Institute of Theoretical and Mathematical Physics





Russian Federal Nuclear Center -

Методы замыкания уравнений лагранжевой газодинамики и упругопластики в смешанных ячейках

Янилкин Ю.В., Гончаров Е.А., Колобянин В.Ю., Топорова О.О.

Введение



interface гетерогенная смесь

Смешанные ячейки в ALE методах содержат в себе контактные границы между различными компонентами (слева) или же гетерогенные смеси компонентов (справа).

Исходная система уравнений

 $\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{T}$ $\frac{d\rho_{\xi}}{dt} = -\rho_{\xi} \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$ $\frac{\mathrm{d}\beta_{\xi}}{\mathrm{d}t} = \beta_{\xi} \Big(\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} - \nabla \cdot \mathbf{u} \Big)$ $\frac{\mathrm{d}\mathbf{e}_{\xi}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\rho_{\xi}} \mathbf{Sp}(\mathbf{T}_{\xi}\mathbf{D}_{\xi})$ $\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{u}$ $T_{ij\xi} = S_{ij\xi} + \delta_{ij}(P_{\xi} + q_{\xi})$ $P_{\xi} = P_{\xi}(\rho_{\xi}, e_{\xi})$ $\mathbf{f}_{\varepsilon} = (\mathbf{S}_{\varepsilon}, \mathbf{D}_{\varepsilon}) = 0$

 $\mathbf{u}(\mathbf{u}_{x}, \mathbf{u}_{y})$ – скорость \mathbf{T} – тензор напряжений

ρ - плотность

ξ - номер компонента

 β - объемная доля вещества ($\beta_{\xi}=V_{\xi}/V$)

е – удельная внутренняя энергия

D – тензор скоростей деформации

r(x,y) – радиус-вектор
 S – девиатор тензора напряжений
 q – искусственная вязкость
 уравнение состояния
 модель среды

 u_x, u_y - определены в узлах сетки, $\rho_{\xi}, \beta_{\xi}, e_{\xi}, P_{\xi}, S_{\xi}$ - определены в ячейках, Неизвестные величины: P, S, q, q_{\xi}, D_ξ, $\nabla \cdot u_{\xi}$

Ввод замыкающих соотношений

$$\mathbf{p} = \sum_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{p}_{\boldsymbol{\xi}}, \qquad \mathbf{q} = \sum_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{q}_{\boldsymbol{\xi}}, \qquad \mathbf{S} = \sum_{\boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{S}_{\boldsymbol{\xi}}$$
(1)

где ψ_{ξ} определяется принятой моделью замыкания.

 $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$, ψ_{ξ} , \mathbf{q}_{ξ} , \mathbf{D}_{ξ} - не определены. Нужны замыкающие соотношения. При их вводе необходимо выполнить законы сохранения.

Первое условие - это условие аддитивности объемов (закон сохранения «объема»)

$$\mathbf{V} = \sum_{\xi} \mathbf{V}_{\xi}, \quad \mathbf{W}_{\Pi \mathbf{U}} \quad \sum \boldsymbol{\beta}_{\xi} = 1 \quad \longrightarrow \quad \Delta \mathbf{V} = \sum_{\xi} \Delta \mathbf{V}_{\xi}, \quad \mathbf{W}_{\Pi \mathbf{U}} \quad \sum \boldsymbol{\beta}_{\xi} \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (2)$$

Естественным обобщением (2) является

$$\sum_{\xi} \beta_{\xi} \mathbf{D}_{\xi} = \mathbf{D}, \text{ которое выполняется при } \mathbf{D}_{\xi} = \mathbf{D} \cdot \left(\frac{\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}}{\nabla \cdot \mathbf{u}} \right)$$
(3)

Второе условие - условие аддитивности энергий (закон сохранения энергии)

$$e = \sum \alpha_{\xi} e_{\xi} \longrightarrow \Delta e = \sum \alpha_{\xi} \Delta e_{\xi} \qquad \Gamma Д e \qquad \alpha_{\xi} = M_{\xi} / M$$
 (4)

