

Calculation of Gas Diffusion at a Contact Discontinuity by the Godunov – Kolgan Method

Yu. V. Tunik

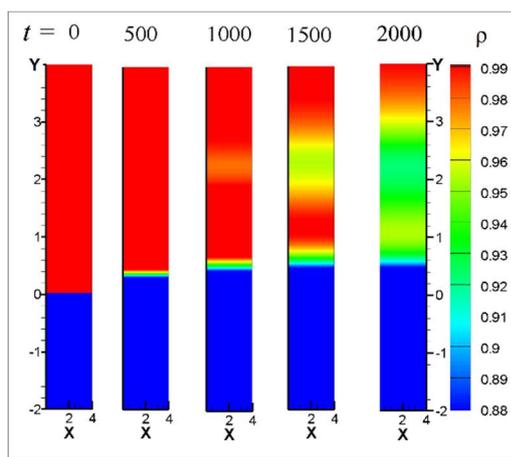
*Research Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University,
Moscow, 119192, Russia*

tunik@imec.msu.ru

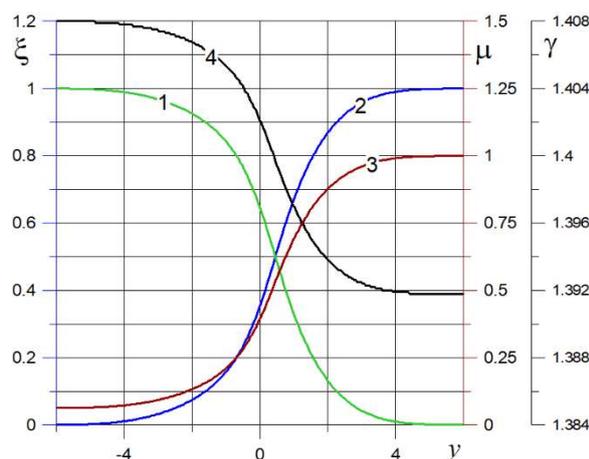
Abstract

It has previously shown that the generalized Godunov – Kolgan scheme, in contrast to Colgan’s scheme, allows one to exclude physically unjustified solutions when numerically integrating Euler’s equations for an inviscid gas and is easily adapted for calculating flows of a single-component viscous gas. This work proposes a modification of the generalized scheme for calculating the flow of a viscous multicomponent gas based on the Navier – Stokes equations. To test the developed approach, the problem of gas diffusion on a plane contact discontinuity is solved. The possibility of calculating diffusion flows and gas composition based on average, rather than minimum modulo, concentration gradients within the computational cell is shown. The proposed approach is more universal, easy to implement, and most importantly preserves the monotonicity of the solution and provides second-order approximation in space on smooth solutions for all gas parameters, including component composition. Calculation with a frozen component composition within the calculation cell leads to a first-order solution for the composition, but in this problem, it gives practically indistinguishable results in terms of concentrations and close results in other gas parameters.

Keywords: Godunov – Kalgan scheme, Navier – Stokes equations, multicomponent gas, diffusion, contact discontinuity.



(a)



(b)

Diffusion of density ((a)), concentration of hydrogen and oxygen ((b), curves 1 and 2), as well as molecular weight and adiabatic exponent ((b), curves 3 and 4)

УДК 519.651

Расчет диффузии газов на контактном разрыве методом Годунова – Колгана

Ю. В. Туник

*НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова,
Россия, Москва, 119192, Мичуринский проспект д. 1
tunik@imec.msu.ru*

Аннотация

Ранее было показано, что обобщенная схема Годунова – Колгана, в отличие от схемы Колгана, позволяет исключить физически неоправданные решения при численном интегрировании уравнений Эйлера для невязкого газа и легко адаптируется для расчета течений однокомпонентного вязкого газа. В данной работе предлагается модификация обобщенной схемы для моделирования течений вязкого многокомпонентного газа на основе уравнений Навье – Стокса. Для тестирования схемы решается задача о диффузии газов на плоском контактном разрыве. Показана возможность расчета диффузионных потоков и состава газа на основе средних, а не минимальных по модулю градиентов концентраций в пределах расчетной ячейки. Предлагаемый подход является более универсальным, легкими в реализации, а главное сохраняет монотонность решения и обеспечивает второй порядок аппроксимации по пространству на гладких решениях для всех параметров газа, включая компонентный состав. Расчет с замороженным компонентным составом в пределах расчетной ячейки приводит к решению первого порядка по составу газа, однако в данной задаче дает практически неотличимые результаты по концентрациям и близкие по другим параметрам газа.

Ключевые слова: схема Годунова – Колгана, уравнения Навье – Стокса, многокомпонентный газ, диффузия, контактный разрыв.

1. Введение

В работах по численному моделированию течений вязкого газа с горением важную роль играют процессы диффузии. Наиболее общий подход к моделированию диффузии предполагает использование соотношений Стефана – Максвелла, которые сводятся к системе алгебраических уравнений относительно диффузионных скоростей газовых компонент при заданных градиентах относительных молярных или массовых концентраций [1]. Однако такой подход требует больших ресурсов. Поэтому при численном решении задач газодинамики с горением на основе уравнений Навье – Стокса в большинстве работ диффузионные потоки определяются законом Фика с эффективными коэффициентами диффузии. Слагаемые дифференциальных уравнений, связанные с процессами диффузионного переноса, как правило, выделяются в виде источниковых членов в уравнениях для невязкого газа [2–3]. В работах со сложной газодинамикой, за редким исключением, отсутствуют детальные сведения о расчете коэффициентов диффузии и вообще о диффузионных потоках [3–5], и наоборот, статьи с подробной информацией о диффузионных потоках не доводятся до решения задач о течении вязкого многокомпонентного газа (см., например, [6–7]).

