

УДК 519.6

КИНЕТИЧЕСКИЕ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ГАЗОДИНАМИКИ

А.В. Сафронов. ЦНИИМАШ. г. Королев, Московская обл.

Email: avsaftron@gmail.com

В численных решениях уравнений газодинамики, кроме аппроксимации интегральных законов сохранения массы, импульса и энергии необходимо выполнение условия неубывания энтропии, которое позволяет получить единственное решение задачи, однозначно определяемое начальными данными. Выполнение этого условия представляет собой проблему для численных расчетов. Убывание энтропии в решении гиперболических уравнений исключается введением искусственной вязкости по Нейману, применением метода Годунова с точным решением задачи Римана и с приближенными решениями, в которых схемная вязкость должна быть больше чем у точного, а также применением кинетического метода релаксации. В работе, на примере скалярного закона сохранения, проведен энтропийный анализ модификаций разностных схем типа Годунова. Предложены новые кинетические варианты численных методов для уравнений газодинамики на основе аппроксимации потоков на границе ячеек сетки с помощью приближенного решения задачи Римана из соотношений на разрывах. Приведена максимальная локальная оценка скоростей волн, обеспечивающая выполнение условия неубывания энтропии в численных расчетах. Подход обобщен для среды (газ, жидкость, металл) с двучленным уравнением состояния.

KINETIC INTERPRETATIONS OF NUMERICAL SCHEMES FOR THE GAS DYNAMICS EQUATIONS

In numerical solutions of the equations of gas dynamics, except approximation of conservation laws mass, momentum and energy, the entropy condition is necessary. Fulfillment of a condition of entropy provides uniqueness of the solution of the problem, unequivocally determined by the initial given and boundary conditions. This condition represents a problem for numerical calculations. Entropy decrease is excluded by introduction of artificial viscosity on Neumann. Application of a method of Godunov with exact the solution of Riemann problem, and with the approximate solutions in which schematic viscosity is more than at the exact. And also application of a kinetic method of a relaxation. In activity, on an example of the scalar law of preservation, it is conducted entropy analysis modifications of Godunov-type schemes. New kinetic versions of numerical methods for the gas dynamics equations are offered, on approximate Riemann solvers, from jump condition, with the maximum estimation of speeds of waves.

Введение.

Проблема энтропии в численном решении гиперболических уравнений является одной из важных проблем физики и математики. Закон неубывания энтропии отвечает за получение единственного решения задачи. Примем в численном решении, выполнение законов сохранения недостаточно для выполнения условия энтропии.. Решение энтропийной проблемы впервые предложено Дж. фон Нейманом [1] путем введения искусственной вязкости в уравнения, записанные в виде законов сохранения. Искусственная вязкость проявляется в градиентных зонах течения, «размазывая» разрывы.

При численном решении задач газодинамики методом Годунова эту роль играет схемная вязкость [2]. Метод Годунова 1 порядка, основанный на точном итерационном решении задачи Римана распада газодинамического разрыва, обладает минимальной схемной вязкостью обеспечивающей сквозной расчет сложных течений с разрывами, но

приводит к трудоёмким вычислениям. Кроме того, в ряде физических случаев, теоретическое решение задачи распада разрыва затруднительно. В этой связи широкое распространение получили методы на основе приближенного решения задачи Римана. К данному классу относятся известные схемы LxF (Lax-Friedrichs) [3,4], Русанова (1961) [5], HLL (Harten, Lax, Leer) [6], Roe (1981) [7], Холодова А.С. (1978), EO (Engquist – Osher,) [8,9], HLLC (Toro, Spruce, Speares, 1994) [10],[11]. Для выполнения энтропийного условия, схемная вязкость методов на основе приближенного решения задачи Римана должна быть выше, чем метода на основе точного решения. Доказательство этого представляет проблему для нелинейных уравнений.

Кардинальным решением энтропийных проблем в численном решении гиперболических уравнений, является применение кинетического метода релаксации, например [12,13,14,15,16]. В кинетическом варианте, искомая нелинейная гиперболическая система уравнений преобразуется в линейную систему с релаксационным источником. Кинетическая интерпретация численных методов, упрощает их энтропийный анализ [15,14,16].

Сравнительный анализ численных методов на основе решения задачи Римана и других подходов, применяемых для задач газодинамики можно найти, например, в работах [17,18,19,20].

Интенсивное развитие методов Годунова связано с повышением порядка вычислений на основе применения процедур интерполяции параметров к граням ячейки сетки с ограничителями, обеспечивающими монотонность схемы. Первый такой ограничитель предложен Колганом [21], изложение теории и обзор вариантов можно найти, например, в работах [17–19,22,23]. Отметим, что повышение порядка аппроксимации уменьшает различие между методами на основе точного и приближенных решений задачи Римана. После интерполяции к граням ячейки (реконструкции), параметры на границе ячейки в схемах повышенного порядка вычисляются аналогично схеме 1 порядка, из задачи распада разрыва. Поэтому в первую очередь необходимо выполнение условия неубывания энтропии в численных схемах 1 порядка, которые анализируются в настоящей работе.

Дадим краткую характеристику методов, с аппроксимацией потоков на границе ячеек сетки на основе на приближенного решения задачи Римана о распаде газодинамического разрыва, с начальными параметрами, соответствующими состояниям газа в соседних ячейках сетки. Схематически начальный разрыв газа с различными состояниями в левом и правом полупространстве распадается на три волны: левую волну, контактный разрыв и правую волну. Обозначим их скорости W_L , W_* и W_R , соответственно. Левые и правые волны могут быть в зависимости от начального перепада давления, как волнами разрежения, так и волнами сжатия (скачками). Точное решение задачи Римана единственно, зависит от автомодельной переменной, скорости волн удовлетворяют неравенству $W_L < W_* < W_R$. Кроме того, заданной функции потока (компонентам вектора потока) отвечают два решения: одно соответствует дозвуковому случаю, другое сверхзвуковому. Поэтому можно представить, что функция потока уравнений газодинамики при переходе из одного состояния в другое в автомодельной задаче распада разрыва обладает свойством выпуклости [17].

Метод EO [8,9] основан на решении задачи Римана в изоэнтропическом приближении. В этом случае решение безытерационное, но требует аналитического выражения характеристических соотношений и по трудоемкости не намного меньше точного с реализацией быстро сходящихся итераций Ньютона. Причем изоэнтропическое решение задачи Римана в случае наличия скачков, нарушает свойство выпуклости функции потока уравнений газодинамики. Тем не менее, схема EO основанная на нахождении экстремумов в звуковых точках с добавлением

дополнительной диссипации в их окрестности не допускает убывания энтропии [8,9]. Однако подход имеет ограничение в случае интенсивных скачков.

Сеточно-характеристическая схема Roe [7] уникальна тем, что при определенном осреднении параметров, поток на границе ячеек соответствует линеаризованному решению задачи о распаде разрыва в конфигурации с двумя ударными волнами, с выполнением соотношений на одиночных разрывах. Схема хорошо зарекомендовала себя при расчете течений с ударными волнами и контактными разрывами, однако имеет известные энтропийные проблемы (появление нефизических скачков) в расчете зон разрежения при смене знака характеристик. Для устранения этого недостатка разработаны различные процедуры энтропийной коррекции, связанные с добавлением диссипации, обзор и анализ которых можно найти в работах [17,18]. В работе [24] предложен эффективный способ стабилизации схемы Roe, на основе свойства выпуклости функции потока.

Методы LxF, Русанова, HLL интерпретируются как двухволновые схемы с учетом разрывов типа левой и правой ударных волн, без рассмотрения контактного разрыва. В схеме LxF используется максимальная оценка скоростей волн во всей расчетной области, в схеме Русанова применяется локальный максимум, по параметрам в соседних ячейках сетки. В схеме HLL предложен более эффективный способ выбора скоростей движения левой и правой волн, по максимальным наклонам соответствующих характеристик в соседних ячейках разностной сетки. При этом веер волн разрежения заменяется скачком, со скоростью распространения соответствующей максимальному наклону характеристик в этой волне разрежения. За счет максимальной оценки волн, двухволновые схемы исключили энтропийные проблемы. Однако двухволновое допущение приводит к значительному "размазыванию" контактного разрыва.

С целью устранения этого недостатка в схеме HLLC (C-contact) [10], впервые предложен способ учета контактного разрыва в задаче распада разрыва, при выборе скоростей левой и правой волны аналогично схеме HLL. В классическом варианте HLLC [10] скорость контактного разрыва вычисляется из звукового приближения. В работе [11] приведено уточнение определения скорости контактного разрыва и применен выбор скоростей распространения левой и правой волн при распаде разрыва аналогично HLLC [25]. Развитием метода HLLC, является работа [16], в которой предложен кинетический вариант метода и проведен энтропийный анализ способов выбора скоростей волн. В работе [26] предложен подход HLLC-типа на основе приближенного решения задачи Римана из соотношений на разрывах выражающих законы сохранения для уравнений газодинамики в Лагранжевых массовых переменных. В этом случае задача о распаде разрыва упрощается тем, что решается в "простых" переменных, а параметрами являются массовые скорости (скорости потока массы) через поверхности левой и правой волн. Важно, что относительно скорости и давления, схема в Лагранжевых переменных является двухволновой, причем массовые скорости через левую и правую волну не меняют своего знака, и их выбор, исходя из максимальной оценки, согласно [16], обеспечивает выполнение условия неубывания энтропии, при вычислениях параметров в ячейках разностной сетки. Диссипативные свойства схемы при этом, как в зонах разрежения, так и на скачках несколько превышают свойства схемы с точным решением задачи Римана, однако вычисления очень экономичны. Схемы HLLC-типа получили широкое применение [18], обобщены на случай МГД уравнений, например [27,28], а также на сверхзвуковой стационарный случай течения газа, с приближенным решением задачи Римана в массовых переменных [29].

