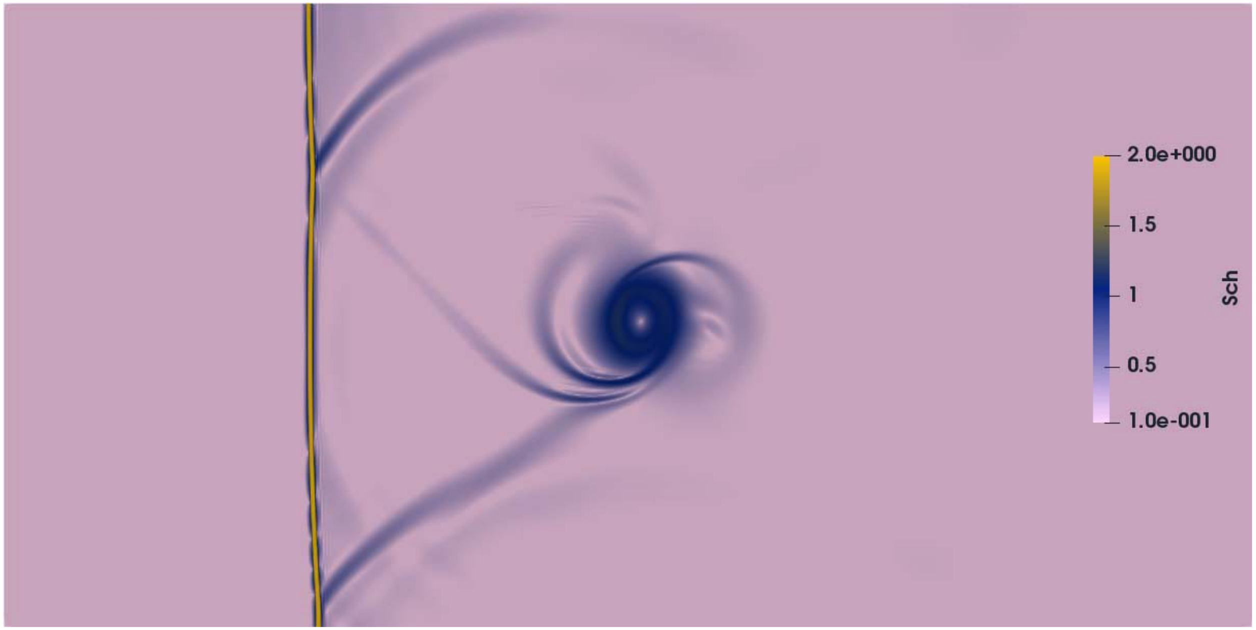
Развитие течения (Schlieren), слева-направо, при t=0.5, 0.6.





