

УДК 519.6

Монотонный метод частиц для моделирования двумерных газо- динамических течений

Описано развитие монотонного метода частиц для двумерных задач газовой динамики, реализованного в рамках комплекса программ ЭГАК. Приводятся алгоритмы взаимодействия частиц с компонентами, которые заданы без применения частиц, а также алгоритмы, позволяющие делать расчеты, используя частицы только в окрестности контактных границ.

Ю. В. Янилкин, В. А. Шмелёв,
В. Ю. Колобянин, С. П. Беляев

Введение

Проблема корректного расчета движения многокомпонентной среды является наиболее серьезной для лагранжево-эйлеровых и эйлеровых методик, особенно в смешанных ячейках в окрестности контактных границ (КГ). Имеются два основных подхода к решению уравнения адвекции для многокомпонентной среды.

Первый подход основан на выделении КГ и определении их положения на каждом счетном шаге. При этом КГ может выделяться явным образом или же восстанавливаться на каждом счетном шаге по полю концентраций. Последний алгоритм положен в основу методов типа метода концентраций [1], получивших широкое распространение.

Второй подход связан с применением методов частиц, или маркеров [2]. В этом случае потоки веществ из смешанных ячеек определяются частицами, с которыми связываются определенные массы веществ.

Оба подхода имеют свои достоинства и недостатки. Достоинства метода частиц определяются лагранжевым представлением частиц и возможностью «привязки» информации о среде к ним, что позволяет минимизировать погрешности эйлеровых методов, связанные с решением уравнения адвекции. Основным недостатком метода частиц является сильная немонотонность решения, вызванная дискретным переносом массы и величин, связанных с массой, из ячейки в ячейку.

В настоящей работе предлагается метод частиц, свободный от указанного недостатка. Монотонизация метода частиц производится путем дробления частиц, чтобы объем вытекающего из ячейки вещества соответствовал объему, вычисляемому по стандартным схемам методики. Чтобы не порождать бесконечную цепочку дробления, в дальнейшем раздробленные частицы вновь объединяются при выполнении определенных условий.

1. Постановка задачи

В коде ЭГАК для численного решения системы уравнений многокомпонентной газовой динамики в двумерном приближении основными величинами являются компоненты вектора скорости u_x , u_y , определенные в узлах сетки, и термодинамические характеристики, определенные в ячейках: плотности ρ_ξ , удельная (на единицу массы) внутренняя энергия e_ξ и объемные концентрации $\beta_\xi = V_\xi/V$ веществ – компонентов среды.

Дополнительно для некоторых компонентов, количество которых не ограничено (в частном случае это могут быть все компоненты), могут задаваться данные об их частицах. Каждая частица (с номером p) имеет пространственные координаты $x_p(t)$, $y_p(t)$, компоненты вектора скорости $u_{xp}(t)$, $u_{yp}(t)$ (они используются лишь в промежуточных вычислениях на лагранжевом этапе), а также для всех частиц дублируется информация о термодинамическом состоянии вещества: плотность $\rho_{\xi p}$, удельная внутренняя энергия $e_{\xi p}$, объем $V_{\xi p}$.

Замечание. Плотности и объемы позволяют находить и массы частиц. Отметим также, что в предлагаемом методе скорости частиц не хранятся, а получаются интерполяцией по скоростям в узлах счетной сетки.

Аппроксимация соответствующей системы уравнений производится с привлечением метода расщепления в два этапа. На первом (лагранжевом) этапе решаются уравнения газодинамики без конвективных членов, т. е. уравнения газодинамики в лагранжевых переменных. На втором (эйлеровом) этапе производится построение новой счетной сетки по заданному закону движения узлов сетки и пересчет величин на эту сетку. При этом в качестве начальных данных используются значения, полученные на первом этапе вычислений. Данный этап, в свою очередь, разбивается на два подэтапа: аппроксимация уравнений адвекции производится с использованием расщепления по направлениям.

В данной работе разностные уравнения приводятся лишь в объеме, необходимом для понимания алгоритмов, связанных с введением частиц; более полные сведения содержатся в [3]. Там, где это не вызывает разночтений, величины с нижнего временного слоя записываются без временного индекса или с индексом n , величины после первого этапа снабжаются индексом $n + 1/2$, а после второго – индексом $n + 1$.

2. Лагранжев этап

Аппроксимация уравнений для величин, определенных в ячейках. Аппроксимация уравнений лагранжевой газодинамики производится по стандартной схеме методики ЭГАК [3]. В результате на лагранжевом этапе вычислений для каждого вещества определяются новые значения скорости в узлах сетки, а также его плотность, энергия и объемная концентрация. Это касается и ячеек, содержащих частицы, причем не имеет значения, является ячейка *смешанной* (содержащей несколько веществ, часть которых описывается с помощью частиц) или *чистой* (содержащей только одно вещество, описываемое частицами).

Определение газодинамических величин для частиц. В дополнение к величинам, отнесенным к компонентам среды, в ячейках, содержащих частицы, определяются газодинамические величины и для частиц.

Определение новых координат частиц. Новые координаты частиц определяются за два шага.

Шаг 1. Предполагается, что на лагранжевом этапе частицы движутся вместе с ячейкой и внутри ячейки, не выходя за ее границу. Относительное изменение положения частиц в ячейке происходит за счет различия дивергенций (сжатий) различных компонентов вследствие применения той

или иной модели замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках. В настоящей работе используется лишь одно предположение – о равенстве дивергенций компонентов. Это означает, что внутриячеечное движение частиц не меняет относительного положения частиц по отношению к узлам счетной ячейки.

Для определения новых координат $\tilde{x}_p^{n+1/2}$, $\tilde{y}_p^{n+1/2}$ частиц используется билинейная интерполяция по координатам узлов ячейки $x^{n+1/2}$, $y^{n+1/2}$.

Шаг 2. Легко показать, что при вычислении скоростей частиц с помощью билинейной интерполяции не выполняется закон сохранения импульса в содержащей частицы ячейке. Чтобы обеспечить его сохранение, полученные билинейной интерполяцией скорости частиц корректируются следующим образом:

1. Рассчитываются компоненты импульса ячейки:

$$P_{cx} = \frac{1}{4} \left(u_{x0}^{n+1/2} + u_{x1}^{n+1/2} + u_{x2}^{n+1/2} + u_{x3}^{n+1/2} \right) M,$$

$$P_{cy} = \frac{1}{4} \left(u_{y0}^{n+1/2} + u_{y1}^{n+1/2} + u_{y2}^{n+1/2} + u_{y3}^{n+1/2} \right) M.$$

Здесь M – масса ячейки, u_{xi} , u_{yi} ($i = \overline{0,3}$) – компоненты векторов скорости в четырех вершинах ячейки.