Необходимо отметить, что все методы на основе решения задачи Римана с учетом контактного разрыва, включая метод Годунова с точным решением, имеют проблемы в пространственном случае, когда касательная к граням ячейки компонента скорости

значительно больше нормальной – «карбункул»-эффект, например [30]. При этом в двухволновых схемах (без учета контактного разрыва) этот эффект проявляется в меньшей степени [30].

Из рассматриваемых методов, доказанным является выполнение условия неубывания энтропии в газодинамических расчетах по схемам LxF, Годунова, Русанова, HLL, EO [6,8,15,37], HLLC в кинетической интерпретации [16] и в массовых переменных [26,29] с выбором скоростей [16].

В настоящей работе, в разделе 1, на примере скалярного закона сохранения с выпуклой функцией потока, с помощью подхода E-flux [9], проиллюстрирован энтропийный анализ рассматриваемых схем, проанализированы варианты добавления контактного разрыва в двухволновые схемы, а также другие модификации алгоритмов.

В разделе 2 приведены кинетические интерпретации новых численных алгоритмов для уравнений газодинамики.

В разделе 3 подход обобщен на случай среды с двучленным уравнением состояния.

1. Энтропийный анализ разностных схем типа Годунова.

В качестве примера, на котором можно проиллюстрировать характер модификаций разностных схем, рассмотрим задачу Коши для скалярного закона сохранения:

$$u_t + f_x = 0, \quad (1)$$

$$u(x,0)=u_0(x), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < T,$$

с выпуклой функцией потока $f(u)$. Для определенности примем $f''(u) > 0$.

В случае гладких решений функция $u(x,t)$ постоянна вдоль характеристик:

$$\frac{dx}{dt} = f'(u)$$

Уравнение (1) может иметь разрывные решения – ударные волны, скорость которых s определяется соотношением Ренкина–Гюгонио:

$$f(u_+) - f(u_-) = s(u_+ - u_-)$$

Энтропийное условие допустимости разрыва Олейник [32] получено на основе концепции "исчезающей вязкости", согласно которой вместо уравнения (1) рассматривается уравнение

$$u_t^\varepsilon + (f(u^\varepsilon))_x = \varepsilon u_{xx}^\varepsilon, \quad (2)$$

и находится решение $u = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u^\varepsilon$.

Условие Олейник заключается в том, что, при $s > 0$, характеристическая скорость за разрывом должна быть больше скорости распространения разрыва, а характеристическая скорость перед разрывом меньше:

$$f'(u_-) > s > f'(u_+).$$

Разностную схему для уравнения (1) запишем в консервативном виде:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma(f_{i+1/2} - f_{i-1/2}). \quad (3)$$

Где $\sigma = \frac{\Delta t}{\Delta x}$, n –номер шага по времени с интервалом Δt , i –номер ячейки сетки по

оси x с разбиением Δx .

В методах типа Годунова поток на границе ячеек $f_{i+1/2}$ вычисляется из решения задачи распада разрыва с начальными данными, соответствующими параметрам в соседних ячейках сетки $(i, i+1)$. При этом схема устойчива при числе Куранта $CFL = s_{\max} \sigma < 1$, где, s_{\max} –максимальная скорость распространения возмущений в расчетной области.

Как упомянуто, кроме выполнения законов сохранения, для единственности численного решения необходимо выполнение энтропийного закона. Условие,

обеспечивающее неубывание энтропии в ячейках сетки в численных расчетах, являющееся следствием теоремы Олейник, введено Ошером [9]. Это условие (E-flux), которое необходимо выполнять при аппроксимации потока на границе ячеек ($f_{i+1/2}^E$) имеет вид

$$\frac{f_{i+1/2}^E - f(u)}{u_{i+1} - u_i} \leq 0, \forall u \in [u_i, u_{i+1}]. \quad (4)$$

Поток метода Годунова на границе ячеек ($f_{i+1/2}^{\text{Годунов}}$), который вычисляется из точного решения задачи распада разрыва с начальными данными, соответствующими параметрам в соседних ячейках сетки и может быть представлен в виде [9]:

$$f_{i+1/2}^{\text{Годунов}} = \begin{cases} \min_{u \in [u_i, u_{i+1}]} f(u), & u_i < u_{i+1} \\ \max_{u \in [u_i, u_{i+1}]} (f(u)), & u_i > u_{i+1} \end{cases} \quad (5)$$

Поток метода Годунова удовлетворяет условию E-flux, причем

$$\begin{aligned} f^E &\leq f^{\text{Годунов}}, & u_i < u_{i+1} \\ f^E &\geq f^{\text{Годунов}}, & u_i > u_{i+1} \end{aligned} \quad (6)$$

С целью сравнительного анализа диссипативных свойств различных схем, разностное уравнение (3) представляется в виде соответствующем аппроксимации уравнения (2) с вязкостью

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2} (f_{i+1} - f_{i-1}) + \frac{1}{2} Q_{i+1/2} (u_{i+1} - u_i) - \frac{1}{2} Q_{i-1/2} (u_i - u_{i-1}), \quad (7)$$

где Q представляет собой величину схемной вязкости

$$Q_{i+1/2} = \sigma \left(\frac{f_{i+1} + f_i - 2f_{i+1/2}}{u_{i+1} - u_i} \right) \quad (8)$$

При этом аппроксимация потока на границе ячеек выражается следующим образом

$$f_{i+1/2} = \frac{f_{i+1} + f_i}{2} - \frac{1}{2\sigma} Q_{i+1/2} (u_{i+1} - u_i) \quad (9)$$

Схемная вязкость метода Годунова представляется в виде [9]:

$$Q_{i+1/2}^{\text{Годунов}} = \sigma \max_{u \in [u_i, u_{i+1}]} \left(\frac{f_{i+1} + f_i - 2f(u)}{u_{i+1} - u_i} \right) \quad (10)$$

Энтропийному условию удовлетворяют методы, в которых при аппроксимации потока на границе ячеек, схемная вязкость больше схемной вязкости метода Годунова [33]:

$$Q_{i+1/2} \geq Q_{i+1/2}^{\text{Годунов}} \quad (11)$$

что аналогично выполнению условия E-flux (4).

Согласно [33] рассматриваемые численные схемы монотонны и устойчивы при выполнении условия CFL и в случае:

$$Q_{i+1/2}^{\text{Roe}} \leq Q_{i+1/2} \leq Q_{i+1/2}^{\text{LxF}} \equiv 1 \quad (12)$$

Здесь $Q_{i+1/2}^{\text{Roe}} = \sigma |f'_{i+1/2}|$ – схемная вязкость потока Roe [7], $Q_{i+1/2}^{\text{LxF}}$ – схемная вязкость метода LxF [3,4], принимающая максимальное значение.

Приведем сравнительный анализ величин схемной вязкости методов на основе приближенного и точного решений задачи распада разрыва.

Ниже рассматриваются параметры на границе ячейки сетки, индекс "L" относится к i -ой ячейке сетки, индекс "R" к $i+1$ -ой, индекс " $i+1/2$ " к параметрам на границе этих ячеек.

Схемная вязкость потока EO [8,9] имеет вид

$$Q_{i+1/2}^{EO} = \sigma \frac{\int_{u_L}^{u_R} |f'(u)| du}{u_R - u_L} \tag{13}$$

Согласно [9] поток EO, удовлетворяет условию E-flux.

Схемы HLL, Русанова и LxF представляются из соотношений Рэнкина–Гюгонио записанных для двух скачков (см. рис.1):

$$(f^* - f_L) = s_L(u^* - u_L), \quad (f^* - f_R) = s_R(u^* - u_R) \tag{14}$$

Здесь s_L, s_R – скорости левой и правой волн, соответственно. Причем $s_L < s_R$.

Аппроксимация потока на границе ячеек из соотношений (14) имеют вид:

$$f_{i+1/2} = f^* = \frac{f_L s_R - f_R s_L + s_L s_R (u_R - u_L)}{s_R - s_L} \tag{15}$$

При этом:

$$u_{i+1/2} = u^* = \frac{u_R s_R - u_L s_L - f_R + f_L}{s_R - s_L} \tag{16}$$

Для определения скоростей волн используются следующие варианты

$$s_R = -s_L = 1/\sigma, \tag{17}$$

$$s_R = -s_L = \max(|f'_L|, |f'_R|) \tag{18}$$

$$s_L = \min(0, \inf(f'_L, f'_R)), \quad s_R = \max(0, \sup(f'_L, f'_R)) \tag{19}$$

В случае (17) поток (15) представляют схему LxF [3,4]. В этой схеме используется максимальная оценка скоростей волн по всей расчетной области. Заметим, что в этом случае поток $f(u^*)$ из (16) отвечает схеме 2-го порядка LxW [34].

При вычислении скоростей волн согласно (18), поток (15) представляют схему Русанова [5], в которой применяется локальный максимум скоростей волн.

При выборе (19) аппроксимации потока на границе ячеек (14) соответствуют схеме HLL [16].

Отметим, что диссипативные свойства рассматриваемых схем пропорциональны скоростям волн.

Рассмотрим случай смены знака производной функции $f(u)$, при $u_R > u_L$. Этот случай является аналогом волны разрежения и характерен для исследования энтропийных проблем. Геометрическая интерпретация потоков рассматриваемых схем представлена на рис.1.