Для численного моделирования течений газа с учетом диффузии, вязкости и теплопроводности необходимо использовать схемы не ниже второго порядка аппроксимации по пространственным переменным, поскольку эти процессы зависят не только от газодинамических

функций, но и от их производных. Одной из таких схем, предназначенных для интегрирования уравнений Эйлера, является схема Колгана [8–10] и обобщенная схема Годунова – Колгана [11] второго порядка точности по пространству. В [12] показано, что схема [11] с некоторым дополнением может успешно применяться для расчета двумерных течений однокомпонентного вязкого газа.

В данной работе предлагается модификация обобщенной схемы Годунова – Колгана, которая сохраняет монотонность решения при моделировании течений вязкого многокомпонентного газа на основе уравнений Навье – Стокса. Изменения касаются расчета диффузионных потоков и обеспечивают второй порядок точности расчета концентраций по пространственным переменным. Для тестирования схемы решается задача о диффузии газа на плоском контактном разрыве.

2. Постановка задачи

Плоский контактный разрыв в ортогональной декартовой системе координат (X, Y) расположен параллельно оси абсцисс и разделяет в первом случае кислород и азот, а во втором – кислород и водород (рис. 1). В начальный момент газ неподвижен, давление и температура имеют одинаковые значения по разные стороны от разрыва: p_0 и T_0 .

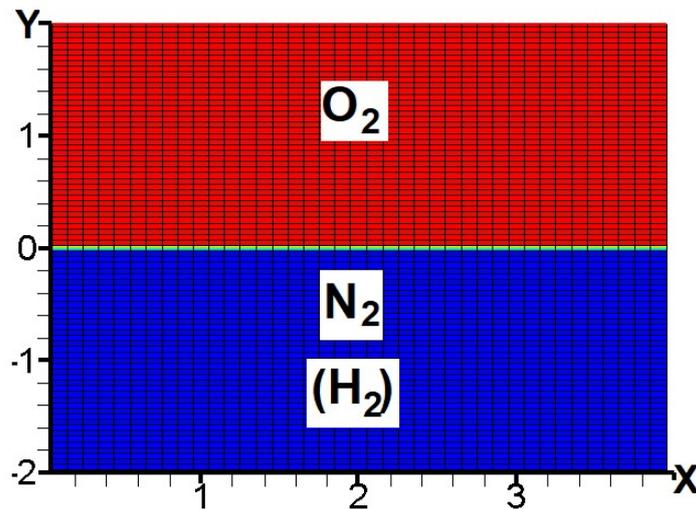


Рис. 1. Фрагмент расчетной области с сеткой

Моделирование проводится на основе уравнений Навье – Стокса, которые в двумерном плоском случае в ортогональной системе координат (X, Y) вместе с уравнениями для относительных массовых концентраций газовых компонент β_k имеют вид (см., например, [1])

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p - \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho uv - \tau_{xy})}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial (\rho vu - \tau_{yx})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v^2 + p - \tau_{yy})}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho (H - p/\rho)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho uH - u\tau_{xx} - v\tau_{xy} + q_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho vH - v\tau_{yy} - u\tau_{xy} + q_y)}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \beta_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \beta_k u + J_{kx})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \beta_k v + J_{ky})}{\partial y} = 0,$$

$$H = h + 0.5(u^2 + v^2), \quad h = \sum_k \beta_k h_k = C_p T, \quad T = \mu p / \rho, \quad \mu^{-1} = \sum_k \beta_k / \mu_k = \sum_k \xi_k \mu_k$$

Здесь u и v – проекции вектора скорости \mathbf{u} на координатные оси X и Y , соответственно; p, ρ, T, h, μ – давление, плотность, температура, энтальпия газа и молекулярный вес газа; μ_k, ξ_k, h_k – молекулярный вес, мольная доля и энтальпия k -ой компоненты, которая рассчитывается по приведенной энергии Гиббса из [13]; q_x и q_y – проекции на координатные оси X и Y теплового потока $\mathbf{q} = -\lambda \text{grad} T + \sum_k \mathbf{J}_k h_k$, где $\lambda = \rho C_p \theta$ – коэффициент теплопроводности, θ – коэффициент терموпроводности, \mathbf{J}_k – диффузионный поток k -ой компоненты; τ_{xx}, τ_{yy} и $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ – компоненты тензора напряжений, связанные с тензором скоростей деформации соотношениями $\tau_{ij} / \rho = \eta \text{div} \bar{v} + 2\nu e_{ij}$, то есть

$$\begin{cases} \frac{\tau_{xx}}{\rho} = \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\nu \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\tau_{yy}}{\rho} = \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\nu \frac{\partial v}{\partial y}, \\ \frac{\tau_{xy}}{\rho} = \frac{\tau_{yx}}{\rho} = \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{cases} \quad (1)$$

Здесь ν – кинематический, а $\eta = -2\nu/3$ – второй коэффициент вязкости.

Для описания диффузии используется закон Фика с коррекцией Mason–Saxena [14], которая обеспечивает нулевой суммарный поток диффузии

$$\mathbf{J}_k = -\rho \bar{D}_k \nabla \beta_k + \rho_k \sum_j \bar{D}_j \nabla \beta_j$$

Обе компоненты имеют равные коэффициенты диффузии \bar{D}_k [15], которые рассчитываются по формуле для бинарной смеси [16]

$$\bar{D}_k = D_{12} = D_{21} = 0.268 \times 10^{-6} \frac{T^{3/2} \sqrt{0.5(\mu_1 + \mu_2) / (\mu_1 \mu_2)}}{\rho d_{12}^2 \Omega(T_{12}^*)}.$$

Здесь $\Omega(T_{12}^*) = 1.074 (T_{12}^*)^{-0.1604}$ – интеграл столкновений; $T_{12}^* = T / (\varepsilon_{12} / k)$ – приведенная температура столкновений; k – постоянная Больцмана; $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$ – глубина энергетической «ямы» потенциала межмолекулярного взаимодействия Леннарда–Джонса (см. таблицу 1); коэффициент диффузии \bar{D}_k в м²/сек, если давление p в атм, молекулярная масса газовых компонент μ_1 и μ_2 в г/см³, а эффективный диаметр столкновений $d_{12} = 0.5(d_1 + d_2)$ в ангстремах (см. таблицу 1).