Таким образом, основной параметр, который нужно определить моделью замыкания - $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$ Второй параметр - \mathbf{q}_{ξ} 4

Классификация моделей



Изотропные одноэтапные методы замыкания Релаксационные методы

Методы на основе модели равенства давлений компонентов. Дивергенции компонентов получаются решением системы уравнений итерационными методами

$$\mathbf{p}_{\xi} = \mathbf{p},\tag{5}$$

- **1. Метод Харлоу** [Харлоу, 1964];
- **2.** Метод Типтона [Tipton, 1989];
- **3.** Методы на основе решения акустической задачи Римана [Делов, Садчиков, 2005] (на этой модели основаны также разработанные позже методы DSS [Kamm, Shashkov, Fung, Harrison, Canfield, 2010] и KSR [Kamm, Shashkov, Rider, 2011]).
- 4. K&S method based on the Riemann solver [Kamm, Shashkov, 2010].

Изотропные одноэтапные методы замыкания Нерелаксационные модели

5. Методы на основе модели равенства сжимаемостей компонентов (∇ · u) [1] Бахрах, Спиридонов, Шанин, 1984; [2] Benson, 1992;

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u} \tag{7}$$

6. Методы на основе модели равенства приращений давлений компонентов (Δp) [Bondarenko, Yanilkin, 2002];

$$\Delta \mathbf{p}_{\xi} = \Delta \mathbf{p}_{\zeta} \tag{8}$$

7. Методы на основе модели равенства массовых скоростей компонентов после прохождения слабой волны (Δu) [Goncharov, Kolobyanin, Yanilkin, 2006];

$$\mathbf{u}_{\xi} = \mathbf{u}_{\zeta} \tag{9}$$

Изотропные двухэтапные методы замыкания

Двухэтапные модели включают в себя этап подсеточного взаимодействия компонентов при их неравновесном состоянии, поэтому на первом этапе здесь могут быть использованы лишь модели 5-7. Подобный подход для моделей замыкания был предложен в работах [1] Barlow, 2001 и [2] Гончаров, Янилкин, 2004.

Метод подсеточной релаксации давлений (метод **PR** - Pressure Relaxation) из работы [2] является универсальным и используется совместно с моделями 5-7, далее они обозначаются как методы $\nabla \cdot \mathbf{u}$ -PR, Δp -PR и Δu -PR.

Все указанные выше методы не используют положение КГ внутри смешанной ячейки. Однако имеются методы, в которых информация о положении КГ используется существенным образом. Впервые подобный метод был предложен в работе [Barlow], затем он развивался в методе "interface-aware sub-scale dynamics" IA-SSD [Hill, Barlow, Shashkov, 2014].

Метод релаксации давлений (метод PR)

Релаксация давлений веществ выполняется в адиабатическом приближении в предположении, что на этом этапе остаются неизменными полная дивергенция и энергия. Формула для дивергенций веществ имеет вид

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = -\frac{\Delta p_{\xi}}{\tau \rho_{\xi} c_{\xi}^{2}} \qquad \Delta p_{\xi} = A c \tau / h \left(p - p_{\xi} \right) \qquad A \sim 1, \tag{10}$$

где среднее давление p = 2

$$p = \sum \beta_{\xi} p_{\xi}$$

Рассмотрим два предельных случая расположения КГ по отношению к движению волны (ударной, звуковой или упругой)



В первом случае (рис. слева) основное движение происходит по нормали к КГ, поэтому здесь пригодны все рассмотренные выше модели.

Во втором случае (справа) основное движение происходит вдоль КГ, а в поперечном направлении оно незначительно. Это означает, что сжатия или растяжения компонентов происходят в тангенциальном к КГ направлении, таким образом, в этом случае более корректным может стать модель на основе равенства дивергенций.

Таким образом, для обеспечения приемлемой точности моделирования двух разных типов течений должны использоваться разные замыкающие соотношения. Для этого предлагаются две двухэтапные модели.

Как и выше, запишем общую дивергенцию в виде суммы двух

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 1} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2} \tag{12}$$

Две модели отличаются способами их определения.