В соответствии с (5)-(6), поток на границе ячеек схемы Годунова соответствует минимуму функции $f(u)$ на рассматриваемом интервале, а схемы удовлетворяющие условию E-flux находятся ниже этого уровня, как показано на рис.1.

В данном случае поток EO (13) совпадает с потоком Годунова.

Поток HLL находится в зоне E-flux, на пересечении касательных к функции $f(u)$ в точках (u_L, f_L) и (u_R, f_R) . Потоки Русанова и LxF находятся также в зоне E-flux ниже потока HLL, поскольку линии проведенные из точек (u_L, f_L) и (u_R, f_R) в этих схемах ближе к вертикали чем в методе HLL. Очевидно выбор скоростей волн (17)–(19) обеспечивает выполнение условия неубывания энтропии в схемах LxF, Русанова и HLL, для любой выпуклой функции $f(u)$.

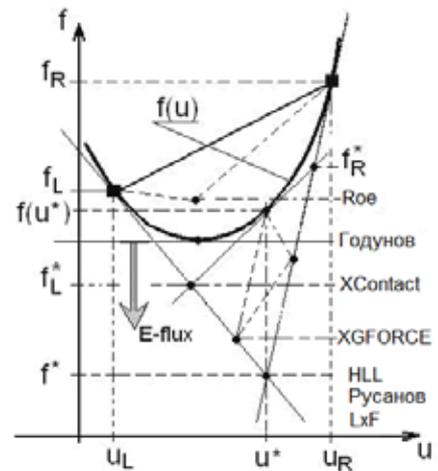


Рис.1. Энтропийный E-flux анализ

В случае смены знака характеристик ($f_L^* < 0, f_R^* > 0$), поток Roe, как показано на рис.1, не удовлетворяет энтропийному условию.

Согласно [33] и данных рис.1, известные потоки по величине схемной вязкости располагаются следующим образом

$$Q_{i+1/2}^{Roe} \leq Q_{i+1/2}^{Годунов} \leq Q_{i+1/2}^{EO} \leq Q_{i+1/2}^{HLL} \leq Q_{i+1/2}^{Русанов} \leq Q_{i+1/2}^{LxF} \equiv 1$$

На рис.1. показан возможный способ добавления третьей волны, аналога контактного разрыва, с выполнением условия E-flux. Алгоритм заключается в следующем: по параметрам u^* , полученным по формуле (16), находится наклон касательной в этой точке $s^*=f'(u^*)$, вычисляется поток $f(u^*)$, и далее определяется искомое решение, находящееся на пересечении данной касательной линии с линиями, обозначающими левую и правую волны. Потоки, отвечающие этому решению на рис. 1 обозначены f_L^* и f_R^* , а переменные u_L^* и u_R^* соответственно. Для этого случая можно записать следующие соотношения на разрывах:

$$(f_L^* - f_L) = s_L(u_L^* - u_L), \quad (f_R^* - f_R) = s_R(u_R^* - u_R), \quad (f_R^* - f_L^*) = s_*(u_R^* - u_L^*) \quad (20)$$

При этом, в силу выпуклости функции $f(u)$, выполняются неравенства

$$s_L < s_* = f'(u^*) < s_R \quad (21)$$

Выбор аппроксимации на границе ячеек зависит от знака s_* :

$$f_{i+1/2} = f_L^*, \text{ при } s_* > 0 \text{ и } f_{i+1/2} = f_R^*, \text{ при } s_* < 0.$$

В итоге, решение задачи на основе соотношений (20) можно представить в виде

$$f_{i+1/2} = f^* + \omega[f(u^*) - f^*] \quad (22)$$

Здесь

$$\omega = \omega_{\text{contact}} = \min\left(\frac{-s_L}{s_* - s_L}, \frac{s_R}{s_R - s_*}\right) \quad (23)$$

На рис. 1 данные потоки обозначены XContact, X – означает способ выбора скоростей волн соответствующий схемам LxF, Русанова, HLL (17)–(19). Из рис.1 видно, что одно из пересечений касательной к функции $f(u)$ в точке $(u^*, f(u^*))$ с линиями, обозначающими левую и правую волны, при выпуклой функции $f(u)$, в случае $f_L^* < 0, f_R^* > 0$, всегда будет лежать ниже минимума этой функции. Т.е. потоки XContact удовлетворяют энтропийному условию E-flux.

Из анализа соотношений (22),(23) и рис. 1 выявлена следующая возможность модернизации двухволновых схем. Если в качестве скорости средней волны s_* принять предельные значения, т.е. из точки $(u^*, f(u^*))$ провести линии параллельные линиям, которые соответствуют левой и правой волне, то получим следующее значение параметра ω в (22):

$$\omega = \omega_{\text{GFORCE}} = \min\left(\frac{-s_L}{s_R - s_L}, \frac{s_R}{s_R - s_L}\right) \quad (24)$$

При выборе $s_R = -s_L = s_{\text{max}}$, полученная схема (15),(16),(22),(24) соответствует схеме GFORCE [35], поэтому параметр ω обозначен ω_{GFORCE} .

В случае определения скоростей волн, при вычислении параметра ω_{GFORCE} , и потоков (15),(16),(22) согласно схемам Русанова (18) и HLL(19) получатся новые варианты схемы GFORCE. На рис.1 положение данных потоков обозначено XGFORCE. Из геометрии видно, что полученные схемы удовлетворяют условию E-flux. Потоки XGFORCE, основанные на максимальной оценке скорости средней волны (рис.1), которая всегда выше скорости контактного разрыва, "размазывают" контактный разрыв, но их схемная вязкость меньше чем потоков при $\omega=0$ (LxF, Русанов, HLL).

Исходя из вышеизложенного, предложенные модификации (XContact и XGFORCE) численных методов, по величине схемной вязкости можно расположить следующим образом

$$Q_{i+1/2}^{Roe} \leq Q_{i+1/2}^{Годунов} \leq Q_{i+1/2}^{EO} \leq Q_{i+1/2}^{XContact} \leq Q_{i+1/2}^{XGFORCE} \leq Q_{i+1/2}^{HLL} \leq Q_{i+1/2}^{Русанов} \leq Q_{i+1/2}^{LxF} \equiv 1$$

В соответствии с (12) данные схемы устойчивы и монотонны.

В общем случае, при выборе параметра ω в диапазоне $0 \leq \omega \leq \omega_{\text{contact}}$ схемы (15),(16),(22) с выбором скоростей (17)–(19) удовлетворяет условию E-flux, поэтому возможны и иные варианты, например $\omega = (\omega_{\text{FORCE}} + \omega_{\text{Contact}})/2$.

Проиллюстрируем схемы на численном решении уравнения (1) с функцией потока $f = u^2/2$, и следующими начальными данными: $t=0$, $u = -1$, при $x < 0.5$ и $u=2$, при $0.5 < x < 1$.

Результаты расчетов в момент времени $t=0.108$ в сравнении с точным решением приведены на рис.2. В схеме с тремя волнами (15),(16),(22) использовался выбор скоростей левой и правой волны HLL (19) и этот вариант обозначен на графике HLLC.

Как и ожидалось, двухволновая схема HLL (15),(19) сильнее сглаживает особенности, чем схемы Годунова и HLLC. Схема HLLC не имеет энтропийных проблем и результаты близки к схеме Годунова. Как видно, схема Roe реализует нефизический разрыв.

На данном примере следует подчеркнуть следующее. В схемах на основе приближенного решения задачи распада разрыва и не допускающих убывание энтропии, схемная вязкость (8) выше, чем в схеме на основе точного решения, при этом поток на границе ячейки

(9), в случае, показанном рис.1 меньше чем точный. Однако, например, при функции потока $f = u^2/2$ точное значение потока в рассматриваемом примере $f=0$. Таким образом, при аппроксимации потока на границе ячеек с помощью приближенных схем, может возникнуть отрицательная величина, при положительной функции потока. На первый взгляд это физически неверно. Однако это к этому факту приводит составляющая схемной вязкости аппроксимации потока на границе (9), а в расчетах параметров в ячейке сетки, которые представлены в виде (7), получаются результаты, отвечающие энтропийному условию.

Таким образом, появление отрицательных величин, при аппроксимации положительной функции потока на границе ячеек в зонах разрежения (при $u_x < 0$), в рассматриваемых методах, свидетельствует об избыточности схемной вязкости (8), и не приводит к убыванию энтропии при вычислениях параметров в ячейках сетки. В этой связи непосредственное извлечение энтропии из аппроксимации потока на границе ячеек (9) (который включает в себя составляющую схемной вязкости), как это предлагается в работе [36] для контроля численного решения уравнений газодинамики проблематично для практического применения.

В данном случае ($f = u^2/2$), когда известен минимум функции потока $f=0$, энтропийно обосновано (см. рис. 1) применение численного ограничителя (fix) на аппроксимацию потока на границе ячеек сетки

$$f_{i+1/2} = \max(f_{i+1/2}, \text{fix}), \quad \text{fix} = 1.E-6.$$

В работах [24,31], показана эффективность применения такого fix для уравнений газодинамики, при аппроксимации потока импульса на границе ячеек $(\rho u^2 + P)_{i+1/2}$ в расчете зон разрежения.

Приведенный энтропийный анализ был представлен на конференции [37].

2. Кинетические интерпретации численных методов для уравнений газодинамики.

Изложим кратко основные положения кинетического метода релаксации решения гиперболических уравнений на примере скалярного закона сохранения (1).