2. Рассчитываются компоненты суммарного импульса частиц, принадлежащих данной ячейке:

$$P_{px} = \sum_p \tilde{u}_{xp}^{n+1/2} m_p, \quad P_{py} = \sum_p \tilde{u}_{yp}^{n+1/2} m_p.$$

Здесь значения скоростей частиц получены с использованием координат частиц, найденных методом билинейной интерполяции, и старых координат частиц:

$$\tilde{u}_{xp}^{n+1/2} = \frac{\tilde{x}_p^{n+1/2} - x_p^n}{\tau}, \quad \tilde{u}_{yp}^{n+1/2} = \frac{\tilde{y}_p^{n+1/2} - y_p^n}{\tau}.$$

3. Вычисляются коэффициенты $\lambda_x = P_{cx}/P_{px}$, $\lambda_y = P_{cy}/P_{py}$.

Скорости и координаты частиц пересчитываются с использованием полученных весовых коэффициентов:

$$u_{xp}^{n+1/2} = \lambda_x \tilde{u}_{xp}^{n+1/2}, \quad u_{yp}^{n+1/2} = \lambda_y \tilde{u}_{yp}^{n+1/2};$$

$$x_p^{n+1/2} = x_p^n + u_{xp}^{n+1/2} \tau, \quad y_p^{n+1/2} = y_p^n + u_{yp}^{n+1/2} \tau.$$

Определение объема, плотности и энергии частиц. Полагаем, что относительные приращения плотности и энергии частиц данного компонента среды равны соответствующим относительным приращениям этих величин, вычисленных для этого компонента в среднем, тогда

$$\rho_{\xi p}^{n+1/2} = \rho_{\xi p}^n + \left(\rho_{\xi}^{n+1/2} - \rho_{\xi}^n \right) \rho_{\xi p}^n / \rho_{\xi}^n, \quad (1)$$

$$e_{\xi p}^{n+1/2} = e_{\xi p}^n + \left(e_{\xi}^{n+1/2} - e_{\xi}^n \right), \quad (2)$$

$$V_{\xi p}^{n+1/2} = V_{\xi p}^n \left(V_{\xi}^{n+1/2} / V_{\xi}^n \right). \quad (3)$$

Легко показать, что при использовании (1)–(3) суммарные массы частиц не меняются, а суммарные внутренние энергии частиц будут равны энергии, сосчитанной для данного компонента в целом, т. е. имеют место соотношения:

$$\rho_{\xi}^{n+1/2} V_{\xi} = \sum_p \rho_{\xi p}^{n+1/2} V_{\xi p},$$

$$e_{\xi}^{n+1/2} m_{\xi} = \sum_p e_{\xi p}^{n+1/2} m_{\xi p}.$$

3. Эйлеров этап

Основные трудности при реализации метода частиц связаны с эйлеровым этапом, а именно с расчетом потоков массы и внутренней энергии из ячейки в ячейку. В классическом методе частиц Харлоу при переходе частицы в соседнюю ячейку ее масса и энергия «переходят» вместе с ней. В связи с дискретным (и немонотонным) характером переноса массы и всех величин, определенных на единицу массы, этому методу свойственна большая немонотонность профилей величин. В разд. 4 подробно рассматривается алгоритм монотонизации метода частиц.

В расчетах задавать все компоненты среды с применением частиц не всегда рационально в силу необходимости использования дополнительных вычислений и памяти компьютера. Поэтому применение частиц должно быть ограничено. Целесообразно применять их для тех компонентов, для которых погрешности, связанные с решением уравнения адвекции, наиболее ощутимы, например, для тонких слоев или веществ, которые требуют хранения истории поведения лагранжевой частицы.

В рамках предлагаемого метода разработаны алгоритмы:

- 1) взаимодействия компонентов, описанных с применением частиц, и компонентов, расчет которых производится по стандартной схеме методики ЭГАК;
- 2) для поддержки существования, образования и удаления частиц только в окрестности КГ;
- 3) объединения частиц;
- 4) пересчета плотности и энергии с частиц на ячейку в целом.

Алгоритмы указаны в последовательности их выполнения на эйлеровом этапе. Перед выполнения алгоритма 1 производится монотонизации метода частиц.

4. Алгоритм монотонизации метода частиц

Одномерный случай. Рассмотрим идею алгоритма в случае одномерного течения для одной «переходящей» из ячейки в ячейку частицы. На рис. 1 и 2 показаны две счетные ячейки, в которых содержатся частицы, обозначенные точками, а штриховыми отрезками указаны воображаемые границы объемов¹.

Поток вещества направлен слева направо в соответствии с указанной скоростью движения u (см. рис. 1). Тогда вытекающий из ячейки слева поток вещества объемом² ΔV (выделен более темным цветом) равен произведению длины поперечного ребра ячейки L на $S = ut$, т. е.

$$\Delta V = Lut. \quad (4)$$

¹ В данной методике при вычислениях необходимы лишь численные значения объемов, их конфигурации не хранятся.

² В дальнейшем для краткости будем использовать термин «поток объема».

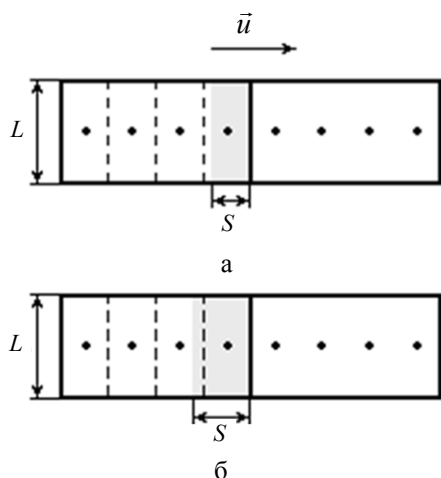


Рис. 1. Причина немонотонности: а – поток объема меньше объема частицы; б – поток объема больше объема частицы

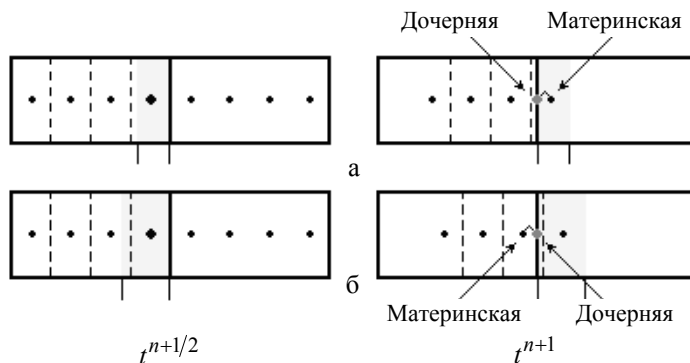


Рис. 2. Алгоритм монотонизации в одномерном случае: а – $\delta V < 0$; б – $\delta V > 0$

Причиной немонотонности классического метода частиц является несовпадение реального потока объема (и соответственно массы вещества), рассчитанного по формуле (4), с объемом частицы, перешедшей через поперечное ребро ячейки. В одном случае (см. рис. 1,а) из ячейки слева перемещается объем, меньший объема частицы, в другом (см. рис. 1,б) – больший объема частицы.

