ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2023, том 514, с. 26–33

МАТЕМАТИКА

УДК 519.634:517.956.35

РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЕ УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ ГЕТЕРОГЕННЫХ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ “СЖАТЫХ” ГАЗОВ НОУБЛА-АБЕЛЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

© 2023 г. А. А. Злотник[1,2,*], Т. А. Ломоносов[1,2,**]

Представлено академиком РАН Б.Н. Четверушкиным
Поступило 12.05.2023 г.
После доработки 16.08.2023 г.
Принято к публикации 21.09.2023 г.

Рассматривается так называемая модель из четырех уравнений динамики гетерогенных сжимаемых бинарных смесей при уравнениях состояния “сжатого” газа Ноубла-Абеля. Используется ее квазигомогенная форма, возникающая после исключения объемных концентраций из искомых функций и основанная на квадратном уравнении для общего давления компонент. Приводятся новые свойства этого уравнения и простая формула для квадрата скорости звука, предлагается альтернативный вывод формулы, связывающей ее с квадратом скорости звука Вуда, и формулируется уравнение баланса давления. Впервые дается регуляризация квазигазодинамического типа гетерогенной модели (в квазигомогенной форме), строится реализующая ее явная двухслойная по времени и симметричная трехточечная по пространству разностная схема без лимитеров в 1D случае и приводятся численные результаты.

Ключевые слова: газовая динамика, гетерогенная бинарная газовая смесь, модель с четырьмя уравнениями, “сжатый” газ Ноубла-Абеля, квазигазодинамическая регуляризация, явная по времени и симметричная по пространству схема

DOI: 10.31857/S2686954323600313, **EDN:** DEJANK

Существует иерархия моделей, описывающих динамику гетерогенных сжимаемых бинарных смесей, см. [1, 2] и ссылки в них. Уравнения баланса массы компонент, полного импульса и полной энергии смеси в простейшей из них односкоростной и однотемпературной модели из четырех уравнений имеют вид

$$\partial_t(\alpha_k r_k) + \operatorname{div}(\alpha_k r_k \mathbf{u}) = 0, \quad k = 1,2, \tag{1}$$

$$\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}) + \nabla p = \rho\mathbf{f}, \tag{2}$$

$$\partial_t(0.5\rho|\mathbf{u}|^2 + \rho\varepsilon) + \operatorname{div}((0.5\rho|\mathbf{u}|^2 + \rho\varepsilon + p)\mathbf{u}) = \operatorname{div}(-\mathbf{q}^F) + \rho\mathbf{u}\cdot\mathbf{f} + Q. \tag{3}$$

Здесь основные искомые функции — плотность $r_k > 0$ и объемная доля $0 < \alpha_k < 1$ для k-й компоненты смеси, $k = 1$, 2, общие скорость $\mathbf{u} = (u_1,\ldots,u_n)$ и абсолютная температура $\theta > 0$ смеси. Они зависят от $x = (x_1,\ldots,x_n) \in \Omega$ и $t \geqslant 0$, где Ω — область в $\mathbb{R}^n$, $n = 1,2,3$. Операторы $\operatorname{div} = \nabla\cdot$ и $\nabla = (\partial_1,\ldots,\partial_n)$ берутся по x, $\partial_t = \partial/\partial t$ и $\partial_i = \partial/\partial x_i$. Символы $\otimes$ и $\cdot$ обозначают тензорное и скалярное произведения векторов, дивергенция тензора берется по его первому индексу, и ниже $\langle\cdot\rangle$ — операция суммирования по индексу $k = 1$, 2. Дополнительные соотношения таковы

$$\langle\alpha_k\rangle = 1, \quad \rho = \langle\alpha_k r_k\rangle, \quad \rho\varepsilon = \langle\alpha_k r_k \varepsilon_k(r_k,\theta)\rangle, \quad p = p_1(r_1,\theta) = p_2(r_2,\theta) > 0, \tag{4}$$

где участвуют плотность ρ и удельная внутренняя энергия ε смеси, а также общее давление компонент смеси p, давление $p_k(r_k,\theta)$ и удельная внутренняя энергия $\varepsilon_k = \varepsilon_k(r_k,\theta)$ k-й компоненты, $k = 1$, 2. Дополнительно к уравнениям (1)–(3), первое и последнее алгебраические уравнения в (4) позволяют найти все искомые функции.

[1]*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, Москва, Россия*
[2]*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Москва, Россия*
**E-mail: azlotnik@hse.ru*
***E-mail: tlomonosov@hse.ru*

Берется уравнение состояния “сжатого” газа Ноубла-Абеля (СГНА) [3] в виде

$$p_k(r_k,\theta)=\frac{R_k r_k\theta}{1-b_k r_k}-p_{*k},\qquad \varepsilon_k(r_k,\theta)=c_{Vk}\theta+\frac{p_{*k}(1-b_k r_k)}{r_k}+\varepsilon_{0k}, \tag{5}$$

где $0<r_k<b_k^{-1}$. Также $R_k>0$, $b_k\geqslant 0$, $c_{Vk}>0$, $p_{*k}\geqslant 0$ и ε_{0k} – заданные физические постоянные, $k=1,2$. Напомним, что $R_k=(\gamma_k-1)c_{Vk}$, где $\gamma_k>1$ – показатель адиабаты k-й компоненты, и положим $c_{pk}=\gamma_k c_{Vk}$. При $b_k=0$ охватывается более простое уравнение “сжатого” газа (СГ).

Слагаемые, связанные с фазовым переходом, опущены, но добавлен тепловой поток Фурье $-\mathbf{q}^F=\varkappa\nabla\theta$ с $\varkappa\geqslant 0$ (следуя [4]). Напомним, что $\mathbf{f}$ и Q отвечают заданным внешней силе и источнику тепла.