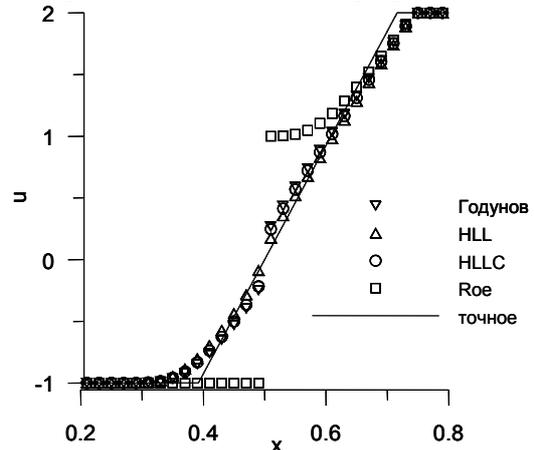


Рис.2. $u_1 = -1, u_2 = 2, t = 0.108, CFL = 0.9$.

Кинетический метод релаксации решения гиперболических уравнений в варианте [12,13,38] состоит в замене нелинейного гиперболического уравнения (1) следующей линейной гиперболической системой с релаксационным источником:

$$u_t + q_x = 0 \quad (25)$$

$$q_t + \lambda^2 u_x = (f(u) - q) / \varepsilon, \quad (26)$$

где q – новая переменная, ε – время релаксации.

При $\varepsilon \rightarrow 0$ решение релаксационной системы, с начальными условиями $q=f$ при $t=0$ соответствует решению уравнения (1).

Решение системы (25) – (26) отвечает приближению Чапмена–Энскога

$$u_t + f_x = \varepsilon (\beta u_x)_x + O(\varepsilon^2), \quad (27)$$

$$\beta = \lambda^2 - (f'(u))^2$$

Время релаксации ε играет роль искусственной вязкости.

Аппроксимация параметров на границах ячеек разностной сетки при решении уравнений (25)–(26), основана на "субхарактеристиках" этой системы:

$$q' \pm \lambda u' = 0, \quad \frac{dx}{dt} = \pm \lambda$$

Параметр λ – субхарактеристическая скорость системы (25)–(26).

Основой данного кинетического подхода является выбор параметра λ , обеспечивающий выполнение условия $\beta > 0$.

Характеристические скорости в кинетическом варианте не меняют знака, и решение не имеет энтропийных проблем (см. например [12,16,38]). Кроме того, в соответствии с приближением Чапмена–Энскога (27) решение системы (25)–(26) соответствует концепции исчезающей вязкости (2).

В упрощенном случае, алгоритм расчета состоит в следующем [12,14]: решается линейная система (25)–(26) без правой части, затем полагается мгновенная релаксация $q^{n+1} = f(u^{n+1})$. Данный алгоритм, удовлетворяющий энтропийному условию (при $\beta > 0$) и получил название двухшаговая кинетическая схема [12,14].

Отметим, что отрицательное значение аппроксимации величины q на границах ячейки сетки не запрещается в случае положительной функции $f(u)$.

В ряде работ, например [14,15,16] подход (25)–(26) применен для уравнений газодинамики. Однако при переходе от (25)–(26) к уравнениям газодинамики (u, q, f – векторы, λ – матрица), учет контактного разрыва затруднителен.

Далее рассмотрим алгоритм численного решения уравнений газодинамики, на основе работы [16], в которой представлен кинетический вариант с учетом контактного разрыва, и показан способ выбора субхарактеристик, обеспечивающий условие неубывания энтропии.

Рассмотрим двумерный случай, в расщеплении по оси x .

Согласно [16] система релаксации для уравнений газодинамики представляется в следующем виде:

$$U_t + F_x = R, \quad (28)$$

где:

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho w \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho \pi \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho w^2 + \pi \\ \rho w v \\ \rho E w + \pi w \\ \rho \pi w + m^2 w \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho [P(U) - \pi] / \varepsilon \end{bmatrix}$$

Здесь: U – вектор консервативных переменных, F – вектор потока, R – релаксационный источник, ρ – плотность газа, w – нормальная к грани ячейки компонента

скорости, v – касательная к грани ячейки компонента скорости, $E = e + w^2/2 + v^2/2$ – полная энергия на единицу объема, $e = P/\rho/(\gamma - 1)$ – внутренняя энергия, P – давление, γ – показатель адиабаты, m – субхарактеристическая массовая скорость, π – "псевдодавление" (при $t=0$, $\pi=P$).

На основании энтропийного анализа, приведенного в работе [16], величина m выбирается, исходя из условия $m > \rho c$, где $c = (\gamma P/\rho)^{1/2}$ – скорость звука.

При $\varepsilon \rightarrow 0$, псевдодавление $\pi \rightarrow P$ и расширенная система (28) переходит в исходные уравнения Эйлера.

Применим метод численного решения релаксационной системы (28) [12,14]:

1) На первом этапе решается система

$$U_t + F_x = 0, \quad (30)$$

полученные новые величины обозначим \hat{U} .

2) Параметры на следующем шаге по времени U^{n+1} находятся из решения системы уравнений

$$\begin{aligned} \rho_t = 0, (\rho w)_t = 0, (\rho E)_t = 0, (\rho v)_t = 0, \\ \pi_t = \frac{1}{\varepsilon} (P(U) - \pi), \end{aligned}$$

следующим образом

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} = \hat{\rho}, w^{n+1} = \hat{w}, E^{n+1} = \hat{E}, v^{n+1} = \hat{v}, P^{n+1} = (\gamma - 1)\hat{\rho}(\hat{E} - \hat{w}^2/2 - \hat{v}^2/2), \\ \pi^{n+1} = P^{n+1} + \exp(-\Delta t/\varepsilon)(\hat{\pi} - P^{n+1}) \end{aligned} \quad (31)$$

3) Согласно двухшаговой кинетической схеме [12,14], в предельном случае мгновенной релаксации $\varepsilon \rightarrow 0$, вместо уравнения (31), на каждом шаге счета полагается

$$\pi^{n+1} = P^{n+1} \quad (32)$$

Аппроксимацию потоков на границе ячеек, при численном решении системы (30), проведем на основе на решении задачи Римана с помощью соотношений на субхарактеристиках линейной системы (30), которые имеют вид [16]:

$$m w' + \pi' = 0, \quad \text{при} \quad \frac{dx}{dt} = W_L = w_L - m/\rho_L, \quad (33)$$

$$m w' - \pi' = 0, \quad \text{при} \quad \frac{dx}{dt} = W_R = w_R + m/\rho_R, \quad (34)$$

$$(1/\rho)' + \frac{\pi'}{m^2} = 0, \quad e' - \frac{(\pi^2)'}{2m^2} = 0, \quad v' = 0, \quad \text{при} \quad \frac{dx}{dt} = W_* = w_*. \quad (35)$$

В двухшаговом алгоритме с мгновенной релаксацией, согласно (32): $\pi_L = P_L$, $\pi_R = P_R$.

В работе [26] (подробнее в разделе 3) выражения, аналогичные (33)–(35), получены из соотношений на разрывах для уравнений газодинамики в Лагранжевых переменных и введены различные значения параметра m , которые соответствуют массовым скоростям через поверхности левой $m_L = \rho_L(w_L - W_L)$ и правой $m_R = \rho_R(W_R - w_R)$ волн. При этом решение рассматриваемой задачи Римана принимает вид:

$$W_* = w_L^* = w_R^* = \frac{m_R w_R + m_L w_L - P_R + P_L}{m_L + m_R}, \quad (36)$$

$$\pi^* = \pi_L^* = \pi_R^* = \frac{m_L P_R + m_R P_L - m_L m_R (w_R - w_L)}{m_L + m_R}, \quad (37)$$

$$(1/\rho)_K^* = (1/\rho)_K - \frac{\pi^* - P_K}{m_K^2}, \quad (38)$$

$$e_K^* = e_K + \frac{(\pi^*)^2 - (P_K)^2}{2m_K^2}, \quad (39)$$

$$v_K^* = v_K. \quad (40)$$

При $W_L \geq 0$, поток на границе ячеек $F_{i+1/2} = F_L$, в случае $W_R \leq 0$, $F_{i+1/2} = F_R$. Ниже рассматривается случай $W_L \leq 0$, $W_R \geq 0$.

В этом случае алгоритм расчета состоит в следующем. По параметрам, полученным из формул (36)-(40) находится полная энергия $E_K^* = e_K^* + W_*^2/2 + v_K^2/2$, определяются компоненты вектора консервативных переменных $U_K^* = \{\rho_K^*, \rho_K^* W_*, \rho_K^* v_K, \rho_K^* E_K^*\}^T$, и далее, из соотношений на разрывах, вычисляется аппроксимация потока на границе ячейки сетки:

$$F_{i+1/2} = F_K^* = F_K - W_K(U_K^* - U_K), \quad (41)$$

где индекс K , в зависимости от знака скорости W_* принимает значение L или R .

При этом соотношение (32) заменяет последнее уравнение системы (28) и речь идет о **кинетической интерпретации приближенного решения задачи Римана**.

В случае (32), такой же результат, что и вычисления с помощью (41), дает более экономичный алгоритм вычисления аппроксимации потока на границе ячеек $F_{i+1/2}$, непосредственно по полученным из (36)–(40) величинам ρ, w, v, e, π [26,29].

