# ИССЛЕДОВАНИЕ МОДИФИКАЦИЙ ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ

А. Ю. Выдрин[1,2], С. В. Сенчуков[2]

[1] *ФГАОУ ВО «Снежинский физико – технический институт Национального исследовательского ядерного университета МИФИ», Снежинск, Россия*

[2] *ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия*

Представлена модификация численного метода частиц в ячейках (PIC), основанная на добавлении индивидуальных значений плотности каждой частицы в разностную схему. Данные значения плотности учитываются через давление, рассчитываемое с использованием уравнения состояния для случая идеального газа.

*Ключевые слова: математическое моделирование, численные методы решения уравнений, газовая динамика, модификация численного метода.*

## Введение

Развитие вычислительной техники в последнее время вывело на передний план широкий спектр численных методов, более затратных по вычислениям, чем общепринятые, но при этом более устойчивые к изменениям геометрии газодинамического течения. Так, например, лагранжев метод частиц в ячейках (PIC) [1], разработанный группой ученых под руководством Ф.Х. Харлоу успешно применяется для описания газодинамических течений сложных конфигураций и высоких степеней сжатия. При этом, однако, имеют место существенные флуктуации газодинамических величин в силу дискретной природы самого численного метода.

**Постановка задачи**

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений в частных производных, изучаемых в газовой динамике:

$$\rho\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial(p+\omega)}{\partial x}; \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho\frac{\partial u}{\partial x} - u\frac{\partial \rho}{\partial x}; \tag{2}$$

$$\rho\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -(p+\omega)\frac{\partial u}{\partial x}; \tag{3}$$

$$p = p(\rho,\ \varepsilon). \tag{4}$$

где $u$ - скорость, $\rho$ - плотность, $p$ - давление, $\varepsilon$ - внутренняя удельная энергия, $\omega$ - классическая искусственная вязкость, $t$ время, $x$ - пространственная координата.

В данном случае уравнение состояния (4) описывает идеальный газ, однако с точки зрения построения разностных схем это не является принципиальным. Поэтому в дальнейшем при записи схем уравнения состояния будут опускаться. Из системы (1) – (4) можно исключить при дальнейшем рассмотрении уравнение, выражающее закон сохранения массы (2). Это возможно сделать потому, что частицы имеют постоянную массу, они не возникают и не исчезают (за исключением лишь тех случаев, когда они покидают систему или входят в нее).

**Разностная схема. Эйлеров этап расчета**

Система дифференциальных уравнений (1) – (4) решается в области: $\Omega = \{0 < x < l,\ 0 < t < T\}$. В области $\Omega$ вводится равномерная разностная сетка:

$$\begin{aligned}&\omega_{h,\tau} = \{(x_{i+1/2},\ t_n),\ (x_i,\ t_n),\ x_{i+1/2} = x_{i-1/2} + h,\ x_i = x_{i-1/2} + 0.5h,\\ &i = 0,1,\dots,N-1,\ x_0 = 0,\ x_N = l;\ t_{n+1} = t_n + \tau,\ n = 0,1,\dots,T-1\},\end{aligned} \tag{5}$$

где $i$ - пространственный индекс, $n$ - временной индекс, $h$ - шаг по пространству, $\tau$ - шаг по времени, $N$ - число граней ячеек, $l$ - конец отрезка по пространству, $T$ - конец отрезка по времени, $t$ время, $x$ - пространственная координата.

Аппроксимируя на разностной сетке (5) уравнение (1), и уравнение (3) разностная схема записывается следующим образом:

$$\rho_i^n\left(\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\tau}\right)=-\frac{\left(p+\omega\right)_{i+1/2}^n-\left(p+\omega\right)_{i-1/2}^n}{x_{i+1/2}-x_{i-1/2}}; \qquad (6)$$

$$\rho_i^n\left(\frac{\varepsilon_i^{n+1}-\varepsilon_i^n}{\tau}\right)=-(p+\omega)_i^n\left(\frac{\overline{u}_{i+1/2}^n-\overline{u}_{i-1/2}^n}{x_{i+1/2}-x_{i-1/2}}\right). \qquad (7)$$