В [4, 5] для уравнений состояния СГ и СГНА было предложено перейти к другой форме модели из четырех уравнений, включающей только альтернативные плотности компонент $\rho_k=\alpha_k r_k$ и $\mathbf{u}$ и ε как искомые функции, но не α_k и r_k, $k=1,2$, и с этой целью были даны нетривиальные выражения $p=p(\rho_1,\rho_2,\varepsilon)$ и $\theta=\theta(\rho_1,\rho_2,\varepsilon)$. Поэтому эту форму можно назвать *квазигомогенной*, и она оказывается предпочтительнее для построения некоторых новых численных методов компьютерного моделирования течений, в частности, см. [4–7].

В данном сообщении приводятся новые свойства квадратного уравнения для p и простая формула для квадрата скорости звука c_s^2, предлагается новый вывод формулы, связывающей его с квадратом скорости звука Вуда и формулируется уравнение баланса давления. Впервые выполняется регуляризация квазигазодинамического (КГД) типа [8, 9] гетерогенной модели (в квазигомогенной форме), для ее реализации строятся явная двухслойная по времени и симметричная трехточечная по пространству схема без лимитеров в 1D случае и приводятся численные результаты. Для упрощенной квазигидродинамической (КГидД) регуляризации дается уравнение баланса энтропии смеси с неотрицательным ее производством.

1. Напомним переход к квазигомогенной форме и выведем некоторые существенные вспомогательные формулы. Из уравнений состояния (5) последовательно получим

$$(\alpha_k-b_k\rho_k)(p_k+p_{*k})=R_k\rho_k\theta, \tag{6}$$

$$\rho_k(\varepsilon_k-\varepsilon_{0k})=c_{Vk}\rho_k\theta+(\alpha_k-b_k\rho_k)p_{*k}=c_{Vk}\rho_k\theta+\frac{R_k\rho_k p_{*k}}{p_k+p_{*k}}\theta. \tag{7}$$

Пусть $\hat\alpha_k:=\alpha_k(1-b_k r_k)=\alpha_k-b_k\rho_k$ и $\rho b=\langle b_k\alpha_k r_k\rangle=\langle b_k\rho_k\rangle$, тогда $0<\hat\alpha_k\leqslant\alpha_k\leqslant 1$ и $\langle\hat\alpha_k\rangle=1-b\rho$. Так как $\langle\alpha_k\rangle=1$ и $p_k=p$, получим далее

$$p=\frac{R\rho\theta-\langle\hat\alpha_k p_{*k}\rangle}{1-b\rho}, \tag{8}$$

$$\rho(\varepsilon-\varepsilon_0)=\langle\rho_k(\varepsilon_k-\varepsilon_{0k})\rangle=c_V\rho\theta+\langle\hat\alpha_k p_{*k}\rangle,\qquad \rho(\varepsilon-\varepsilon_0)+(1-b\rho)p=\gamma c_V\rho\theta, \tag{9}$$

где $\rho\varepsilon=\langle\rho_k\varepsilon_k\rangle$ и появляются соответствующие функции-коэффициенты такие, что

$$\rho\varepsilon_0=\langle\rho_k\varepsilon_{0k}\rangle,\quad \rho R=\langle R_k\rho_k\rangle,\quad \rho c_V=\langle c_{Vk}\rho_k\rangle,\quad \gamma=(R/c_V)+1. \tag{10}$$

Из равенств (6), (7) и $\langle\alpha_k\rangle=1$ выводим также формулы

$$\left\langle\frac{R_k\rho_k}{p+p_{*k}}\right\rangle\theta=1-b\rho,\qquad \rho(\varepsilon-\varepsilon_0)=\left(c_V\rho+\left\langle\frac{R_k\rho_k p_{*k}}{p+p_{*k}}\right\rangle\right)\theta.$$

Умножив вторую формулу на $\langle R_k\rho_k/(p+p_{*k})\rangle$, использовав первую и разделив результат на $c_V\rho(1-b\rho)$, выводим следующее рациональное уравнение для $p=p(\rho_1,\rho_2,\varepsilon)$:

$$\left\langle\frac{\sigma^{(k)}}{p+p_{*k}}\left(\frac{\rho(\varepsilon-\varepsilon_0)}{1-b\rho}-p_{*k}\right)\right\rangle=1, \tag{11}$$

$$\rho=\langle\rho_k\rangle,\quad \rho b=\langle b_k\rho_k\rangle,\qquad \sigma^{(k)}=\sigma^{(k)}(\rho_1,\rho_2):=\frac{R_k\rho_k}{c_V\rho}>0,\quad \langle\sigma^{(k)}\rangle=\gamma-1. \tag{12}$$

Из этого уравнения следует квадратное уравнение

$$p^2-\beta p-c=0, \tag{13}$$

$$\beta:=\left\langle\sigma^{(k)}\left(\frac{\rho(\varepsilon-\varepsilon_0)}{1-b\rho}-p_{*k}\right)-p_{*k}\right\rangle,\qquad c:=(\sigma^{(1)}p_{*2}+\sigma^{(2)}p_{*1})\frac{\rho(\varepsilon-\varepsilon_0)}{1-b\rho}-\gamma p_{*1}p_{*2}. \tag{14}$$

Пусть $d:=\beta^2+4c$ – дискриминант уравнения (13). При $p_{*1}p_{*2}\neq 0$ свойство $d>0$ и правильный выбор физического корня не очевидны и требуют анализа.

Заметим, что уравнения (11) и (13) не полностью эквивалентны. В частности, в случае $p_{*1}=p_{*2}=p_*$ единственный корень первого уравнения есть $p=(\gamma-1)\rho(\varepsilon-\varepsilon_0)/(1-b\rho)-\gamma p_*$, тогда как второе имеет дополнительный паразитический корень $p = -p_*$.

