

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Южно-уральский государственный университет»  
(национальный исследовательский университет)  
Институт естественных и точных наук  
Факультет Математики, механики и компьютерных технологий  
Кафедра вычислительной механики

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ  
Заведующий кафедрой ВМ,  
д. ф.-м. н., профессор  
\_\_\_\_\_/Ю.М. Ковалев  
\_\_\_\_\_2020 г.

**Математическое моделирование многокомпонентных газовых смесей**

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

ЮУрГУ – 01.03.03.2020. 306-01-015.ВКР

Руководитель  
ст. преподаватель  
\_\_\_\_\_/ Е.Е. Пигасов  
\_\_\_\_\_2020 г.

Автор работы  
студент группы ЕТ-410  
\_\_\_\_\_/ В.А. Снимщиков  
\_\_\_\_\_2020 г.

Нормоконтролер  
к. ф.-м. н., доцент кафедры ВМ  
\_\_\_\_\_/Н.Л. Клиначева  
\_\_\_\_\_2020 г.

## Оглавление

1	Введение.....	3
2	Допущения проекта.....	4
2.1	Погрешности .....	4
2.2	Сплошная среда .....	5
2.3	Подходы к описанию движения.....	6
2.4	Виды систем.....	7
3	Обзор литературы .....	8
4	Метод расчета.....	11
4.1	Суть метода .....	11
4.2	Разностная схема .....	12
4.2.1	Одномерный случай.....	12
4.2.2	Двумерный случай .....	14
4.3	Модификация метода .....	16
4.3.1	Одномерный случай.....	16
4.3.2	Двумерный случай .....	17
4.4	Показатель адиабаты смеси газа.....	17
4.5	Поле силы тяжести .....	19
4.5.1	Одномерный случай .....	19
4.5.2	Двумерный случай .....	19
4.5.3	Начальное распределение двумерного случая .....	19
5	Результаты расчетов .....	20
5.1	Одномерный случай .....	20
5.2	Двумерный случай.....	27
6	Заключение .....	33
7	Библиографический список .....	34
8	Приложение .....	36
8.1	Всплытие пузырька водорода (одномерный случай) .....	36
8.2	Всплытие пузырька водорода (двумерный случай).....	41
8.3	Визуализация (одномерный случай) .....	53
8.4	Визуализация (двумерный случай).....	55
8.5	Расчет погрешности .....	57

## 1 Введение

**Актуальность работы:** В современном мире широко востребовано математическое моделирование в интересах водородной безопасности АЭС. Рост вычислительных мощностей и их доступность в наше время, создало благоприятные условия для применения математического моделирования во многих областях исследований. Развитие численного моделирования позволяет прогнозировать результаты сложных процессов, изучение которых другими способами неоправданно затратно, затруднено или попросту невыполнимо. В этой работе ограничимся математическим моделированием в рамках механики сплошных сред. В современном мире широко востребовано моделирование работы водородной безопасности АЭС. Образование водорода в реакторах на тепловых нейтронах с водным теплоносителем в режиме нормальной эксплуатации обусловлено разложением воды или пара под действием облучения в активной зоне реактора. При запроектной аварии с осушением активной зоны возникают условия для выделения водорода в термохимических реакциях пара с цирконием, топливом, конструкционными материалами и топлива с бетоном. Повышенная концентрация водорода внутри защитной оболочки АЭС в аварийных условиях может привести к взрыву с разрушением защитной оболочки и выходом радиоактивных продуктов деления в окружающую среду. Поэтому алгоритм для односкоростной многокомпонентной среды поможет визуализировать осушение активной зоны, позволит наблюдать миграцию газов в расчетной области.

**Цель работы:** Изучить поведение односкоростной гетерогенной среды. Рассмотреть тестовые задачи для верификации численного алгоритма.

### **Задачи работы**

1. Знакомство с численными методами решения задач газовой динамики.
2. Поиск и исследование данных для верификации расчетного кода.
3. Разработка алгоритма расчета газодинамических течений в приближении односкоростной многокомпонентной модели.

#### 4. Создание и верификация расчетного кода.

Необходимо упомянуть о допущениях, которые используются в данной работе.

## 2 Допущения проекта

### 2.1 Погрешности

Ввиду того, что численные методы необходимы для нахождения приближенного результата, то этому решению свойственно некоторое отклонение от эталонного расчета. Рассмотрим здесь источники погрешности.[1]

1)Погрешность модели. Модель — это описание рассматриваемого процесса, в котором выявлены основные и игнорируются второстепенные свойства. Хорошая модель — точное описание изучаемого явления. Очевидно, моделирование сопровождается упрощением, это вносит существенный вклад в результат описания явления. Математическая модель описывается численно, а оценка допуска погрешности осуществляется в рамках науки, которая изучает данный процесс.

2)Погрешность исходных данных. Обычно, математическая модель содержит параметры, которые зависят от исходных данных. Исходные данные обычно определяются опытным путем, неминуемо получаемые с ошибками измерений, возникает погрешность, которая влияет на конечный результат.

3)Погрешность метода. После полного описания математической модели, вычисления рассматриваемого процесса можно выполнять разными путями. Обычно сложная большая математическая задача дробится на более простые. Каждый участок более простой задачи таит в себе погрешность, которая неизбежно накапливается, тем самым отклоняет от эталонного решения.

4)Погрешность округления. Любые вычисления проводятся с ограниченным количеством цифр, в виду этого приходится пользоваться округлением промежуточных и конечного результата. Такая погрешность имеет свойство накапливается в ходе вычислений. Аналогично результаты, которые получают точными аналитическими методами, испытывают влияние погрешности округлений и в действительности оказываются приближенными.

Итоговая погрешность есть — результат слияния различных видов погрешностей и она не может быть меньше, чем наибольшая из всех включенных в нее погрешностей.

После перечисления видов погрешности стоит указать о принимаемых допущениях и приближениях. Расчеты будут производиться с точностью 16 знаков после запятой. Газ будем считать идеальным, а жидкость несжимаемой. Вещества, из которых получаем смесь, чистые, примеси в исходных веществах отсутствуют. Эти допущения дают понимание желаемого порядка точности вычислений.

Механика сплошных сред — раздел механики и физики сплошных сред, посвященный движению газообразных, жидких и деформируемых твердых тел. Подходами механики сплошных сред можно математически моделировать происходящие явления, связанные с перемещением веществ в конечном объеме. Например, воздух в комнате, вода в трубопроводе и т.д. Отдельными значимыми разделами в механике сплошных сред являются: теория упругости, газовая динамика, гидромеханика и многие другие.

## **2.2 Сплошная среда**

Вещество, которое заполняет рассматриваемый объем непрерывно, то есть в любом бесконечно малом объеме содержится масса, называют — сплошной средой.[2] В окружающем нас мире все среды имеют дискретное строение, состоят из частиц, которые находятся обычно на большом (по сравнению с размерами частиц) расстоянии друг от друга. Расстояния между частицами часто значительно меньше размеров описываемых тел. Если исследуется явление, масштаб которого много больше дистанции между частицами и размера частиц, то можно говорить, что масса распределена непрерывно по всей области, занятой средой, или, по-другому, использовать модель сплошной среды.

При движении среды пространственные координаты каждой точки являются функциями времени и лагранжевых координат.

### 2.3 Подходы к описанию движения

Описывать движение сплошной среды возможны двумя подходами. Первый называется лагранжевым, второй – эйлеровым. [3]

Лагранжев метод исследования движения частиц относится к отсчётному типу. В начальный момент времени  $t_0$  каждая из частиц обозначается путём присвоения ей значения координат в данный момент времени.

В трёхмерной системе координат введём обозначения

$$x_0 = a, y_0 = b, z_0 = c. \quad (1)$$

В дальнейшем наблюдение происходит за каждой частицей отдельно. При этом методе исследования положение частицы в любой момент времени  $t > t_0$  можно описать параметрами  $a, b, c$  и  $t$ , которые называются переменными Лагранжа. Можно записать, что вектор положения частицы имеет вид

$$\vec{r} = \vec{r}(a, b, c, t). \quad (2)$$

Скорость частицы можно получить как первую производную радиус-вектора

$$\vec{v}(a, b, c, t) = \frac{d\vec{r}(a, b, c, t)}{dt} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial t}. \quad (3)$$

Ускорение выражается через производную скорости

$$a(a, b, c, t) = \frac{d\vec{v}(a, b, c, t)}{dt} = \frac{d^2\vec{r}(a, b, c, t)}{dt^2} = \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial t^2}. \quad (4)$$

При дифференцировании в последних двух формулах параметры  $a, b, c$  являются постоянными,  $\vec{r}$  и  $\vec{v}$  являются только функционалами времени и в этом случае энергии дифференцирования  $\frac{d}{dt}$  и  $\frac{\partial}{\partial t}$  тождественны.

Эйлеров метод описания движения относится к пространственному типу. В этом способе описания наблюдаем, что происходит в точках пространства, через которое переносится среда. Интерес касается только того, что происходит в данной области, но не сами частицы и их дальнейшее поведение. В различные моменты времени  $t$  в каждой точке пространства с координатами  $x, y, z$  изучаются параметры движения. Следовательно, скорость в различных точках

пространства должна быть функцией четырёх переменных  $x, y, z, t$ , называемых переменными Эйлера,

$$\bar{v} = \bar{v}(x, y, z, t), \quad (5)$$

тогда дифференциал

$$d\bar{v} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} dt + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} dx + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} dy + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} dz. \quad (6)$$

В движущейся среде приращения  $dx, dy, dz$  не являются независимыми, а соответственно равны

$$dx = V_x dt, dy = V_y dt, dz = V_z dt, \quad (7)$$

где  $V_x, V_y, V_z$  – скорость по  $x, y, z$  соответственно.

Исходя из этого справедливо следующее равенство

$$\frac{d\bar{v}}{dt} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + V_x \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + V_y \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + V_z \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + (\bar{v}\nabla)\bar{v}, \quad (8)$$

где

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial}{\partial y} \bar{j} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{k}. \quad (9)$$

Это означает, что полное ускорение  $\frac{d\bar{v}}{dt}$  индивидуальной частицы, находящейся в момент времени  $t$  в точке с координатами  $x, y, z$ , состоит из двух частей: локального ускорения  $\frac{\partial \bar{v}}{\partial t}$ , обусловленного изменением скорости во времени в данной точке, и конвективного ускорения  $(\bar{v}\nabla)\bar{v}$ , обусловленного неоднородностью поля скоростей в окрестности данной точки и связанного с этим обстоятельством конвективного переноса.

Такая производная  $\frac{d\bar{v}}{dt}$  носит название индивидуальной производной или по-другому – субстанциональной.

После рассмотрения способов наблюдения за перемещением моделируемых систем, необходимо упомянуть о видах систем.

## 2.4 Виды систем

По числу фаз системы делят на гомогенные и гетерогенные. [5] Чистых веществ в природе нет, примеси существуют всегда, иногда в неизмеримо малых

количествах. Ввиду допущений, будем считать, что вещества без примесей. Обычно встречаются многокомпонентные среды. Сплошная среда является многокомпонентной если в рассматриваемом объеме смешаны различные вещества.

Гомогенная система – система, которая состоит из одной фазы (компоненты смешаны на молекулярном уровне). Гетерогенная система – система, которая состоит из двух или более фаз (один компонент присутствует в виде микрочастиц).