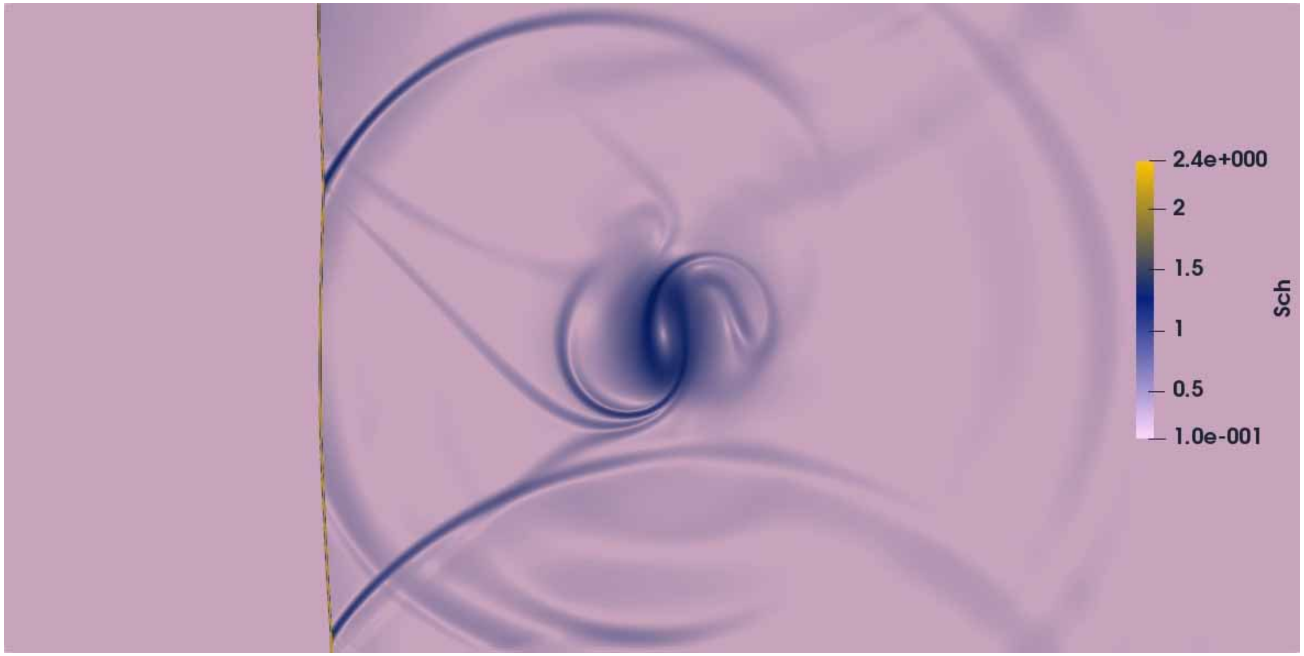
Результаты расчета

Развитие течения (Schlieren), слева-направо, при t=0.7.