Утверждение 1. *Пусть* $\Delta_* := p_{*2} - p_{*1}$. *Верны формулы* $\beta = p_+ + p_-$, $c = -p_+ p_- \geqslant 0$ *с*

$$p_+ = \frac{R\rho\theta - \langle\hat{\alpha}_k p_{*k}\rangle}{1 - b\rho} > 0,$$

$$p_- = -\frac{1}{1 - b\rho}\left(\hat{\alpha}_1 p_{*2} + \hat{\alpha}_2 p_{*1} + \frac{\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2}{c_V\rho\theta}\Delta_*^2\right) \leqslant 0.$$

Как следствие, $d > 0$, $\sqrt{d} = p_+ - p_-$, *и эти* $p_\pm$ *– стандартные корни* $p_\pm = (\beta \pm \sqrt{d})/2$.

В силу этого утверждения p_+ – физический корень, а p_- – паразитический. Но формула и для p_- нужна для вывода ряда дополнительных свойств, см. утверждение 3 ниже.

Теперь можно перейти к *квазигомогенной форме* модели из четырех уравнений, состоящей из уравнений баланса массы компонент в виде

$$\partial_t\rho_k + \mathrm{div}\,(\rho_k\mathbf{u}) = 0, \quad k = 1, 2, \tag{15}$$

и полного импульса и полной энергии смеси (2), (3). Основными искомыми функциями становятся альтернативные плотности $\rho_k > 0$, скорость $\mathbf{u}$ и удельная внутренняя энергия ε смеси. Уравнения состояния (5) не используются, и теперь p и θ задаются как

$$\begin{gathered} p = p_+(\rho_1, \rho_2, \varepsilon) = (\beta + \sqrt{d})/2 > 0, \\ \theta(\rho_1, \rho_2, \varepsilon) = (\rho(\varepsilon - \varepsilon_0) + (1 - b\rho)p)/(\gamma c_V\rho), \end{gathered} \tag{16}$$

см. формулу (9); напомним, что здесь $d = \beta^2 + 4c$ (или см. альтернативную формулу в [5]), с $\beta = \beta(\rho_1, \rho_2, \varepsilon)$ и $c = c(\rho_1, \rho_2, \varepsilon)$, введенными в (14), см. также (10) и (12). Подчеркнем, что эта новая система не содержит α_k и r_k, хотя в соответствии с формулами (6), $p_k = p_+$ и $r_k = \rho_k/\alpha_k$ их можно вычислить апостериори. В простейшем случае идеальных газов, т.е. при $p_{*k} = b_k = 0$, $k = 1, 2$, имеем $p_+ = R\rho\theta = R_1\rho_1\theta + R_2\rho_2\theta$ и $\alpha_k = R_k\rho_k/(R\rho)$, $k = 1, 2$, и гетерогенная модель становится эквивалентной гомогенной модели смеси с разными давлениями компонент $p_1 = R_1\rho_1\theta$ и $p_2 = R_2\rho_2\theta$, занимающих общий объем, что и объясняет успех последней в [10] и связанных с ней работах.

Стандартным образом можно последовательно вывести уравнения баланса полной массы, кинетической и внутренней энергий компонент

$$\begin{gathered} \partial_t\rho + \mathrm{div}\,(\rho\mathbf{u}) = 0, \\ 0.5\partial_t(\rho|\mathbf{u}|^2) + 0.5\mathrm{div}\,(\rho|\mathbf{u}|^2\mathbf{u}) + \mathbf{u}\cdot\nabla p = \rho\mathbf{f}\cdot\mathbf{u}, \end{gathered} \tag{17}$$

$$\partial_t(\rho\varepsilon) + \mathrm{div}\,(\rho\varepsilon\mathbf{u}) + p\,\mathrm{div}\,\mathbf{u} = \mathrm{div}\,(\varkappa\nabla\theta) + Q. \tag{18}$$

Утверждение 2. *Верны следующие формула для квадрата скорости звука и уравнение баланса для* p_+

$$c_s^2 := \partial_\rho p_+ + \frac{p_+}{\rho^2}\partial_\varepsilon p_+ = \frac{\gamma(p_+ + p_{*1})(p_+ + p_{*2})}{(1 - b\rho)\rho\sqrt{d}} > 0, \tag{19}$$

$$\partial_t p_+ + \mathbf{u}\cdot\nabla p_+ + \rho c_s^2\mathrm{div}\,\mathbf{u} = \frac{(1 - b\rho)c_s^2}{c_p\theta}(\mathrm{div}(\varkappa\nabla\theta) + Q), \tag{20}$$

где производные ∂_ρ *и* ∂_ε *берутся при постоянных* ε_0, $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(2)}$ *в* (14) *как в* [1, 4] и $c_p = \gamma c_V$.

Доказательство выполняется дифференцированием уравнения (13) и с использованием утверждения 1, уравнения (18) и следующего уравнения

$$\begin{aligned} &(\partial_t + \mathbf{u}\cdot\nabla)\frac{\langle a_k\rho_k\rangle}{\langle c_k\rho_k\rangle} = \\ &= \frac{1}{\langle c_k\rho_k\rangle^2}[\langle c_k\rho_k\rangle\langle a_k(\partial_t + \mathbf{u}\cdot\nabla)\rho_k\rangle - \\ &- \langle a_k\rho_k\rangle\langle c_k(\partial_t + \mathbf{u}\cdot\nabla)\rho_k\rangle] = 0 \end{aligned}$$

для произвольных постоянных a_k и c_k, $k = 1, 2$ (кроме $c_1 = c_2 = 0$), при условии $\langle c_k\rho_k\rangle \neq 0$, поскольку $(\partial_t + \mathbf{u}\cdot\nabla)\rho_k = -\rho_k\mathrm{div}\,\mathbf{u}$ в силу уравнения баланса массы компонент (15).

Сопоставим два определения квадрата скорости звука в смесях.

