

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕДАХ

*Куропатенко В.Ф., Суров В.С., Мустафин В.К., Михайлова Г.И.,
Макеева И.Р., Коваленко Г.В., Доровских И.А., Ковалев Ю.М.*

Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский НИИ технической физики им. академика Е.И. Забабахина (РФЯЦ-ВНИИТФ)
г. Снежинск, Челябинской обл., ул. Васильева, д. 13, а/я 245 Тел.: (35172)32625 Факс: (35172)32077

Поведение многокомпонентных сред в условиях воздействия на них динамических нагрузок сильно зависит от характера воздействия. Компоненты могут разрушаться, плавиться, испаряться или претерпевать полиморфные фазовые переходы. В зависимости от этого меняется характер их взаимодействия друг с другом. Математическая модель должна описать разнообразие состояний и поведения компонент и форму их взаимодействия в условиях быстрых изменений термодинамических характеристик. Невозможность прямого экспериментального изучения всех разнообразных процессов взаимодействия компонент предъявляет повышенные требования к точности и широте возможностей математической модели. В процессе работ по проекту создана более общая по сравнению с существующими физико-математическую модель многокомпонентной среды, исследованы ее отличия от других моделей, разработан новый численный метод расчета неустановившихся движений многокомпонентных сред при наличии фазовых превращений компонент и их химического взаимодействия. Расчеты нескольких классов задач показали, что объемные концентрации компонент реагируют как на "размывание" сильных и слабых разрывов, так и на колебания численного решения. В новом методе обеспечивается отсутствие осцилляций при минимальной дистракции. Монотонность метода обеспечивается неотрицательностью коэффициентов оператора перехода для α и β инвариантов (теорема Годунова). Минимальность дистракции обеспечивается применением уравнений Гюгонио для описания диссипации в ударной волне. Для ряда эталонных задач (ударные волны и волны разрежения) проведено сравнение с методами Неймана-Рихтмайера, Годунова, Лакса-Вендрофа и одним из первых методов В.Ф. Куропатенко. С целью проверки достоинств метода при моделировании динамического разрушения построено аналитическое решение задачи о воздействии сверхмягкого излучения на конденсированное вещество. В результате взаимодействия волны разрежения с ударной волной, а затем со встречной волной разрежения после выхода УВ на свободную поверхность происходит разрушение вещества в плоскости, параллельной свободной поверхности. Проведено сравнение результатов расчетов с этим "аналитическим решением". Во всех эталонных задачах продемонстрированы преимущества нового метода. Для компонент, находящихся в состоянии твердого тела, построена кинетическая модель динамического разрушения, учитывающая релаксации касательных напряжений и скорость накопления микроразруждений. Проведено сравнение полученных в расчете статических и динамических кривых сжатия пористого железа с экспериментальными. В ходе работ по проекту решен ряд частных задач с фиксированным состоянием компонент. В частности, решена задача о протекании находящейся под давлением аэрозвеси через пористую бетонную преграду с учетом того, что частички дисперсной среды постепенно перекрывают поровые каналы (пористость зависит от времени и пространственной координаты). Созданные методы являются теоретическими, основным из них является метод математического моделирования. Экспериментальные данные использовались для верификации математической модели.

Multicomponent media behavior under dynamic loading depends on the influence character. Components could be fractured, melt, evaporate or undergo phase transformation. Their interaction character changes with these factors. The mathematical model should describe the variety of states and component behavior and the form of their interaction under rapid variation of thermodynamic characteristics. Impossibility of direct experimental study of all the different processes of component interaction make high demands for accuracy and abilities of the mathematical model. During the project execution the physical-mathematical model for the multicomponent medium, more general than existing ones, is developed, its characteristic features are studied, the new numerical technique for calculations of non-steady motions of multicomponent media with phase transformations and their chemical interaction. Calculations of some types of the problems showed that volume fractions of the components strongly responded both for "spreading" of the strong and weak discontinuities and for oscillations