Фазы делят на сплошные и разделенные на большое количество отдельных частиц. Сплошной фазой считают ту фазу, из любой точки которой можно попасть в любую другую точку этой же фазы, не пересекая никаких межфазных границ. Сплошной фазой может быть образована только гомогенная система. Гетерогенная система может содержать в себе, как сплошные, так и дисперсные фазы.

Ввиду тематики работы нас интересуют многокомпонентные односкоростные течения. Рассмотрим наиболее популярные работы в этой области.

### **3 Обзор литературы**

В работе [6] рассматривается свободное всплытие пузырька воздуха. Одной из задач работы является исследование движения пузырьков воздуха в жидкости в поле силы тяжести. Перемещение пузырька выражено силами плавучести и сопротивления, взаимодействие между ними выражается ввиду учета поверхностного натяжения, вязкости, инерции окружающей среды и плавучести. В этой работе предполагается, что среда, в которой перемещается пузырек и газ, который он содержит, несжимаемы. Моделирование подъема рассматриваемого объекта описывается системой уравнений Навье – Стокса. Для сохранения границы между фазами, используют специальные методы расчета потоков и переноса концентраций. В приведенных результатах работы видно, что за пузырьком получают следы, которые представляют собой дорожку, состоящую из сорвавшихся по одному с разных сторон рассматриваемого



объекта вихрей. Такое поведение поля скорости выражает неустойчивое поведение пузырька, его колебательную траекторию. В работе замечено, что в зависимости от начального возмущения направление колебаний может отличаться. Полагают, что это связано с малыми трансформациями формы объекта и наклоном его относительно вертикальной оси.

В работе [7] моделируется всплытие пузырей метана и аргона в открытой воде. В моделируемом процессе присутствует диффузия газа в воде. Приведены графики изменения радиуса пузырька и изменение скорости от высоты всплытия. Приведена общая модель, описывающая миграцию газового пузырька, когда термобарические условия не способствуют условиям гидратообразования, но сопровождается поглощением газа окружающей средой. Рассматривается критическое значение глубины, после которого пузырек перестает ускоряться. Сопоставительный анализ численных результатов и данных, полученных опытным путем, позволили дать ориентировочное значение для коэффициента диффузии аргона в воде.

Работа [8] прогнозирует существенный рост доли водородной энергетики на мировом экономическом рынке, ввиду того, что водород является весьма эффективным энергоносителем, который имеет ряд достоинств в сравнении уже с реализованными источниками добычи энергии: считается более экологически безопасным, проще добывается и транспортируется. Автор утверждает, что существует потребность в разработке новых способов повышения водородной безопасности как на промышленных объектах, так и на АЭС с водо-водяными реакторами, что приводит к необходимости моделирования гомо- и гетерогенных сред. Модель позволит анализировать возникающие течения с существенными градиентами характеристик смеси. Важную роль играет высокая диффузионная способность водорода, высокая плавучесть, обусловленная его малой плотностью, широкие концентрационные пределы воспламенения и низкое значение энергии воспламенения и детонирования. Модель строится на основе метода Куропатенко для неортогональных эйлеровых сеток. Метод позволяет проводить расчеты в одно-, двух- и трёхмерных постановках, в

расчетах могут использоваться сетки, состоящие из произвольных выпуклых многогранников. В работе реализована теплопроводность, диффузия для односкоростной двухфазной сплошной среды.

Модификация метода крупных частиц в приложении к исследованиям течений газозвесей [9]. Приведенная модификация метода крупных частиц позволяет успешно проводить расчеты без введения искусственной вязкости. Показано, что предложенная модификация эффективна при больших числах Куранта, что благоприятно отражается в быстродействии выполнения расчетов. Тестирование разработанного метода проводилось на решении задач о распространении ударных волн в «замороженной» газозвеси и в облаке газозвесей. Были предложены уравнения для эйлерова этапа, которые являются более эффективными в сравнении с методом крупных частиц и модифицированным методом крупных частиц при отсутствии искусственной вязкости и больших числах Куранта.

В статье [10] проанализированы зарубежные и отечественные работы, направленные на повышение водородной безопасности водоохлаждаемых реакторов. Проведены испытания головных образцов пассивных каталитических рекомбинаторов водорода (ПКРВ). Автор утверждает, что каталитическая реакция окисления водорода является процессом с выделением теплоты, то есть экзотермическая реакция. Протекание гетерогенной химической реакции с выделением теплоты на поверхности раздела «газ/катализатор» приводит к нагреву самих несущих компонентов, газообразных реагентов и продуктов реакции. Нагретая область реагентов и продуктов реакции стремится вверх и приводит к образованию конвекционного перемещения газа вдоль каталитической поверхности (появлению «тяги»). Для моделирования запроектной тяжелой аварии в данной работе используют CFD – коды, в основе которых лежит решение уравнений Навье-Стокса или Рейнольдса численными методами. Для получения таких данных необходимо проведение дополнительных экспериментов в европейских и международных проектах:

SARNET/SARNET2, THAI/THAI-2/THAI-3/THAI-4, MITHYGENE,  
REKO/REKO-2/REKO-3/REKO-4.

После знакомства с различными работами в этой области, принято решение использовать односкоростное приближение для многокомпонентной модели, которая будет реализована на базе численного метода крупных частиц. С добавлением в нее модификаций: повышения устойчивости счета, учета поля силы тяжести и параметров смеси.

## 4 Метод расчета

### 4.1 Суть метода

Метод крупных частиц [11] сочетает в себе преимущества лагранжева и эйлера подходов. Расчетная область делится стационарной фиксированной в пространстве (эйлеровой) сеткой. Также сплошная среда описывается дискретной моделью – рассматривается совокупность частиц фиксированной массы (лагранжева сетка частиц), которые перемещаются через эйлерову сетку ячеек. Частицы используют для определения параметров жидкости (массы, энергии, скорости), эйлерова сетка задействована для описания параметров поля (давления, плотности).

Для описания метода используют уравнения Эйлера в дивергентном виде (уравнения неразрывности, импульса и энергии).

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho W) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u W) + \frac{\partial p}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v W) + \frac{\partial p}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E W) + \operatorname{div}(p W) &= 0.\end{aligned}$$

Идея метода [11] состоит в расщеплении по физическим процессам исходной нестационарной системы уравнений Эйлера, записанной в форме законов сохранения. Среда моделируется системой из жидких частиц, совпадающих в текущий момент времени с узлом эйлеровой сетки. Результат

расчета есть изменение характеристик системы. Процесс моделирования достигается путем многих повторений шагов по времени, который разделяется на три этапа.

Эйлеров этап. Не берет во внимание эффекты связанные с движением элементарной ячейки. Подразумевается, что поток массы на границах не рассматривается. Учитывается эффект ускорения газа только под действием давления. На этом шаге для «крупной частицы» определяются промежуточные значения параметров потока: скорость и энергия.

Лагранжев этап. При перемещении жидкости рассчитываются потоки массы через границы эйлеровых ячеек.

Заключительный этап. На этом шаге рассчитываются величины на новом временном слое. Заключительные значения параметров потока: скорость, энергия, плотность. Определяются на основе законов сохранения массы, энергии и импульса.

## 4.2 Разностная схема

### 4.2.1 Одномерный случай

На первом этапе рассчитывается изменение импульса  $\tilde{v}_i^n$  и энергии  $\tilde{E}_i^n$  лагранжева единичного объема жидкости за изменение времени  $\Delta t$

$$\tilde{v}_i^n = v_i^n - \frac{p_{i+1/2}^n - p_{i-1/2}^n}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_i^n}, \quad (10)$$

$$\tilde{E}_i^n = E_i^n - \frac{p_{i+1/2}^n v_{i+1/2}^n - p_{i-1/2}^n v_{i-1/2}^n}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_i^n}. \quad (11)$$

Величины с дробными индексами, относящиеся к границам ячеек, находятся по формуле 12:

$$v_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{v_i^n + v_{i+1}^n}{2}, \quad p_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{p_i^n + p_{i+1}^n}{2}. \quad (12)$$

Лагранжев этап. На этом шаге вычисляются эффекты переноса, учитывающие обмен между ячейками при их переносе на прежнюю эйлерову сетку. Находим за время  $\Delta t$  потоки массы  $\Delta M$  через границы эйлеровых ячеек.

$$\rho_i^n \Delta x = \rho_i^n \Delta x - (\Delta M_{i+1/2} - \Delta M_{i-1/2}), \quad (13)$$

где поток массы через правую грань  $\Delta M_{i+1/2}$ , плотность  $\rho_i^n$ , шаг в рассматриваемой области  $\Delta x$

$$\Delta M_{i+1/2} = \begin{cases} \rho_i^n \frac{\tilde{v}_i^n + \tilde{v}_{i+1}^n}{2} \Delta t, & \text{если } \tilde{v}_i^n + \tilde{v}_{i+1}^n > 0; \\ \rho_{i+1}^n \frac{\tilde{v}_i^n + \tilde{v}_{i+1}^n}{2} \Delta t, & \text{если } \tilde{v}_i^n + \tilde{v}_{i+1}^n < 0, \end{cases} \quad (14)$$

аналогично для потока массы через левую грань  $\Delta M_{i-1/2}$ .

Заключительный этап. Здесь происходит перераспределение массы, импульса и энергии по пространству и определяются окончательные поля эйлеровых параметров потока на фиксированной сетке в момент времени  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ .

Потоки масс через границы на данном этапе несут с собой промежуточные значения скорости и удельной энергии.

Для определения направления потока, введем функции  $D_{i-1/2}$  и  $D_{i+1/2}$ .

Определим значение для левой грани  $D_{i-1/2}$ :

$$D_{i-1/2} = \begin{cases} 1, & \text{если жидкость втекает в } i \text{ - ую ячейку } \tilde{v}_{i-1}^n + \tilde{v}_i^n > 0; \\ 0, & \text{если жидкость вытекает из } i \text{ - ой ячейки } \tilde{v}_{i-1}^n + \tilde{v}_i^n < 0. \end{cases} \quad (15)$$

аналогично для правой грани  $D_{i+1/2}$

$$D_{i+1/2} = \begin{cases} 1, & \text{если жидкость втекает в } i \text{ - ую ячейку } \tilde{v}_{i-1}^n + \tilde{v}_i^n < 0; \\ 0, & \text{если жидкость вытекает из } i \text{ - ой ячейки } \tilde{v}_{i-1}^n + \tilde{v}_i^n > 0. \end{cases} \quad (16)$$

Исходя из этого, окончательные значения параметров потока  $\rho, v, E$  на новом временном слое  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  вычисляются по формулам:

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \frac{\Delta M_{i-1/2} + \Delta M_{i+1/2}}{\Delta x}, \quad (17)$$

$$v_i^{n+1} = \frac{D_{i-1/2} \tilde{v}_{i-1}^n \Delta M_{i-1/2} + D_{i+1/2} \tilde{v}_{i+1}^n \Delta M_{i+1/2}}{\rho_i^{n+1} \Delta x} + \frac{\tilde{v}_i^n \{ \rho_i^n \Delta x + [1 - D_{i-1/2}] \Delta M_{i-1/2} - [1 - D_{i+1/2}] \Delta M_{i+1/2} \}}{\rho_i^{n+1} \Delta x}, \quad (18)$$

$$E_i^{n+1} = \frac{D_{i-1/2} \tilde{E}_{i-1}^n \Delta M_{i-1/2} + D_{i+1/2} \tilde{E}_{i+1}^n \Delta M_{i+1/2}}{\rho_i^{n+1} \Delta x} +$$

$$\frac{\tilde{E}_i^n \{ \rho_i^n \Delta x + [1 - D_{i-1/2}] \Delta M_{i-1/2} - [1 - D_{i+1/2}] \Delta M_{i+1/2} \}}{\rho_i^{n+1} \Delta x}, \quad (19)$$

Давление  $p_i^{n+1}$  на новом временном слое рассчитывается из уравнения состояния:

$$p_i^{n+1} = (\gamma - 1) \rho_i^{n+1} \left( E_i^{n+1} - \frac{1}{2} v_i^{n+1} \right). \quad (20)$$

В разделе «результаты расчетов» приведены графики всех характеристик в расчетной области (рис.5.1.1), также изображен аналитический расчет (рис. 5.1.2). Имеется график относительной погрешности (рис. 5.1.3).