Утверждение 3. *Верна следующая формула*

$$\frac{1}{\rho c_s^2} = \frac{1}{\rho c_{sW}^2} + \frac{c_{p1}\alpha_1 r_1 c_{p2}\alpha_2 r_2}{c_p\rho\theta}(\zeta_1 - \zeta_2)^2, \tag{21}$$

где c_{sW}^2 *– квадрат хорошо известной скорости звука в смесях по Вуду и*

$$\begin{gathered} \frac{1}{\rho c_{sW}^2} = \left\langle\frac{\alpha_k}{r_k c_{sk}^2}\right\rangle, \\ c_{sk}^2 = \frac{\gamma_k(p_k + p_{*k})}{r_k(1 - b_k r_k)} = \frac{(\gamma_k - 1)c_{pk}\theta}{(1 - b_k r_k)^2}, \\ \zeta_k := \left(1 - \frac{1}{c_{pk}}\partial_\theta\varepsilon_k(\theta, p_k)\right)\frac{\theta}{p_k} = \frac{1}{c_{pk}\hat{r}_k} \end{gathered}$$

с $\hat{r}_k := r_k/(1 - b_k r_k)$ *и* $k = 1, 2$.

Эта формула следует из утверждения 6 в [1], но, важно, что имеется другое замкнутое в себе и прямое доказательство, основанное лишь на данных выше рассуждениях и двух утверждениях. Оно состоит в последовательных преобразованиях правой части $\mathcal{F}$ в (21):

$$\mathcal{F} = \frac{\hat\alpha_2\gamma_2(\gamma_1-1)c_{p1}\hat r_1 + \hat\alpha_1\gamma_1(\gamma_2-1)c_{p2}\hat r_2}{(\gamma_1-1)(\gamma_2-1)c_{p1}c_{p2}\hat r_1\hat r_2\theta} - \frac{\langle\hat\alpha_k\rangle^2}{\rho c_p\theta} = \frac{\hat\alpha_2 R_1\hat r_1 + \hat\alpha_1 R_2\hat r_2}{R_1R_2\hat r_1\hat r_2\theta} - \frac{\langle\hat\alpha_k\rangle^2}{\gamma c_V\rho\theta} =$$

$$= \frac{\gamma(\langle\hat\alpha_k\rangle p + \hat\alpha_1 p_{*2} + \hat\alpha_2 p_{*1}) - \langle\hat\alpha_k\rangle^2(p+p_{*1})(p+p_{*2})/(c_V\rho\theta)}{\gamma(p+p_{*1})(p+p_{*2})} =$$

$$= \frac{\langle\hat\alpha_k\rangle p + \hat\alpha_1 p_{*2} + \hat\alpha_2 p_{*1} + \hat\alpha_1\hat\alpha_2\Delta_*^2/(c_V\rho\theta)}{\gamma(p+p_{*1})(p+p_{*2})} = \frac{(1-bp)(p-p_-)}{\gamma(p+p_{*1})(p+p_{*2})} = \frac{1}{\rho c_s^2}\cdot[0,1]$$

Детали преобразований опускаем.

Из утверждения 3 следует, что $c_s^2 \leqslant c_{sW}^2$. Отметим простое неравенство $c_{sW}^2 \leqslant \langle(\rho_k/\rho)c_{sk}^2\rangle$ для произвольных $c_{sk}^2 > 0$, $k = 1, 2$, где равенство достигается только в случае $r_1c_{s1}^2 = r_2c_{s2}^2$.

2. Применим к квазигомогенной модели формальную процедуру регуляризации, данную в [11] для однокомпонентного газа и где было показано, что она легко приводит к КГД регуляризации из [9]. Эта процедура была недавно применена в [10] к системе уравнений типа Эйлера динамики односкоростной и однотемпературной гомогенной газовой смеси. В уравнениях баланса (15), (2) и (3) заменим соответственно $\rho_k\mathbf{u} \to \rho_k\mathbf{u} + \tau\partial_t(\rho_k\mathbf{u})$ и

$$\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}) + \nabla p - \rho\mathbf{f} \to$$
$$\to \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u} + \tau\partial_t(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})) +$$
$$+ \nabla(p + \tau\partial_t p) - (\rho + \tau\partial_t\rho)\mathbf{f},$$
$$(E+p)\mathbf{u} \to (E+p)\mathbf{u} + \tau\partial_t((E+p)\mathbf{u}),$$
$$\rho\mathbf{u}\cdot\mathbf{f} \to (\rho\mathbf{u} + \tau\partial_t(\rho\mathbf{u}))\cdot\mathbf{f},$$

где $E = 0.5\rho|\mathbf{u}|^2 + \rho\varepsilon$ – полная энергия смеси и $\tau > 0$ – параметр регуляризации, который может зависеть от всех искомых функций. Также добавим слагаемые $\operatorname{div}\Pi^{NS}$ и $\operatorname{div}(\Pi^{NS}\mathbf{u})$ в правые части уравнений (2) и (3) с тензором вязкости типа Навье–Стокса

$$\Pi^{NS} = \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu\right)(\operatorname{div}\mathbf{u})\mathbb{I},$$
$$\nabla\mathbf{u} := \{\partial_i u_j\}_{i,j=1}^n,$$

с коэффициентами вязкости $\mu \geqslant 0$, $\lambda \geqslant 0$ (возможно, искусственными) и единичным тензором n-го порядка $\mathbb{I}$.