Необходимо отметить, что в кинетической интерпретации, внутренняя энергия определяется из соотношений (39), (37), причем, энтропия, согласно [16], вычисляется по этой внутренней энергии и плотности полученной с помощью (38):

$$S_K^* = (\gamma - 1)e_K^* (\rho_K^*)^{1-\gamma}. \quad (42)$$

Алгоритм (37)–(41) отличается от "звукового" приближения [2], в котором давление, скорость и плотность вычисляются с помощью линеаризации соотношений (36)–(38), а внутренняя энергия находится из уравнения состояния по полученным величинам давления и плотности. В связи с этим имеется принципиальное различие энтропии в кинетической интерпретации (42), от энтропии [36] вычисленной по давлению и плотности, аналогично "звуковому" приближению, которая в данном случае представляется в виде $S_\pi = \pi/\rho^\gamma$. Рассмотрим качественно это различие.

Приращение энтропии (42) $dS = (\gamma - 1)e \rho^{-\gamma} = P/\rho^\gamma$, согласно (33)–(35), можно выразить следующим образом:

$$dS = \frac{de + Pd(1/\rho)}{T} = \frac{(P - \pi)}{T} d\left(\frac{1}{\rho}\right) = \frac{S - S_\pi}{T} \rho^\gamma d\left(\frac{1}{\rho}\right), \quad (43)$$

здесь T – температура.

Как видно из (43), убывание S_π в зонах разрежения $S_\pi \leq S$, при $d(1/\rho) > 0$, приводит к возрастанию энтропии в кинетической интерпретации. В этой связи, выводы работы [36] основанные на исследовании S_π , не применимы к рассматриваемому подходу, подробное энтропийное обоснование которого дано в работе [16].

С целью уточнения выбора параметра m , приведем анализ энтропии (42).

Из уравнений (38)–(39), отношение энтропии $S = (\gamma - 1)e \rho^{1-\gamma}$ на границе ячеек сетки, к энтропии в соответствующей ячейке представим в виде:

$$y = \frac{S_K^*}{S_K} = \left[1 + \frac{(\gamma - 1)(x^2 - 1)}{2\gamma b} \right] \left(1 - \frac{x - 1}{\gamma b} \right)^{\gamma - 1},$$

где $x = \frac{\pi^*}{P_K}$, $b = \left(\frac{m}{\rho_K c_K} \right)^2$, ($K=R$ или L).

Знак производной функции $y(x)$ определяется выражением:

$$y' \propto (x-1) \left(b - \frac{\gamma+1}{2\gamma} x - \frac{\gamma-1}{2\gamma} \right)$$

В случае волны разрежения $x < 1$, при выборе параметра $b=1$, производная $y' \propto -(x-1)^2 < 0$, и функция $y > 1$. Т.е., условие $m_K = \rho_K c_K$ обеспечивает неубывание энтропии в расчете зон разрежения.

В случае ударной волны $x > 1$. При условии выбора параметра b больше точного значения на ударной волне $b > \frac{\gamma+1}{2\gamma} x + \frac{\gamma-1}{2\gamma}$, производная $y' > 0$, и функция y возрастает $y > 1$.

Таким образом, в обоих случаях, получился предсказуемый результат: энтропия возрастает в случае определения величины параметра m **выше точного значения массовой скорости.**

Рассмотрим волну, обращенную вправо (поток газа через нее вдоль оси x направлен справа налево), и некоторые свойства перехода из состояния газа до разрыва "+" в состояние после "-".

В случае ударной волны, в соответствии с теоремой Олейник и теоремой Цемплена в газодинамике, справедливы следующие неравенства:

$$u_- + c_- > W > u_+ + c_+,$$

$$\rho_- c_- > \rho_+ (u_- - u_+ + c_-) > M > \rho_+ c_+$$

где M – плотность потока массы через поверхность волны, W – скорость волны.

Если правая волна является волной разрежения, максимальное значение скорости распространения возмущения определяется характеристикой перед волной $u_+ + c_+$, и максимальное значение массовой скорости равно $\rho_+ c_+$.

Таким образом, значение массовой скорости правой волны превышающее точное можно вычислить по формулам:

$$M_{\max} = \max(\rho_+ c_+, \rho_- c_-),$$

$$\text{или } M_{\max} = \rho_+ [\max(u_+ + c_+, u_- + c_-) - u_+]$$

Для левой волны соотношения аналогичны.

Исходя из этих оценок и результатов работы [16], параметр m системы (28) можно принять максимальным по массовым скоростям в соседних ячейках сетки:

$$m = \max(\rho_L c_L, \rho_R c_R) \quad (44)$$

Отметим, что выражения (36), (37) аналогичны (16), (17), а выбор (44) соответствует (18).

Однако, вычисления с помощью (44) не всегда обеспечивают выполнение условия $W_L < W_R$. Кроме того, в расчетах сильных зон разрежения, формулы (44) приводят к очень большим значениям скоростей волн [16], превышающим характеристическую скорость перед волной. С учетом этого, в работе [26] введены различные значения параметра m , соответствующие левой и правой волне m_L и m_R . Этот подход подробнее представлен в разделе (3).

В итоге, рекомендуется следующий алгоритм выбора скоростей волн в задаче (36)–(40), отвечающий условию неубывания энтропии:

1) вычисляются скорости левой и правой волны, согласно выбору метода HLL [6] по наклонам характеристик (характеристическим скоростям):

$$W_L = \min(w_L - c_L, w_R - c_R), \quad W_R = \max(w_L + c_L, w_R + c_R), \quad (45)$$

этот выбор обеспечивает выполнение энтропийного условия $m_L \geq \rho_L c_L$, и $m_R \geq \rho_R c_R$ в зонах разрежения, а также условия $W_L > W_R$, при этом скорость волны разрежения определяется характеристикой перед волной.

2) условие (44) применяется, в случае конфигураций с ударными волнами, когда скорость волны, рассчитанная с помощью массовой скорости (44), превышает оценку по наклонам характеристик (45):

$$W_L = w_L - \rho_R c_R / \rho_L, \text{ при } w_L - \rho_R c_R / \rho_L < w_R - c_R < w_L - c_L, \quad (46)$$

$$W_R = w_R + \rho_L c_L / \rho_R, \text{ при } w_R + \rho_L c_L / \rho_R > w_L + c_L > w_R + c_R \quad (47)$$

Оценка скоростей волн (46),(47) приводит к дополнительному размазыванию скачка ~ на 1 ячейку сетки, и в схемах без учета контактного разрыва не обязательна.

Методы, описанные для скалярного закона сохранения в разделе 1 (15),(16),(22),(23),(24), применяются для системы (30), путем замены величины u на вектор консервативных переменных U , величины f на вектор потока F , а значения скоростей волн s_L, s_* и s_R соответственно на W_L, W_* и W_R .

Поток $F(U^*)$ вычисляется следующим образом:

$$F(U^*) = W_* U^* + Q^*, \text{ где } Q^* = \{0, \pi^*, 0, \pi^* W_*, m_L m_R W_*\}^T \quad (48)$$

Как видно из (43), для параметра π^* (37), энтропийно обосновано применение fix , аналогичного в разделе 1.

В случае (48), расчеты с учетом контактного разрыва по формулам (15),(16),(22),(23), отвечают решению задачи (36)–(40), с аппроксимацией потоков (41). Причем, уравнения в виде (22), полученные из соотношений на разрывах (20) универсальны, в зависимости от выбора скоростей волн W_R, W_L и способа вычисления параметра ω , включают в себя схемы LxF, HLL, Русанова, их вариантов с учетом контактного разрыва (XC), и модификаций типа XGFORCE с максимальной оценкой скорости средней волны. Следует подчеркнуть, что все перечисленные подходы энтропийно обоснованы. Обобщение на трехмерный пространственный случай не представляет проблемы.

В работе [31] к виду (22) приведена и схема Roe [7], полученный алгоритм с выбором скоростей левой и правой волн согласно HLL [25], на ударных волнах точно соответствует методу Roe.

В рассматриваемом подходе, двухволновые схемы LxF, Русанова и HLL ($\omega=0$) совпадают с их кинетическим вариантом.

В случае учета контактного разрыва, или применения подхода типа GFORCE, параметр π^* участвует в вычислении потока $F(U^*)$. В этой связи, схемы с учетом контактного разрыва, с выбором скоростей (45)–(47), и схемы типа GFORCE с (45) обозначим соответственно HLLCK и KGFORCE, где K обозначает kinetic.

Заметим, что в кинетической интерпретации, при вычислении потока $F(U^*)$, не требуется уравнение состояния. Вместе с этим в схеме GFORCE [35], давление рассчитывается с привлечением уравнения состояния по компонентам вектора консервативных переменных, что усложняет обобщение метода [35] на расчеты с переменным показателем адиабаты.

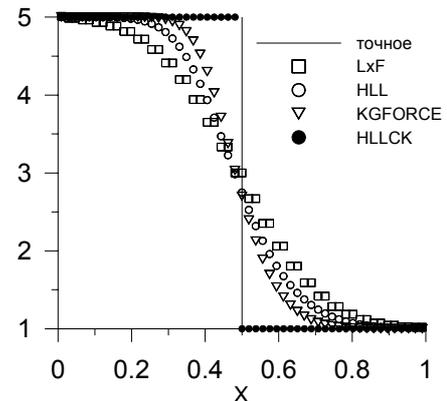


Рис. 3. $\rho_1=5.0, \rho_2=1.0, w_1=w_2=0, P_1=P_2=1.0, t=1.2, CFL=0.9$.