#### 4.2.2 Двумерный случай

Этапы решения [11] в двумерном случае совпадают с одномерным, но в разностные уравнения добавляется расчет величин по второй координатной оси. Рассмотрим конечно-разностные уравнения двумерной задачи.

Эйлеров этап.

$$\tilde{v}_{ijx}^n = v_{ijx}^n - \frac{p_{ij+1/2x}^n - p_{ij-1/2x}^n}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_i^n}, \quad (21)$$

$$\tilde{v}_{ijy}^n = v_{ijy}^n - \frac{p_{i+1/2jy}^n - p_{i-1/2jy}^n}{\Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_i^n}, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{ij}^n = E_{ij}^n - \frac{p_{ij+1/2x}^n v_{ij+1/2x}^n - p_{ij-1/2x}^n v_{ij-1/2x}^n}{\Delta x \Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_i^n} + \\ \frac{p_{i+1/2jy}^n v_{i+1/2jy}^n - p_{i-1/2jy}^n v_{i-1/2jy}^n}{\Delta x \Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_i^n}. \end{aligned} \quad (23)$$

Величины с дробными индексами, относящиеся к границам ячеек, находятся, так:

$$v_{ij+\frac{1}{2}x}^n = \frac{v_{ij}^n + v_{ij+1}^n}{2}, \quad p_{ij+\frac{1}{2}x}^n = \frac{p_{ij}^n + p_{ij+1}^n}{2}, \quad (24)$$

$$v_{i+\frac{1}{2}jy}^n = \frac{v_{ij}^n + v_{i+1j}^n}{2}, \quad p_{i+\frac{1}{2}jy}^n = \frac{p_{ij}^n + p_{i+1j}^n}{2}. \quad (25)$$

Лагранжев этап.

$$\rho_i^n \Delta x = \rho_i^n \Delta x + (\Delta M_{ij+1/2} - \Delta M_{ij-1/2}) + (\Delta M_{i+1/2j} - \Delta M_{i-1/2j}), \quad (26)$$

где поток массы по компоненте  $x$   $\Delta M_{ij+\frac{1}{2}}$

$$\Delta M_{ij+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \rho_{ij}^n \frac{\tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n}{2} \Delta t \Delta y, \text{ если } \tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n > 0; \\ \rho_{ij+1}^n \frac{\tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n}{2} \Delta t \Delta y, \text{ если } \tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n < 0, \end{cases} \quad (27)$$

где поток массы по компоненте  $y$

$$\Delta M_{i+1/2j} = \begin{cases} \rho_{ij}^n \frac{\tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{i+1j}^n}{2} \Delta t \Delta x, \text{ если } \tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{i+1j}^n > 0; \\ \rho_{i+1j}^n \frac{\tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{i+1j}^n}{2} \Delta t \Delta x, \text{ если } \tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{i+1j}^n < 0, \end{cases} \quad (28)$$

Аналогично для нижней  $\Delta M_{i-1/2j}$  и левой  $\Delta M_{ij-1/2}$  граней.

Заключительный этап.

Для определения направления потока, введем функции  $D_{ij-1/2}$ ,  $D_{ij+1/2}$ ,  $D_{i-1/2j}$  и  $D_{i+1/2j}$ .

Определим значение для правой грани  $D_{ij+1/2}$

$$D_{ij+1/2} = \begin{cases} 1, \text{ если жидкость втекает в } j - \text{ую ячейку } \tilde{v}_{ij-1}^n + \tilde{v}_{ij}^n < 0; \\ 0, \text{ если жидкость вытекает из } j - \text{ой ячейки } \tilde{v}_{ij-1}^n + \tilde{v}_{ij}^n > 0. \end{cases} \quad (29)$$

Для верхней грани  $D_{i+1/2j}$

$$D_{i+1/2j} = \begin{cases} 1, \text{ если жидкость втекает в } i - \text{ую ячейку } \tilde{v}_{i-1j}^n + \tilde{v}_{ij}^n < 0; \\ 0, \text{ если жидкость вытекает из } i - \text{ой ячейки } \tilde{v}_{i-1j}^n + \tilde{v}_{ij}^n > 0. \end{cases} \quad (30)$$

Аналогично для нижней  $D_{i-1/2j}$  и левой  $D_{ij-1/2}$  граней.

Исходя из этого, окончательные значения параметров потока  $\rho, v, E$  на новом временном слое  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  вычисляются по формулам:

$$\rho_{ij}^{n+1} = \rho_{ij}^n + \frac{(\Delta M_{ij+1/2} - \Delta M_{ij-1/2}) + (\Delta M_{i+1/2j} - \Delta M_{i-1/2j})}{\Delta x \Delta y}, \quad (31)$$

По  $x$  составляющей

$$v_{ijx}^{n+1} = \frac{D_{ij-1/2} \tilde{v}_{ij-1}^n \Delta M_{ij-1/2} - D_{ij+1/2} \tilde{v}_{ij+1}^n \Delta M_{ij+1/2}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y} + \frac{\tilde{v}_{ij}^n \left\{ \rho_{ij}^n \Delta x \Delta y + \left[ 1 - D_{ij-\frac{1}{2}} \right] \Delta M_{ij-\frac{1}{2}} - \left[ 1 - D_{ij+\frac{1}{2}} \right] \Delta M_{ij+\frac{1}{2}} \right\}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y}. \quad (32)$$

По  $y$  составляющей

$$v_{ij_y}^{n+1} = \frac{D_{i-1/2j} \tilde{v}_{i-1j}^n \Delta M_{i-1/2j} - D_{i+1/2j} \tilde{v}_{i+1j}^n \Delta M_{i+1/2j}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y} + \frac{\tilde{v}_{ij}^n \left\{ \rho_{ij}^n \Delta y + \left[ 1 - D_{i-\frac{1}{2j}} \right] \Delta M_{i-\frac{1}{2j}} - \left[ 1 - D_{i+\frac{1}{2j}} \right] \Delta M_{i+\frac{1}{2j}} \right\}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y}. \quad (33)$$

Рассчитаем энергию

$$E_{ij}^{n+1} = \frac{D_{ij-1/2} \tilde{E}_{ij-1}^n \Delta M_{ij-1/2} - D_{ij+1/2} \tilde{E}_{ij+1}^n \Delta M_{ij+1/2}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y} + \frac{D_{i-1/2j} \tilde{E}_{i-1j}^n \Delta M_{i-1/2j} - D_{i+1/2j} \tilde{E}_{i+1j}^n \Delta M_{i+1/2j}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y} + \tilde{E}_i^n \left( \frac{\rho_i^n \Delta x + \left[ 1 - D_{ij-1/2} \right] \Delta M_{ij-1/2} - \left[ 1 - D_{ij+1/2} \right] \Delta M_{ij+1/2}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y} \right) + \tilde{E}_i^n \left( \frac{\rho_i^n \Delta y + \left[ 1 - D_{i-1/2j} \right] \Delta M_{i-1/2j} - \left[ 1 - D_{i+1/2j} \right] \Delta M_{i+1/2j}}{\rho_{ij}^{n+1} \Delta x \Delta y} \right). \quad (34)$$

Давление на новом временном слое рассчитывается из уравнения состояния

$$p_{ij}^{n+1} = (\gamma - 1) \rho_{ij}^{n+1} \left( E_{ij}^{n+1} - \frac{1}{2} \left( \sqrt{(v_{ij_x}^{n+1})^2 + (v_{ij_y}^{n+1})^2} \right)^2 \right). \quad (35)$$

В разделе «результаты расчетов» приведены графики всех параметров в расчетной области.

### 4.3 Модификация метода

#### 4.3.1 Одномерный случай

В работе [14] для увеличения устойчивости базового метода предлагается изменение расчета предварительного давления.

$$\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{p_{i+1}^n + p_i^n}{2} \left( 1 - (\gamma - 1) (v_{i+1}^n - v_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right). \quad (36)$$

Полученное предварительное давление предлагается использовать в расчете предварительной скорости в Эйлеровом этапе.

$$\tilde{v}_i^{n+1} = v_i^n - \frac{1}{\rho_i^n} \left( \tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (37)$$



Следующим шагом берем среднее арифметическое значений скоростей.

$$\tilde{v}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{(\tilde{v}_i^{n+1} + \tilde{v}_{i+1}^{n+1})}{2}. \quad (38)$$

Заключительным этапом необходимо рассчитать полную энергию.

$$\tilde{E}_i^{n+1} = E_i^n - \frac{1}{\rho_i^n} \left( \tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \tilde{v}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \tilde{v}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (39)$$

### 4.3.2 Двумерный случай

Суть нововведений не меняется, но для двумерного счета добавляется вторая координата, разностные уравнения имеют следующий вид [11]

$$\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}j_y}^{n+1} = \frac{p_{i+1j}^n + p_{ij}^n}{2} \left( 1 - (\gamma - 1) (v_{i+1j_y}^n - v_{ij_y}^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right), \quad (40)$$

$$\tilde{p}_{ij+\frac{1}{2}x}^{n+1} = \frac{p_{ij+1}^n + p_{ij}^n}{2} \left( 1 - (\gamma - 1) (v_{ij+1x}^n - v_{ijx}^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right), \quad (41)$$

$$\tilde{v}_{ij_y}^{n+1} = v_{ij_y}^n - \frac{1}{\rho_{ij}^n} \left( \tilde{p}_{i+\frac{1}{2}j}^{n+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}j}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (42)$$

$$\tilde{v}_{ij_x}^{n+1} = v_{ij_x}^n - \frac{1}{\rho_{ij}^n} \left( \tilde{p}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{p}_{ij-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (43)$$

Аналогично считаем среднее арифметическое значений скоростей.

$$\tilde{v}_{i+\frac{1}{2}j_y}^{n+1} = \frac{(\tilde{v}_{ij_y}^{n+1} + \tilde{v}_{i+1j_y}^{n+1})}{2}, \quad (44)$$

$$\tilde{v}_{ij+\frac{1}{2}x}^{n+1} = \frac{(\tilde{v}_{ij_x}^{n+1} + \tilde{v}_{ij+1x}^{n+1})}{2}. \quad (45)$$

Заключительным этапом необходимо рассчитать полную энергию.