В совокупности все эти замены ведут от исходной системы типа Эйлера-Фурье (15), (2) и (3) к ее следующей КГД регуляризации

$$\partial_t\rho_k + \operatorname{div}(\rho_k(\mathbf{u} - \mathbf{w}_k)) = 0, \quad k = 1,2, \tag{22}$$

$$\begin{aligned}&\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho(\mathbf{u}-\mathbf{w})\otimes\mathbf{u}) + \nabla p = \\ &= \operatorname{div}\Pi + (\rho - \tau\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}))\mathbf{f},\end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned}&\partial_t E + \operatorname{div}((E+p)(\mathbf{u}-\mathbf{w})) = \\ &= \operatorname{div}(-\mathbf{q}^F - \mathbf{q}^\tau + \Pi\mathbf{u}) + \rho(\mathbf{u}-\mathbf{w})\cdot\mathbf{f} + Q\end{aligned} \tag{24}$$

с теми же неизвестными функциями. Эта система содержит регуляризующие скорости

$$\begin{aligned}&\mathbf{w}_k := \tau\rho_k^{-1}\operatorname{div}(\rho_k\mathbf{u})\mathbf{u} + \hat{\mathbf{w}}, \quad k = 1,2, \\ &\hat{\mathbf{w}} = \tau((\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} + \rho^{-1}\nabla p - \mathbf{f}),\end{aligned} \tag{25}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{w} := \left\langle\frac{\rho_k}{\rho}\mathbf{w}_k\right\rangle &= \frac{\tau}{\rho}\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u} + \nabla p - \rho\mathbf{f}) = \\ &= \frac{\tau}{\rho}\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})\mathbf{u} + \hat{\mathbf{w}},\end{aligned} \tag{26}$$

слагаемое $\Pi = \Pi^{NS} + \Pi^\tau$ и регуляризующие вязкое напряжение и поток тепла

$$\Pi^\tau := \rho\mathbf{u}\otimes\hat{\mathbf{w}} + \tau\left(\mathbf{u}\cdot\nabla p + \rho c_s^2\operatorname{div}\mathbf{u} - \frac{(1-b\rho)c_s^2}{c_p\theta}Q\right),$$
$$-\mathbf{q}^\tau := \tau(\mathbf{u}\cdot(\rho\nabla\varepsilon - \rho^{-1}p\nabla\rho) - Q)\mathbf{u},$$

где можно переписать $\rho\nabla\varepsilon - \rho^{-1}p\nabla\rho = \nabla(\rho\varepsilon) - \rho^{-1}(\rho\varepsilon + p)\nabla\rho$. Вывод повторяет рассуждения из Приложения А в [10] и отличается лишь использованием более общего уравнения баланса давления (20) (при $\varkappa = 0$) и общего слагаемого $\rho^{-1}p$ в выражении для $-\mathbf{q}^\tau$.

Регуляризованная КГД-система уравнений влечет дополнительные уравнения баланса массы, кинетической и внутренней энергий смеси

$$\partial_t\rho + \operatorname{div}(\rho(\mathbf{u}-\mathbf{w})) = 0, \tag{27}$$

$$\begin{aligned}&0.5\partial_t(\rho|\mathbf{u}|^2) + 0.5\operatorname{div}(\rho|\mathbf{u}|^2(\mathbf{u}-\mathbf{w})) + \mathbf{u}\cdot\nabla p = \\ &= (\operatorname{div}\Pi)\cdot\mathbf{u} + (\rho - \tau\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}))\mathbf{f}\cdot\mathbf{u},\end{aligned} \tag{28}$$

$$\begin{aligned}&\partial_t(\rho\varepsilon) + \operatorname{div}(\rho\varepsilon(\mathbf{u}-\mathbf{w})) + p\operatorname{div}\mathbf{u} = \\ &= \operatorname{div}(-\mathbf{q}^F - \mathbf{q}^\tau + p\mathbf{w}) + \Pi : \nabla\mathbf{u} - \rho\mathbf{f}\cdot\mathbf{w} + Q,\end{aligned} \tag{29}$$

которые выводятся аналогично соответствующим исходным уравнениям (17), (18).

Также остановимся на упрощенной регуляризованной КГидД системе уравнений

$$\partial_t\rho_k + \operatorname{div}\,(\rho_k(\mathbf{u}-\hat{\mathbf{w}})) = 0, \quad k = 1,2,$$

$$\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho(\mathbf{u}-\hat{\mathbf{w}})\otimes\mathbf{u}) + \nabla p =$$
$$= \operatorname{div}(\Pi^{NS} + \widehat{\Pi}^{\tau}) + \rho\mathbf{f},$$

$$\partial_t E + \operatorname{div}((E+p)(\mathbf{u}-\hat{\mathbf{w}})) =$$
$$= \operatorname{div}(-\mathbf{q}^F + (\Pi^{NS} + \widehat{\Pi}^{\tau})\mathbf{u}) + \rho(\mathbf{u}-\hat{\mathbf{w}})\cdot\mathbf{f} + Q,$$

с упрощенной регуляризующей скоростью $\hat{\mathbf{w}}$ вместо $\mathbf{w}$ во всех слагаемых, вязким напряжением $\widehat{\Pi}^{\tau} := \rho\mathbf{u}\otimes\hat{\mathbf{w}}$ вместо Π^{τ} и без регуляризующих слагаемых $\tau\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})$ и $-\mathbf{q}^{\tau}$. Верны и уравнения баланса типа (27)–(29) с теми же перечисленными упрощениями.

Для k-й компоненты удельная энтропия $s_k(r_k,\varepsilon_k)$ определяется термодинамическими уравнениями $\partial_{r_k}s_k = -p_k/(r_k^2\theta)$ и $\partial_{\varepsilon_k}s_k = 1/\theta$, $k = 1,2$; явное выражение для s_k опускаем. Удельная энтропия смеси s такова, что $\rho s = \langle\rho_k s_k\rangle$.

Утверждение 4. *Пусть $Q \geqslant 0$. Для регуляризованной КГидД системы уравнений верно уравнение баланса энтропии смеси с ее неотрицательным производством*

$$\partial_t(\rho s) + \operatorname{div}\left(\rho s(\mathbf{u}-\hat{\mathbf{w}}) + \frac{1}{\theta}\mathbf{q}^F\right) =$$
$$= \frac{1}{\theta}\left\{\frac{\mu}{2}|\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T|_F^2 + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu\right)(\operatorname{div}\,\mathbf{u})^2 + \right.$$
$$\left. + \frac{\varkappa}{\theta}|\nabla\theta|^2 + \frac{\rho}{\tau}|\hat{\mathbf{w}}|^2 + Q\right\} \geqslant 0,$$

где конкретные СГНА-уравнения состояния неважны и $|\cdot|_F$ — норма Фробениуса.