Замечание. В двумерном случае и при перемещении нескольких частиц суть дела не меняется.

Введем обозначение

$$\delta V = \Delta V - V_p, \tag{5}$$

где ΔV – поток объема, рассчитанный по формуле (4), V_p – объем частицы с номером p , перешедшей из одной ячейки в другую.

Приведем объяснение алгоритма монотонизации для обоих указанных случаев.

1. *Поток объема ΔV меньше объема перемещающейся частицы ($\delta V < 0$).* Данная ситуация отображена на рис. 2,а. Слева – состояние после лагранжевого этапа вычислений – на момент $t^{n+1/2}$, справа – на момент t^{n+1} . В этом случае частица, перешедшая из донорной ячейки в акцепторную, делится на две части – материнскую и дочернюю. Материнская частица переходит в акцепторную ячейку, приобретая координаты в соответствии с ее скоростью и объемом, равный выходящему из донорной ячейки объему вещества ΔV . Дочерняя частица получает объем, равный разности объема первоначальной частицы и потока объема ΔV , и помещается в донорную ячейку, приобретая координаты точки на стороне ячейки. Связь между материнской и дочерней частицами обозначена в виде ломаного отрезка.

2. *Поток объема ΔV больше объема переходящей частицы ($\delta V > 0$).* Данная ситуация отображена на рис. 2,б. В этом случае необходимо восполнить недостаток объема переходящей частицы за счет принудительного перемещения некоторых частиц или фрагментов частиц из донорной ячейки в акцепторную. Таким образом, дробится ближайшая к общему ребру этих ячеек частица из неперешедших в акцепторную ячейку. Она порождает дочернюю частицу объемом, равным разности объемов δV , которая помещается в акцепторную ячейку как точка с координатами на общем ребре донорной и акцепторной ячеек.

В случае перемещения из ячейки в ячейку не одной, а сразу нескольких частиц формула (5) примет вид

$$\delta V = \Delta V - \sum_p V_p,$$

где ΔV – потока объема, рассчитанный по формуле (4); V_p – объем частицы с номером p , перешедшей из ячейки в ячейку; суммирование ведется по всем перешедшим частицам.

В связи с этим приведем отличия от описанного выше алгоритма.

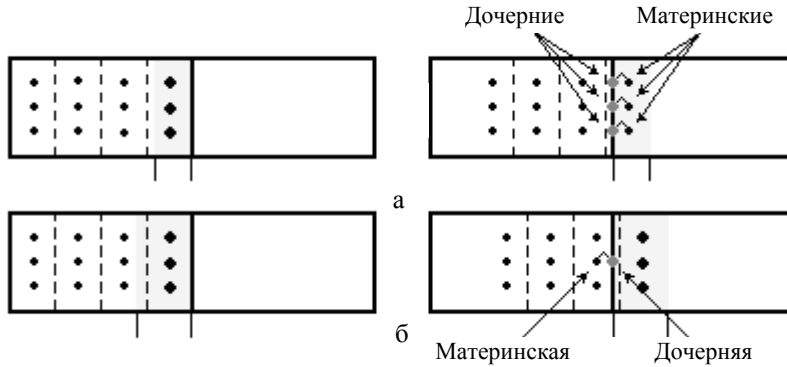


Рис. 3. Алгоритм монотонизации в одномерном случае при переходе из ячейки в ячейку нескольких частиц: а – $\delta V < 0$; б – $\delta V > 0$

1. Поток объема ΔV меньше суммы объемов переходящих частиц ($\delta V < 0$). Данная ситуация отображена на рис. 3,а. В этом случае делятся все переходящие частицы. В акцепторную ячейку попадают материнские частицы с объемами

$$V_p^M = V_p \frac{\Delta V}{\sum_p V_p}.$$

На границе донорной ячейки остаются дочерние частицы, каждая из которых имеет объем

$$V_p^D = V_p - V_p^M.$$

2. Поток объема ΔV больше суммы объемов переходящих частиц ($\delta V > 0$) – рис. 3,б. Чтобы заполнить оставшийся объем δV , делится ближайшая к границе частица из донорной ячейки. При этом, если $V_p < \delta V$, весь объем материнской частицы переходит к дочерней и делится следующая частица из донорной ячейки. Если донорная ячейка состоит из смеси нескольких компонентов, а акцепторная – чистая и заполнена компонентом, который присутствует в донорной ячейке, то делиться в первую очередь будут частицы этого компонента.

Во всем остальном в алгоритме ничего не меняется.

Обобщение на двумерный случай. Здесь прежде всего представляет интерес случай перехода частицы в соседнюю ячейку, расположенную по диагонали от донорной ячейки (рис. 4). Это особый случай, поскольку в методике ЭГАК при решении уравнения адвекции и соответствующем расчете потоков используется расщепление по направлениям и не предусмотрены потоки из ячейки в ячейку по диагонали.

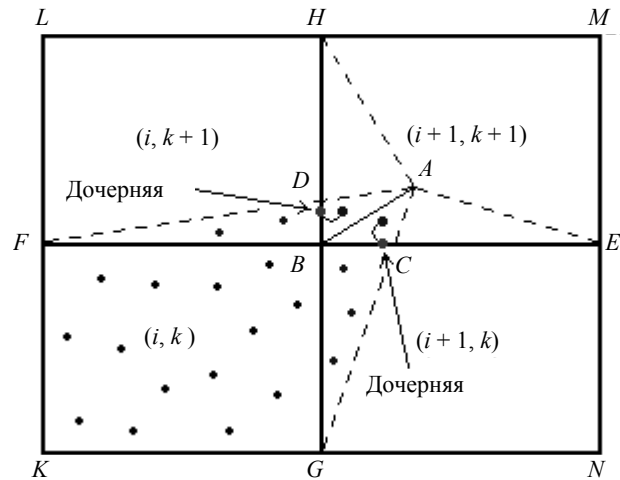


Рис. 4. Вычисление потоков объема на эйлеровом этапе

Рассмотрим частный случай, изображенный на рис. 4. Пусть на эйлеровом этапе происходит перемещение лишь одного узла A в новое положение B . Пунктирными линиями на рисунке показано положение сторон ячеек на момент времени $t^{n+1/2}$ (после лагранжева этапа вычислений), для которых данный узел сетки является общей вершиной. Точки C и D определяются как точки пересечения прямых AG с BE и AF с BH соответственно.