Таблица 1

Диаметр столкновений, числа Шмидта и Прандтля для газовых компонент

Компонента	d [Å]	Sc	Pr	ε/k [K]
O ₂	3.47	0.78	0.72	106.7
N ₂	3.80	0.95	0.72	71.4
H ₂	2.83	0.22	0.69	59.7

Коэффициенты вязкости и теплопроводности для смеси рассчитываются по формулам Уилки [16]

$$\nu = \sum_i \nu_i \left(1 + \sum_{j \neq i} G_{ij}^{\nu} \frac{\xi_j}{\xi_i} \right)^{-1}, \quad \theta = \sum_i \theta_i \left(1 + \sum_{j \neq i} G_{ij}^{\theta} \frac{\xi_j}{\xi_i} \right)^{-1},$$

$$G_{ij}^{\nu} = G_{ij}^{\nu}(\nu_i, \nu_j) = \frac{\left[1 + (\nu_i/\nu_j)^{1/2} (\mu_j/\mu_i)^{1/4} \right]^2}{2^{3/2} \left[1 + (\mu_i/\mu_j) \right]^{1/2}}, \quad G_{ij}^{\theta} = G_{ij}^{\theta}(\theta_i, \theta_j)$$

Коэффициенты кинематической вязкости ν_k и теплопроводности θ_k для каждой газовой компоненты рассчитываются по формулам элементарной молекулярно-кинетической теории

$$\nu_k = Sc_k \cdot D_k, \quad \theta_k = \frac{\nu_k}{Pr_k}, \quad D_k = \frac{1}{3} \bar{v}_k \cdot \bar{l}, \quad \bar{v}_k = \sqrt{\frac{8RT}{\pi \mu_k}}, \quad \bar{l} = \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma}$$

Здесь Sc_k и Pr_k – соответствующие числа Шмидта и Прандтля (табл. 1); \bar{v} – средняя тепловая скорость молекул; \bar{l} – средняя длина свободного пробега; n – число молекул в единице объема; $\sigma = \sum \xi_k \sigma_k$ – средняя площадь сечения столкновений, $\sigma_k = \pi d_k^2 / 4$; R – универсальная газовая постоянная.

3. Метод расчета

3.1. Обобщенная схема Годунова – Колгана

Задача решается численно. В основе численного метода – обобщенная схема Годунова – Колгана [11], которая является модификацией схемы Колгана [8–10] для численного интегрирования уравнений Эйлера, но в отличие от последней способна обеспечить неубывание энтропии при численном интегрировании уравнений Эйлера с приемлемым шагом по времени. Второй порядок аппроксимации по пространству на гладких решениях достигается благодаря экстраполяции газодинамических параметров на границы ячеек и расчету по этим величинам потоков массы, импульса и энергии после решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва. Экстраполяция проводится с использованием минимальных по модулю градиентов [8], что обеспечивает монотонность численного решения для линейного уравнения $\partial \Psi / \partial t + \partial \Psi / \partial x = 0$. При численном моделировании двумерного течения на произвольной регулярной сетке распад разрыва рассчитывается на четырех границах расчетной ячейки, то есть в точках D, D', C, C' (рис. 2), которые являются серединами соответствующих граничных отрезков.

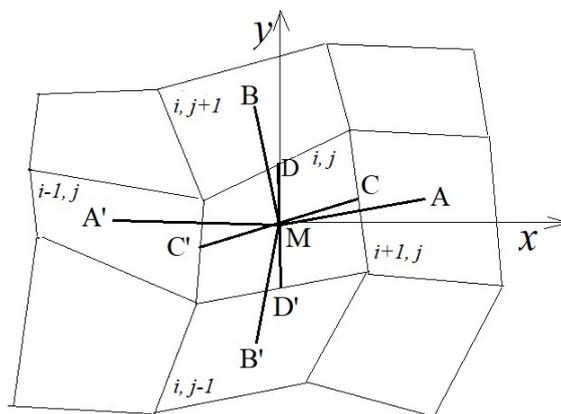


Рис. 2. Основные точки и направления для построения численной схемы

По схеме Колгана значение любого параметра газового потока Ψ в этих точках задается линейной экстраполяцией: $\Psi = \Psi_0 + \Delta\Psi$. Здесь Ψ_0 – значение параметра в центральной точке ячейки M; $\Delta\Psi = 0.5l \cdot \partial\Psi/\partial\vec{l}$ – приращение функции на половине вектора \vec{l} ($\overline{C'C}$ или $\overline{D'D}$); $\partial\Psi/\partial\vec{l}$ – центральная производная в направлении вектора \vec{l} , l – длина вектора \vec{l} .

В обобщенной схеме Годунова – Колгана [11] задача о распаде произвольного разрыва между соседними ячейками решается для параметров не в точках D, D', C, C' (рис. 2), а в промежуточных точках на векторах \vec{l} между центром и общей границей. Положение этих точек и соответствующие им значения искомых функций определяется параметром $\alpha = 0.5 \exp(-|\Delta\Psi/\Psi_0|)$: $\Psi = \Psi_0 + \alpha l \cdot \partial\Psi/\partial\vec{l}$. В области размытого скачка уплотнения или контактного разрыва, где $|\Delta\Psi| \gg |\Psi_0|$ и $\alpha \approx 0$, промежуточная точка совпадает с центром ячейки, и обобщенная схема работает как схема Годунова. В области гладких решений, когда $|\Delta\Psi| \ll |\Psi_0|$ и $\alpha \approx 0.5$, промежуточная точка перемещается на границу ячейки, и схема работает как схема Колгана второго порядка по пространственным переменным.

Минимальные по модулю производные $\partial\Psi/\partial\vec{l}$ определяются в три этапа. Вначале находятся четыре пары производных в направлении \overline{MA} и \overline{MB} , \overline{MB} и $\overline{A'M}$, $\overline{A'M}$ и $\overline{B'M}$, $\overline{B'M}$ и \overline{MA} (см. рис. 2). Каждая из этих пар позволяет вычислить производные в направлении векторов $\overline{C'C}$ и $\overline{D'D}$, из которых выбираются минимальные по модулю. Следует отметить, что результат введения промежуточной точки, то есть коэффициента α , можно трактовать как ограничение на величину производной в центре расчетной ячейки.