Изотропные методы замыкания 1 Метод АСМ-1

На первом этапе используется модель равенства дивергенций

$$7 \cdot \mathbf{u}_{\xi_1} = \nabla \cdot \mathbf{u} \tag{13}$$

На втором этапе происходит релаксация давлений компонентов в смешанных ячейках по методу, в своей основе совпадающему с методом PR.

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi 2} = -\frac{\Delta p_{\xi}}{\tau \rho_{\xi} c_{\xi}^{2}} \qquad \Delta p_{\xi} = A c \tau / h \left(p - p_{\xi} \right)$$
(14)

Отличие заключается в том, что для метода АСМ-1 А зависит от взаимной ориентации направлений движения среды и КГ.

Общую дивергенцию запишем как сумму двух составляющих

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\tau} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{n} \tag{15}$$

Полагаем

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \cdot \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}_n}{\nabla \cdot \mathbf{u}} \qquad \qquad \mathbf{A}_0 = 1 \tag{16}$$

Коэффициент А величина переменная.

- В случае движения по нормали к КГ $\nabla \cdot \mathbf{u}_n = \nabla \cdot \mathbf{u}$ A=A₀ $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\tau} = 0$ (17)
- При движении вдоль КГ $\nabla \cdot \mathbf{u}_n = 0$ A=0, $\nabla \cdot \mathbf{u}_\tau = \nabla \cdot \mathbf{u}$ (18)

Анизотропные методы замыкания 2 Метод АСМ-2

Разложим скорость на две составляющие: тангенциальную и нормальную (относительно положения КГ) и запишем соответствующие им дивергенции среды в целом и компонентов

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\tau} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{n} \qquad \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi\tau} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi n}$$
(19)

Полагаем, что вдоль КГ реализуется механизм равносжимаемости компонентов

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi\tau} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\tau} \tag{20}$$

Для дивергенции в нормальном к КГ направлении может быть использована любая из моделей замыкания (1, 5-7), мы используем модель $\Delta u_{\xi} = \Delta u_{\zeta}$

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

$$\lambda_{\xi} = \frac{1}{c_{\xi}} \sum_{k} \frac{\beta_{k}}{c_{k}}$$
(21)

После этого производится релаксация давлений компонентов по методу PR, который дает дополнительный вклад $\nabla \cdot \mathbf{u}'_{\boldsymbol{r}_n}$ в дивергенцию $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\boldsymbol{r}_n}$

$$\widetilde{\nabla \cdot \mathbf{u}}_{\xi_n} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi_n} + \nabla \cdot \mathbf{u}'_{\xi_n}$$
(22)

Окончательно

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \widetilde{\nabla \cdot \mathbf{u}}_{\xi n} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi \tau}$$
(23) 12

Метод расчета смешанных ячеек с вакуумом

Для вакуума в коде ЭГАК разработан специальный алгоритм, который один и тот же для методов замыкания 1, 5-7.

В смешанной ячейке с вакуумом выделяются два случая: $\nabla \cdot \mathbf{u} > 0$ и $\nabla \cdot \mathbf{u} \le 0$ Случай $\nabla \cdot \mathbf{u} > 0$, полагается $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}$

Случай $\nabla \cdot \mathbf{u} \leq 0$, полагается, что уменьшение объема ячейки происходит лишь за счет уменьшения объема вакуума.

Для методов АСМ-1 и АСМ-2 общую дивергенцию запишем в виде суммы

 $\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\tau} + \nabla \cdot \mathbf{u}_{n}$ При растяжении ячейки $\nabla \cdot \mathbf{u} \ge 0$ $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}$

При $\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$ возможны два случая:

- если
$$\nabla \cdot \mathbf{u}_{n} < 0_{TO}$$
 $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi\tau}$ $\nabla \cdot \mathbf{u}_{vac} = \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\beta_{\xi}}{\beta_{vac}} \cdot \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$

- если
$$\nabla \cdot \mathbf{u}_n \ge 0$$
 то $\nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi} = \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$

R

Искусственная вязкость

В смешанных ячейках необходимы дополнительные соотношения к рассмотренным методам, касающиеся способов вычисления искусственной вязкости для компонентов. Шесть способов рассмотрены в работе [Гончаров, Колобянин, Янилкин, 2010]. Лучший из них – третий.