В соответствии с правилами методики ЭГАК потоки объема между ячейками определяются следующим образом. Объем вещества, который сопоставлен треугольнику ABG (для краткости – *объем треугольника ABG*) передается из ячейки (i, k) в ячейку $(i + 1, k)$, т. е.:

$$V_{i,k}^{n+1} = V_{i,k}^{n+1/2} - V_{ABG},$$

$$V_{i+1,k}^{n+1} = V_{i+1,k}^{n+1/2} + V_{ABG}.$$

Исходя из этого, для всех рассматриваемых ячеек с учетом всех потоков имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} V_{i,k}^{n+1} &= V_{i,k}^{n+1/2} - V_{ABG} - V_{ABF} = V_{BFGK}, \\ V_{i+1,k}^{n+1} &= V_{i+1,k}^{n+1/2} + V_{ABG} - V_{ABE} = V_{BGNE}, \\ V_{i,k+1}^{n+1} &= V_{i,k+1}^{n+1/2} - V_{ABH} + V_{ABF} = V_{BFLH}, \\ V_{i+1,k+1}^{n+1} &= V_{i+1,k+1}^{n+1/2} + V_{ABE} + V_{ABH} = V_{BHME}. \end{aligned} \tag{6}$$

Заметим, что по формулам (6) объем треугольника ABC входит дважды в потоки объема для ячейки $(i + 1, k)$ – как часть треугольников ABG и ABE , но один раз – со знаком плюс, а второй раз – со знаком минус. То есть в новый объем этой ячейки он фактически не войдет, а войдет в объем ячейки $(i + 1, k + 1)$. Аналогично дело обстоит с объемом треугольника ABD , который войдет в объем ячейки $(i + 1, k + 1)$ и не войдет в объем ячейки $(i, k + 1)$.

Таким образом, при рассмотрении вкладов частиц полагается, что частица, находящаяся в треугольнике ABC , при счете потоков между данной ячейкой (i, k) и ее недиагональными соседями переходит в ячейку $(i + 1, k)$, а частица из треугольника ABD переходит в ячейку $(i, k + 1)$. Затем при счете потоков между ячейками $(i + 1, k)$, $(i + 1, k + 1)$ и $(i, k + 1)$, $(i + 1, k + 1)$ эти частицы

переходят в ячейку $(i + 1, k + 1)$. Поэтому при рассмотрении процесса с точки зрения монотонности потоков вводятся соответствующие дочерние частицы, как показано на рис. 4. Отметим, что при вычислении потоков положение материнской частицы тем не менее определяется в истинной акцепторной ячейке $(i + 1, k + 1)$.

Моделирование деления частиц основывается на следующих принципах:

- термодинамическое состояние делящейся частицы дублируется для обеих получаемых частиц (тем самым обеспечивается выполнение законов сохранения);
- в качестве номера дочерней частицы берется номер материнской частицы, который одновременно служит признаком того, что частица дочерняя;
- для материнской частицы никакой информации о дочерних частицах не имеется;
- у одной материнской частицы может быть несколько дочерних;
- у дочерней частицы может быть только одна материнская;
- дочерние частицы также могут делиться, однако всем последующим дочерним частицам будет присвоен номер первоначальной материнской частицы;
- дочерние частицы размещаются на общей стороне между донорной и акцепторной ячейками, чтобы максимально быстро обеспечить их слияние с соответствующими материнскими частицами.

5. Алгоритм взаимодействия частиц со средой, описываемой без частиц

В случае смешанных ячеек, содержащих вещества без частиц и с частицами, алгоритм расчета потоков объема видоизменяется.

Рассмотрим случай, когда ячейка заполняется разнотипными веществами, одно из которых описывается лишь сеточными величинами, а второе – частицами (соответственно 1 и 2 на рис. 5). Пусть необходимо распределить по компонентам поток, направленный слева направо (выделенный на рисунке более темным цветом).

Сначала поток объема заполняем объемом переходящих частиц. Если суммарный объем переходящих частиц превышает поток объема через граничное ребро, «работает» описанный выше алгоритм деления частиц (см. разд. 4, случай $\delta V < 0$).

В случае нехватки суммарного объема переходящих частиц для заполнения всего вытекающего объема выполняются следующие действия. Недостающая часть потока объема заполняется оставшимся компонентом без частиц. Если «бесчастичных» компонентов несколько, объем между ними распределяется по алгоритму метода концентраций [1]. Если и бесчастичных компонентов не хватает, то остаток потока объема заполняется частицами с использованием алгоритма деления для случая $\delta V > 0$ из разд. 4.

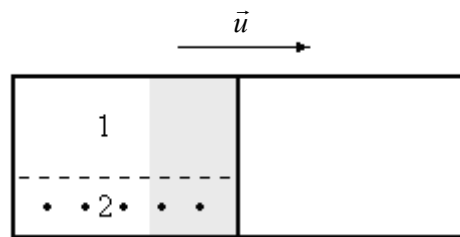


Рис. 5. Поток объема из смешанной ячейки

6. Алгоритмы счета в окрестности КГ

В рамках предлагаемого метода разработан способ счета с использованием частиц только в окрестностях КГ между веществами. Окрестностью КГ будем считать смешанные ячейки и по одному слою прилегающих к ним с обеих сторон чистых ячеек каждого вещества.

На рис. 6 изображены варианты расположения частиц относительно КГ. Темно-серым и светло-серым цветом (рис. 6,а) закрашены чистые ячейки с различными веществами, серым (рис. 6,б) – смешанная ячейка. Частицы в ячейках выделены контрастным цветом. Рис. 6,а иллюстрирует задание обоим веществ частицами только в окрестности КГ на начальный момент времени, а рис. 6,б – расположение частиц в ходе счета.