of the numerical solution. The new technique ensures oscillation absence with minimal distraction. The monotonicity of the technique is provided by nonnegativity of transformation operator coefficients for α and β invariants (Godunov theorem). Distraction minimization is provided using Hugoniot equations to describe dissipation in shock wave. For a set of standard problems (shock waves and rarefaction waves) the comparison with Neumann-Richtmayer, Godunov, Lax-Wendroff and one of first Kuropatenko's techniques is done. To verify the advantages of the technique for simulation of dynamic failure analytical solution for the problem of supersoft radiation effect on condensed matter is constructed. The matter failure takes place in the plane parallel to the free surface as the result of interaction of rarefaction wave with shock wave and then with coming from the opposite direction rarefaction wave after shock wave outcoming to the free surface. Comparison of calculational results with this "analytical solution" is done. For all the standard problems the advantages of the new technique are shown. For components which are in the solid state kinetic model of dynamic failure considering tangential stress relaxation and microdamage accumulation rate is constructed. Comparison of obtained calculational static and dynamic compression curves for porous iron and experimental one is carried out. During the project execution a set of special problems with constant component state is solved. In particular, the problem of compressed aerosuspension flowing through the porous concrete barrier considering the fact that particles of the disperse medium gradually block the pore channels (porosity depends on time and spatial coordinate) is solved. Developed techniques are theoretical, the method of the mathematical simulation is the basic. Experimental data were used to verify the mathematical model.

Объявленные ранее цели проекта:

Проект направлен на повышение точности математического моделирования поведения многокомпонентной гетерогенной среды под действием излучений или механических воздействий. Цель может быть достигнута путем совершенствования имеющейся физико-математической модели и обоснования ее преимуществ, а также путем создания нового численного метода, в котором низкая дистракция разрывов сочеталась бы с монотонностью.

Степень выполнения поставленных задач:

В ходе работ по проекту проведено развитие модели многокомпонентной среды, участвующей в неустановившемся движении. Для обоснования формы обменных членов в уравнениях компонент и оценки численных значений входящих в них параметров рассмотрены осреднения пульсационных составляющих в турбулентных потоках гетерогенных многокомпонентных сред. С помощью использования осреднения по Фавру, получены уравнения кинетической энергии осредненного движения для гетерогенных смесей с малым объемным содержанием конденсированных фаз. Проведено сравнение модели многокомпонентной среды с моделью Янгса. Показано, что модель Янгса получается из созданной модели после ряда упрощающих предположений. Однако, до последнего времени остается не выясненным до конца вопрос о внутренней диффузии модели, когда для газов в уравнении движения берется $\text{grad } \alpha_i P_i$. Исследования модели в этом направлении должны быть продолжены. Создан новый численный метод расчета нестационарных движений идеальных сплошных сред. Построено аналитическое решение о воздействии сверхмягкого излучения на конденсированное тело с последующим распространением ударной волны и волны разрежения и разрушением вещества после выхода УВ на свободную границу. Создана программа КАМА-97, по которой проведен ряд расчетов. Исследована модель трехкомпонентной среды, представляющей пористое твердое тело, через поры которого просачивается дисперсная среда (газ с пылинками). Размеры пылинок распределены по нормальному закону. Газ и пылинки проникают через пористую стенку до тех пор, пока существуют открытые поровые каналы. Пористость является функцией от t и x , т.к. частицы постепенно перекрывают поровые каналы в преграде. Математическое моделирование описанных выше процессов проводилось по новой компьютерной программе "КАМА". Разностная схема, построенная для

указанной цели, обеспечивает отсутствие осцилляций за фронтом ударной волны или на "хвосте" волны разрежения при минимальной дистракции. Это приводит к минимизации энтропийных следов при взаимодействии сильных разрывов друг с другом и с контактными границами. Поскольку в ряде задач скелет твердого пористого тела неподвижен, то предпочтительным оказался разностный метод в эйлеровых координатах. Т.о. задачи, поставленные на 1997 -1998 гг., выполнены примерно на 75-80%. Работы по пп. 3 и 8 (создание модели степного пожара и проведение расчетов степного пожара) из плана работ были исключены.

Полученные важнейшие результаты:

Для решения широкого класса задач математическая модель многокомпонентной среды должна описывать сложные физические процессы, которые протекают в компонентах под действием динамических нагрузок на среду (плавление, испарение, полиморфные фазовые переходы, разрушение и др.). Поскольку разные компоненты движутся с разными скоростями, а возмущения движутся с разными скоростями звука, волновая картина в такой среде оказывается чрезвычайно сложной. Созданная модель многокомпонентной среды описывает, указанные процессы благодаря специальной форме законов сохранения, содержащих производные физических характеристик каждой компоненты. Наличие физических, а не парциальных, характеристик позволяет для каждой компоненты использовать ее индивидуальное уравнение состояния. Необходимость выполнения законов сохранения компонент и законов сохранения среды в целом, накладывает ряд ограничений на функции, описывающие обмен импульсом и энергией между компонентами. С целью обоснования формы таких членов и оценки численных значений входящих в них параметров рассмотрены осреднения пульсационных составляющих в турбулентных потоках гетерогенных многокомпонентных сред. С помощью использования осреднения по Фавру, получены уравнения кинетической энергии осредненного движения для гетерогенных смесей с малым объемным содержанием конденсированных фаз. Модель многокомпонентной среды исследовалась с целью выяснения ее принципиальных отличий от других известных моделей. В качестве объекта для сравнения была выбрана наиболее популярная в Англии и других странах модель Д.Янгса. Показано, что созданная модель многокомпонентной среды является более общей, т.к. модель Янгса получается из нее после существенных упрощающих предположений. Созданная модель применена для моделирования фильтрации дисперсной среды через пористую преграду. Поскольку размер частиц дисперсной фазы (пылинок) сравним с размером пор, то происходит постепенное перекрытие поровых каналов в преграде. Т.о. пористость становится функцией времени и пространственной координаты. В связи с уменьшением объемной концентрации пор возрастает сопротивление движению дисперсной среды и в некоторый момент фильтрация может полностью прекратиться. Для компонентов, находящихся в состоянии твердого тела, построена кинетическая модель динамического разрушения, учитывающее релаксации касательных напряжений и скорость накопления микроразрушений. Проведено сравнение полученных в расчете статических и динамических кривых сжатия пористого железа с экспериментальными данными. В течение 1997 и 1998 гг. создан новый разностный метод для расчета движений сплошной среды с сильными, слабыми и контактными разрывами. В этом методе все термодинамические величины и скорость относятся к серединам ячеек сетки, в узлах сетки задаются лишь координаты. Для определения всех величин в момент $t = t^n + \Delta t$ на гранях

ячейки вычисляются вспомогательные значения давления и скорости, с помощью которых определяются деформации ячеек, новая плотность и новая скорость. В случае адиабатических течений интегрируется уравнение изэнтропы. В случае сжатия одна из величин P^* или U^* задаются равными значению P или U из соседней ячейки, вторая вспомогательная величина находится из уравнений на сильном разрыве. Проведено априорное обоснование требуемых характеристик разностного метода. Априорные оценки показывают, что метод удовлетворяет поставленным требованиям как по монотонности, так и по дистракции. Создана программа КАМА-97, по которой проведены расчеты большого числа эталонных задач, имеющих аналитическое решение. Проведено сравнение с результатами расчетов этих задач с помощью методов Неймана-Рихтмайера, Лакса-Вендрофа, Годунова и одного из ранних методов В.Ф.Куропатенко. Во всех случаях продемонстрированы преимущества нового метода. Монотонность метода обеспечивается неотрицательностью коэффициентов оператора перехода для a и b инвариантов (теорема Годунова). Минимальность дистракции обеспечивается применением уравнений Гюгонио для описания диссипации в ударной волне. 3.7. Модель многокомпонентной среды и обоснование формы обменных членов являются новыми. Разностный метод является новым. Аналитическое решение о "точечном" разрушении конденсированного тела при взаимодействии двух волн разрежения является новым. Созданная программа КАМА-97 является новой. Решение задачи о фильтрации дисперсной среды через пористую преграду с постепенным перекрытием поровых каналов является новым.

Сопоставление с мировым уровнем:

Численный метод по совокупности характеристик, определяющих диссипативные, дистракционные и осцилляционные свойства, превосходит все известные из русских и зарубежных публикаций методы для решения аналогичных задач. Метод и результаты расчетов были доложены на международных конференциях "Новые модели и программы для ударно-волновых процессов в конденсированных средах" в Оксфорде (Англия) 15-19 сентября 1997 г., "Ударные волны в конденсированных средах" в Санкт-Петербурге 12-17 июля 1998 г., "Конечно-разностные методы: теория и применения" в Минске в июле 1998 г. Аналитическое решение о "точечном" разрушении в зоне взаимодействующих волн разрежения находится на уровне лучших зарубежных аналитических решений, используемых для тестирования разностных методов. Математическая модель многокомпонентной среды по своей общности превосходит большинство известных в России и за рубежом моделей.