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{ij}^{n+1} = E_{ij}^n - \frac{1}{\rho_{ij}^n} \left( \tilde{p}_{i+\frac{1}{2}j}^{n+1} \tilde{v}_{i+\frac{1}{2}j_y}^{n+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}j}^{n+1} \tilde{v}_{i-\frac{1}{2}j_y}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x} + \\ \frac{1}{\rho_{ij}^n} \left( \tilde{p}_{ij+\frac{1}{2}}^{n+1} \tilde{v}_{ij+\frac{1}{2}x}^{n+1} - \tilde{p}_{ij-\frac{1}{2}}^{n+1} \tilde{v}_{ij-\frac{1}{2}x}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (46)$$

## 4.4 Показатель адиабаты смеси газа

Показатель адиабаты (коэффициент Пуассона) — отношение теплоёмкости при постоянном давлении  $C_p$  к теплоёмкости при постоянном

объёме  $C_v$ . Иногда эту величину называют фактором изэнтропийного расширения. Обозначается греческой буквой  $\gamma$ .

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v}. \quad (47)$$

индексы у теплоемкостей индексы указывают на условие неизменности давления или постоянства объёма.

В поставленной задаче моделируется взаимодействие нескольких газов ( $m$  штук), ввиду этого каждый газ имеет свой показатель адиабаты. Показатель адиабаты смеси формируется на основе массовых долей газа в ячейке.

$$\gamma = \gamma_1 Y_1 + \gamma_2 Y_2 + \dots + \gamma_m Y_m. \quad (48)$$

Миграцию массовой доли газа в ячейке  $Y_{i,j}^n$  происходит по формуле ( $k$  – газ,  $i, j$  – ячейка) (формула 49.1 для двумерного случая)

$$Y_{k,i}^{n+1} = Y_{k,i}^n + (\Delta Y_{k,i-1/2}^n - \Delta Y_{k,i+1/2}^n) / \Delta x. \quad (49)$$

$$Y_{k,i,j}^{n+1} = Y_{k,i,j}^n + \frac{\left( \Delta Y_{k,i,j-\frac{1}{2}}^n - \Delta Y_{k,i,j+\frac{1}{2}}^n + \Delta Y_{k,i-\frac{1}{2},j}^n - \Delta Y_{k,i+\frac{1}{2},j}^n \right)}{\Delta x \Delta y}. \quad (49.1)$$

Где потоки массовой доли через грань  $\Delta Y_{i,j,k+1/2}^n$  находятся по формуле

$$\Delta Y_{ij,k+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} Y_{ij}^n \frac{\tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n}{2} \Delta t, & \text{если } \tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n > 0; \\ Y_{ij+1}^n \frac{\tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n}{2} \Delta t, & \text{если } \tilde{v}_{ij}^n + \tilde{v}_{ij+1}^n < 0, \end{cases} \quad (50)$$

Аналогично для остальных сторон ячейки.

Пересчет количества газа в ячейке происходит по формуле (51)

$$Y_{i,j}^{n+1} = \frac{Y_{i,j}^{n+1}}{(\Delta Y_{0j}^{n+1} + \Delta Y_{1j}^{n+1} + \dots + \Delta Y_{mj}^{n+1})}, \quad (51)$$

Где  $m$  – количество различных газов. Существует условие, что

$$\sum_{i=0}^m Y_{ij}^{n+1} = 1. \quad (52)$$

## 4.5 Поле силы тяжести

### 4.5.1 Одномерный случай

Сила тяжести — сила, действующая на любое физическое тело, находящееся вблизи поверхности Земли. Сила тяжести сообщает всем телам, независимо от их массы, одно и то же ускорение. Сила тяжести  $\vec{F}_g$ , действующая на материальную точку массой  $m$  вычисляется по формуле:

$$\vec{F}_g = mg.$$

Где  $g$  — ускорение, сообщаемое телу силой тяжести, которое называется ускорением свободного падения.

Для численного решения задач в поле силы тяжести необходимо добавить слагаемые в уравнение импульса и энергии.

$$\tilde{v}_i^n = v_i^n - \frac{p_{i+1/2}^n - p_{i-1/2}^n}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_i^n} - g\Delta t, \quad (53)$$

$$\tilde{E}_i^n = E_i^n - \frac{p_{i+1/2}^n v_{i+1/2}^n - p_{i-1/2}^n v_{i-1/2}^n}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_i^n} - \tilde{v}_i^n g\Delta t. \quad (54)$$

### 4.5.2 Двумерный случай

Для численного решения задач в поле силы тяжести в двумерной постановке необходимо добавить слагаемые в уравнение энергии и импульса (по определенной координате).

$$\tilde{v}_{ij}^n = v_{ij}^n - \frac{p_{i+1/2jy}^n - p_{i-1/2jy}^n}{\Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_i^n} - g\Delta t, \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{ij}^n = E_{ij}^n - \frac{p_{ij+1/2x}^n v_{ij+1/2x}^n - p_{ij-1/2x}^n v_{ij-1/2x}^n}{\Delta x \Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_i^n} + \\ \frac{p_{i+1/2jy}^n v_{i+1/2jy}^n - p_{i-1/2jy}^n v_{i-1/2jy}^n}{\Delta x \Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_i^n} - \tilde{v}_{ij}^n g\Delta t. \end{aligned} \quad (56)$$

### 4.5.3 Начальное распределение двумерного случая

Для изображения начальных условий двумерной постановки в расчетной области необходимо изобразить круг, который будет содержать внутри себя параметры самого пузырька, а за пределами него — параметры окружающей среды. Изображение круга в расчетной области происходит по формуле:

$$r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}.$$

Где  $r$  – радиус пузырька (измеряется в количестве ячеек),  $x_0, y_0$  – координаты центра. Заполнение происходит по принципу сравнения расстояния от центра пузырька до текущей ячейки в массиве. Если расстояние меньше радиуса пузырька  $r$ , то заполняем параметрами пузырька, а если больше, то параметры окружающей среды.

## 5 Результаты расчетов

### 5.1 Одномерный случай

Методом крупных частиц [11] было рассчитано распространение стационарной ударной волны.

В качестве уравнения состояния (УРС) взято УРС для  $\gamma$  – газа:

$$PV = (\gamma - 1)e. \quad (57)$$

Начальные данные при  $t = 0$ :

$$0 < x < \frac{L}{3}, P = 2, U = 1, V = \frac{1}{2}, e = \frac{1}{2},$$

$$\frac{L}{3} < x < L, P = 0, U = 0, V = 1, e = 0.$$

Граничные условия при  $t > 0$ :

$$x_{\text{ЛГ}} = 0, U_{\text{ЛГ}} = 1,$$

$$x_{\text{ПГ}} = L, U_{\text{ПГ}} = 0.$$

Время окончания счета:

$$t_{\text{к}} = 0.3.$$

Геометрия сетки:

$N$  равномерно распределенных по координате точек вдоль оси  $x$ .

Условия счета

$$L = 1.2, \quad \kappa = 0.5, \quad \gamma = 3, \quad N = 1000.$$

$L$  – длина рассматриваемой области

$k$  – число Куранта

$\gamma$  – показатель адиабаты

$N$  – число ячеек

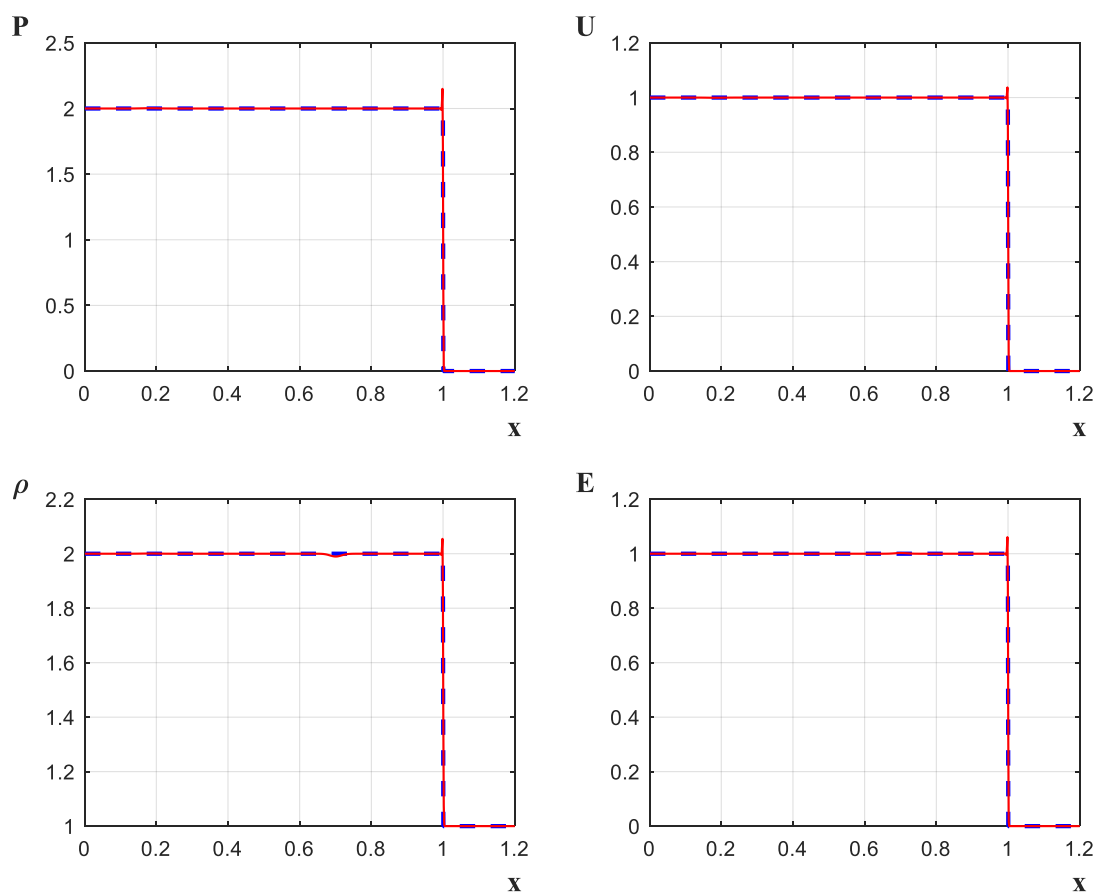


Рис. 5.1.1 Пунктирная линия — аналитическое решение, сплошная — численное.

На рисунке 5.1.1 приведены профили давления, скорости, плотности и полной энергии стационарной ударной волны в безразмерном случае. Все расчеты проводились на  $N = 1000$  ячейках и с числом Куранта  $K = 0.1$ . Из представленного рисунка 5.1.1 можно понять, что численное решение совпадает с аналитическим. На границе ударной волны можно наблюдать небольшой скачок, который является особенностью расчетного метода. Рассмотрим относительную ошибку вычисления.