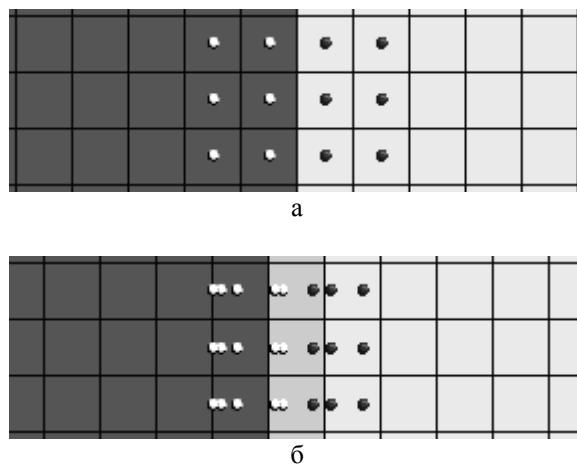


Рис. 6. Расположение частиц веществ относительно КГ: а – $t = 0$; б – $t > 0$

Таким образом, если вещество описано частицами только в окрестности КГ, то одно и то же вещество присутствует в двух ипостасях: как с частицами, так и без них, в зависимости от геометрического положения конкретной ячейки. Отсюда главная сложность алгоритма – взаимодействие частиц и бесчастичного вещества для одного и того же компонента смеси. Для упрощения алгоритма в рамках методики запрещается нахождение в пределах одной ячейки вещества, описанного частицами, и того же вещества, но без частиц. Формально для каждой ячейки это требование выглядит так: либо $V_{\xi} = \sum_{\xi p} V_{\xi p}$, либо $\sum_{\xi p} V_{\xi p} = 0$.

Рассмотрим две причины возникновения ситуации одновременного нахождения в ячейке вещества с разнотипным описанием. На рис. 7 изображены ячейки, заполненные одним и тем же веществом. Но для каждого случая в одной из них вещество описано частицами (черные точки), а в другой – без частиц. Темным цветом заштрихован поток объема относительно объема всей ячейки, стрелкой указано его направление. Далее приведены описания и способы исключения нежелательной ситуации.

1. На рис. 7,а представлен поток объема из ячейки с частицами в ячейку без частиц. В этом случае алгоритм деления частиц на две, описанный в разд. 4, для донорной ячейки не меняется, но при этом частица, которая должна была попасть в акцепторную ячейку, удаляется с пересчитыванием термодинамических параметров, а оставшаяся частица в донорной ячейке становится обычной (не дочерней).

2. На рис. 7,б представлен расчет потока объема из ячейки без частиц в ячейку с частицами. В этом случае в акцепторную ячейку добавляется частица с объемом, равным потоку объема, и с параметрами вещества донорной ячейки. При этом добавляемая частица сразу сливается с одной из частиц акцепторной ячейки. Правила объединения приведены ниже.

Для сохранения ситуации, при которой частицы присутствуют лишь в окрестности КГ, производится удаление частиц из ячеек вне ее окрестности и образование частиц в ячейках окрестности КГ.

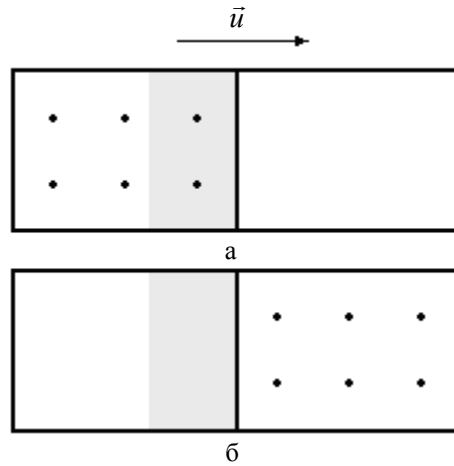


Рис. 7. Конфликтные ситуации при двух способах задания одного и того же вещества: а – поток объема из ячейки с частицами в ячейку без частиц; б – поток объема из ячейки без частиц в ячейку с частицами

7. Алгоритм объединения частиц

В противовес делению частиц (см. разд. 4) разработан алгоритм их объединения. Данная процедура необходима для предотвращения бесконтрольного роста количества частиц при их дроблении.

Две частицы одного и того же вещества, находящиеся в пределах одной ячейки, подлежат объединению, если выполняется один из следующих критериев:

- одна из частиц является дочерней по отношению к другой;
- две дочерние частицы имеют одну и ту же материнскую;
- частицы имеют близкие (с точностью до константы) координаты;
- количество частиц превышает установленное максимальное количество в ячейке;
- одна из частиц имеет относительно малый объем.

Правила объединения частиц следующие:

- если объединяются дочерняя и материнская частицы, то полученная частица получает координаты материнской;
- если объединяются две дочерние частицы (p_1 и p_2), то координаты полученной частицы (p) выбираются пропорционально массам исходных частиц:

$$\tilde{x}_p = x_{p1} + (x_{p2} - x_{p1}) \frac{m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}},$$

$$\tilde{y}_p = y_{p1} + (y_{p2} - y_{p1}) \frac{m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}};$$

- термодинамические параметры полученной частицы вычисляются с обеспечением законов сохранения:

$$\tilde{e}_p = \frac{e_{p1}\rho_{p1}V_{p1} + e_{p2}\rho_{p2}V_{p2}}{\rho_{p1}V_{p1} + \rho_{p2}V_{p2}},$$

$$\tilde{\rho}_p = \frac{\rho_{p1}V_{p1} + \rho_{p2}V_{p2}}{V_{p1} + V_{p2}},$$

$$\tilde{V}_p = V_{p1} + V_{p2}.$$

8. Алгоритм пересчета плотности и энергии с частиц на ячейку в целом

Для каждой ячейки, содержащей частицы, происходит пересчет величин по следующим формулам:

$$\rho_{\xi}^{n+1} = \frac{\sum_p \rho_{\xi p} V_{\xi p}}{\sum_p V_{\xi p}},$$

$$e_{\xi}^{n+1} = \frac{\sum_p e_{\xi p} \rho_{\xi p} V_{\xi p}}{\sum_p \rho_{\xi p} V_{\xi p}},$$

где суммирование ведется по частицам компонента ξ в рассматриваемой ячейке.

9. Тестирование метода

Задача 1. О движении скачка уплотнения в форме креста. В области: $0 < x < 12$, $0 < y < 12$ заданы два вещества (0 и 1). Для вещества 0: $\rho_0 = 1$, $e_0 = 0$, $u_x = 1$, $u_y = 1$, частицы не заданы; для вещества 1: $\rho_0 = 10$, $e_0 = 0$, $u_x = 1$, $u_y = 1$, задана одна частица на ячейку. Во всей области $P = 0$, т. е. в данной задаче газодинамика фактически отсутствует, имеется лишь конвективный перенос.

Расчеты проводились на неподвижной сетке 60×60 .

Результаты расчетов по ММЧ и по методике ЭГАК³ приведены в форме растровых картин плотности на момент времени $t = 7,08$ (рис. 8). Из рисунка видно, что при решении линейного уравнения переноса ММЧ дает точный результат.

³ Здесь и далее ММЧ – монотонный метод частиц, МЧ – метод частиц (классический); термин ЭГАК используется для обозначения одноименной методики, основанной на сеточном подходе.