Использованные методы и подходы:

В основе модели многокомпонентной среды лежит концепция написания законов сохранения для каждой компоненты, что позволяет использовать уравнения состояния, описывающие фазовые переходы в каждой компоненте независимо от состояния других компонент. Поэтому существующие иные модели можно рассматривать, как частные случаи данной модели. Благодаря такому подходу расширяется спектр течений, которые могут быть описаны без дополнительных упрощающих предположений. Механизмы пластического деформирования и откольного разрушения также описываются с позиций единого подхода путем включения в базовую систему законов сохранения и определяющих уравнений,

специальных кинетических уравнений, форма которых является оригинальной. При построении численного метода расчета нестационарных движений использован подход, согласно которому на ударной волне для описания диссипации энергии используются уравнения Гюгонио, а в областях адиабатичности интегрируется уравнение энергии с любой наперед заданной точностью. Такой подход является оригинальным. Новизна метода заключается в том, что впервые указанный подход применен для случая, когда скорость определяется там же, где и термодинамические величины - в серединах сеточных ячеек.

ПУБЛИКАЦИИ

1. Математическое моделирование турбулентных течений гетерогенных сред

Ковалев Юрий Михайлович

Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов 3 (1998) 21-27

Форма членов, стоящих в правых частях законов сохранения и обеспечивающих обмен импульсом и энергией, определяется с помощью пространственных и временных осреднений. Появление новых видов осреднений объясняется постепенным уменьшением упрощающих предположений. Для смеси $N-1$ конденсированных компонент и одной газовой компоненты предложены пространственные усреднения, связывающие средние производные с производными усредненных величин. Для рассмотрения этих уравнений вводится в рассмотрение межфазная поверхность, через которую отсутствует поток массы. В случае двух компонент полученные усреднения совпадают с формулами, предложенными Нигматулиным. Эти усреднения позволили получить систему уравнений законов сохранения для гетерогенных сред с малым объемным содержанием конденсированных фаз. Усреднения турбулизованной среды по времени строятся, отталкиваясь от усреднений Рейнольдса. Следующим по сложности усреднения является усреднение по Фавру. Следующим шагом является учет тройных корреляций. В работе приводятся доказательства того, что усреднения по Фавру более предпочтительны и анализируются случаи малых и больших объемных концентраций малого и большого числа компонент.

2. Двупараметрическая $K-\epsilon$ модель турбулентности для гетерогенных сред с малым объемным содержанием конденсированных фаз

Ковалев Юрий Михайлович

Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов 4 (1998) 27-32

Система уравнений многокомпонентных сред является незамкнутой и требует дополнительных уравнений. С целью получения и обоснования таких уравнений сделаны упрощающие предположения о несжимаемости жидких фаз, о справедливости осреднений по Рейнольдсу и ряд других. Из 8 предположений 7 встречаются довольно часто. Из них только одно предположение встречается редко и ему придается особое значение. Кинетическое

уравнение для турбулентной энергии, полученное для газовой фазы, в случае одной компоненты и отсутствия химических реакций и фазовых превращений переходит в уже известное уравнение. Получено уравнение для скорости диссипации энергии турбулентных пульсаций, которое положено в основу двухпараметрической К-Е модели турбулентности. Работа содержит теоретическое обоснование обменных членов в многокомпонентных средах, и может быть использована для уменьшения эмпирических зависимостей в других моделях.

3. Уравнения сохранения турбулентных потоков гетерогенных сред

Ковалев Юрий Михайлович

Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов 4 (1998) 33-40

В работе дается обоснование уравнений турбулентных течений гетерогенных сред с малой объемной концентрацией конденсированной фазы. При этом делается ряд упрощающих ограничений, в том числе и весьма распространенное - о несжимаемости конденсированной фазы. Предполагается, что можно пренебречь пульсациями скорости фазовых переходов и скоростью химических реакций. В результате цепочки рассуждений получены уравнения для кинетической энергии осредненного движения, которые отличаются от ранее известных уравнений членами, описывающими межфазное взаимодействие газовой и конденсированных фаз. Получено уравнение для турбулентной энергии i -й фазы, хотя в большинстве работ рассматривается только турбулентная энергия всей смеси. Из общих уравнений для турбулентной энергии для смеси с малыми объемными концентрациями получены ранее известные уравнения, что является обоснованием правильности общего подхода. В работе рассмотрены также уравнения для полной энергии i -й компоненты и с помощью этих уравнений получены уравнения сохранения внутренней энергии i -й компоненты.