где $u$ - скорость, $\rho$ - плотность, $p$ - давление, $\varepsilon$ - внутренняя удельная энергия, $\omega$ - классическая искусственная вязкость, $i$ - пространственный индекс, $n$ - временной индекс, $\tau$ - шаг по времени, $x$ - пространственная координата,

$$\rho_i^n = M_i/(x_{i+1/2}-x_{i-1/2}), \qquad (8)$$

$$\left(p+\omega\right)_{i+1/2}^n=\frac{1}{2}\left(\left(p+\omega\right)_i^n+\left(p+\omega\right)_{i+1}^n\right), \qquad (9)$$

$$\overline{u}_{i+1/2}^n=\frac{1}{4}\left(u_i^{n+1}+u_i^n+u_{i+1}^{n+1}+u_{i+1}^n\right). \qquad (10)$$

Условие устойчивости для явной схемы записывается следующим образом [2]:

$$\tau \le \min\left(\frac{\alpha h_i}{\left|\vec{u}\right|+c_{зв}}\right), \qquad (11)$$

где

$$c_{зв}=\sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}} \qquad (12)$$

скорость звука, $\tau$ - шаг по времени, $h_i$ - шаг по пространству, $\alpha$ - коэффициент, $|\vec{u}|$ - модуль вектора скорости.

Для моделирования ударно – волновых течений в схему (6) – (7) вводится классическая искусственная вязкость (комбинация линейной и квадратичной вязкости) [2]:

$$\omega = \omega_{лин} + \omega_{кв}, \tag{13}$$

где

$$\omega_{лин} = 0.5\nu\rho c_{зв}\left(\left|div\vec{u}\right| - div\vec{u}\right); \tag{14}$$

$$\omega_{кв} = 0.5\mu\rho\left|div\vec{u}\right|\left(\left|div\vec{u}\right| - div\vec{u}\right) \tag{15}$$

$\nu$ – коэффициент линейной вязкости, $\mu$ – коэффициент квадратичной вязкости, $c_{зв}$ – скорость звука.

В разностной схеме (6) – (7) искусственная вязкость вводится как аддитивная добавка к давлению, аппроксимирующая соответствующее дифференциальное выражение:

$$p_i^n = p_i^n + \omega_i. \tag{16}$$

**Движение частиц. Лагранжев этап расчета**

Перемещение частиц осуществляется с составляющими скорости на новом временном слое $u_i^{n+1}$, и составляющими внутренней удельной энергии на новом временном слое $\varepsilon_i^{n+1}$. Это придает большую устойчивость расчетам. При движении каждой частицы ее эффективная скорость вычисляется линейной интерполяцией по значениям скорости на гранях соответствующей ячейки, ближайших по своему расположению к рассматриваемой частице.

Для более точного описания фронта ударной волны передвижение частиц осуществлялось с составляющими внутренней удельной энергии в виде «добавки» к энергии частицы разницы предварительной новой, и старой внутренней удельной энергии в ячейке:

$$e_k^{n+1} = e_k^n + (\varepsilon_i^{n+1} - \varepsilon_i^n), \tag{17}$$

где $e_k$ – энергия на частицах, $\varepsilon_i$ – внутренняя удельная энергия в ячейке, $k$ – индекс частицы на сетке, $i$ – индекс ячейки на сетке, $n$ – временной индекс.

Во избежание возможных отрицательных значений энергии после раздачи «добавки» было выполнено нормирование:

$$e_k^{'} = e_k \frac{Q_i^{n+1}}{\sum_k m_k e_k}, \tag{18}$$

где $e_k$ – энергия на частицах, $Q_i$ – внутренняя энергия в ячейке, $k$ – индекс частицы на сетке, $i$ – индекс ячейки на сетке, $n$ – временной индекс.

**Модификация метода. Индивидуальные параметры на частицах**

Каждая ячейка разностной сетки характеризуется системой переменных, выражающих усредненные по массе значения скорости, внутренней удельной энергии, и давления в этой ячейке:

$$M_i = \sum_k m_k; \tag{19}$$

$$u_i = \frac{\sum_k m_k u_k}{\sum_k m_k}; \tag{20}$$

$$p_i = \frac{\sum_k m_k p_k}{\sum_k m_k}; \tag{21}$$

$$\varepsilon_i = \frac{\sum_k m_k (e_k + \frac{u_k^2}{2}) - M_i \frac{u_i^2}{2}}{\sum_k m_k}; \tag{22}$$

где $M_i$ - полная масса в ячейке, $u_i$ - усредненная скорость в ячейке, $p_i$ - усредненное давление в ячейке, $\varepsilon_i$ - внутренняя удельная энергия в ячейке, $u_k$ - скорость на частицах, $m_k$ - масса на частицах, $p_k$ - давление на частицах, $e_k$ - энергия на частицах, $i$ - индекс ячейки на сетке, $k$ - индекс частицы на сетке.