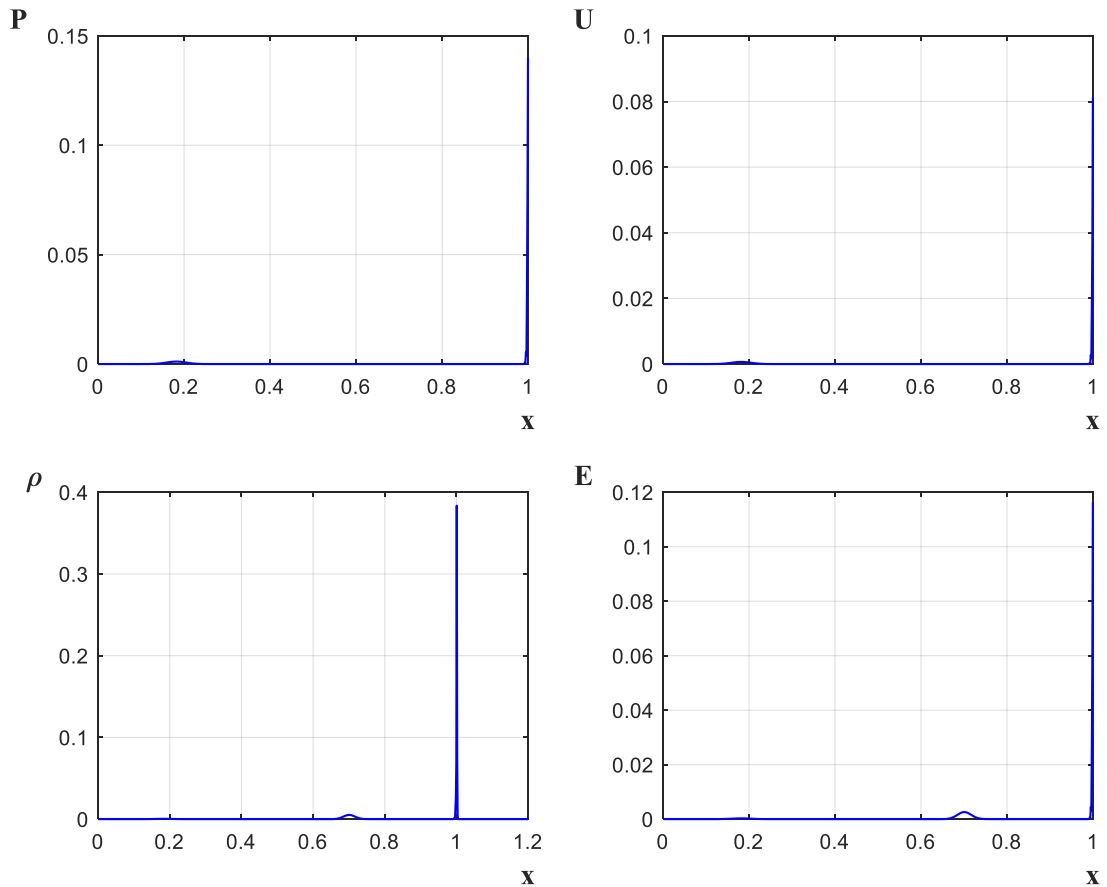


Рис. 5.1.2 Относительная погрешность вычисления.

На графике 5.1.2 изображена относительная погрешность вычисления. Наблюдаем рост погрешности на границе ударной волны это обусловлено двумя составляющими. Первое, что численно длина ударной волны составляет несколько ячеек, а аналитически претерпевает разрыв. Второе то, что численно результат имеет «клин», который является особенностью метода. Следующим этапом произведен расчет стационарной ударной волны в размерном виде с прогнозом на уменьшение «клина» на границе ударной волны.

Методом крупных частиц [11] было рассчитано распространение стационарной ударной волны (размерный случай).

В качестве уравнения состояния (УРС) взято УРС для  $\gamma$  – газа:

$$PV = (\gamma - 1)e. \quad (58)$$

Начальные данные при  $t = 0$ :

$$0 < x < \frac{L}{3}, P = 20 \text{ атм}, U = 1110.3 \frac{\text{м}}{\text{с}}, V = \frac{1}{5.63} \frac{\text{м}^3}{\text{кг}}, e = 1504337 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}},$$

$$\frac{L}{3} < x < L, P = 1 \text{ атм}, U = 0, V = \frac{1 \text{ м}^3}{1.21 \text{ кг}}, e = 206611 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}.$$

Граничные условия при  $t > 0$ :

$$x_{\text{ЛГ}} = 0, U_{\text{ЛГ}} = 1,$$

$$x_{\text{ПГ}} = L, U_{\text{ПГ}} = 0.$$

Время окончания счета:

$$t_{\text{к}} = 0.000425 \text{ с}.$$

Геометрия сетки:

$N$  равномерно распределенных по координате точек вдоль оси  $x$ .

Условия счета

$$L = 1.2, \quad \kappa = 0.5, \quad \gamma = 1.4, \quad N = 1000.$$

$L$  – длина рассматриваемой области,

$\kappa$  – число Куранта,

$\gamma$  – показатель адиабаты,

$N$  – число ячеек.

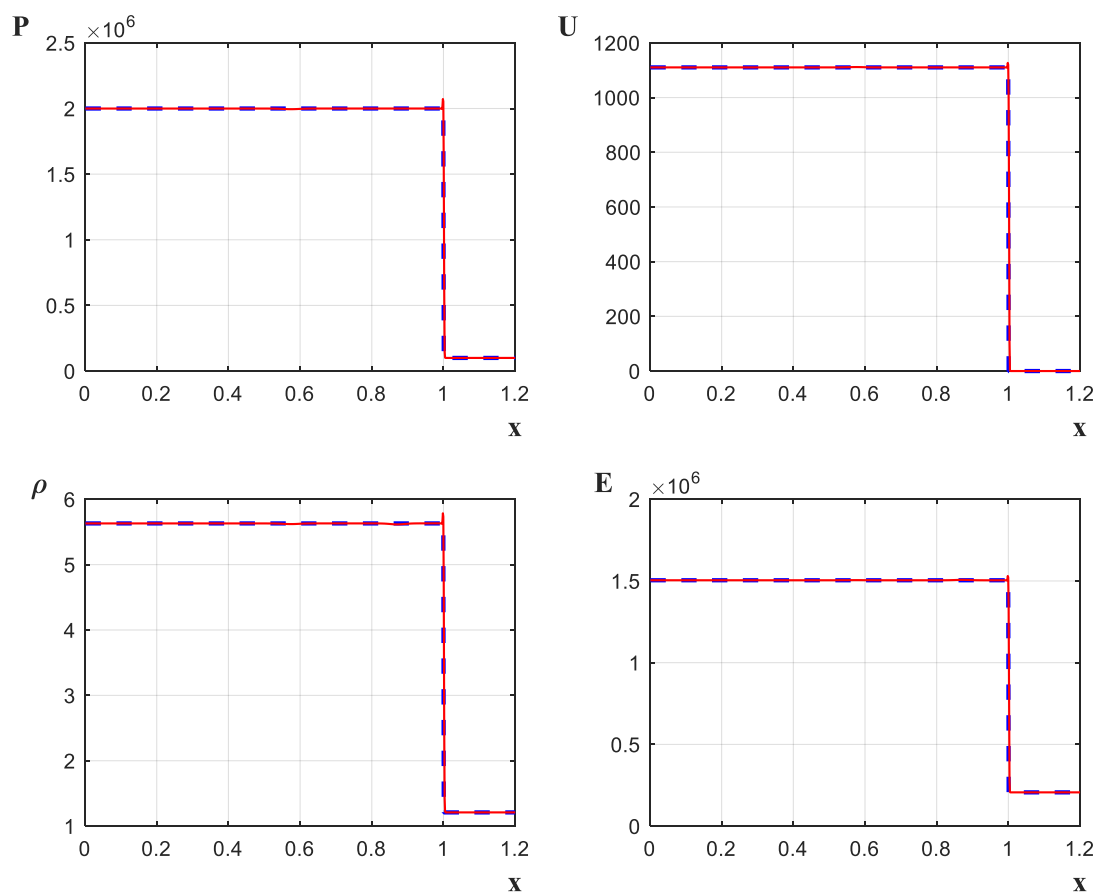


Рис. 5.1.3 Пунктирная линия — аналитическое решение, сплошная — численное.

На рисунке 5.1.3 приведены профили давления, скорости, плотности и полной энергии стационарной ударной волны в размерном случае. Все расчеты проводились на  $N = 1000$  ячейках и с числом Куранта  $= 0.1$ , как и для безразмерного случая. На рисунке 5.1.3 численное решение совпадает с аналитическим. На границе ударной волны наблюдается скачок, который меньше, чем в безразмерном случае. Таким образом, с увеличением значений параметров «клин» становится менее заметен. Рассмотрим относительную ошибку вычисления.



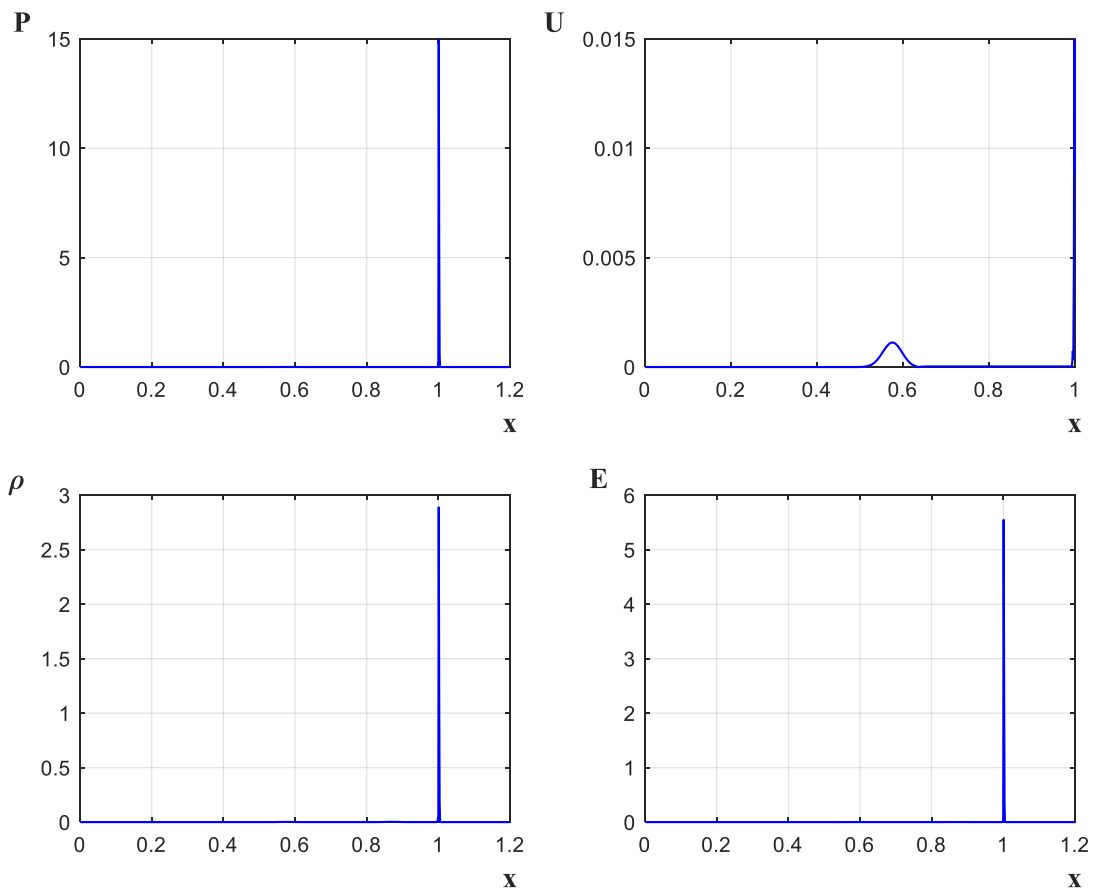


Рис. 5.1.4 Относительная погрешность вычислений.

На графике 5.1.4 изображена относительная погрешность вычисления. Как и в безразмерном случае, наблюдаем рост погрешности на границе ударной волны. Относительная ошибка вычислений больше, чем в безразмерной постановке ввиду значительного отличия параметров внутри расчетной области.