1	равна средней вязкости в ячейке	$q_{\xi} = q$
2	вязкость со своими величинами	$\rho_{\mathfrak{p}}\beta_{\mathfrak{p}}^2\lambda_{\mathfrak{p}}^2$
	$\rho_{\xi}, h_{\xi} = \beta_{\xi}h, \nabla \cdot \mathbf{u}_{\xi}$	$q_{\xi} = q \frac{1}{\sum \rho_k \beta_k^3 \lambda_k^3}$
3	пропорциональна плотности веществ $q_{\xi} \sim \rho_{\xi}$	$q_{\xi} = q \frac{\rho_{\xi}}{\sum \rho_k \beta_k \lambda_k}$
4	одинаковое приращение давлений $\Delta p_{\xi} = \Delta p_{\zeta}$	$q_{\xi} = q \frac{\rho_{\xi}}{\lambda_{\xi} \left(\frac{\partial p_{\xi}}{\partial e_{\xi}}\right)_{\rho} \sum \frac{\beta_{k} \rho_{k}}{\left(\partial p_{k} / \partial e_{k}\right)_{\rho}}}$
5	одинаковое приращение энергий $\Delta e_{\xi} = \Delta e_{\zeta}$	$q_{\xi} = q \frac{\rho_{\xi}}{\rho \lambda_{\xi}}$
6	пропорциональна приращению давления	$A \cdot \rho_{\xi} c_{\xi}^{2} = \left(\partial p_{\xi} / \partial e_{\xi} \right)_{\rho} q_{\xi} / \rho_{\xi}$
	$q_{\xi} \sim \Delta p_{\xi}$	А – коэффициент пропорциональности 14

Тестовые задачи и результаты расчетов

Ниже приводятся три 1D и одна 2D задачи, имеющие аналитические решения. Все 1D расчеты проведены в лагранжевых переменных, а 2D задача – в эйлеровых.

Для 1D задач приводятся следующие однотипные обработки результатов расчетов. 1. Графики сходимости в норме L₁.

 Таблицы с величинами, характеризующими порядок сходимости интегральной погрешности основных величин в норме L₁. Погрешность определяется по формуле

$$\delta \mathbf{y} = \left\| \mathbf{y}_{\text{comp}} - \mathbf{y}_{\text{exact}} \right\|_{1} = \mathbf{A} \mathbf{h}^{\sigma}$$

где h – начальный размер ячейки, y_{comp}, y_{exact} – расчетное и точное значения величины в центре ячейки

3. Таблицы со значениями основных величин в смешанных ячейках.

1. Задача Сода



Задача Сода



Параметры сходимости

							-
-1	100	200	400	800	А	σ	
р	1.89E-02	1.11E-02	6.33E-03	3.58E-03	1.89E-02	0.80	
ρ	1.58E-02	9.39E-03	5.35E-03	3.01E-03	1.59E-02	0.80	AC
e	9.09E-03	5.42E-03	3.01E-03	1.71E-03	9.22E-03	0.81	
u	3.40E-02	1.78E-02	8.66E-03	4.99E-03	3.45E-02	0.93	

L_1	100	200	400	800	А	σ	
р	1.96E-02	1.13E-02	6.44E-03	3.60E-03	1.97E-02	0.81	ACM_1
ρ	1.63E-02	9.51E-03	5.40E-03	3.01E-03	1.65E-02	0.81	
e	9.53E-03	5.51E-03	3.08E-03	1.71E-03	9.64E-03	0.83	
u	3.11E-02	1.61E-02	8.30E-03	4.29E-03	3.11E-02	0.95	17

CM-2

2. Прохождение УВ через границу вода-воздух

(Plohr, 1988; Saurel, Abgrfll, 1999)