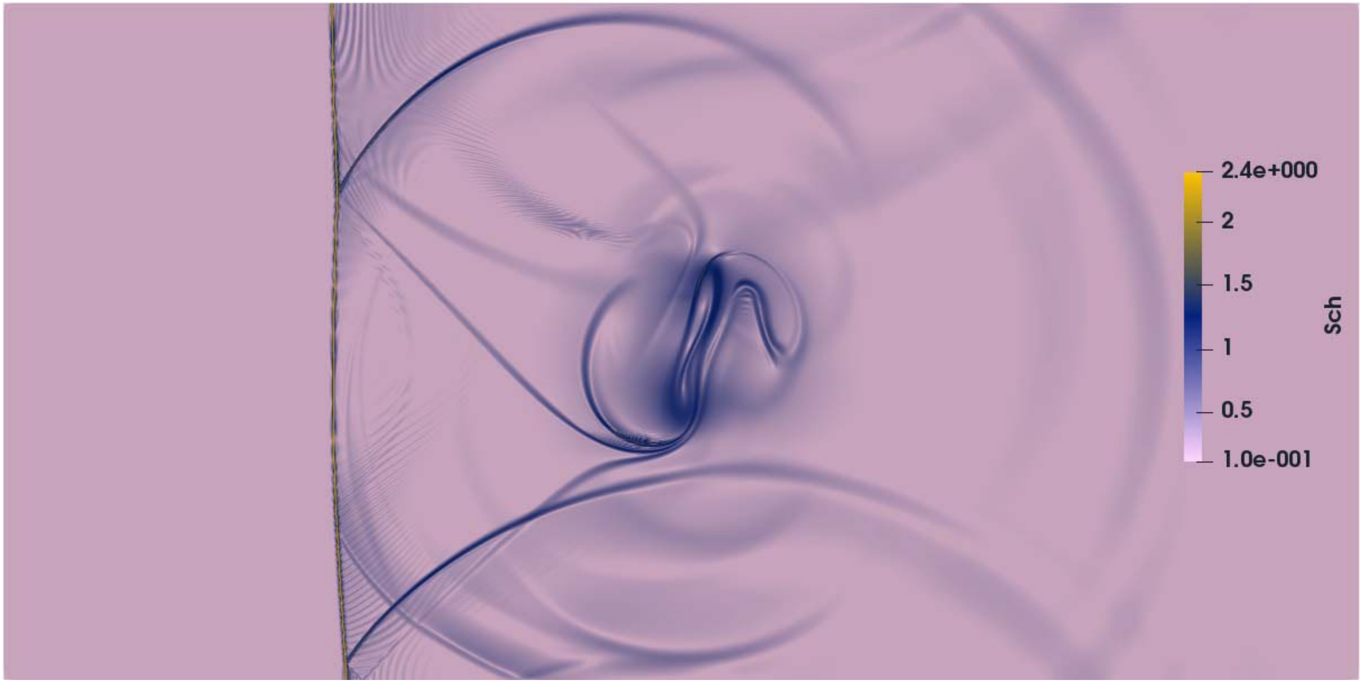
Результаты расчета. Сетка 1/1600

$\alpha = 0.2, \quad Sc = 1.0$



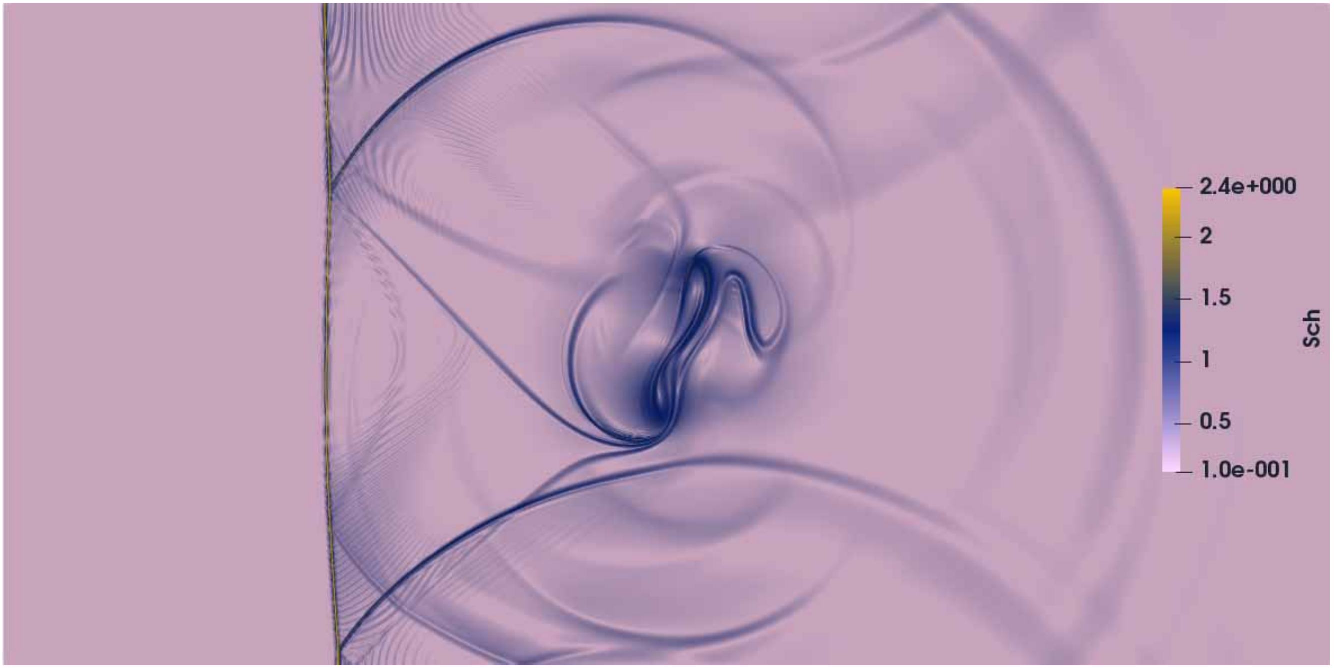
Результаты расчета. Сетка 1/1600

$\alpha = 0.2, \quad Sc = 0.0$



Результаты расчета. Сетка 1/1600

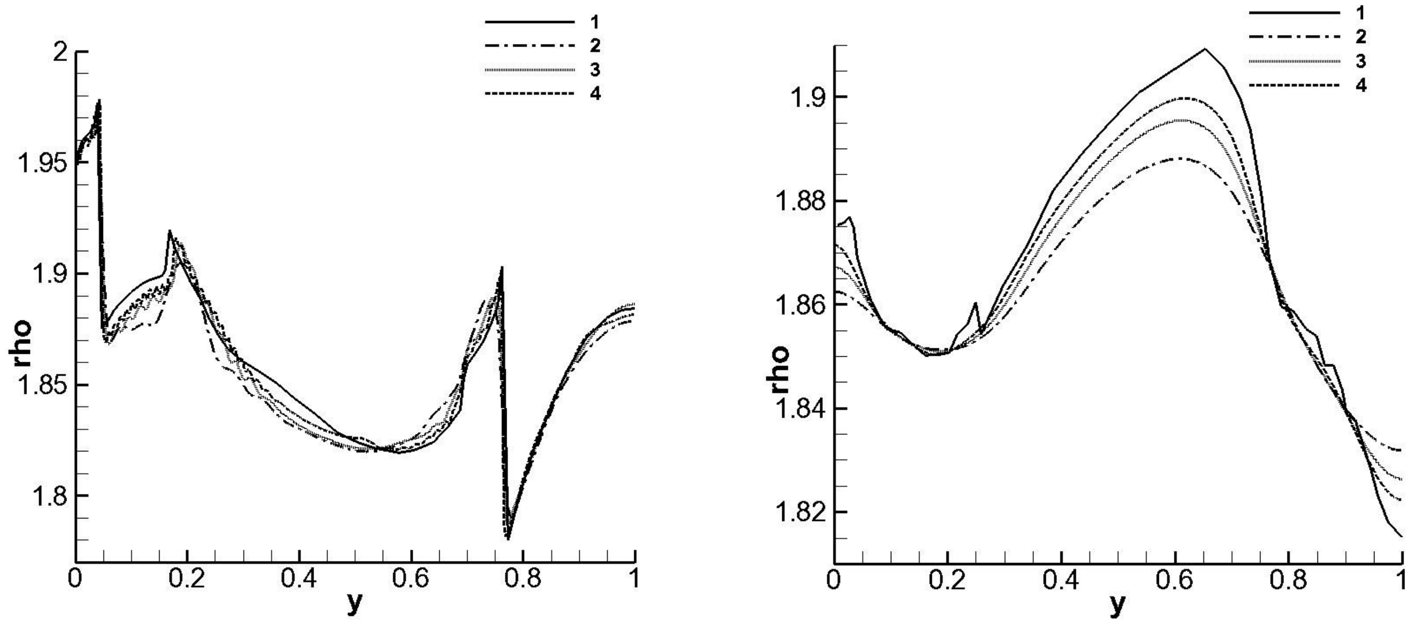
$$\alpha = 0.1, \quad Sc = 0.1$$



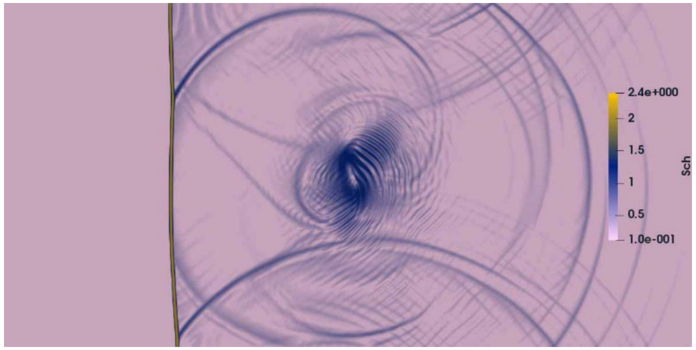
Результаты расчета. Сходимость по сетке

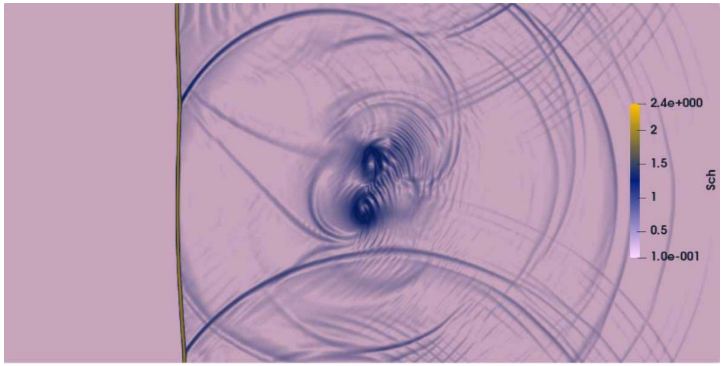
$\alpha = 0.2, \quad Sc = 0.0$

Плотность ρ вдоль линий 0.52 и 1.65 для пространственных сеток с шагами 1/400 (2), 1/800 (3), 1/1600 (4), 1 – эталонное решение.



Результаты расчета.
Сетка 1/400, решатели с ограничителями upwind, Minmod и VanLeer.





Зависимость времени решения задачи для разных алгоритмов

Personal research code (КГД)	QGDFoam	rhoCentralFoam VanLeer	rhoCentralFoam Minmod	rhoCentralFoam upwind
9.0	18.3	10.9	10.0	6.2

Времена расчета 1000 шагов на сетке 800*400.

КГД система (одножидкостная модель – общая скорость и температура)

Е.В. Шильников, Т.Г. Елизарова Квазигазодинамическая модель и численный алгоритм для описания смесей разнородных флюидов // ЖВМиМФ, 2023, № 7,

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

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

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

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

КГД добавки

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

$$\Pi = \Pi_{\mathrm{NS}} + \rho \mathbf{u} \otimes \hat{\mathbf{w}} + \tau(\mathbf{u}\nabla p + \gamma p \,\mathrm{div}\, \mathbf{u} - (\gamma - 1)Q),$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\mathrm{NS}} - \tau \rho \mathbf{u}\left(\mathbf{u} c_V \nabla T + p(\mathbf{u}\nabla)\left(\frac{1}{\rho}\right) - \frac{Q}{\rho}\right), \quad \tau = \frac{\mu}{p} = \alpha \frac{h}{c}$$