Методом крупных частиц [11] было рассчитано частичное всплытие пузырька водорода в кислороде.

$$L = 0.1 \text{ м.}$$

Начальные данные при  $t = 0$ ,  $0 < x < \frac{L}{10}$  и  $\frac{L}{2.5} > x > L$ ,

$$P = 101325 \text{ Па}, U = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}, E = 3116250.0 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}},$$

Начальные данные при  $t = 0$ ,  $\frac{L}{10} < x < \frac{L}{2.5}$ ,

$$P = 101325 \text{ Па}, U = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}, E = 194765.625 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}},$$

Плотность вычисляем из УРС

$$\rho = \frac{P}{(\gamma - 1)E'}$$

Граничные условия – жесткие стенки.

Условия счета

$$K = 0.1, \gamma_H = \frac{14542.5}{10387.5} = 1.4, \gamma_0 = \frac{908.90625}{649.21875} = 1.4, N = 1000.$$

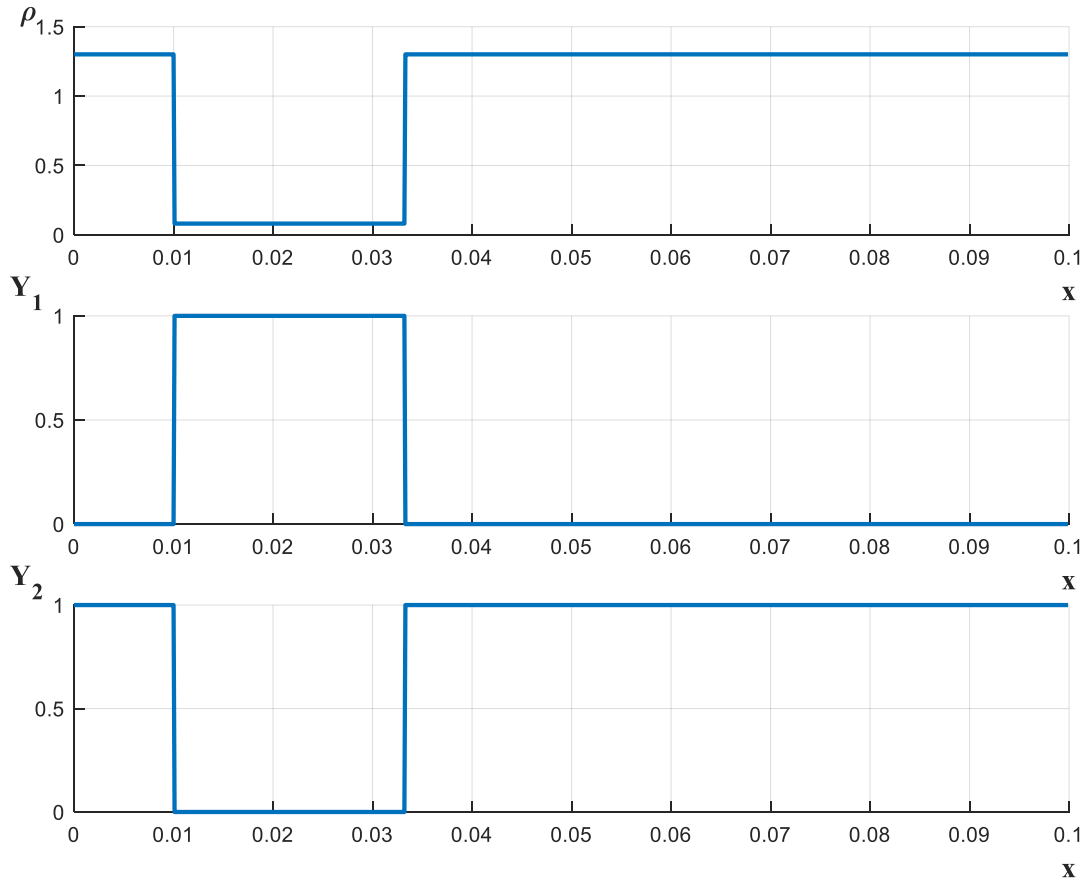


Рис 5.1.5 Начальное распределение.

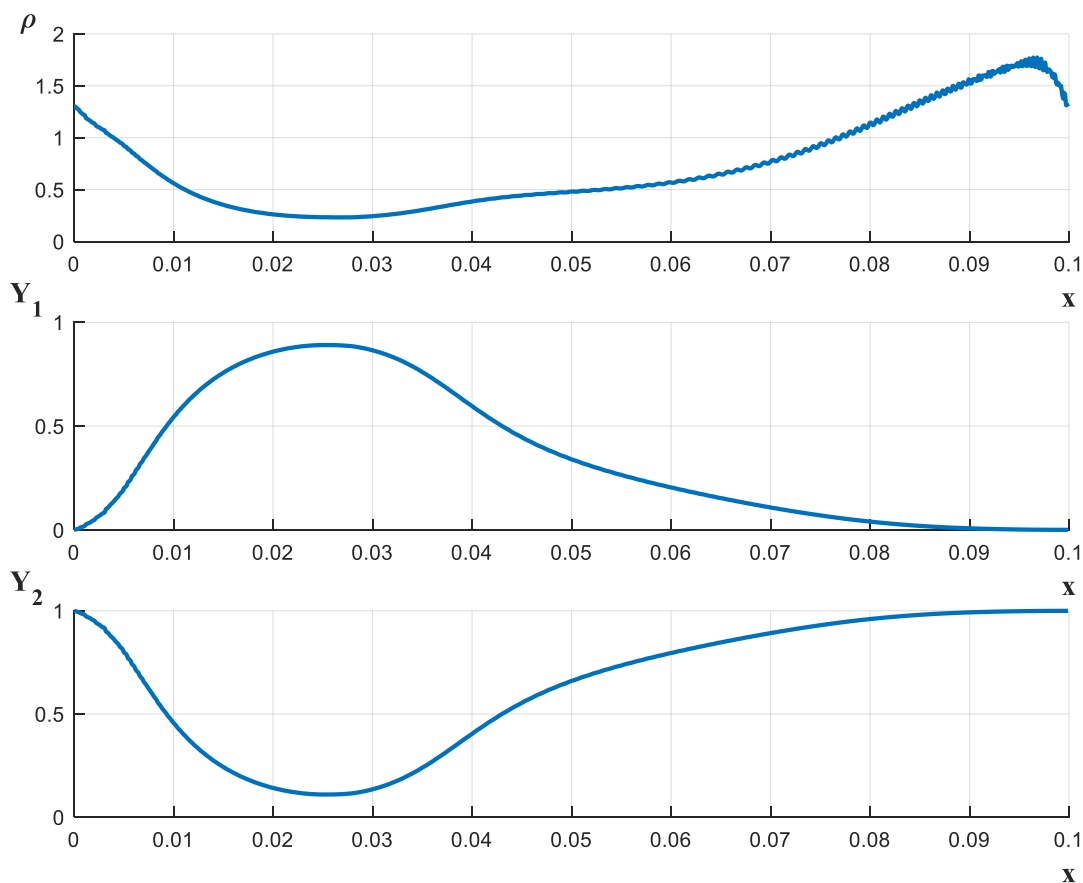


Рис. 5.1.6 Распределение параметров на момент времени  $t = 0.36$  с.

На рисунке 5.1.6 изображены графики плотности и массовых долей водорода и кислорода соответственно. Расчетная область  $N = 1000$  ячеек, число Куранта = 0.1. Теплоёмкость газов табличная. На графиках изображена миграция массовых долей, которая отображает перемещение легкого газа в более тяжелом, что не противоречит динамике легкоподвижных сред.

## 5.2 Двумерный случай

Методом крупных частиц [11] было рассчитано распространение стационарной ударной волны.

В качестве уравнения состояния (УРС) взято УРС для  $\gamma$  – газа

$$PV = (\gamma - 1)e$$

Начальные данные при  $t = 0$

$$0 < x < \frac{L}{3}, P = 2, U_x = 1, U_y = 0, V = \frac{1}{2}, e = \frac{1}{2}.$$

$$\frac{L}{3} < x < L, P = 0, U_x = 0, U_y = 0, V = 1, e = 0.$$

Граничные условия при  $t > 0$ :

$$x_{\text{ЛГ}} = 0, U_{\text{ЛГ}} = 1,$$

$$x_{\text{ПГ}} = L_x, U_{\text{ПГ}} = 0,$$

$$y_{\text{ВГ}} = 0, U_{\text{ВГ}} = 0,$$

$$y_{\text{НГ}} = L_y, U_{\text{НГ}} = 0.$$

Время окончания счета:

$$t_k = 0.3.$$

Геометрия сетки:

$N$  равномерно распределенных по массе точек вдоль оси  $x$ ,  $M$  равномерно распределенных по массе точек вдоль оси  $y$ .

Условия счета

$$L_x = 1.2, \quad L_y = 1.2, \quad \kappa = 1, \quad \gamma = 3, \quad M_y = 1000, \quad N_x = 1000.$$

$L_x$  – длина рассматриваемой области по оси  $x$ ,

$L_y$  – длина рассматриваемой области по оси  $y$ ,

$k$  – число Куранта,

$\gamma$  – показатель адиабаты,

$M$  – число ячеек по оси  $y$ ,

$N$  – число ячеек по оси  $x$ .