18

Прохождение УВ через границу вода-воздух



Параметры сходимости

L ₁	250	500	1000	А	σ	
р	2.39E-02	1.53E-02	9.37E-03	2.39E-02	0.68	
ρ	2.51E-03	1.44E-03	7.93E-04	2.51E-03	0.83	A
e	1.64E-03	9.19E-04	5.29E-04	1.64E-03	0.81	
u	1.22E-02	7.13E-03	4.69E-03	1.22E-02	0.69	
L ₁	250	500	1000	А	σ	
р	2.55E-02	1.66E-02	1.00E-02	2.58E-02	0.68	A
ρ	3.73E-03	2.23E-03	1.28E-03	3.76E-03	0.77	
e	2.63E-03	1.57E-03	8.93E-04	2.65E-03	0.78	
u	1.51E-02	8.52E-03	4.76E-03	1.51E-02	0.83	

ACM-2

ACM-1

19

Прохождение УВ через границу вода-воздух Plots of convergence in the L1 norm



3. Распространение ударной волны по гетерогенной смеси двух идеальных газов

Начальные данные $(\gamma, \rho, e, p, u, \beta) = \begin{cases} (3.0, 1.0, 0., 0., 0, 0.5), & \text{if } -2.0 \le x \le 1.0, \\ (1.2, 1.0, 0., 0., 0), 0.5) & \text{if } -2.0 \le x \le 1.0 \end{cases}$

На границе задана постоянная скорость u_x=2, УРС – идеальный газ.

Для задачи существует аналитическое решение, полученное Гончаровым в предположении равенства давлений компонентов.

Эта задача отличается от двух предыдущих. Во-первых, отсутствием чистых ячеек, что не позволяет иметь для нее расчет с чистыми ячейками. Во-вторых, для нее могут быть получены лишь некоторые из описанных выше зависимостей. В частности, для нее практически не имеют смысла расчеты на сходимость, так как установившееся решение в смешанных ячейках не зависит от размеров ячейки.

Распространение ударной волны по смеси двух газов



Распространение ударной волны по смеси двух газов

Установившиеся значения величин

метод	D	p ₁	p ₂	ρ_1	ρ ₂	e ₁	e ₂
exact	2.839	5.677	5.677	2.0	11	1.419	2.581
$\nabla \cdot \mathbf{u}$	3.456	13.219	0.581	2.379	2.379	2.778	1.222
Δu	2.827	5.886	5.324	2.053	10.372	1.434	2.567
$\nabla \cdot \mathbf{u} - PR (ACM-1)$	2.859	5.715	5.715	1.956	11.253	1.461	2.539
Δu -PR (ACM-2)	2.817	5.640	5.640	2.047	10.754	1.378	2.622

4. 2D задача об упругой волне в пластине (предложена Краюхиным А.)



Пластина - титан, окруженная вакуумом или воздухом, летит со скоростью v₀=0.01 км/с, ударяется об жесткую стенку и по пластине распространяется упругая волна.



Обсуждение результатов и выводы

Расчеты, в том числе и не вошедшие в данный обзор, показывают, что для всех 1D задач все исследованные методы обладают хорошей сходимостью (~1) к точному решению при уменьшении размеров ячеек. Отметим, что порядок сходимости расчетов с методами замыкания в основном определяется порядком сходимости основной разностной схемы. Что касается погрешности именно методов замыкания, то они в большей степени определяются величиной сомножителя А в формуле погрешности.

$$\delta \mathbf{y} = \left\| \mathbf{y}_{\text{comp}} - \mathbf{y}_{\text{exact}} \right\|_{1} = \mathbf{A}\mathbf{h}^{\sigma}$$

Читатель сам может выбрать понравившийся метод. Однако необходимо отметить два обстоятельства, важные при выборе того или иного метода. Во-первых, объем вычислений разный у разных методов. Во-вторых, имеющиеся сложности при программной реализации, связанные с ограничениями применимости разных методов, также различны.

Что касается 2D задачи, то у анизотропных методов нет альтернативы. Они обладают той же точностью в 1D задачах, что и основные методы, так как основаны на тех же моделях замыкания, а в расчетах 2D задачи имеют более высокую точность. Из двух анизотропных методов предпочтения заслуживает ACM-1, как более простой в реализации.

Спасибо за внимание

•