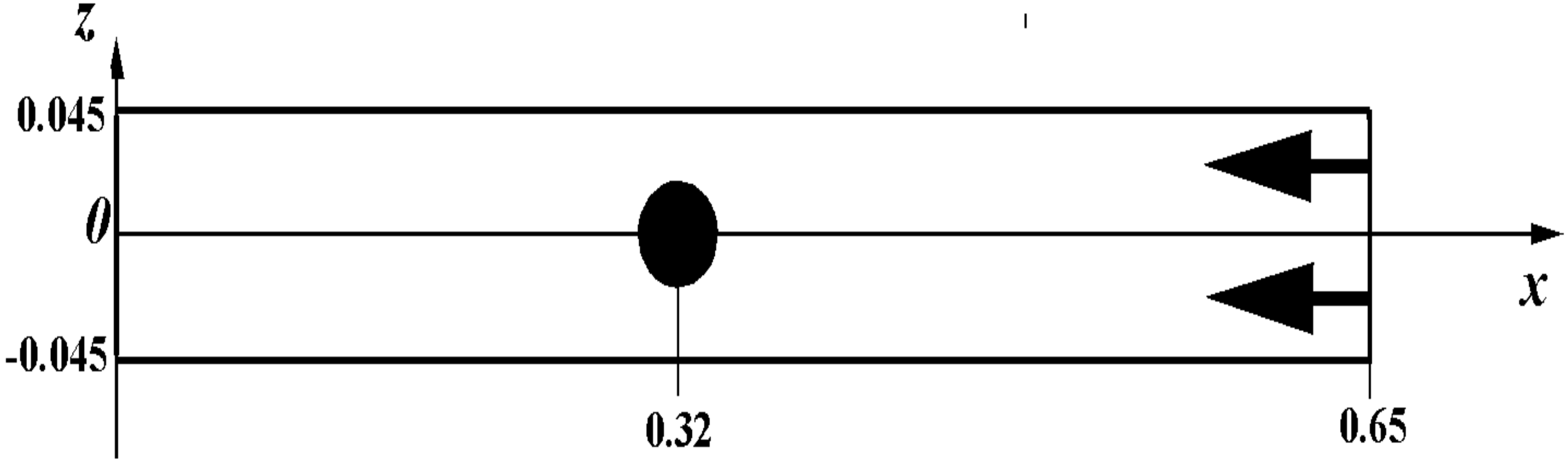
In the one-fluid model it is assumed that the gas mixture has a uniform velocity u and temperature *T*. The density of the mixture, its pressure specific energy and other parameters are determined through the parameters of mixture components as follows:

$$\rho = \rho_a + \rho_b,\ p = p_a + p_b,\ E = \rho\varepsilon + \rho\mathbf{u}^2 / 2,$$

$$R = \frac{R_a\rho_a + R_b\rho_b}{\rho} = c_{\mathrm{p}} - c_{\mathrm{V}}, \quad \gamma = \frac{c_{\mathrm{p}}}{c_{\mathrm{V}}}, \quad \gamma - 1 = \frac{R}{c_{\mathrm{V}}},$$

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_a\rho_a + \varepsilon_b\rho_b}{\rho}, \quad c_{\mathrm{V}} = \frac{c_{\mathrm{V}a}\rho_a + c_{\mathrm{V}b}\rho_b}{\rho}.$$

Моделирование взаимодействия плоской ударной волны, движущейся в воздухе, с цилиндрическим пузырем другого газа