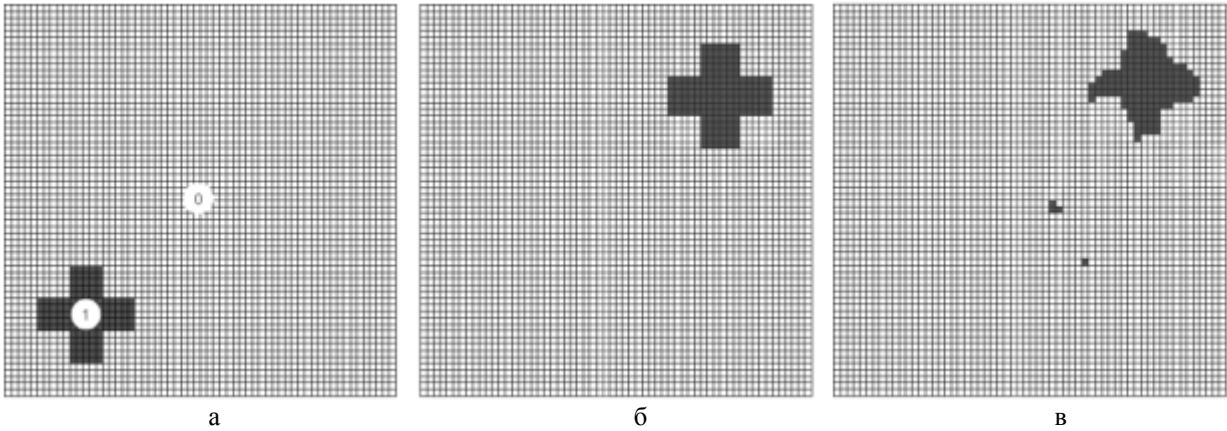


Рис. 8. Задача 1. Растровые картины плотности: а – $t = 0$; б – $t = 7,08$, ММЧ; в – $t = 7,08$, ЭГАК

Задача 2. Одномерная стационарная ударная волна. Рассматривается одномерная задача в следующей постановке. В области $0 < x < 50$, $0 < y < 4$ имеется идеальный газ с параметрами $\rho = 1$, $P = 0$, $u = 0$, $\gamma = 3$. По веществу слева направо движется плоская ударная волна с параметрами за фронтом $\rho = 2$, $e = 2$, $P = 8$, $u = 2$.

Расчеты проводились на неподвижной сетке 100×4 . В расчетах МЧ и ММЧ задавалось по 4 частицы на ячейку.

На рис. 9 показаны графики зависимости плотности от координаты на момент времени $t = 10$, полученные в расчетах по ММЧ и МЧ, а также по методу РРМ [4]. Видно, что ММЧ дает примерно такой же результат, что и РРМ, и лучший результат по сравнению с МЧ. Точное положение ударной волны $x = 40$.

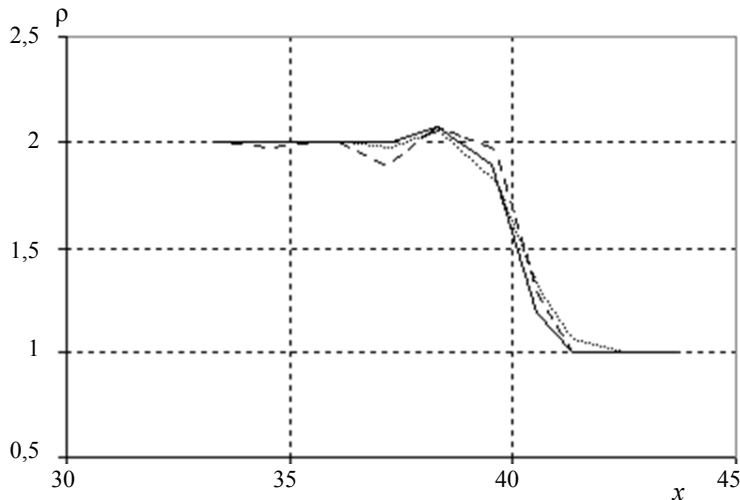


Рис. 9. Задача 2. Зависимости плотности от координаты, $t = 10$:
 - - - - МЧ; — — ММЧ; - РРМ

Задача 3. Точечный взрыв. В области $0 < x < 20$, $0 < y < 20$ имеются два вещества (рис. 10,а): в круге радиусом 0,1 с центром в начале координат помещен идеальный газ с параметрами $\rho = 1$, $e = 1$, $P = 0$, $\gamma = 1,4$ (вещество 0); в остальной части области – идеальный газ с параметрами $\rho = 1$, $e = 0$, $P = 0$, $\gamma = 1,4$ (вещество 1).

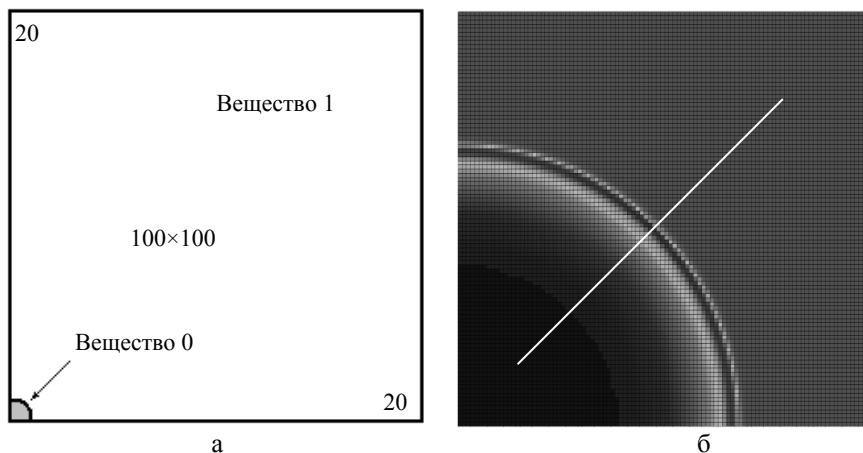


Рис. 10. Схема постановки задачи 3 (а) и растровая картина плотности на момент $t = 100$ (б)

Проведены расчеты методами РРМ, ММЧ и МЧ на неподвижной прямоугольной сетке. Расчеты по МЧ и ММЧ проводились с заданием в начальный момент времени по 4 частицы на ячейку. В данной задаче в расчете по ММЧ происходит увеличение количества частиц в области вещества 0 из-за его сильного расширения.

Результаты расчета по ММЧ представлены на рис. 10,б в виде растровой картины плотности на момент времени $t = 100$.

На рис. 11 приводятся графики зависимости плотности от радиуса для всех ячеек части счетной области, где в момент $t = 100$ находится ударная волна. Они демонстрируют степень сохранения сферической симметрии рассматриваемого течения различными методами.