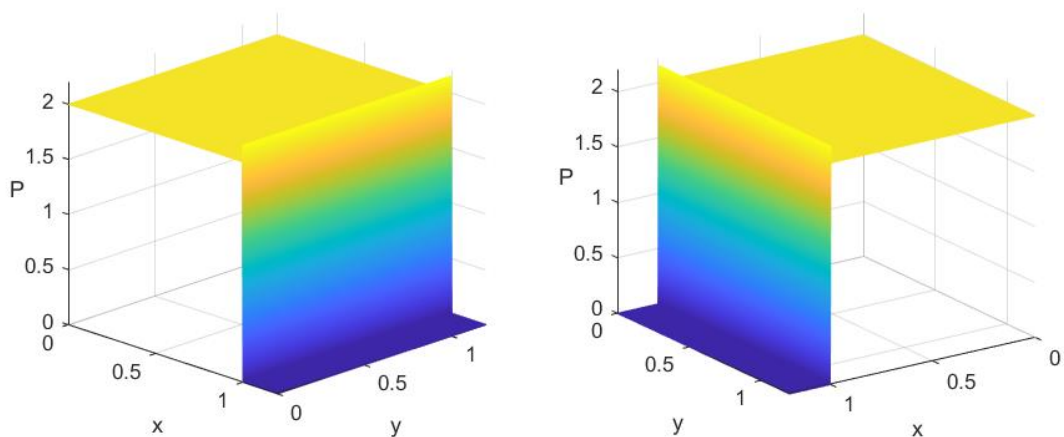


Рис. 5.2.1 Распространение давления по компоненте  $x$

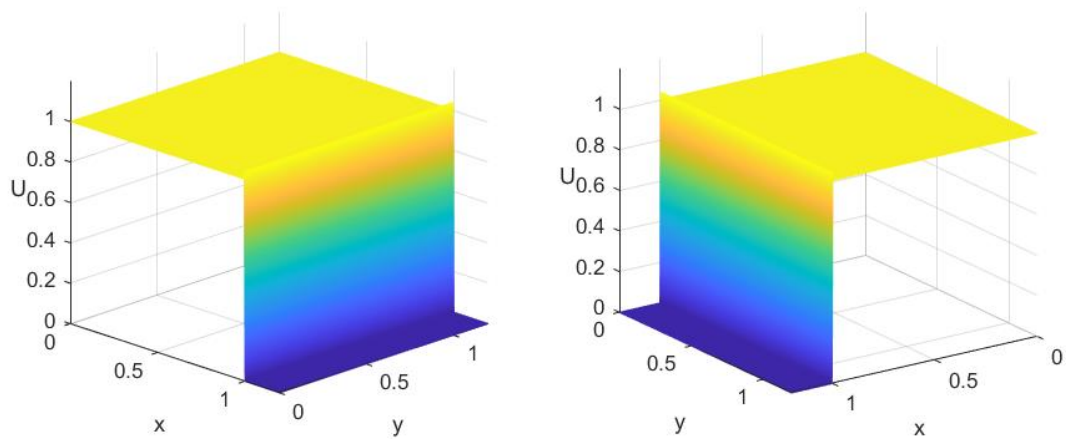


Рис. 5.2.2 Распространение скорости по компоненте x

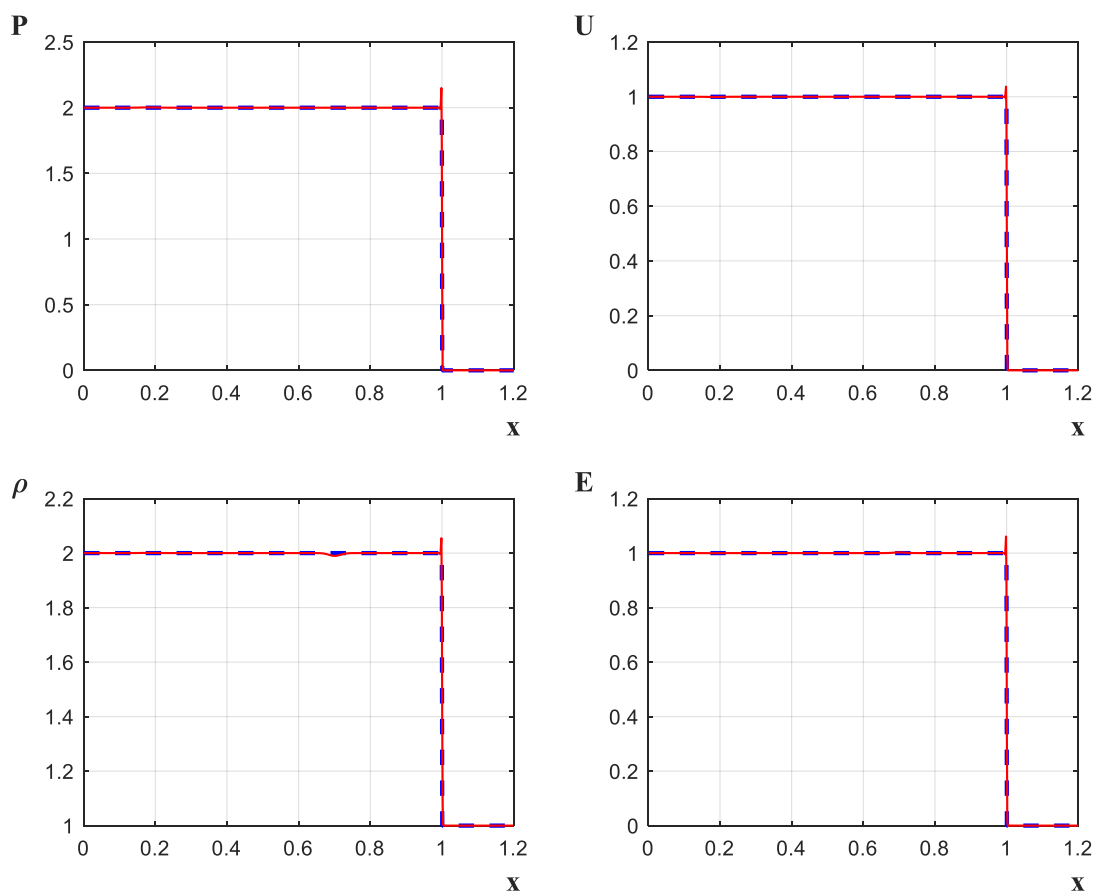


Рис. 5.2.3 График в сечении по оси x. Пунктирная линия – аналитическое решение, сплошная – численное.

Для проверки работоспособности проведем аналогичный расчет по y компоненте.

Начальные данные при  $t = 0$

$$0 < y < \frac{L}{3}, P = 2, U = 1, V = \frac{1}{2}, e = \frac{1}{2}.$$

$$\frac{L}{3} < y < L, P = 0, U = 0, V = 1, e = 0.$$

Время окончания счета:

$$t_k = 0.3.$$

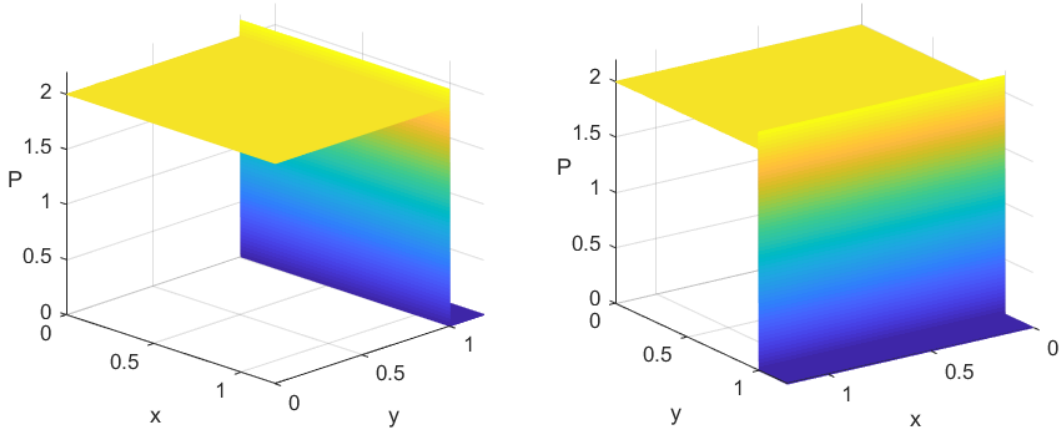


Рис. 5.2.4 Распространение давления по компоненте y.

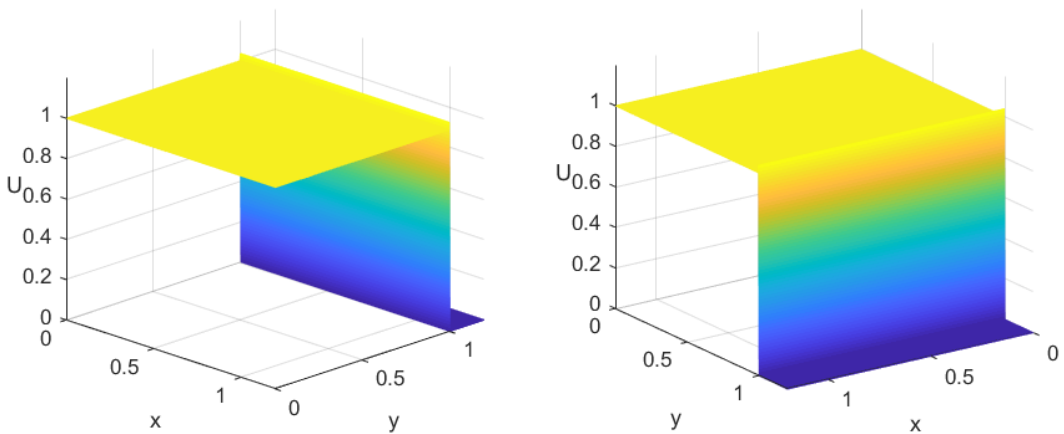


Рис. 5.2.5 Распространение скорости по компоненте y.

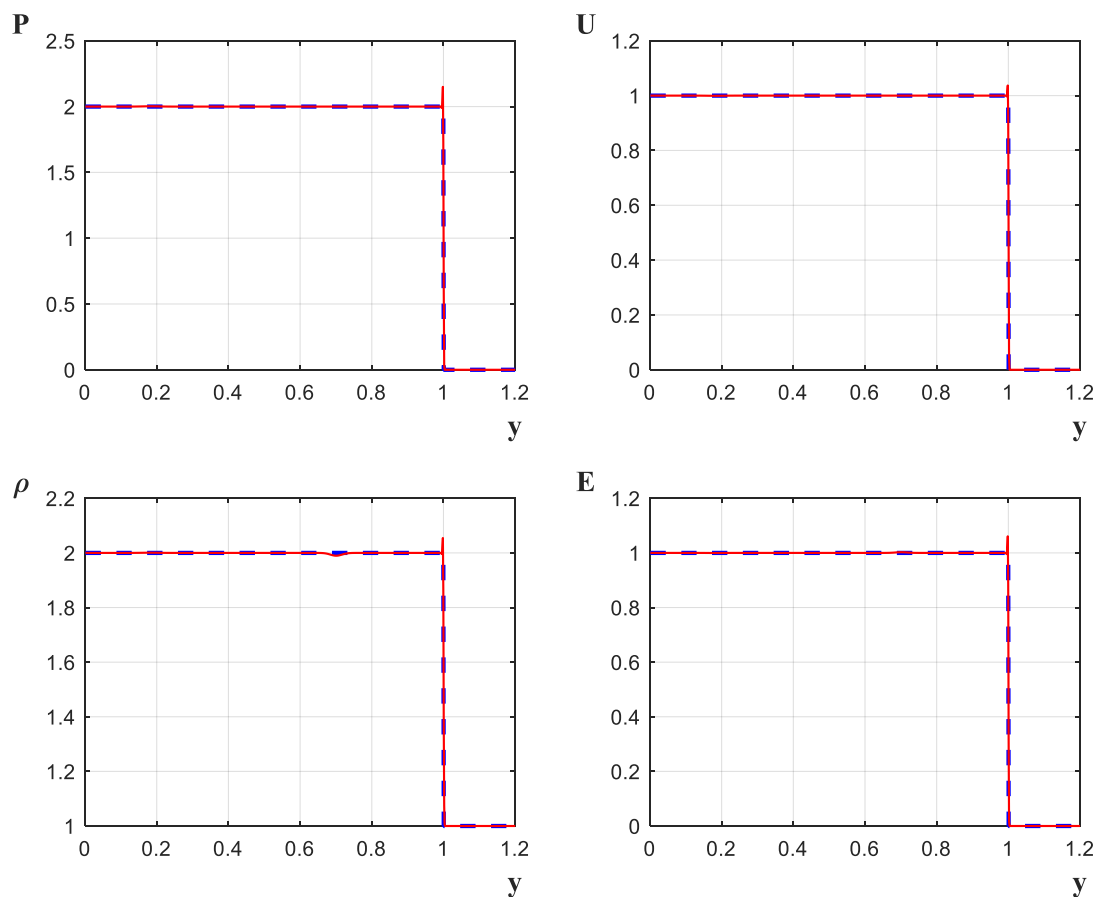


Рис. 5.2.6 График в сечении по оси  $y$ . Пунктирная линия – аналитическое решение, сплошная – численное.

Графики распространения стационарной ударной волны в сечении совпадает с аналитикой и соответствуют одномерным результатам.