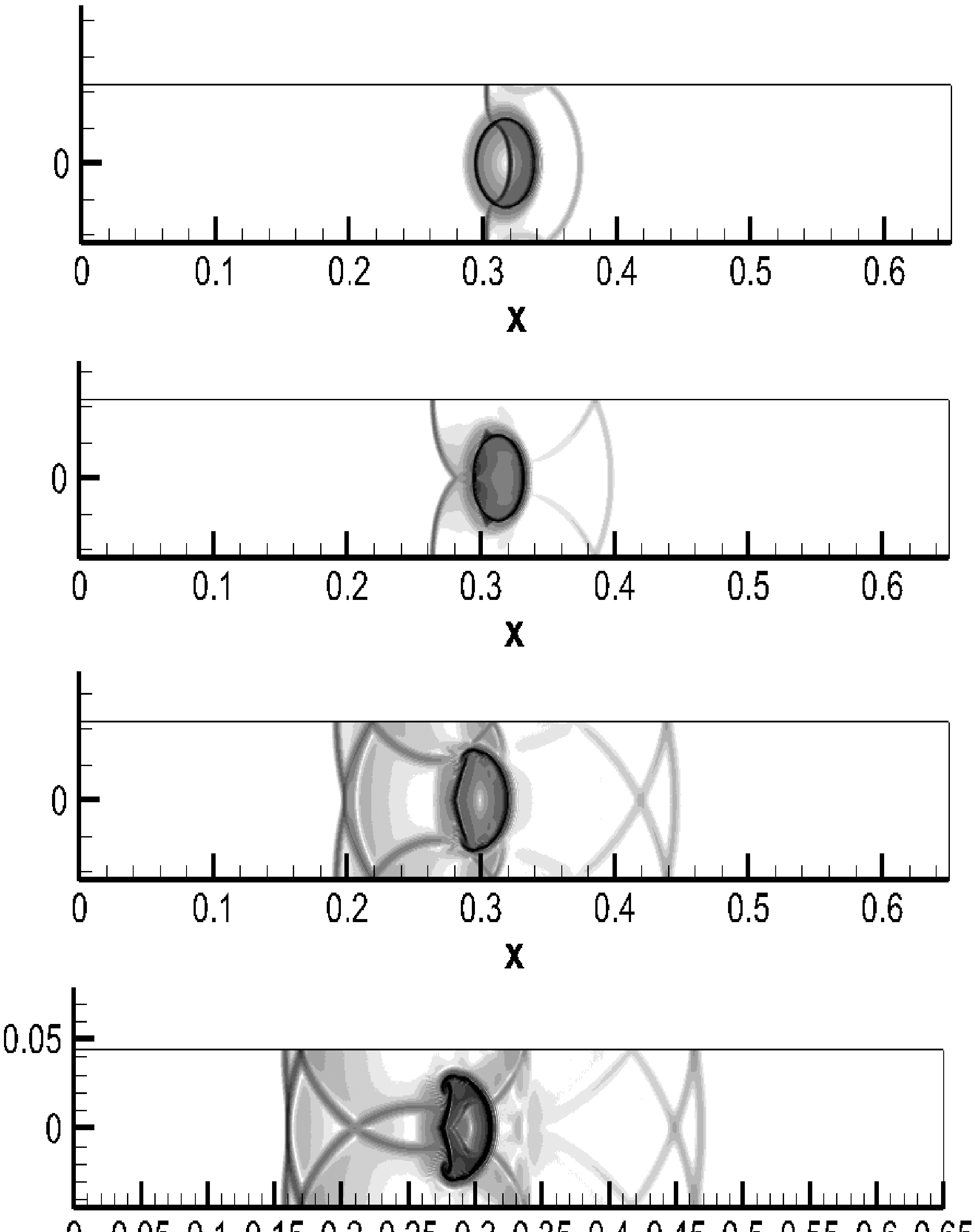


Плоская ударная волна, проходя через воздух, падает на цилиндрический пузырь из гелия или хладоагента R22 (CHClF2). Пузырь с радиусом R = 0.025 помещается в воздух с центром пузыря в точке (0.32, 0).

Начальные динамически равновесные параметры газов в расчетной области

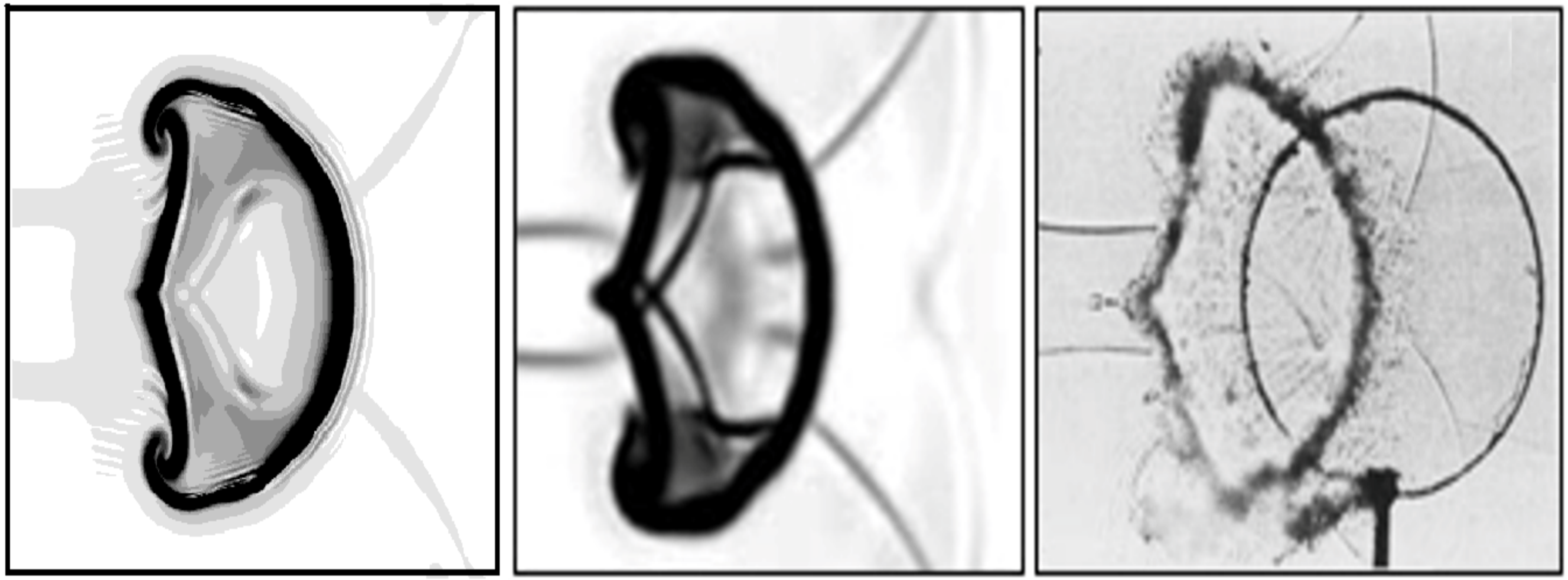
	ρ	u	v	p	γ	m	R	c_s
Воздух	1.0	0.0	0.0	10^5	1.4	28.96	287.1	374.16
Гелий	0.182	0.0	0.0	10^5	5/3	4.003	2077	915.75
R22	3.1538	0.0	0.0	10^5	1.249	86.47	96.15	199.0