3.2. Модификация обобщенной схемы для расчета течений многокомпонентного вязкого газа

В случае расчета течений многокомпонентного вязкого газа в прямоугольной декартовой системе координат удобно от центральных производных по векторам $\overline{C'C}$ и $\overline{D'D}$ перейти к производным $\partial\Psi/\partial x$ и $\partial\Psi/\partial y$, которые, в частности, позволяют вычислить компоненты тензора напряжений по (1), а также тепловые и диффузионные потоки в центре расчетных ячеек. Следуя [12], производная любой искомой функции на границе ячейки, в том числе и массовой доли газовых компонент β_k , рассчитывается, как сумма градиентов в центрах соседних ячеек с весовыми коэффициентами

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{(\partial\Psi/\partial x)_1 \Delta x_1 + (\partial\Psi/\partial x)_2 \Delta x_2}{\Delta x_1 + \Delta x_2},$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial y} = \frac{(\partial\Psi/\partial y)_1 \Delta y_1 + (\partial\Psi/\partial y)_2 \Delta y_2}{\Delta y_1 + \Delta y_2} \quad (2)$$

Здесь Δx и Δy координаты вектора $\overline{C'C}$ или $\overline{D'D}$; индексы 1 и 2 относятся к двум соседним ячейкам. Зная $\partial\Psi/\partial x$ и $\partial\Psi/\partial y$, нетрудно рассчитать производные вдоль границы $\partial\Psi/\partial L$ и по нормали к ней $\partial\Psi/\partial N$. Коэффициенты вязкости ν , теплопроводности λ и диффузии \overline{D}_k рассчитываются по температуре, плотности и концентрации газовых компонент, значения которых на этих границах получены в результате решения задачи о распаде разрыва.

Однако описанная выше методика не позволяет решить поставленную задачу о диффузии газа на контактном разрыве. Во-первых, распад рассматриваемого контактного разрыва сохраняет давление p_0 и нулевую скорость. Очевидно, также, что минимальные по модулю градиенты концентраций в ячейках слева и справа от разрыва равны нулю. Тогда согласно (2) нулю равны диффузионные и тепловые потоки, обнуляются компоненты тензора напряжений и их работа. Неизменными остаются плотность и температура по разные от него стороны. Таким образом, в данном случае использование формулы (2) и минимальных по модулю производных не позволяет выйти из начального состояния, разрыв сохраняется в неизменном виде, что противоречит опыту и теории диффузионных процессов. При моделировании сложных течений вязкого газа подобные разрывы маловероятны, тем не менее, расчетная схема должна быть универсальной и давать адекватные результаты в подобных ситуациях. Отказ от выбора минимальных по модулю производных может привести к потере монотонности схемы и численного решения.

Проблема решается, если для концентраций вместо минимальных по модулю производных в направлении векторов $\overline{C'C}$ и $\overline{D'D}$ берутся «средние» значения, то есть процедура $\text{MINMOD}(A, B)$ [8] заменяется процедурой $\text{MEANMOD}(A, B)$

$$\text{MEANMOD}(A, B) = \begin{cases} 0.5 \cdot (A + B), & \text{если } A \cdot B \geq 0, \\ 0, & \text{если } A \cdot B < 0 \end{cases} \quad (3)$$

Четыре производные по каждому из направлений $\overline{C'C}$ или $\overline{D'D}$ делятся на две пары. MEANMOD последовательно применяется вначале к каждой из пар, а затем к «средним» значениям в этих парах. «Средние» значения отличаются от средних арифметических, если аргументы функции MEANMOD имеют различные знаки. Эта поправка делается по аналогии с процедурой MINMOD . В данной задаче расчет производных по средним арифметическим значениям дает те же результаты, что и с процедурой (3).

4. Результаты расчетов

Расчет проводится на регулярной неподвижной сетке (см. рис. 1) в прямоугольнике $0 < x < 4$ и $-15 < y < 15$. Здесь и ниже расстояния и длины даются в миллиметрах ($l_0 = 0.001$ м), плотность отнесена к плотности кислорода ρ_0 при давлении p_0 и температуре T_0 , скорость – к величине $U_0 = \sqrt{p_0/\rho_0}$, время – к $t_0 = l_0/U_0$. Разрыв располагается на прямой $y = 0$. Кислород находится в области $y > 0$, второй газ заполняет область $y < 0$. На горизонтальных границах $y = -15$ и $y = 15$ сохраняются соответствующие инварианты Римана. На вертикальных границах $x = 0$ и $x = 4$ задаются периодические условия. Используется равномерная по оси абсцисс расчетная сетка с шагом $\Delta x = 0.1$. Область $y > 0$ разбита на 240 ячеек, из которых первые 200 от поверхности разрыва имеют размер $\Delta y = 0.05$, размер последующих ячеек увеличивается на 4 %. Построенная таким образом расчетная сетка симметрично отражена в область $y < 0$.

Особенность поставленной задачи обусловлена наличием бесконечных, а при численном решении высоких градиентов концентраций $\partial\beta_k/\partial N = \partial\beta_k/\partial y$ на контактном разрыве. Как следствие бесконечно большое значение имеет и производная плотности по нормали к линии разрыва. При отрицательном значении производной $\partial\beta_k/\partial N$ схема второго порядка может привести к отрицательной величине массовой доли β_k на любой из сторон расчетной

ячейки. Поэтому наряду с условием Куранта на шаг по времени вводится дополнительное ограничение: в ячейке изменение массы любой газовой компоненты за счет диффузии не должно превышать некоторой, заранее заданной величины. Ниже в расчетах это не более 5 %. В рассматриваемой задаче это ограничение сказывается на небольшом начальном интервале по времени. Основное ограничение на шаг по времени обусловлено условием устойчивости Куранта с числом $Cur = 0.2$.