Воспользуемся уравнением неразрывности из системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа [3]:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho div\vec{u}. \tag{23}$$

Разделив обе части уравнения на величину $\rho$ получим:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt} = -div\vec{u}; \\ &\frac{d\ln(\rho)}{dt} = -div\vec{u}. \end{aligned} \tag{24}$$

Используя разностный вид уравнения (24) вычисляется значение индивидуальной плотности на частицах в предположении равной сжимаемости:

$$\rho_k^{n+1} = \rho_k^n e^{-\tau div\vec{u}}, \tag{25}$$

где $\rho_k$ – плотность на частицах, $k$ – индекс частицы на сетке, $\tau$ – шаг по времени, $n$ – временной индекс, $div\vec{u}$ - дивергенция вектора скорости.

Таким образом, зная значение индивидуальной плотности, и энергии [4] на частицах, вычисляется давление для каждой частицы через уравнение состояния для случая идеального газа:

$$p_k = (\gamma - 1)\rho_k e_k, \tag{26}$$

где $\rho_k$ – плотность на частицах, $e_k$ – энергия на частицах, $p_k$ – давление на частицах, $k$ – индекс частицы на сетке.

После пересчета с частиц на сетку давление усредняется (21) и подставляется в разностную схему (6) – (7), включая в себя индивидуальную плотность на частицах (25).

### Результаты численных расчетов

В работе была предложена тестовая задача Blast Waves [5], в которой моделируется сложное нестационарное взаимодействие двух взрывающихся слоев. Задача не имеет точного решения.

В области $(0 \le x \le 1)$ имеются три идеальных газа в неравновесном (по давлению) состоянии. Начальные условия задачи:

$$(\gamma, \rho, \varepsilon, p, u) = \begin{cases} (1,4;\ 1,0;\ 2500;\ 1000;\ 0), & (0 \le x \le 0,1), \\ (1,4;\ 1,0;\ 0,025;\ 0,01;\ 0), & (0,1 < x < 0,9), \\ (1,4;\ 1,0;\ 250;\ \ 100;\ \ 0), & (0,9 \le x \le 1). \end{cases}$$

На границах области задается условие «жесткая стенка».

Контрольный момент времени $t = 0.038$.

Было проведено шесть расчетов с числом частиц ячейке $n_k = 100 \cdot 2^{k-1},\ k = 1,...,6.$

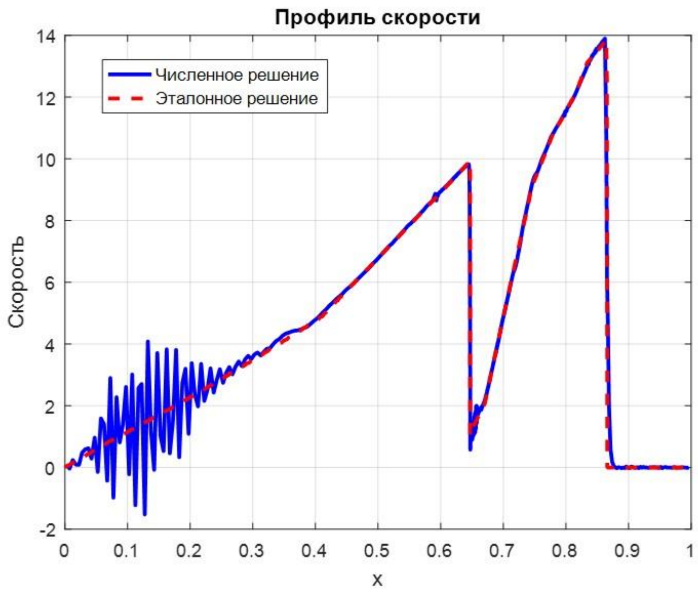
Решение задачи для $k = 6$ по явной разностной схеме на адаптивной сетке представлено на рисунке 1.