3. Обратимся к 1D случаю и введем равномерные основную $\overline{\omega}_h = \{x_i = -X + ih; 0 \leqslant i \leqslant N\}$ и вспомогательную $\omega_h^* = \{x_{i+1/2} = -X + (i+0.5)h; 0 \leqslant i \leqslant N-1\}$ сетки на $\overline{\Omega} = [-X, X]$, с шагом $h = 2X/N$, а также неравномерную сетку $\overline{\omega}^{h_t} = \{t_0 = 0 < t_1 < \ldots < t_{\overline{m}} = t_{fin}\}$ по времени с шагами $h_{tm} = t_{m+1} - t_m$. Пусть $\omega_h = \overline{\omega}_h\backslash\{-X, X\}$ и $\breve{\omega}^{h_t} = \overline{\omega}^{h_t}\backslash\{t_{fin}\}$.

Пусть $H(\omega)$ — пространство функций, заданных на сетке ω. Для $v \in H(\overline{\omega}_h)$, $w \in H(\omega_h^*)$ и $y \in H(\overline{\omega}^{\tau})$, введем разностные операторы

$$[v]_{i+1/2} = (v_i + v_{i+1})/2, \quad \delta v_{i+1/2} = (v_{i+1} - v_i)/h,$$
$$v_{\pm,i+1/2} = v_{i+(1\pm1)/2},$$

$$[w]_i^* = (w_{i-1/2} + w_{i+1/2})/2, \quad \delta^* w_i = (w_{i+1/2} - w_{i-1/2})/h,$$
$$\delta_t y^m = (y^{m+1} - y^m)/h_{tm},$$

где $v_i = v(x_i)$, $w_{i+1/2} = w(x_{i+1/2})$ и $y^m = y(t_m)$. Пусть далее $\hat{y}^m = y^{m+1}$.

Пусть для краткости $\mathbf{f} = 0$. Дискретизируем на $\omega_h \times \breve{\omega}^{h_t}$ регуляризованные КГД-уравнения баланса (22)–(24) в 1D случае следующей явной двухслойной по времени и трехточечной симметричной по пространству схемой

$$\delta_t\rho_k + \delta^*([\rho_k]([u] - w_k)) = 0, \quad k = 1,2, \tag{30}$$

$$\delta_t(\rho u) + \delta^*([\rho]([u] - w)[u] + [p]) = \delta^*\Pi, \tag{31}$$

$$\delta_t(0.5\rho u^2 + \rho\varepsilon) + \delta^*\{(0.5\rho u_- u_+ +$$
$$+ [\rho\varepsilon] + [p])([u] - w) - 0.25h^2(\delta p)\delta u\} =$$
$$= \delta^*(-q + \Pi[u]) + [Q]^*. \tag{32}$$

Основные искомые функции $\rho_1 > 0$, $\rho_2 > 0$, u и ε (фактически $\rho\varepsilon$) вместе с функциями p и θ определены на основной сетке $\overline{\omega}_h \times \overline{\omega}^{h_t}$. Здесь p и θ определяются формулами (16), см. также выражения (12) и (14) для их коэффициентов; напомним, что $d = b^2 + 4c$.

Возьмем следующие дискретизации регуляризующих скоростей (25), (26) в виде

$$w_k = \frac{[\tau]}{[\rho_k]}[u]\delta(\rho_k u) + \hat{w}, \quad k = 1,2,$$
$$\hat{w} = \frac{[\tau]}{[\rho]}([\rho][u]\delta u + \delta p),$$
$$w = \left\langle\frac{[\rho_k]}{[\rho]}w_k\right\rangle = \frac{[\tau]}{[\rho]}[u]\delta(\rho u) + \hat{w},$$

а также дискретизации вязкого напряжения и теплового потока в виде

$$\Pi = \nu\delta u + [u][\rho]\hat{w} +$$
$$+ [\tau]\left([u]\delta p + [\rho c_s^2]\delta u - \frac{(1 - [b\rho])[c_s^2]}{[c_p][\theta]}Q\right),$$

$$-q = \varkappa\delta\theta + [\tau]\{(\delta(\rho\varepsilon) -$$
$$- [\rho]^{-1}([\rho\varepsilon] + [p])\delta\rho)[u]^2 - Q[u]\}.$$

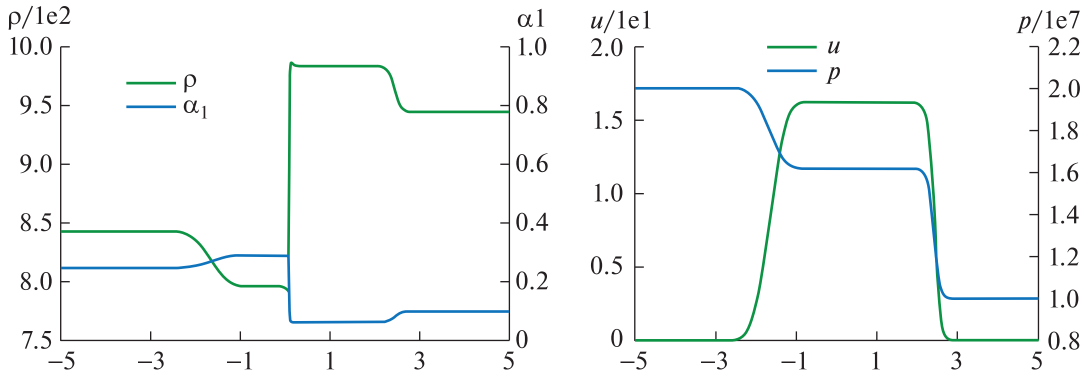

Рис. 1. Результаты расчета течения воды в воздух на основе КГД регуляризации.