Методом крупных частиц [11] было рассчитано частичное всплытие пузырька водорода в кислороде.

$$L_x = 0.1 \text{ м}, L_y = 0.1 \text{ м},$$

$$r = 200 \text{ ячеек.}$$

Начальные данные при  $t = 0, 50 > \sqrt{(x - 500)^2 + (y - 800)^2}$ ,

$$P = 101325 \text{ Па}, U_x = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}, U_y = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}, E = 3116250.0 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}},$$

Начальные данные при  $t = 0, 50 \leq \sqrt{(x - 500)^2 + (y - 800)^2}$ ,

$$P = 101325 \text{ Па}, U_x = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}, U_y = 0 \frac{\text{м}}{\text{с}}, E = 194765.625 \frac{\text{Дж}}{\text{кг}},$$

Плотность вычисляем из УРС

$$\rho = \frac{P}{(\gamma - 1)E'}$$

Граничные условия – жесткие стенки.

Условия счета

$$K = 0.1, \gamma_H = 1.4, \gamma_o = 1.4, N = 1000, M = 1000.$$

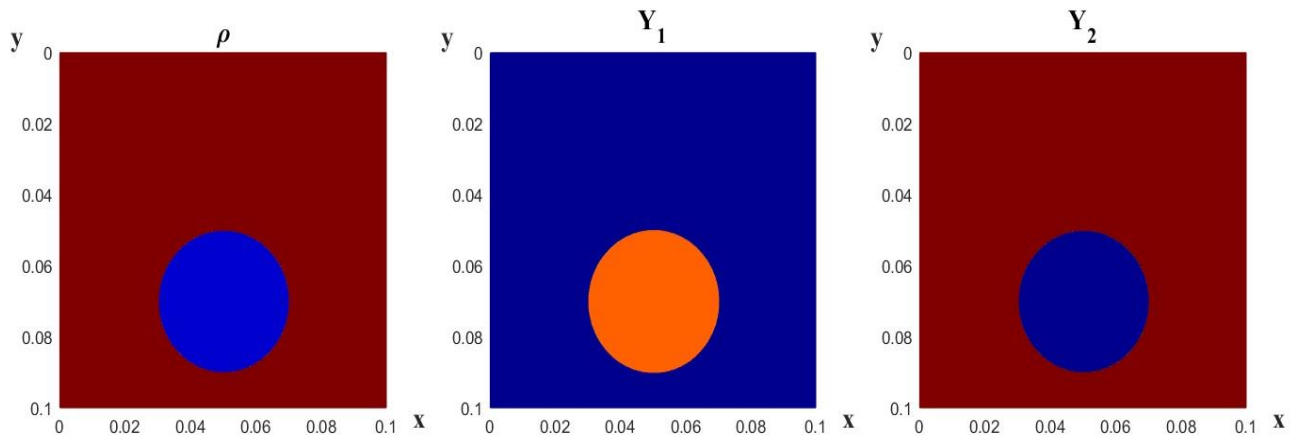


Рис. 5.2.7 Распределение в начальный момент времени.

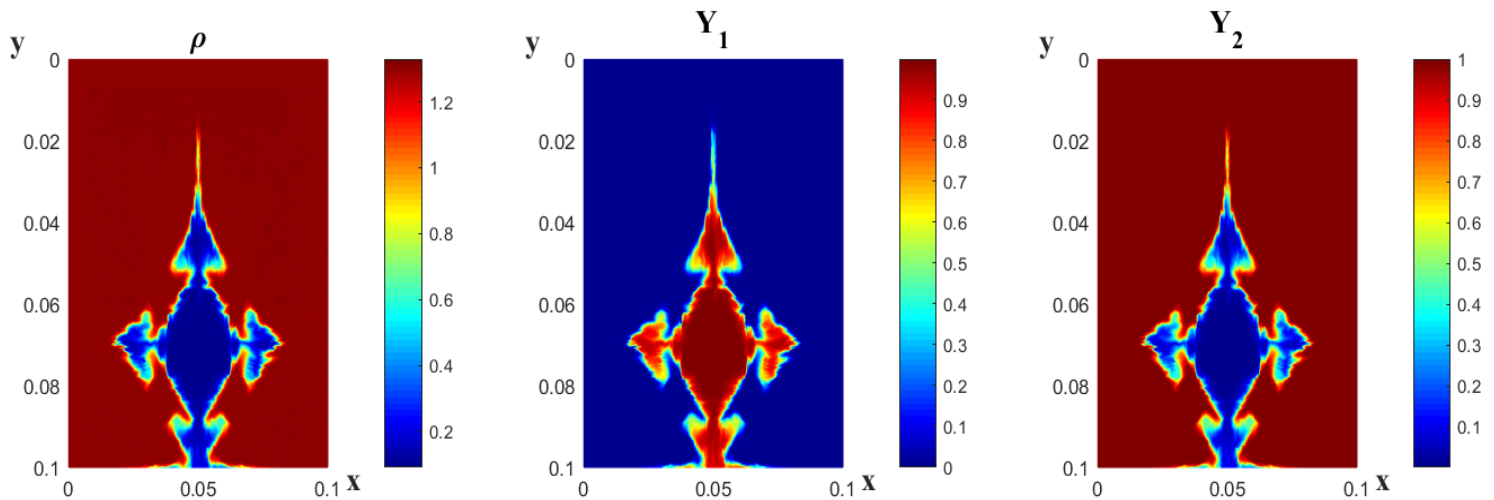


Рис. 5.2.8 Распределение параметров  $t = 0.0018$  с.

На рисунке 5.2.7 изображены поля плотности и массовой доли на начальный момент времени  $t = 0$  с. Прогнозируемое поведение двумерной задачи – вытягивание пузырька в эллипс и последующее перемещение вверх расчетной области. Ввиду ограниченности вычислительной мощности доступных персональных устройств получены графики на момент времени  $t =$



0.001 секунды, необходимо применение высокопроизводительных машин. Для улучшения результатов рекомендуется использовать более точные величины хранения расчетных параметров (long double), предпочтительнее использовать длинную арифметику. Из графика на момент времени  $t = 0.001$  с можно наблюдать, что пузырь водорода приобретает форму эллипса и стремится к всплытию.

## 6 Заключение

Основной частью работы является знакомство с многокомпонентными газовыми средами. Найдена литература и проведен её обзор. После изучения литературы и её результатов принято решение использовать метод крупных частиц ввиду универсальности и легкости исполнения. В данной работе реализован и верифицирован метод крупных частиц на задаче о стационарной ударной волне в двух постановках. Базовый метод представляет результаты, которые совпадают с аналитическим решением на заданный момент времени. Произведена работа по подсчету относительной ошибки вычисления. Ошибка, которую показывает метод относительно аналитического решения, трактуется как длина ударной волны в программной реализации совместно с особенностью метода (клин). Методом крупных частиц и дополнительных расчетных модулей (показатель адиабаты и поле силы тяжести) было смоделировано частичное всплытие пузырька водорода в кислороде. Приведены графики перемешивания массовых долей газов. Метод показывает подъем частиц газа водорода в верхнюю часть расчетной области, что видно из графика плотности. Перспектива развития работы – подключение расчета химических реакций, что позволит моделировать аварии на АЭС с учетом процессов горения. Анализируя полученные графики, можно прийти к выводу, что результаты не противоречат общим представлениям динамики легкоподвижных сред.

## 7 Библиографический список

1. Зенков, А. В. Численные методы : учеб. Пособие / А. В. Зенков. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2016.— 124 с.
2. Куропатенко, В. Ф. Основы численных методов механики сплошной среды : монография/ В. Ф. Куропатенко, Е. С. Шестаковская—Челябинск, 2017.-253с.
3. Эглит, М. Э. Лекции по основам механики сплошных сред. монография/ М. Э. Эглит. — Издание 5-ое. Москва. 2014. – 208 с.
4. Никольский, А. Б. Химия/ А. Б. Никольский, А. В. Суворов – СПб.: Химиздат, 2001. - 512с.
5. Куропатенко, В. Ф. Модели механики сплошных сред : монография/ В. Ф. Куропатенко –Челябинск, Челяб гос. Ун-т. 2007. – 303 с.
6. Козелков, А. С. Численное моделирование свободного всплытия пузырька воздуха : статья/ А. С. Козелков, В. В. Курулин, С. В. Лашкин, Н. В. Тарасова, Е. С. Тятюшкина // Супервычисления и математическое моделирование, URL: <http://book.sarov.ru/wp-content/uploads/Supercomputing-16-2016-21.pdf> – Саров, 2016. (дата обращения: 10.02.2020г.) Текст электронный.
7. Русинов, А. А Математическая модель процесса всплытия одиночного пузырька газа в водной среде : статья/А. А. Русинов, Е. В. Александров// Научный журнал ВЕСТНИК Воронежского государственного университета – URL: <http://www.vestnik.vsu.ru/pdf/phymath/2017/02/2017-02-06.pdf> (дата обращения: 19.01.2020г.) – Текст : электронный.
8. Беляев, П. Е. Моделирование физических процессов в программном комплексе «КЕДР» : статья/ П. Е. Беляев, И. Р. Макеева, Д. А. Мастюк, Е. Е. Пигасов // Научная сессия НИЯУ МИФИ – 2019 по направлению инновационные ядерные технологии. – 2019. URL: [http://www.sphti.ru/nayka/meropr\\_n/NS-2019/%D1%82%D0%B5%D0%B7%D0%B8%D1%81%D1%8B\\_%D0%9D%D0%A1-2019.pdf](http://www.sphti.ru/nayka/meropr_n/NS-2019/%D1%82%D0%B5%D0%B7%D0%B8%D1%81%D1%8B_%D0%9D%D0%A1-2019.pdf). (дата обращения: 19.05.2020г.) – Текст : электронный.
9. Ковалев, Ю. М. Метод крупных частиц для исследования течений газозвесей : статья / Ю. М. Ковалев, Е. А. Ковалева Южно-Уральский государственный

- университет, Челябинский государственный университет. г. Челябинск. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/metod-krupnyh-chastits-dlya-issledovaniya-techeniy-gazovzvesey/viewer> (дата обращения: 21.03.2020г.) – Текст : электронный.
10. Кириллов, И. А. Обеспечение водородной безопасности на атомных электростанциях с водоохлаждаемыми реакторными установками. Современное состояние проблемы : статья / И. А. Кириллов, Н. Л. Харитонов, Р. Б. Шарафутдинов, Н. Н. Хренников Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности (ФБУ «НТЦ ЯРБ») URL: [https://www.secnrs.ru/publications/nrszine/2-84-2017/hydrogen\\_safety.pdf](https://www.secnrs.ru/publications/nrszine/2-84-2017/hydrogen_safety.pdf) (дата обращения: 25.03.2020г.) – Текст : электронный.
11. Белоцерковский, О. М. Метод крупных частиц в газовой динамике : монография / О. М. Белоцерковский, Ю. М. Давыдов. М.: Наука, 1982. 392 с.
12. Чёрный, Г. Г. Газовая динамика : монография / М.: Наука, 1988. 424 с.
13. Parra-Santos, M. T. Численное моделирование переходы горения в детонацию / F. M. T. Parra-Santos, Castro-Ruiz, C. Mendes-Bueno.
14. Гришин, Ю. А. Повышение устойчивости вычислительного алгоритма метода крупных частиц : статья / Ю. А. Гришин, В. А. Зенкин – Наука и образование. – 2011. – №13. – С. 41 – 45 URL: <http://technomag.edu.ru/doc/221488.html> (дата обращения: 20.12.2019г.) – Текст : электронный.