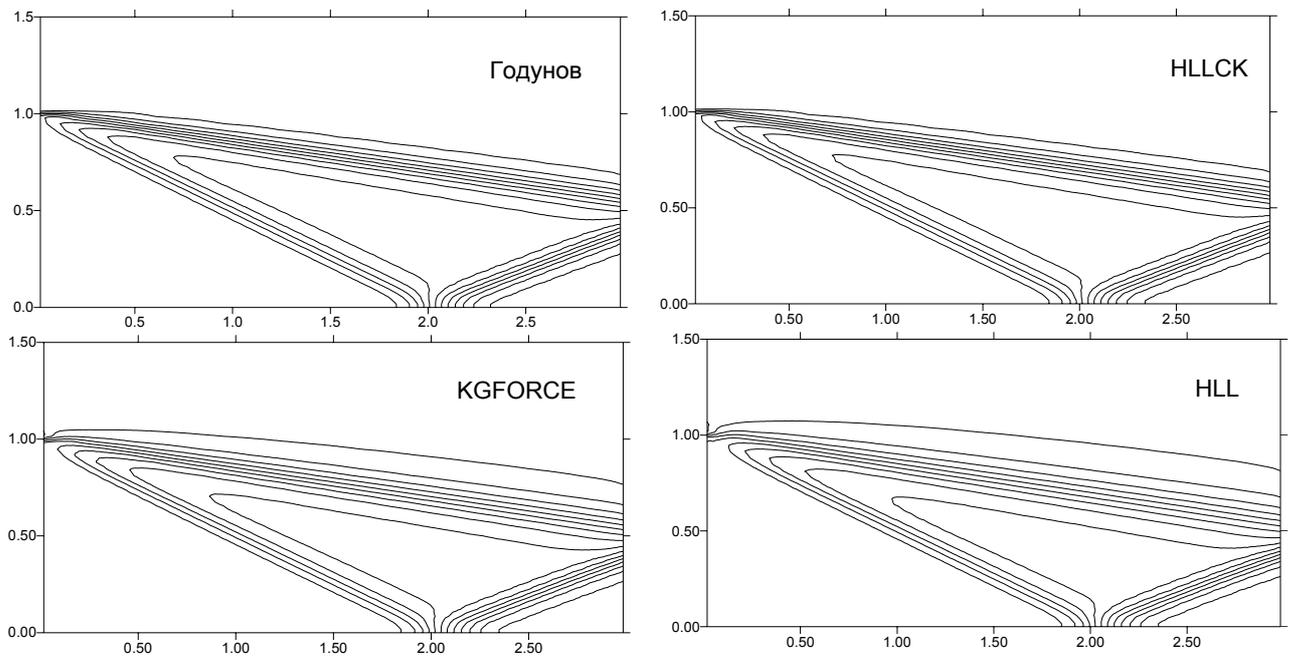


Рис.4. Изолинии плотности. Затопленная плоская струя.
 $Ma=3$, $n_a=0.5$. Сетка $J_a=20$. 2-ой порядок. $CFL=0.9$.

С целью иллюстраций, на рис. 3 приведены результаты расчетов неподвижного контактного разрыва по изложенным схемам.

Начальные данные: $\rho_1=5.0$, $\rho_2=1.0$; $w_1=w_2=0$; $P_1=P_2=1.0$. $x_0=0.5$.

Результаты расчетов при $CFL=0.9$ в момент времени $t=1.2$ приведены на рис. 3. Из рис.3 видно, что применение модификации KGFORCE с выбором скоростей левой и правой волн по HLL (45), как и ожидалось, приводит к меньшему размазыванию контактного разрыва, чем схема HLL.

На рис. 4 даны изолинии плотности из расчетов сверхзвуковой плоской струи воздуха, истекающей в затопленное пространство. Параметры на срезе сопла: число Маха $Ma=3$, отношение давления на срезе (P_a) сопла к внешнему давлению (P_e) $n_a=P_a/P_e=0.5$. Струя истекает справа на лево, срез сопла от 0 до 1 по вертикальной оси. Расчетная область занимала 1.5×3.0 радиусов выходного сечения сопла ($R_a=1$). Использовалась прямоугольная сетка с количеством разбиений на радиус срез сопла $J_a=20$. На срезе сопла задавался сверхзвуковой поток, на горизонтальной границе условия симметрии (стенка), на гранях ячеек примыкающих к свободным границам, потоки задавались из решения задачи Римана с параметрами соответствующими состояниям в примыкающей ячейке и невозмущенной внешней среды. На рисунке 5 показана сходимость по времени в виде изменения логарифма максимального (в расчетной области) приращения плотности за шаг счета в зависимости от количества шагов счета по времени (итераций). Расчеты проводились по схемам Годунова, HLL, а также по предложенным HLLCK и KGFORCE с повышением порядка методом Колгана-Родионова.

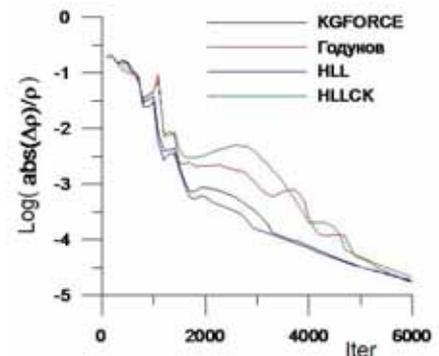


Рис.5. Сходимость по времени

Из рис.4 видно, что в потоке образуется скачок, который затем отражается от горизонтальной оси симметрии, а выше скачка от кромки сопла возникает контактный разрыв. Таким образом, разрывы проходили поперек ячеек сетки и рассчитывались сквозным образом (без выделения).

Из данных рис.4. видно, что результаты расчетов по схеме HLLCK учитывающей контактный разрыв при аппроксимации потоков на границе ячеек сетки, близки к схеме Годунова.

Как видно, схемы KGFORCE и HLL ударные волны рассчитывают практически так же, как схемы Годунова и HLLCK, вместе с этим, контактный разрыв «размазывают» сильнее. Однако здесь следует подчеркнуть, что в случаях «карбункул»-эффекта [30], схемы типа KGFORCE и HLL предпочтительнее схем с контактным разрывом типа Годунова и HLLCK.

Заметно (рис.3,4), что схема KGFORCE меньше «размазывает» контактный разрыв, чем HLL.

Результаты методических расчетов приведены в также работах [26,29,31].

Представленные методы реализованы в расчете струйных течений [39].

Ниже, приведенные кинетические подходы с мгновенной релаксацией, обобщены для среды с двучленным уравнением состояния.

3. Обобщение схемы на случай решения уравнений гидродинамики с двучленным уравнением состояния.

С целью упрощения практического применения, в этом разделе приведено полное описание подхода, независимо от разделов 1-2, без ссылок на формулы предыдущих разделов, поэтому ниже нумерация формул приведена независимо.

Рассмотрим описание схемы с учетом контактного разрыва, на примере двумерных уравнений гидродинамики в расщеплении по оси x :

$$U_t + F_x = 0, \quad (1)$$

$$\text{где } U = \{\rho, \rho u, \rho v, \rho E\}^T, \quad F = \{\rho u, \rho u^2 + P, \rho uv, \rho uE + Pu\}^T.$$

Здесь ρ -плотность вещества, u -компонента скорости по оси x (нормальная к грани ячейки), v -компонента скорости касательная к грани ячейки), P -давление, $E = \varepsilon + u^2/2 + v^2/2$ – полная энергия.

Среда подчиняется двучленному уравнению состояния [2], согласно которому внутренняя энергия единицы массы ε :

$$\varepsilon = \frac{P + \gamma P_0}{(\gamma - 1)\rho} - \frac{c_0^2}{\gamma - 1}, \quad (2)$$

где $P_0 = \rho_0 c_0^2 / \gamma$, γ , ρ_0 , c_0 – некоторые постоянные величины.

При этом скорость звука:

$$c^2 = \gamma(P + P_0) / \rho, \quad (3)$$

и энтропийная функция:

$$S = \frac{P + P_0}{\rho^\gamma} = \frac{(\gamma - 1)(\rho\varepsilon - P_0) + \rho c_0^2}{\rho^\gamma}. \quad (4)$$

Разностную схему запишем в виде:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}), \quad (5)$$

где n -номер шага по времени с интервалом Δt , i -номер ячейки сетки по оси x с разбиением Δx .

В методе Годунова [2] поток на границе ячеек $F_{i+1/2}$ вычисляется из точного решения задачи Римана распада произвольного разрыва с параметрами, соответствующими состояниям вещества в соседних ячейках сетки. При этом схема монотонна и устойчива при числе Куранта $CFL = W_{\max} \Delta t / \Delta x < 1$, где W_{\max} -максимальная скорость распространения возмущений.

Предложенный метод, состоит в расчете потока на границе ячеек путем приближенного решения задачи Римана с использованием соотношений на поверхности разрывов:

$$\Delta F = W \Delta U \quad , \quad (6)$$

где W -скорость распространения разрыва, символ Δ обозначает разность значений соответствующей величины на разрыве.

Основная идея метода состоит в применении выражений законов сохранения массы, импульса и энергии на поверхности газодинамического разрыва (6) в виде соответствующем уравнениям (1) в Лагранжевых переменных:

$$\Delta m = 0 \quad , \quad (7)$$

$$m \Delta E + \Delta(Pu) = 0 \quad , \quad (8)$$

$$m \Delta u + \Delta P = 0 \quad , \quad (9)$$

$$m \Delta v = 0 \quad ,$$

где m – массовая скорость (плотность потока вещества) через поверхность разрыва:

$$m = \rho(u - W) \quad (10)$$

На контактном разрыве $m=0$, в этом случае выражения (8,9) имеют вид:

$$\Delta P = 0 \quad , \quad (11)$$

$$\Delta u = 0 \quad (12)$$

Применительно к волнам разрежения $m \sim \rho c$ (c -скорость звука).