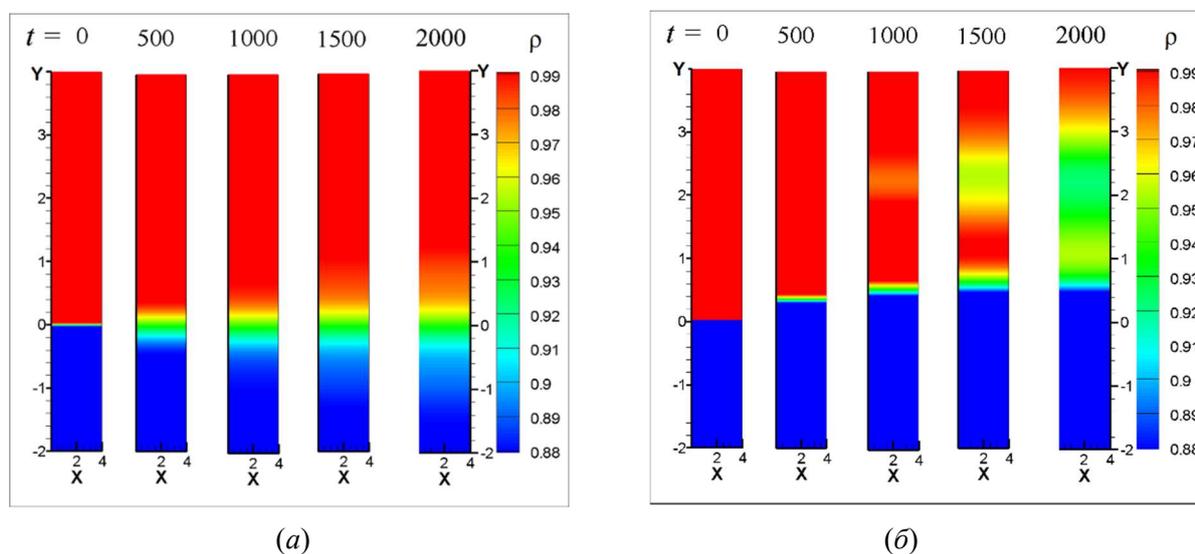


Рис. 3. Диффузия плотности в различные моменты времени t на контактном разрыве между кислородом (сверху) и вторым газом: азотом (а) и водородом (б)

Расчеты проводятся при начальном давлении $p_0 = 26500$ Па и температуре $T_0 = 223.6$ К, что соответствует атмосферным условиям на высоте 10 км. При этом $\rho_0 = 0.4567$ кг/м³, $U_0 = 240.9$ м/с, $t_0 = 4.15$ мкс. Периодические условия по оси абсцисс обеспечивают независимость решения от переменной x (рис. 3). Поэтому ниже результаты представлены в зависимости только от одной пространственной координаты y .

4.1. Диффузия на разрыве между азотом и кислородом

Априори можно предположить, что диффузия близких по молекулярному весу и эффективному диаметру столкновений газов, таких как кислорода и азота, вряд ли скажется на давлении и вызовет заметное перемещение среды, поскольку диффузия, исключая начальный период с высокими градиентами концентраций, – это медленный процесс по сравнению с распространением звуковых и слабых волн в газах. Расчеты подтверждают эти предположения. Диффузия приводит почти к симметричной картине размывания разрыва (см. рис. 3, а), давление сохраняет свое начальное значение (рис. 4, кривая 1), и газ остается в покое всюду за исключением небольшой области в окрестности разрыва, где к моменту времени $t = 2000$ скорость едва заметно отличается от нулевой (кривая 2). Изменение молекулярного веса и плотности газа в результате диффузии компонент приводит к локальному отклонению температуры от начального значения в окрестности разрыва (кривая 4), величина которого при $t = 2000$ превышает 1.5 %. Без учета теплопроводности отклонение температуры достигает 5 % и сохраняется во времени на начальном уровне вместе с разрывом плотности (рис. б). В то же время отсутствие теплопроводности не оказывает влияния на диффузию в случае контактного разрыва между азотом и кислородом. Молярная доля кислорода и азота снижается на 50% в точке начального положения контактного разрыва (рис. 5, жирные кривые 1 и 2), то есть разрыв в данном случае как бы сохраняет свое положение. Тонкие линии получены по схеме Колгана, но со средними значениями градиентов для концентраций. В данном случае различие незначительно.

Представленные результаты позволяют утверждать, что обобщенная схема с использованием процедуры MEANMOD обеспечивает монотонность решения для концентраций и других параметров газа.

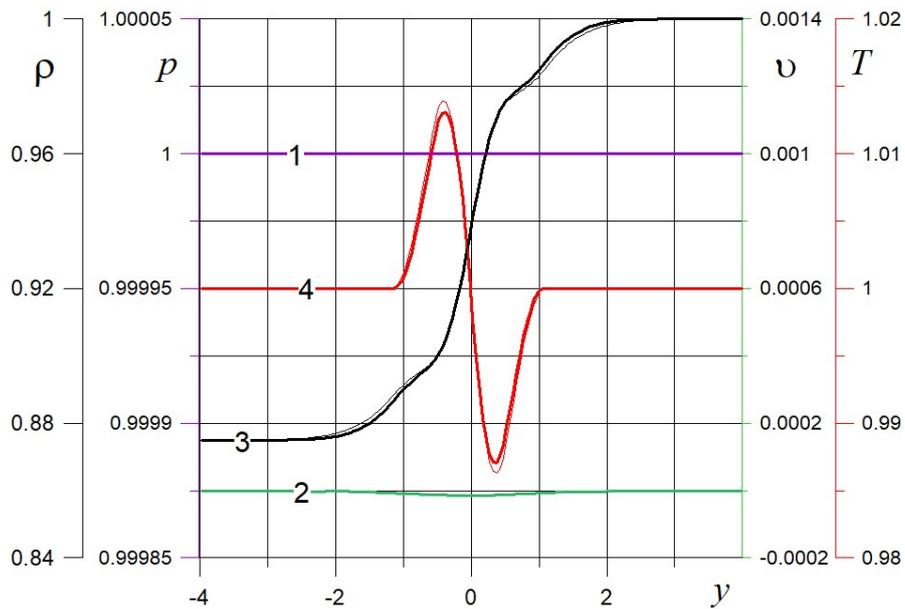


Рис. 4. Кривые давления (1), скорости (2), плотности (3) и температуры (4), полученные по схеме Колгана (тонкие линии) и обобщенной схеме Годунова – Колгана (жирные линии) в случае диффузии N_2 и O_2