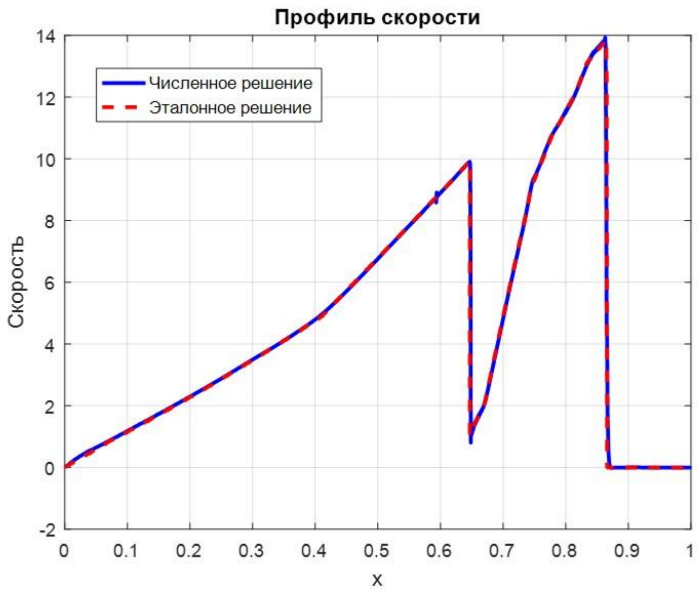
Приведены профили скорости, плотности, внутренней удельной энергии, давления – слева без применения в разностной схеме индивидуальных параметров на частицах, справа – с применением в разностной схеме индивидуальных параметров на частицах.

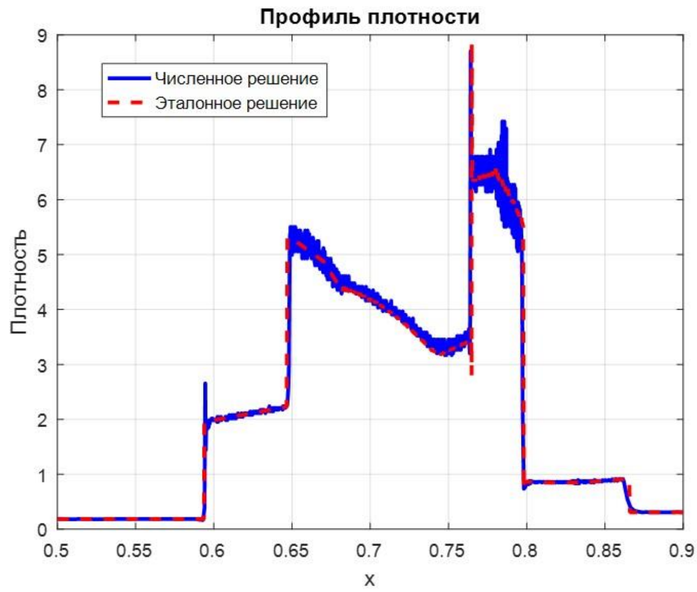
Полученные решения сравнивались с «эталонным» расчетом, полученным на лагранжевом счете, обозначенным далее индексом $k = 0$. «Практический» порядок сходимости метода PIC на негладких решениях определялся по формуле:

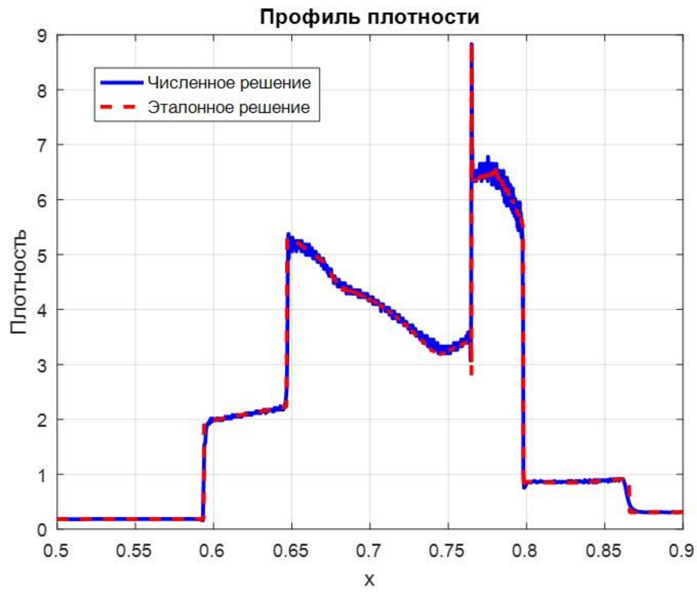
$$\alpha_k = \log_2 \frac{\left\| \rho_k - \rho_0 \right\|_{L_1}}{\left\| \rho_{k+1} - \rho_0 \right\|_{L_1}},\ k = 1,...,5, \qquad (27)$$