Обозначим индексами: L - параметры в левой ячейке сетки (зона 1), R- в правой (зона 2), L с верхним "*" - в зоне 3 между левой волной и контактном разрывом, R с верхним "*" - в зоне 4 между контактном разрывом и правой волной как показано на схеме течения (рис.6). Поскольку на контактном разрыве $m=0$, **решение задачи зависит от двух параметров** - массовых скоростей (скорость потока массы) через левую и правую волну m_L и m_R соответственно. Условимся считать данные массовые скорости положительными.

Решение задачи Римана на основе соотношений (7)-(12) имеет вид:

$$W_* = u_L^* = u_R^* = (u_R m_R + u_L m_L - P_R + P_L) / (m_L + m_R) \quad , \quad (13)$$

$$P_* = P_R^* = P_L^* = [P_R m_L + P_L m_R - m_L m_R (u_R - u_L)] / (m_L + m_R) \quad , \quad (14)$$

$$1/\rho_K^* = 1/\rho_K - (P_* - P_K) / m_K^2 \quad , \quad (15)$$

$$\varepsilon_K^* = \varepsilon_K + (P_*^2 - P_K^2) / m_K^2 / 2 \quad , \quad (16)$$

$$v_K^* = v_K \quad , \quad (19)$$

где $K=L,R$

Скорости левой и правой волн определяются согласно (10) следующим образом:

$$W_L = u_L - m_L / \rho_L \quad , \quad (21)$$

$$W_R = u_R + m_R / \rho_R \quad (22)$$

В формулах (13)–(22) индексы соответствуют номеру зоны на схеме течения (рис.6). Соотношения (16),(18) получены из (8),(9) с помощью следующих преобразований

$$m \Delta E + \Delta(Pu) = m \Delta \varepsilon + P \Delta u = m \Delta \varepsilon - P \Delta P / m \quad .$$

Когда скорость распространения контактного разрыва $W_* \geq 0$ (рис.6), при скорости

левой волны $W_L \geq 0$ параметры на границе ячеек равны параметрам в зоне 1, а при $W_L < 0$ - параметрам в зоне 3. Если $W_* < 0$, то при скорости правой волны $W_R \leq 0$ - параметры на границе ячеек равны параметрам в зоне 2, а при $W_R > 0$ параметрам в зоне 4. При $W_L < 0, W_R > 0$ алгоритм расчета потока на границе ячеек сетки следующий: по найденным с помощью формул (13)–(20) величинам ρ, u, v, ε определяется вектор консервативных переменных $U = \{\rho, \rho u, \rho v, \rho \varepsilon + \rho u^2/2 + \rho v^2/2\}^T$ в зонах 3 и 4 (U_L^* и U_R^*). Затем с помощью соотношений на разрывах (6) для левой или правой волны, в зависимости от зоны рис.6, вычисляется поток $F_{i+1/2}$:

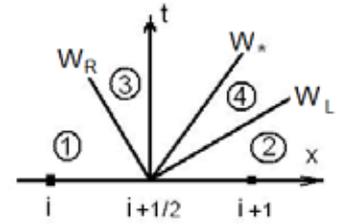


Рис.6. Схема течения

$$F_{i+1/2} = \begin{cases} F_L^* = F_L + W_L(U_L^* - U_L), & W_* \geq 0 \\ F_R^* = F_R + W_R(U_R^* - U_R), & W_* < 0 \end{cases} \quad (23)$$

Полученная схема потоковая, и основными переменными являются составляющие вектора U , которые вычисляются по величинам ρ, u, v, ε найденным из формул (13)–(20). Проведем исследование энтропии, вычисленной с помощью этих параметров.

В начале покажем, что плотность положительна. Из уравнений (7),(21) запишем $u_L - m_L/\rho_L = u_* - m^*/\rho_L^* = W_L$, отсюда $\rho_L^* = m_L/(W_* - W_L)$, и поскольку вычисления в зоне 3 рис.6 проводятся в случае $W_* \geq 0, W_L < 0$, следовательно $\rho_L^* > 0$. Для области 4 рис.6 доказательство $\rho_R^* > 0$ аналогично.

Проанализируем отношение энтропии (4) в зоне 3 (см. рис.6) вычисленной по энергии (16) и плотности (15) к энтропии в левой ячейке сетки:

$$y(x) = \frac{S_L^*}{S_L} = \left[1 + \frac{(\gamma - 1)(x^2 - 1)}{2\gamma b} \right] \left(1 - \frac{x - 1}{\gamma b} \right)^{\gamma - 1},$$

где $x = \frac{P_* + P_0}{P_L + P_0}, b = \left(\frac{m_L}{\rho_L c_L} \right)^2$.

Производная функции $y(x)$ определяется выражением:

$$y' = Z(x - 1) \left(b - \frac{\gamma + 1}{2\gamma} x - \frac{\gamma - 1}{2\gamma} \right),$$

где $Z = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma b^2} \right) \left(1 - \frac{x - 1}{\gamma b} \right)^{\gamma - 2} = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma b^2} \right) \left(\frac{\rho_L}{\rho_L^*} \right)^{\gamma - 2} > 0$

В случае волны разрежения давление уменьшается $x < 1$, и при $b = 1$, производная $y' = -Z \left(\frac{\gamma + 1}{2\gamma} \right) (x - 1)^2 < 0$, а функция $y > 1$. Т.е., условие $m_L = \rho_L c_L$ обеспечивает неубывание энтропии в случае левой волны разрежения (отметим, что даже и при $x < 0$). В случае ударной волны давление возрастает $x > 1$, и при условии выбора параметра b больше точного значения на ударной волне $b > \frac{\gamma + 1}{2\gamma} x + \frac{\gamma - 1}{2\gamma}$, производная $y' > 0$, а функция y возрастает $y > 1$. Отсюда следует, что в предложенном приближенном решении, исключается убывание энтропии, в случае определения величины параметра m выше точного значения массовой скорости.

Рассмотрим волну, обращенную вправо (поток газа через нее вдоль оси x направлен справа налево), и некоторые свойства перехода из состояния вещества до разрыва "+" в состояние после "-". В случае ударной волны, для уравнений (1), с уравнением

состояния (2), аналогично теореме Цемплена для идеального газа, справедливы следующие неравенства [2]:

$$u_+ + c_- > W > u_+ + c_+, \text{ и } \rho_- c_- > \rho_+ (u_- - u_+ + c_-) > M > \rho_+ c_+$$

где M – плотность потока массы через поверхность волны, W – скорость волны. Если правая волна является волной разрежения, максимальное значение скорости распространения возмущения, также как в идеальном газе, определяется характеристикой перед волной $u_+ + c_+$, и максимальное значение массовой скорости равно $\rho_+ c_+$.

Отсюда, значение массовой скорости правой волны превышающее точное можно вычислить по формулам:

$$M_{\max} = \max(\rho_+ c_+, \rho_- c_-), \text{ или } M_{\max} = \rho_+ [\max(u_+ + c_+, u_- + c_-) - u_+]$$

Для левой волны соотношения аналогичны.

Исходя из приведенных оценок, параметры m_1 и m_2 можно принять максимальным по массовым скоростям в соседних ячейках сетки:

$$m_L = m_R = \max(\rho_L c_L, \rho_R c_R) \quad (24)$$

Однако, в расчетах сильных зон разрежения, формулы (24) приводят значениям скоростей волн (21),(22), превышающим характеристическую скорость перед волной. Поэтому, рекомендуется следующий алгоритм выбора массовых скоростей в задаче (13)–(22), отвечающий условию неубывания энтропии:

1) вычисляются массовые скорости левой и правой волны, по максимальным наклонам характеристик:

$$m_L = \rho_L \max(c_L, c_R + u_L - u_R), m_R = \rho_R \max(c_R, c_L + u_L - u_R) \quad (25)$$

этот выбор обеспечивает выполнение энтропийного условия $m_L \geq \rho_L c_L$, и $m_R \geq \rho_R c_R$ в зонах разрежения, а также условия $W_R > W_L$, при этом скорость волны определяется характеристикой перед волной.

2) выбор (24) применяется в случае конфигурации с ударными волнами, когда массовая скорость, вычисленная по формуле (24), превышает оценку по наклонам характеристик (25):

$$m_L = \rho_R c_R, \text{ при } \rho_R c_R > \rho_L (c_R + u_L - u_R) > \rho_L c_L, \quad (26)$$

$$m_R = \rho_L c_L, \text{ при } \rho_L c_L > \rho_R (c_L + u_L - u_R) > \rho_R c_R \quad (27)$$

Из (16),(18) следует, что энергия положительна $\varepsilon_K > 0$ ($K=3$ или 4) при условии $m_K^2 > \frac{\gamma-1}{2\gamma} \rho_K^2 c_K^2$. Очевидно, что это условие выполняется при выборе параметра m_K по формулам (25-27).

Вместо формул (23) возможен и более простой алгоритм вычисления потока $F_{i+1/2}$, непосредственно по величинам $\rho, u, v, \varepsilon, P$ полученным из (13)–(20):

$$F_{i+1/2} = W_* U_K + Q_* \quad (29)$$

где индекс $K=3$, при $u_* \geq 0$ и $K=4$, при $u_* < 0$, а $Q_* = \{0, P_*, 0, P_* W_*\}^T$.