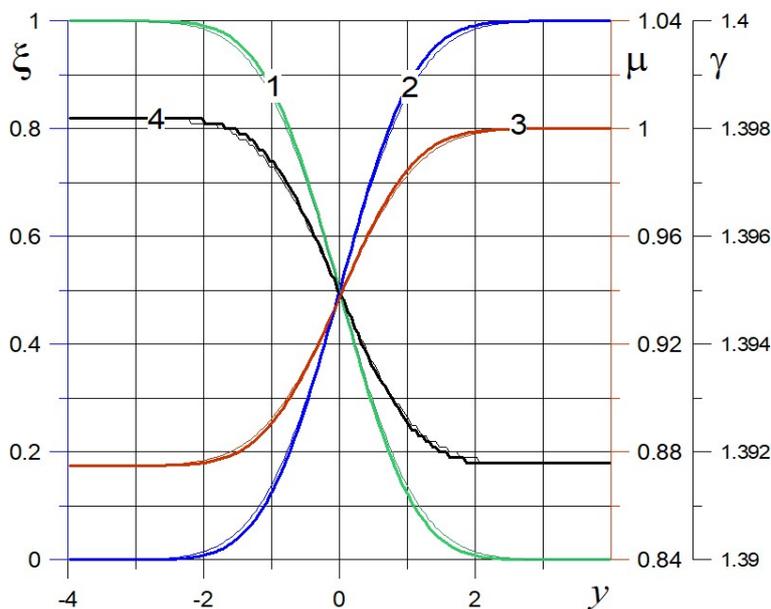


Рис. 5. Молярная доля азота (1), кислорода (2), молекулярный вес (3) и показатель адиабаты (4), полученные по схеме Колгана (тонкие линии) и обобщенной схеме Годунова – Колгана (жирные линии) в случае диффузии N_2 и O_2

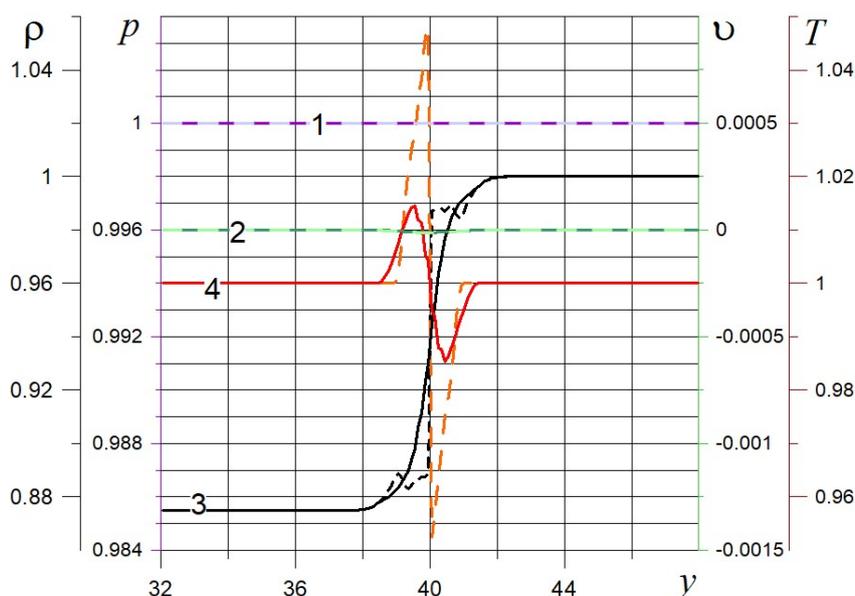


Рис. 6. Кривые давления (1), скорости (2), плотности (3) и температуры (4), полученные по обобщенной схеме Годунова – Колгана при учете (сплошные линии) и без учета теплопроводности (штриховые линии)

4.2. Контактный разрыв между водородом и кислородом

Обобщенная схема Годунова – Колгана с процедурой MEANMOD обеспечивает монотонное решение и в случае контактного разрыва между водородом и кислородом (рис. 7, 8), которые заметно отличаются по молекулярному весу, эффективному диаметру столкновений, числам Шмидта и Прандтля, а также по потенциалу межмолекулярного взаимодействия (см. табл. 1). Это различие сказывается на скорости диффузии компонент и инициирует более сложное и интенсивное движение газа. Более сложной и несимметричной становится и картина размывания контактного разрыва (см. рис. 3, б). За время $t = 2000$ разрыв размывает примерно на 8 мм (рис. 7), а в случае с азотом только на 4 мм (см. рис. 5). Снижение концентраций на 50 % происходит левее точки $x = 0$ (рис. 7, кривые 1 и 2). В окрестности разрыва отклонение температуры от ее начального значения достигает 62 % (рис. 8, кривая 4), газ приходит в движение (кривая 2) в сторону, занятую водородом, практически при постоянном давлении (кривая 1). В области занятой водородом скорость газа достигает значения 0.176×10^{-3} , с учетом величины U_0 порядка 40 мм/с. Первопричиной этого движения является локальное изменение температуры в окрестности разрыва, которое происходит, в основном, при постоянном давлении. В этих условиях повышение температуры сопровождается падением плотности, то есть расширением газа, которое инициирует простые волны Римана по обе стороны от разрыва аналогично тому, что происходит при распространении пламени от торцевой стенки. Асимметрия в изменении температуры (рис. 8, кривая 4) приводит к движению в сторону газа с меньшей плотностью. В случае азота с кислородом волны Римана идут в разные стороны от разрыва и близки по интенсивности. Как следствие, скорость движения газа не превышает 0.145×10^{-4} (см. рис. 4, кривая 2), то есть 3.5 мм/с в небольшой окрестности начального положения разрыва.