где $\rho_0$ – «эталонная» плотность.


Профиль скорости
Численное решение
Эталонное решение
Скорость
x


Профиль скорости
Численное решение
Эталонное решение
Скорость
x


Профиль плотности
Численное решение
Эталонное решение
Плотность
x


Профиль плотности
Численное решение
Эталонное решение
Плотность
x

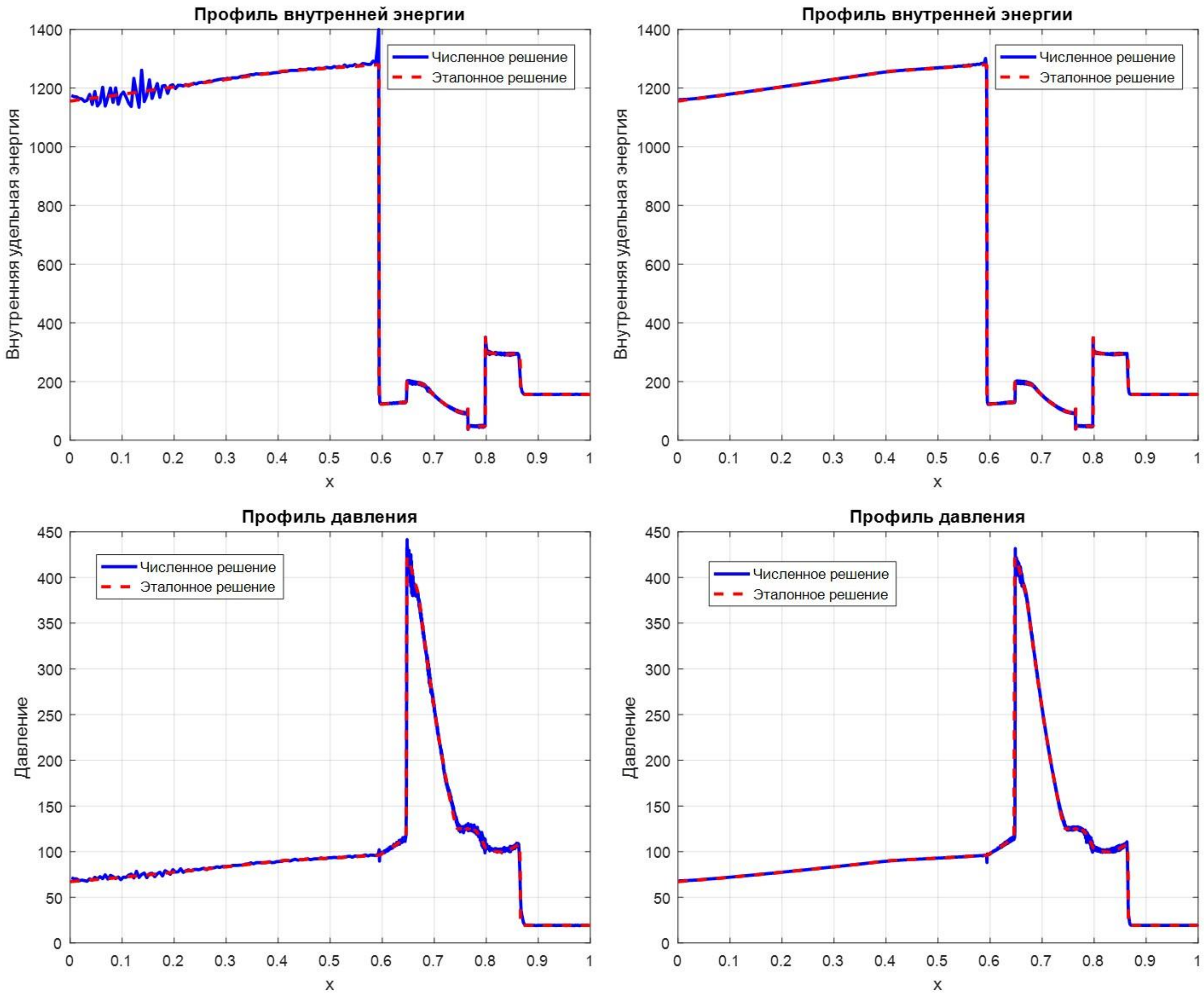



Рисунок 1. Численное решение задачи Blast Waves

На рисунке 2 приведена погрешность вычисления в норме $\|\rho_k - \rho_0\|_{L_1}$ в логарифмическом масштабе. Показано сравнение точности линейной и квадратичной интерполяции при вычислении эффективных скоростей для движения частиц.

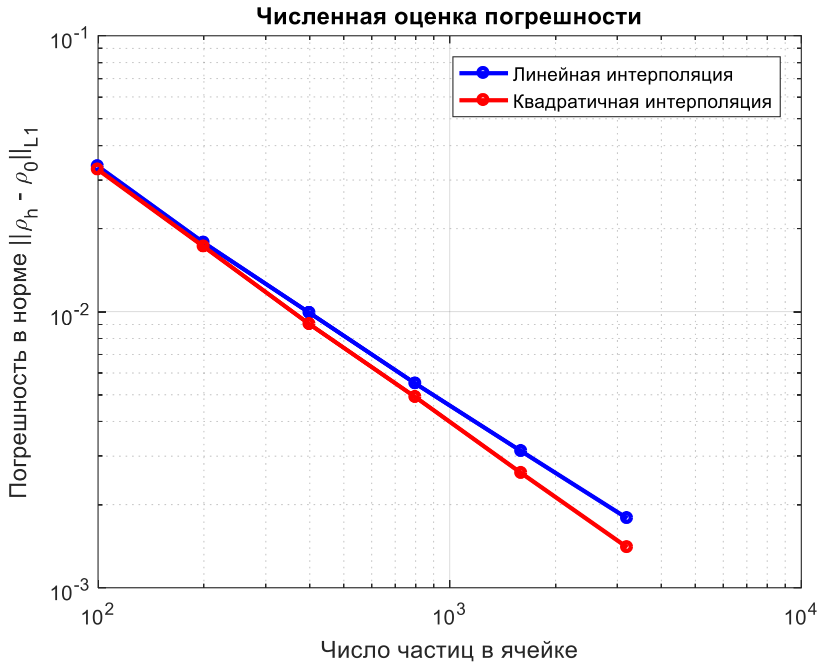



Рисунок 2. Численная оценка погрешности

Значения «практического» порядка сходимости $\alpha_k$ для метода PIC, используя линейную интерполяцию при вычислении эффективных скоростей для движения частиц, приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения «практического» порядка сходимости метода PIC.

| $k$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| $\alpha_k$ | 0,92 | 0,93 | 0,87 | 0,91 | 0,89 |

**Заключение**

Приведенные результаты позволяют сделать вывод о том, что введение индивидуальных параметров на частицах в разностную схему позволило повысить монотонность численного решения в методе PIC, получена сходимость в норме $\left\|\rho_k - \rho_0\right\|_{L_1}$ используя два метода интерполяции, «практический» порядок сходимости примерно равен единице, полная энергия системы сохраняется, показано, что квадратичная интерполяция имеет точность немного выше, чем линейная при вычислении эффективных скоростей для движения частиц.

**Использованные источники**

1) Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики. Ф. Х. Харлоу Калифорнийский университет, Научно – исследовательская лаборатория в *Лос – Аламосе*, *Нью – Мексико*.

2) Разностные схемы газовой динамики. А.А. Самарский, Ю.П. Попов Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», М., 1975.

3) Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, издание второе дополненное. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Издательство «Наука», главная редакция физико – математической литературы Москва 1966.

4) М.А. Харлова, И.А. Литвиненко, Численное исследование режима автоколебаний в методе частиц. ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия.

5) Woodward P., Collella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. // J. of Comp. Phys., 1984, v. 54.