На правой границе задается условие притока воздуха с параметрами за ударной волной, движущейся справа налево через воздух со скоростью, соответствующей числу Маха M = 1.22.

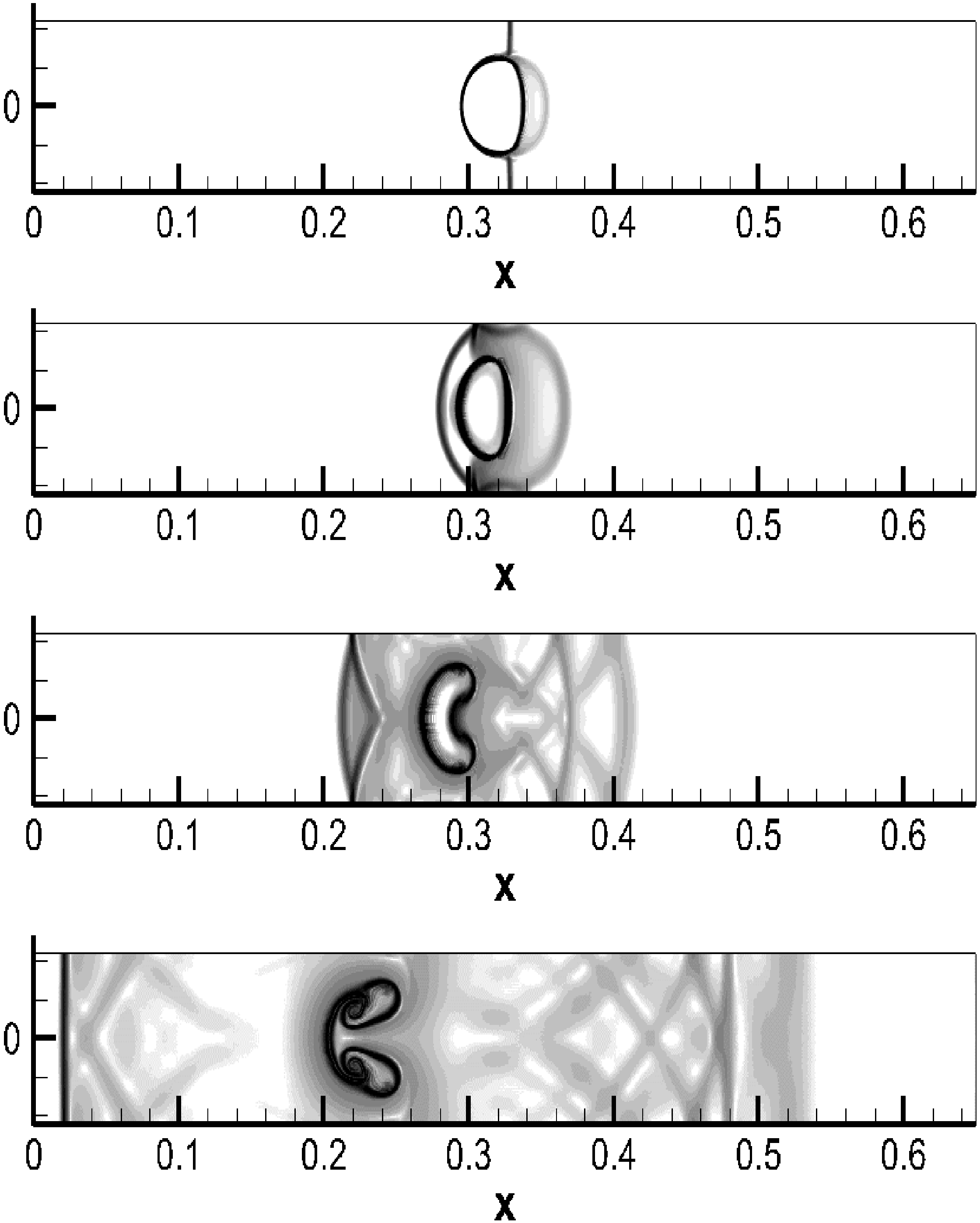


Пузырь R22.
Численные Шлирен образы в последовательные моменты времени

Сравнение формы пузырька в последний момент времени, полученное в наших расчетах (слева), с численными (в середине *) и экспериментальными (справа **) результатами.