Расчет по схеме Колгана со средними значениями градиентов для концентраций, но при $\alpha = 0.5$, обрывается на первых же шагах по времени из-за высоких градиентов концентраций, которые приводят к отрицательным значениям массовой доли компонент на границах расчетных ячеек.

Расчет с замороженными значениями концентраций в пределах расчетной ячейки, как например в [2], дает практически неотличимые результаты по концентрациям, молекуляр-

ному весу и показателю адиабаты (рис. 7), а также близкие по плотности, температуре, давлению и скорости. Отличие заключается в том, что к моменту $t = 2000$ движение в сторону газа с меньшей плотностью возникает во всей расчетной области. Разница по давлению не превышает $2 \times 10^{-3} \%$ (рис. 8, кривые 1), а по скорости 8 мм/с (рис. 8, кривые 2). Указанное расхождение обусловлено разными значениями концентраций, которые используются при расчете потоков на границах расчетных ячеек.

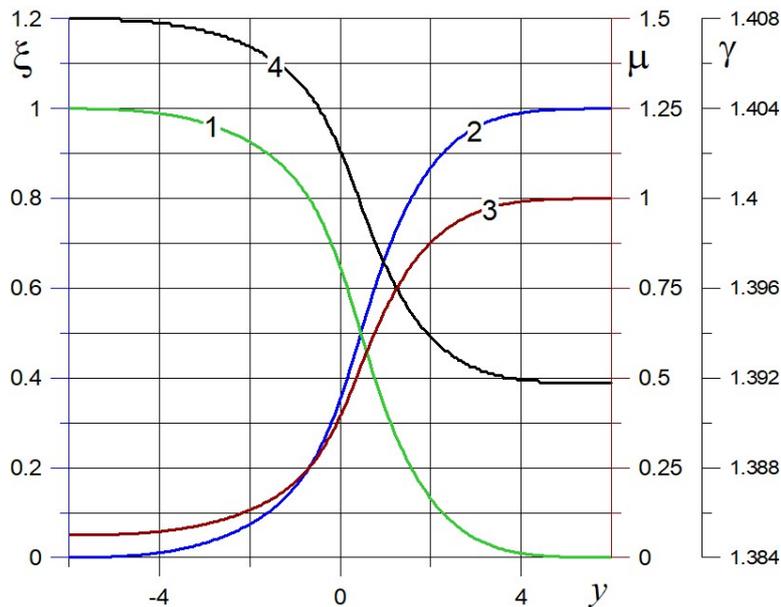


Рис. 7. Молярная доля водорода (1), кислорода (2), молекулярный вес (3) и показатель адиабаты (4), полученные по обобщенной схеме Годунова – Колгана

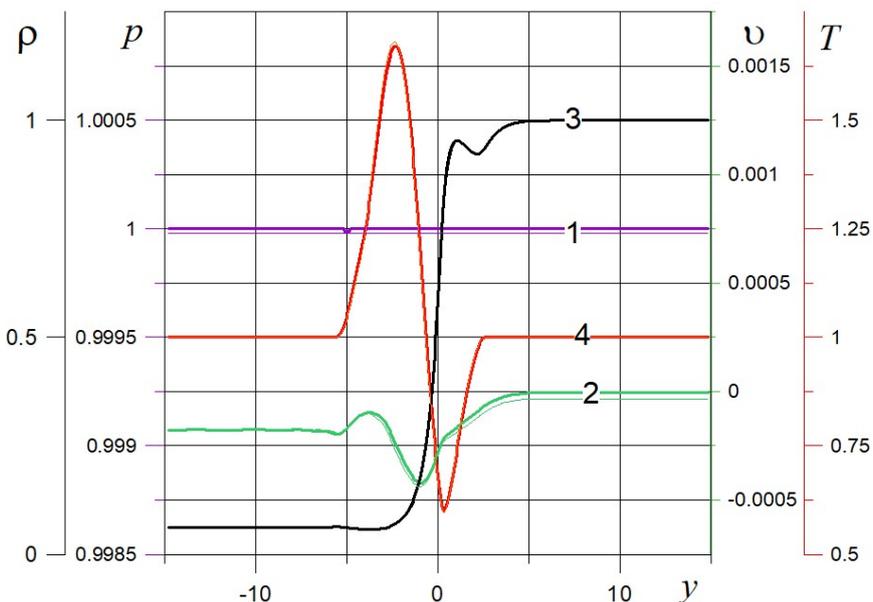


Рис. 8. Кривые давления (1), скорости (2), плотности (3) и температуры (4), полученные по обобщенной схеме Годунова – Колгана с замороженными (тонкие кривые) и переменными концентрациями (жирные кривые) в пределах расчетной ячейки

5. Заключение

Использование минимальных по модулю градиентов для аппроксимации компонентного состава в пределах расчетной ячейки, то есть процедуры MINMOD, в общем случае не позволяет решать задачи о диффузии газов на контактном разрыве на основе как схемы Колгана, так и обобщенной схемы Годунова – Колгана. Универсальной альтернативой является расчет концентраций газовых компонент по средним значениям градиентов в расчетной ячейке и использование обобщенной схема Годунова – Колгана. Предлагаемый подход сохраняет монотонность решения и обеспечивает второй порядок аппроксимации по пространству на гладких решениях для всех параметров газа, включая компонентный состав. Расчет с замороженным компонентным составом в пределах расчетной ячейки приводит к решению первого порядка для компонентного состава, однако в данной задаче дает практически неотличимые результаты по концентрациям и близкие по другим параметрам газа.