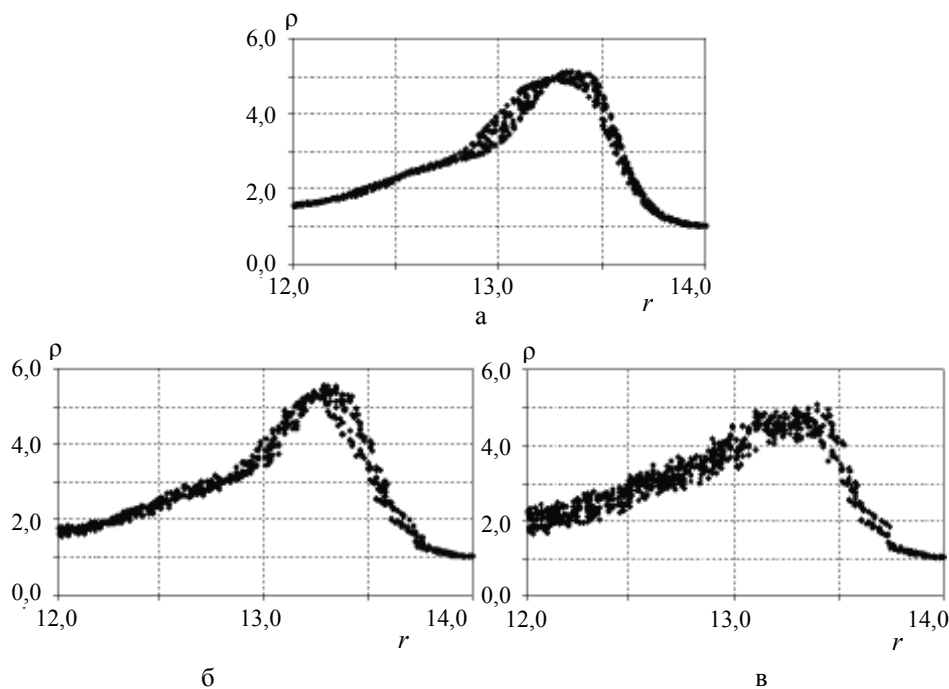


Рис. 11. Задача 3. Плотность вещества по всем ячейкам в зависимости от радиуса, $t = 100$: а – РРМ; б – ММЧ; в – МЧ

На рис. 12 приведены профили плотности в зависимости от радиуса в сечении, отмеченном на рис. 10,б в виде отрезка белого цвета.

Из представленных рисунков видно, что и в этой задаче точность ММЧ близка к точности РРМ и заметно выше точности МЧ.

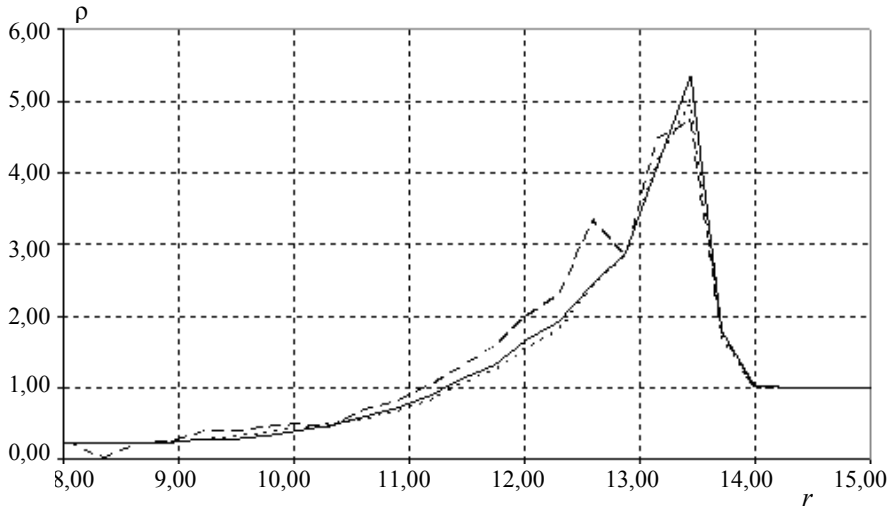


Рис. 12. Задача 3. Графики зависимости плотности от радиуса в выбранном сечении, $t = 100$:
 – РРМ; ---- – МЧ; — — — ММЧ

Задача 4. Сферическое схождение оболочки. Начальная геометрия задачи взята из работы [5] и показана на рис. 13 ($R_1 = 0,8$, $R_2 = 1$, $L = 1,1$, Ox – ось симметрии).

В области 1 $\rho_0 = 0,01$, $e_0 = 0$, $U_0 = 0$; уравнение состояния – для идеального газа с $\gamma = 5/3$. В области 2 $\rho_0 = 10$, $e_0 = 0$, $U_0^R = -1$; уравнение состояния – трехчлен с константами $\rho_0 = 10$, $c_0 = 4$, $n = 5$, $\gamma = 2$. На границе $R_2 = 1$ давление $P = 0$. В области 3 – вакуум с $P = 0$. Единицы измерения: ρ – г/см³, t – 10 мкс, L – см. Расчеты проводились на неподвижной равномерной сетке 110×110 .

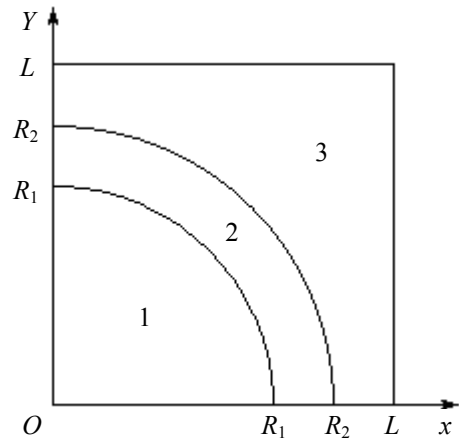


Рис. 13. Геометрия задачи 4

В расчете по ММЧ частицы задавались как в области с газом, так и в оболочке (1 частица на ячейку, ограничение на количество частиц – 4). Сравнение результатов проводилось с расчетом по методике ЭГАК. Данная задача интересна тем, что в ней количество частиц постоянно уменьшается в процессе счета из-за сжатия обоих веществ.

Основной оцениваемый результат в этой задаче – максимальное сжатие газа. Отметим, что эталонное значение плотности, полученное в расчетах на сходимость по одномерной методике [6], составляет ~ 25 . Максимальная средняя плотность газа и соответствующее ей время для каждого из расчетов равны: для ММЧ – 16,03 при $t = 0,368$, для ЭГАК – 16,49 при $t = 0,369$. Для наглядности на рис. 14,а приводится фрагмент счетной области с частицами на момент $t = 0,368$. Также приведены значения плотности для всех ячеек области сжатого газа при расчете по ММЧ (рис. 14,б) и по стандартной методике ЭГАК (рис. 14,в).