Здесь возникают сомнения [36], обусловленные тем, что поскольку найденные величины $\rho_K, W_*, v_K, \varepsilon_K, P_*$ подчиняются уравнению состояния не строго, а в линеаризованном виде, возникают две возможности вычисления энтропии: по плотности и энергии (как принято в настоящей работе), а также по плотности и давлению, как в работе [36]. При этом в работе [36], энергия вычисляется из уравнения состояния по плотности и давлению, т.е., практически исследуется «звуковое» приближение. В пользу определения энтропии по плотности и энергии свидетельствует анализ схемы в кинетической интерпретации в разделе 2, подтвержденный тестовыми расчетами в предельных сочетаниях параметров [26,29]. Кроме того, вследствие выполнения соотношений (6)–(9), вычисления с помощью формул (23) и (29) дают одинаковый результат. Т.е. по существу схема является потоковой, поэтому основными параметрами являются компоненты вектора

консервативных переменных, которые вычисляются по $\rho_K, W_*, v_K, \varepsilon_K$. Причем, как показано, схема положительно определена по плотности и энергии.

В случае алгоритма (29), для параметра P_* вычисленного по формуле (14), как показано в разделах 1-2, энтропийно обосновано применение ограничения:

$$P_* = \max(P_* + P_0, \text{fix}) - P_0, \text{ где } \text{fix} = 1.E-6.$$

Изложенный алгоритм применяется для аппроксимации потоков на границах соседних внутренних ячеек разностной сетки, а для вычисления параметров на гранях ячеек прилегающих к границе расчетной области рекомендуются процедуры, основанные на точном решении соответствующих модельных задач, согласно идеям работы [2].

Как показали расчеты задач газодинамики [26,29], приведенный метод имеет широкий диапазон применения и существенно сокращает время счета по отношению к схеме с точным решением задачи Римана. Верхняя оценка скоростей волн (24)–(26) в вычислениях с 1-ым порядком аппроксимации, приводит к дополнительному "размазыванию" особенностей на ~ 1 ячейку сетки, по сравнению со схемой Годунова. Однако повышение порядка аппроксимации с помощью монотонных процедур экстраполяции параметров к граням ячеек сетки, например [21], уменьшает это различие. Приведенный алгоритм не требует привлечения уравнения состояния при аппроксимации потока на границе ячейки сетки, что облегчает применение схемы на случай расчетов с переменными теплофизическими свойствами.

Таким образом, методы аппроксимации потока на границе ячеек на основе приближенного решения задачи Римана, представленные в разделе 2 обобщаются на случай среды с двучленным уравнением состояния только соответствующим изменением вычисления скорости звука в среде, которая участвует в оценке скоростей волн.

Представленный подход на основе формул (25-29), интерпретируется как метод на основе приближенного решения задачи Римана в массовых переменных, с энтропийно согласованной максимальной локальной оценкой скоростей волн.

Заключение.

Приведены модификации численных методов решения уравнений газодинамики на основе приближенного решения задачи Римана из соотношений на разрывах.

Предложены новые способы учета контактного разрыва и алгоритм с максимальной скоростью средней волны в методах с верхней оценкой скоростей левой и правой волн.

На примере скалярного закона сохранения с выпуклой функцией потока, а также на основе кинетической интерпретации для уравнений газодинамики, дано энтропийное обоснование предложенных модификаций

Обоснован выбор скоростей волн в приближенном решении задачи распада разрыва, исходя из максимальной локальной оценки, обеспечивающий выполнение условия неубывания энтропии в численных расчетах.

Подход обобщен для расчета течений среды (газ, жидкость, металл), для которой термодинамические величины подчиняются двучленному уравнению состояния. Показано, что схема положительно определена по плотности и энергии.

Литература

1. Meumann J., Richtmyer R. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks// J.Appl. Phys. 1950, 21, №3, 232-237.
2. Численное решение многомерных задач газовой динамики. Под редакцией С.К. Годунова. Москва:Наука. 1976.
3. К. О. Friedrichs. Symmetric hyperbolic linear differential equations// Comm. Pure Appl. Math. 7, 345 (1954).

4. P. D. Lax. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation// *Comm. Pure Appl. Math.* 7, 159 (1954).
5. В.В. Русанов. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями// *ЖВМ и МФ.* 1961, 1, N2, 267-279
6. A.Harten, P.D.Lax, B.Van Leer. On Upstream Diffrencing and Godunov-type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws // *SIAM Review.* 1981, 25, No.1. 35-61.
7. P.L. Roe. Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes // *J. Comput. Phis.* 1981,43, No.2. 357-372.
8. B.Enguist, S. Osher. One-sided difference approximation for nonlinear conservation laws//*Math. Comp.* 36(1981), 321-351.
9. Osher S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximations//*SIAM J. Numer. Anal.* 1984; 21(2):217-235.
10. E.F.Toro, M.Spruce, S.Speares. Restoration of the Contact Surface in the HLL Riemann Solver // *Shock Saves.* 1994,4. 25-34.
11. P.Batten, N.Clarke, C.Lambert, D.M.Causon. On the Coice of Savespeeds for the HLLC Riemann Solver // *SIAM J. Comput.* 1997, 18, No. 6. 1553-1570.
12. S.Jin. Z.P.Xin. The relaxation schemes for systems of conservation laws in arbitrary spacedimensions// *Comm. Pure Appl. Math.*, 48:235-276, 1995.
13. G.-Q. Chen and P. G. LeFloch. Entropy flux-splittings for hyperbolic conservation laws. Part I: General framework//*Comm. Pure Appl. Math.*, 48 (1995), pp. 691-729.
14. R. J. LeVeque, M. Pelanti. A Class of Approximate Riemann Solvers and Their Relation to Relaxation Schemes// *J. Comput. Phys.* 172 (2001), 573-591.
15. E. Tadmor. Entropy stability theory for difference approximations of nonlinear conservation laws and related time-dependent problems// *Acta Numerica* (2003), pp. 451-512. Cambridge University Press, 2003
16. F. Bouchut . Entropy satisfying flux vector splittings and kinetic BGK models// *Numer. Math.* 94 (2003), 623-672.
17. А.Г. Куликовский, Н.В. Погорелов, А.Ю.Семенов. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит. 2001.
18. Toro E F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics.* Springer-Verlag. Second Edition, June 1999.
19. R. J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems.* Cambridge Texts in Applied Mathematics.2004.
20. E. Stein, R. de Borst, T. Hughes. *Encyclopedia of Computational Mechanics.* John Wiley & Sons, Ltd. England. 2004.
21. В.П. Колган. Применение принципа минимальных производных к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики//*Ученые записки ЦАГИ.* 1972, 3, №6, 68-77.
22. Bram van Leer. REVIEW ARTICLE. Upwind and High-Resolution Methods for CompressibleFlow: FromDonorCell toResidual-Distribution Schemes// *Commun. Comput. Phys.* Vol. 1, No. 2, pp. 192-206 April 2006.
23. M. Berger, M.J. Aftosmis. Analysis of Slope Limiters on Irregular Grids. *AIAA Paper* 2005-0490. 2005.
24. Сафронов А.В. Способ стабилизации сеточно-характеристических схем для уравнений газодинамики// *Вычислительные методы и программирование.* 2007,8, №1, 6-9
25. B. Einfeldt. On Godunov-type methods for gas dynamics// *SIAM J. Num. Anal.*, 25:294-318, 1988.
26. Сафронов А.В. Разностный метод решения нестационарных уравнений газодинамики на основе соотношений на разрывах // *Космонавтика и ракетостроение.* 2006, № 2 (43), 152-158.
27. V. Honkkila , P. Janhunen. HLLC solver for ideal relativistic MHD// *Journal of Computational Physics.* 223 (2007), 643-656. .
28. F. Bouchut, C. Klingenberg, K. Waagan. A multiwave approximate riemann solver for ideal mhd based on relaxation I - theoretical framework// *Numerische Mathematik,* 108(1):7-41, 2007.
29. Сафронов А.В. Разностный метод для уравнений газодинамики из соотношений на разрывах// *Математическое моделирование.* 2008, 20, №2, 76-84.

30. M. Pandolfi, D. D'Ambrosio. Numerical instabilities in upwind methods: Analysis and cures for the "carbuncle" phenomenon// J. Comput. Phys., 166 (2001), pp. 271–301.
31. Сафронов А.В. Разностная схема для нестационарных уравнений газодинамики из соотношений на разрывах в консервативных переменных//Вычислительные методы и программирование. 2007,8, №1, 69-76.
32. О.А. Олейник. О единственности и устойчивости обобщенного решения задачи Коши для квазилинейного уравнения//Успехи мат. наук. 1959, 14, №2(86), 165-170.
33. E. Tadmor . Numerical viscosity and the entropy condition for conservative difference schemes// Math. Comp. 43(1984b) , 369–381
34. P. Lax and B.Wendroff. Systems of conservation laws// Comm. Pure Appl. Math. 13(1960), 217-237
35. E.F. Toro , V.A. Titarev. MUSTA fluxes for systems of conservation laws// Journal of Computational Physics 216 (2006) 403–429.
36. Прокопов Г.П. Необходимость контроля энтропии в газодинамических расчетах // ЖВМ и МФ.2007.47,№9,1591-1601.
37. Сафронов А.В. Об энтропии в численных схемах газодинамики на основе соотношений на разрывах //XVII Всероссийская конференция "Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов, и решение задач математической физики с приложением к многопроцессорным системам". Тезисы докладов. Дюрсо,2008.
38. G. Q. Chen, C. D. Levermore, and T. P. Liu, Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy//Comm. Pure Appl. Math., 47 (1994), pp. 787–830.
39. Сафронов А.В. Численный метод расчета струй продуктов сгорания при старте ракет// Космонавтика и ракетостроение. 2007, № 1(46), 72-79.

Статья поступила в редакцию 24 декабря 2008 г.