Литература

1. Лапин Ю.В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1989. 366 с.
2. Родионов А.В. Разработка методов и программ для численного моделирования неравновесных сверхзвуковых течений в приложении к аэрокосмическим и астрофизическим задачам. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Саров, Институт теоретической и математической физики. 2019. 299 с.
3. Быков Л.В., Никитин П.В., Пашков О.А. Математическое моделирование процессов обтекания затупленного тела высокоскоростным потоком // Электронный журнал «Труды МАИ». 2014, № 78. <https://cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe> <http://trudymai.ru/published.php?ID=53445>
4. Котов Д.В., Суржигов С.Т. Расчет гиперзвукового течения химически реагирующего газа в ГПВРД методом конечного объема с использованием схемы AUSM // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т. 11. <http://chemphys.edu.ru/issues/2011-11/articles/174/>
5. Жалнин Р.В., Масыгин В.Ф., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. Моделирование дозвуковых многокомпонентных реагирующих газовых потоков на неструктурированных сетках // Инженерные технологии и системы. 2020. Т. 30, № 1. С. 162-175. Doi: 10.15507/2658-4123.030.202001.162-175
6. Сызранова Н.Г., Шевелев Ю.Д. О моделировании диффузии в многокомпонентных газовых средах // Физико-химическая кинетика в газовой динамике 2011. Т. 12. <http://chemphys.edu.ru/issues/2011-12/articles/347/>
7. Жуков В.Т., Рыков В.Г., Феодоритова О.Б. Математическая модель течения многокомпонентной смеси газов с учетом возникновения жидкой фазы. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018, № 183. 36 с. Doi: 10.20948/prepr-2018-183
8. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1972. Т. III, № 6. С. 68–77.
9. Колган В.П. Конечно-разностная схема для расчета двумерных разрывных решений нестационарной газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1975. Т. VI, № 1. С. 9–14.
10. Тилляева Н.И. Обобщение модифицированной схемы С.К. Годунова на произвольные нерегулярные сетки // Ученые записки ЦАГИ. 1986. Т. XVII, № 2. С. 18–26.
11. Туник Ю.В. Численное решение тестовых задач на основе модифицированной схемы С.К. Годунова // ЖВМиМФ. 2018. Т. 58, № 10. С. 1629–1641. DOI: 10.31857/S004446690003583-2
12. Туник Ю. В. Метод Годунова – Колгана для расчета течений вязкого газа // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т. 23, вып. 5. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-5/articles/1010/>
13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др. М.: Наука, 1978. Т. 1, кн. 2.

14. Mason E.A., Saxena S.C. Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures. *Physics of Fluids*. 1958. Vol. 1. No. 5. Pp. 361–369.
15. Попов П.В. Диффузия: учебно-методическое пособие по курсу Общая физика. М.: МФТИ, 2016. 94 с.
16. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. Пер. с англ. – М.: Мир, 1990, 660 с.

References

1. Lapin Yu. V., Strelets M. Kh., *Internal flows of gas mixtures*, М.: Nauka, 1989, 366 p. [in Russian].
2. Rodionov A. V., Development of methods and programs for numerical modeling of nonequilibrium supersonic flows as applied to aerospace and astrophysical problems, Ph. Doctor's thesis, Sarov, All-Russian Scientific Research Institute of Experimental Physics, 2019, 299 p.
3. Bykov L. V., Nikitin P. V., Pashkov O. A., Mathematical modeling of high-speed flow around a blunt body, *Electronic journal «Trudy MAI»*, 2014, no. 78. [in Russian]. <http://trudymai.ru/published.php?ID=53445>
4. Kotov D. V., Surzhikov S. T., Calculation of hypersonic flow of reacting gas in scramjet combustor by finite volume method using AUSM, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2011, vol. 11. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2011-11/articles/174/>
5. Zhalnin R. V., Masyagin V. F., Peskova E. E., Tishkin V. F., Modelling the Flow of Multicomponent Reactive Gas on Unstructured Grids, *Engineering Technologies and Systems*, 2020, vol. 30, no. 1. DOI: 10.15507/2658-4123.030.202001.162-175
6. Syzranova N. G., Shevelev Yu. D., On the modelling of multi-component diffusion in gases, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2011, vol. 12. [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2011-12/articles/347/>
7. Zhukov V. T., Rykov V. G., Feodoritova O. B., *Mathematical model of the flow of a multicomponent gas mixture taking into account the appearance of the liquid phase*, М.: Preprint of Keldysh Institute of Applied Mathematics, 2018, no 183. 36 p. DOI: 10.20948/prepr-2018-183
8. Kolgan V. P., Application of the principle of minimum values of the derivative to the construction of finite-difference schemes for the calculation of discontinuous solutions of gas dynamics, *TsAGI Science Journal*, 1972, vol. 3, no 6, pp. 68–77 [in Russian].
9. Kolgan V. P., Finite-difference scheme for computing two-dimensional discontinuous solutions of unsteady gas dynamics, *TsAGI Science Journal*, 1975, vol. 6, no 1, pp. 9–14 [in Russian].
10. Tillyaeva N. I., Generalization of the modified scheme of S.K. Godunov to arbitrary irregular meshes, *TsAGI Science Journal*, 1986, vol. 17, no 2, pp. 18–26 [in Russian].
11. Tunik Yu. V., Numerical solution of test problems based on the modified scheme of S.K. Godunov, *ZhVMiMF*. 2018, vol. 58, no 10, pp. 1629–1641 [in Russian]. DOI: 10.31857/S004446690003583-2
12. Tunik Yu. V., Godunov – Kolgan method for calculating viscous gas flows, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2022, vol. 23, no. 5 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-5/articles/1010/>
13. Gurvich L. V., Veits I. V., Medvedev V. A., *Thermodynamic properties of substances*, М.: Nauka, 1978, vol. 1, no. 2 [in Russian].
14. Mason E. A., Saxena S. C., Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures, *Physics of Fluids*, 1958, vol. 1, no 5, pp. 361–369.
15. Попов П. В., *Diffusion: educational and methodological manual for the course General Physics*, М.: MFTI, 2016. 94 p. [in Russian].
16. Oran E. S., Boris J. P., Numerical Simulation of Reactive Flow. М.: Mir, 1990, 660 p. [in Russian].