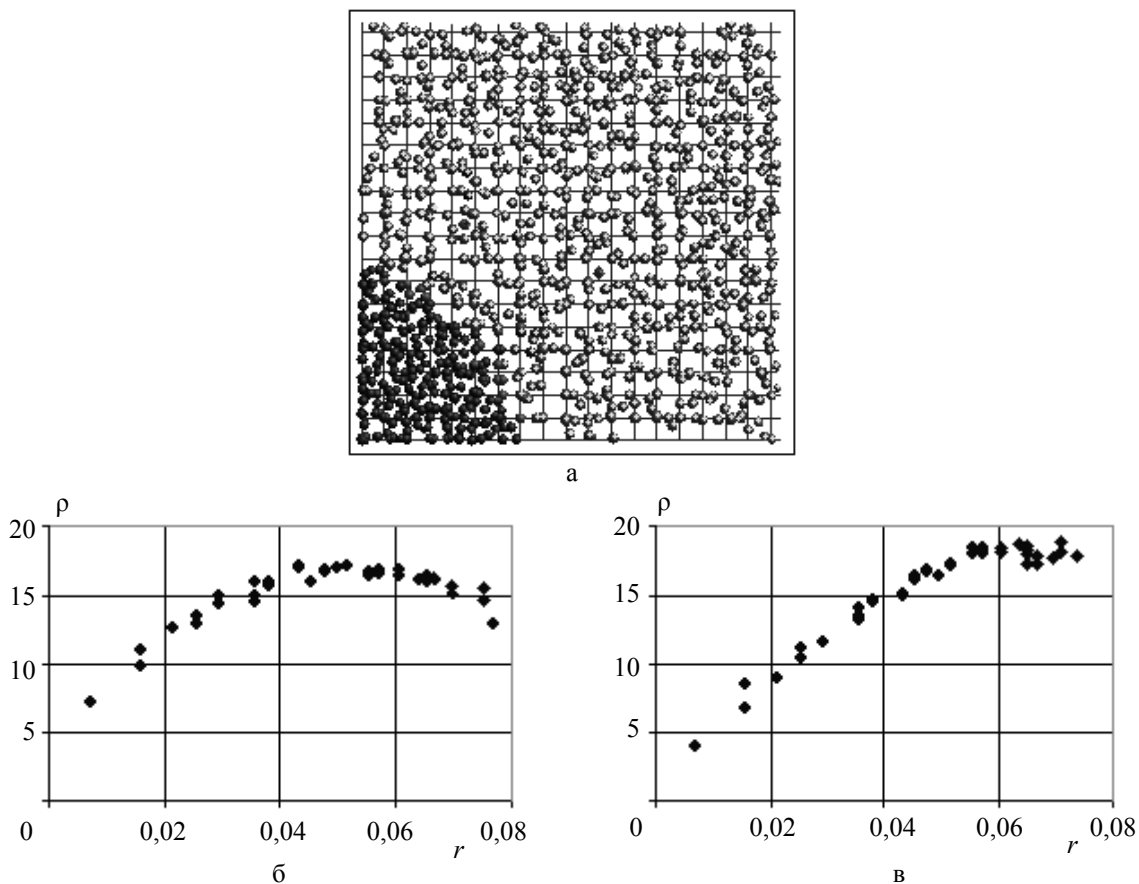


Рис. 14. Задача 4. Расположение частиц в центральной области (а); значения плотности для всех ячеек газа, рассчитанные по ММЧ (б) и стандартной методике ЭГАК (в)

Максимальные сжатия газа, а также времена их достижения в ЭГАК и ММЧ близки, однако максимальные сжатия значительно ниже по сравнению с эталонным решением, что объясняется малым количеством ячеек в этих расчетах (при увеличении количества ячеек решение приближается к эталонному [5]). Меньшее сжатие в расчете ММЧ по сравнению с ЭГАК объясняется наличием пятен газа, «оторвавшихся» от основной области в расчете ММЧ. С точки зрения сохранения симметрии течения ММЧ дает результат примерно с той же точностью, что и ЭГАК (см. [7]).

Заключение

В работе дано описание ММЧ. Метод разработан для моделирования газодинамических течений многокомпонентной среды при совместном использовании сеточных методов методики ЭГАК без частиц, основанных на методе РРМ, и ММЧ для некоторых слоев. Проведены методические исследования метода.

Расчеты показали, что ММЧ имеет близкую с методом РРМ точность в задачах с ударно-волновыми течениями и существенно большую точность, как и классический МЧ, в задачах конвективного переноса. В то же время ММЧ свободен от основного недостатка МЧ – сильной немо- нотонности решения, связанной с дискретным переносом массы.

Дальнейшие перспективы ММЧ авторы связывают с его применением в задачах, требующих хранения истории процесса для лагранжевых точек. Такие задачи возникают при использовании кинетик выгорания ВВ, в моделях разрушения материалов и др.

Список литературы

1. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С. и др. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566–569.
2. Харлоу Ф. Х. Численные методы частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. – М.: Мир, 1967. С. 316–342.
3. Янилкин Ю. В., Шанин А. А., Ковалев Н. П. и др. Комплекс программ ЭГАК для расчетов двумерных течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1993. Вып. 4. С. 69–75.
4. Янилкин Ю. В., Колобянин В. Ю., Чистякова И. Н., Егужова М. Ю. Применение метода РРМ в расчетах по методикам ЭГАК и ТРЭК // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2005. Вып. 4. С. 69–79.
5. Янилкин Ю. В., Топорова О. О. Двумерная скалярная и искусственная вязкость методики ЭГАК в сферических системах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2010. Вып. 3. С. 46–54.
6. Бондаренко Ю. А. Порядок аппроксимации, порядок численной сходимости и экономичность счета многомерной газовой динамики в переменных Эйлера на примере расчетов задачи «blast waves» // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2004. Вып. 4. С. 51–61.
7. Дарова Н. С., Дибиров О. А., Жарова Г. В. и др. Комплекс программ ЭГАК. Лагранжево-эйлерова методика расчета двумерных газодинамических течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1994. Вып. 2. С. 51–58.

The Monotone Particle Method for 2D Gas Dynamic Flow Simulations

Yu. V. Yanilkin, V. A. Shmelev, V. Yu. Kolobyanin, S. P. Belyaev

The article describes the development of the monotone particle method for 2D gas dynamic simulations implemented in the EGAK code. Algorithms of particle interaction with materials defined without particles, as well as algorithms enabling simulations, where particles are used only at interfaces are presented.