Напомним, что c_s^2 задается второй формулой (19). Функции w_k, $\hat{w}$, w, Π, $\nu = (4/3)\mu + \lambda$, q, $\varkappa$ и Q определены на сетке $\omega_h^* \times \overline{\omega}^{h_t}$, а функция τ определена на $\overline{\omega}_h \times \overline{\omega}^{h_t}$. Возьмем регуляризующий параметр $\tau = ah/(c_s + i_\tau|u|)$, зависящий от h, и искусственные коэффициенты $\nu = a_S[\tau][p]$ и $\varkappa = a_{Pr}[\tau][c_p][p]$, формально как в случае однокомпонентного газа [9], где $a > 0$ — параметр, $a_S \geqslant 0$ и $a_{Pr}^{-1} > 0$ — числа Шмидта и Прандтля для смеси, используемые как настраиваемые численные параметры, и $i_\tau = 0$ или 1. Ниже $i_\tau = 0$.

Начальные значения ρ_1, ρ_2, u, $\rho\varepsilon$ (или эквивалентные им) при $t = 0$ задаются на $\overline{\omega}_h$. Можно найти $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$ из уравнения (30), $\hat{\rho}\hat{u}$ и затем $\hat{u}$ из уравнения (31), $0.5\hat{\rho}\hat{u}^2 + \widehat{\rho\varepsilon}$ и затем $\widehat{\rho\varepsilon}$ из уравнения (32), все на ω_h. В вычислениях ниже берем также граничные значения $\varphi_0 = \varphi_1$ и $\varphi_N = \varphi_{N-1}$ для $\varphi = \hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \hat{u}$ и $\widehat{\rho\varepsilon}$.

Построенная пространственная дискретизация заметно проще энтропийно корректной в случае гомогенной смеси идеальных газов в [10] (она базируется на [12]). Но дискретизация уравнения баланса (24) в [10] основана на регуляризованной КГД многоскоростной и многотемпературной модели, пока не разработанной для гетерогенных смесей. Также здесь используются только стандартные усреднения ρ_1, ρ_2, ε.

В уравнении (32) нестандартные слагаемые с u_u_+ (близкое к среднему геометрическому для u^2) и $-0.25h^2(\delta p)\delta u$ позволяют обеспечить более естественную форму важного дискретного уравнения баланса внутренней энергии смеси как в [12].

Утверждение 5. *Верны следующие дискретные аналоги уравнений баланса массы, кинетической и внутренней энергий смеси* (27)–(29)*:*

$$\delta_t\rho + \delta^* j = 0, \quad j := [\rho]([u] - w),$$

$$0.5\delta_t(\rho u^2) - 0.5h_t\hat{\rho}(\delta_t u)^2 + \\ + 0.5\delta^*(ju\_u_+) + (\delta^*[p])u = (\delta^*\Pi)u,$$

$$\delta_t(\rho\varepsilon) + 0.5h_t\hat{\rho}(\delta_t u)^2 + \delta^*(j[\varepsilon]) = \\ = -\delta^* q + [\Pi\delta u]^* - p\delta^*([u] - w) + [w\delta p]^* + [Q]^*$$

на $\omega_h \times \breve{\omega}^{h_t}$.

Применяется автоматический выбор шага по времени $h_{tm} = \beta_0 h/\max_i(c_{si}^m + |u_i^m|)$, $0 \leqslant m \leqslant \overline{m} - 1$ (при $m = \overline{m} - 1$ равенство становится неравенством) с параметром $\beta_0 > 0$ типа Куранта. Отметим, что условия L^2-диссипативности построенной схемы в случае однокомпонентного идеального газа следуют из результатов [13].

4. По построенной схеме было выполнено большое количество успешных тестовых расчетов. Здесь приведем результаты только двух из них, для краткости опустив единицы измерения величин. Во-первых, возьмем задачу об ударной трубе с течением воды в воздух, см. тест 4.4 в [14]. Рассматривается смесь идеального газа и воды как СГ, с постоянными идеального газа $(\gamma_1, R_1, p_{*1}) = (1.4,\ 288,\ 0)$ и постоянными СГ $(\gamma_2, c_{p2}, p_{*2}) = (2.8,\ 4186,\ 8.5 \times 10^8)$; здесь $b_k = \varepsilon_{0k} = 0$, $k = 1, 2$. Начальные данные таковы: $(\alpha_1, u, p, \theta) = (0.25, 0.2 \times 10^7, 308.15)$ при $-5 \leqslant x < 0$ и $(0.1, 0, 10^7, 308.15)$ при $0 < x \leqslant 5$. Взяты численные параметры $(N, a_S, a_{Pr}, a, \beta_0) = (2501, 1, 1, 4, 0.1)$. Функции ρ, α_1 и u, p при $t_{fin} = 0.006$ в качестве результатов показаны на рис. 1. Кроме того, массовая концентрация ρ_1/ρ кусочно-постоянна и равна примерно 0.6682 и 0.1193 слева и справа от разрыва. В данном тесте возможен и выбор $a_S = 0$, что лишь немного ухудшает качество вычисления ρ, α_1. Результаты для упрощенной схемы, отвечающей

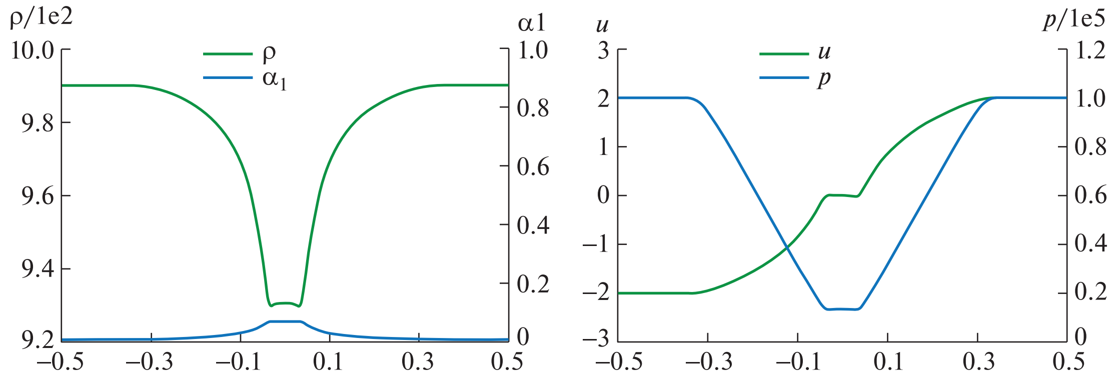

Рис. 2. Результаты расчета течения с кавитацией на основе КГидД регуляризации.