* Quirk J., Karni S. On the dynamics of a shock-bubble interaction // Journal of Fluid Mechanics, 1996, 318, p.129-163
** Haas J.F., Sturtevant B. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities // Journal of Fluid Mechanics, 1987, 181, p.41-76

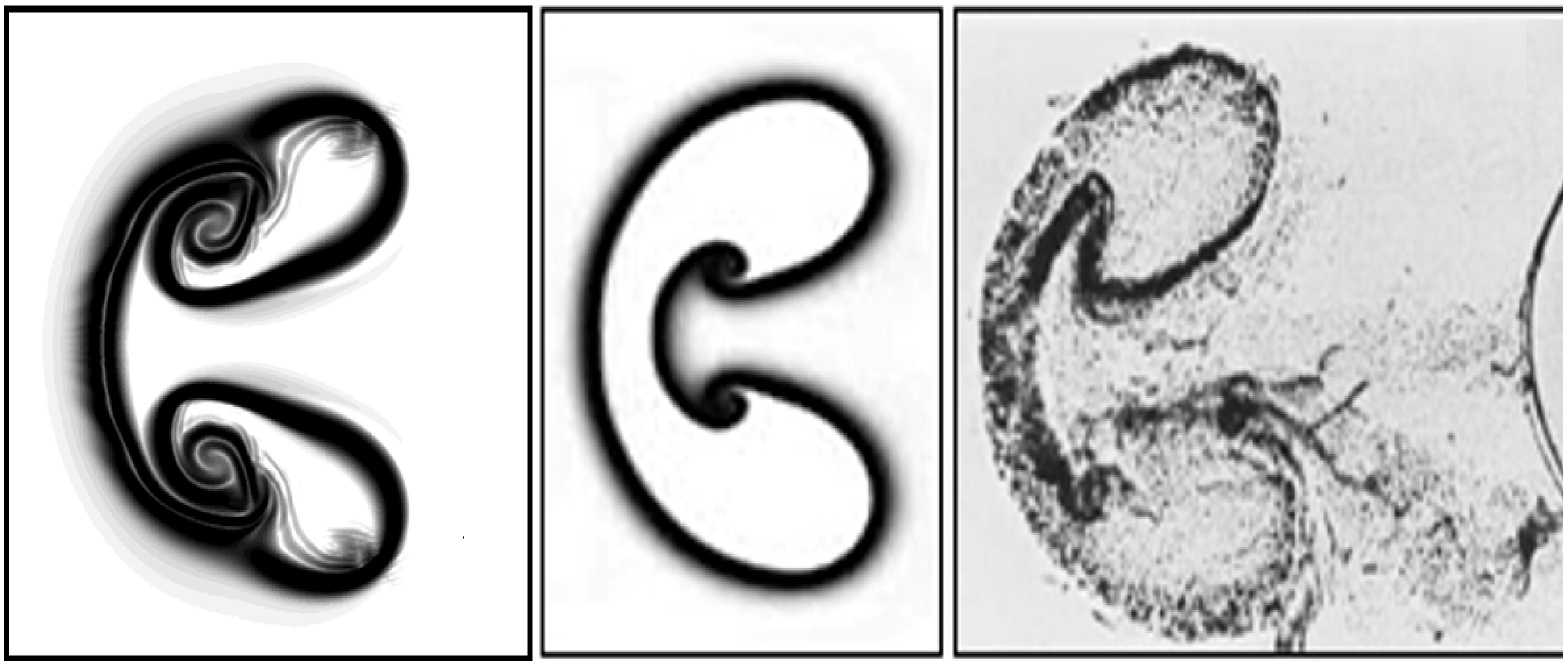


Пузырь He.

Численные Шлирен образы в последовательные моменты времени.

В отличие от предыдущего случая отраженная волна здесь является не ударной волной, а волной разрежения.

Сравнение формы пузырька в последний момент времени, полученное в наших расчетах (слева), с численными (в середине *) и экспериментальными (справа **) результатами



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

** Haas J.F., Sturtevant B. Interaction of weak shock