описанной выше КГидД регуляризации, существенно хуже, хотя числа Маха малы (меньше 0.065); в целом сфера ее успешной применимости заметно уже.

Во-вторых, промоделируем начальную стадию течения с кавитацией в трубе, см. тест 8.2.1 в [7]. Берутся две фазы воды, а именно, 1% водяного пара и 99% жидкой воды, и для них применяются соответственно уравнения состояния СГ и СГНА с параметрами $(\gamma_1, p_{*1}, \varepsilon_{01}, c_{V1}, b_1) = (1.467,\ 0,\ 2077616, 955, 0)$ и $(\gamma_2, p_{*2}, \varepsilon_{02}, c_{V2}, b_2) = (1.187,\ 7.028\times10^8, -1177788,\ 3610,\ 6.61\ \times\ 10^{-4})$. Начальные данные имеют вид $(\alpha_1, u, p, \theta) = (0.01, 2\operatorname{sgn}x,\ 10^5,\ 353)$ при $|x| \leqslant 0.5$. Выбраны численные параметры $(N, a_S, a_{Pr}, a, \beta_0) = (1001, 1, 1, 0.8, 0.2)$. В данной задаче числа Маха снова малы (меньше 0.07), и применение не только КГД, но и КГидД регуляризации было успешным. Результаты при $t_{fin} = 0.003$ продемонстрированы на рис. 2. На нем функции ρ, α_1, p являются четными, а u – нечетной. Кроме того, массовая концентрация ρ_1/ρ приближенно постоянна и равна $0.6416\ \times\ 10^{-5}$. В обоих тестах результаты хорошо согласуются с приведенными в указанных работах.

Более подробно результаты для смесей “сжатых” газов даны в [15]. Хорошо известно, что данная модель смесей довольно легко расширяется на важный случай с фазовыми переходами [4–7]; его вычислительный анализ на основе построенных регуляризаций должен стать предметом последующих статей.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-11-00126 (А.А. Злотник, разделы 1 и 2) и Московского центра фундаментальной и прикладной математики по соглашению с Минобрнауки РФ, проект 075-15-2022-283 (оба автора, разделы 3 и 4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Flåtten T., Morin A., Munkejord S.T.* // SIAM J. Appl. Math. 2010. V. 70. P. 2861–2882.
2. *Zhang C., Menshov I., Wang L., Shen Z.* // J. Comput. Phys. 2022. V. 466, article 111356.
3. *Le Métayer O., Saurel R.* // Phys. Fluids. 2016. V. 28. P. 046102.
4. *Le Martelot S., Saurel R., Nkonga B.* // Int. J. Multiphase Flow. 2014. V. 66. P. 62–78.
5. *Saurel R., Boivin P., Le Métayer O.* // Comput. Fluids. 2016. V. 128. P. 53–64.
6. *Chiapolino A., Boivin P., Saurel R.* // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2017. V. 83. P. 583–605.
7. *Pelanti M.* // Int. J. Multiphase Flow. 2022. V. 153, article 104097.
8. *Четверушкин Б.Н.* Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
9. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
10. *Zlotnik A., Lomonosov T.* // Entropy. 2023. V. 25, article 158.
11. *Злотник А.А.* // Матем. моделирование. 2012. Т. 24. № 4. С. 65–79.
12. *Злотник А.А.* // ЖВМиМФ. 2012. Т. 52. № 7. С. 1304–1316.
13. *Злотник А.А., Ломоносов Т.А.* // ДАН. 2018. Т. 482. № 4. С. 375–380.
14. *Li Q., Fu S.* // Comput. Math. Appl. 2011. V. 61. P. 3639–3652.
15. *Zlotnik A., Lomonosov T.* // Chaos. 2023. V. 33, article 113128.

REGULARIZED EQUATIONS FOR DYNAMICS OF THE HETEROGENEOUS BINARY MIXTURES OF THE NOBLE-ABEL STIFFENED-GASES AND THEIR APPLICATION

A. A. Zlotnik[a,b] **and T. A. Lomonosov**[a,b]

[a] *Higher School of Economics University, Moscow, Russia*

[b] *Federal Research Center Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Presented by Academician of the RAS B.N. Chetverushkin

We consider the so-called four-equation model for dynamics of the heterogeneous compressible binary mixtures with the Noble-Abel stiffened-gas equations of state. We exploit its quasi-homogeneous form arising after excluding the volume concentrations from the sought functions and based on a quadratic equation for the common pressure of the components. We present new properties of this equation and a simple formula for the squared speed of sound, suggest an alternative derivation for a formula relating it to the squared Wood speed of sound and state the pressure balance equation. For the first time, we give quasi-gasdynamic-type regularization of the heterogeneous model (in the quasi-homogeneous form), construct explicit two-level in time and symmetric three point in space finite-difference scheme without limiters to implement it in the 1D case and present numerical results.

Keywords: gas dynamics, heterogeneous binary gas mixture, four-equation model, Noble-Abel stiffened-gas, quasi-gasdynamic regularization, explicit in time and symmetric in space scheme