

01;03

Численное моделирование газодинамических явлений

© Ю.П. Головачев, А.И. Жмакин, А.А. Шмидт

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 14 января 1999 г.)

Представлен обзор работ по вычислительной гидродинамике, относящихся к исследованиям сверхзвукового обтекания тел, взаимодействия ударных волн, многофазных течений, гипозвуковых течений в устройствах полупроводниковой технологии.

Введение

Благодаря впечатляющему прогрессу в создании вычислительных систем и успехам в разработке методов численного решения нелинейных многомерных задач численное моделирование стало в настоящее время одним из основных методов изучения сложных газодинамических явлений. Математические модели газодинамических явлений отличаются большой сложностью. Кроме того, рассматриваемые течения обычно сопровождаются разнообразными физико-химическими процессами с сильно различающимися временными и пространственными масштабами. Это предъявляет жесткие требования к методике численного моделирования. Решение рассматриваемых задач с приемлемыми затратами ресурсов ЭВМ требует, во-первых, использования оптимальных математических и физических моделей и, во-вторых, эффективных вычислительных алгоритмов, обладающих высокой разрешающей способностью. Важным элементом численного моделирования является построение расчетных сеток. В наших исследованиях применяются подвижные сетки, адаптирующиеся к структуре газодинамического поля. Адаптация сетки, обеспечивающая разрешение тонких деталей исследуемого течения, осуществляется в процессе решения задачи либо путем изменения расположения расчетных узлов при неизменном их общем числе, либо путем добавления или удаления узлов в соответствующих участках расчетной области.

Задачи сверхзвукового обтекания тел

Исследования сверхзвукового обтекания тел представляют интерес для задач аэродинамики и аэрокосмической техники. Современные задачи такого рода характеризуются необходимостью учета эффектов разреженности, вязко-невязкого взаимодействия, отрыва и присоединения потока, широкого набора физико-химических процессов, инициируемых нагревом газа в интенсивных скачках уплотнения. При этом влияние процессов молекулярного или турбулентного переноса оказывается существенным во всей возмущенной области течения, что приводит к необходимости применения уравнений динамики вязкого газа вместо традиционных моделей невязкого течения и пограничного слоя.

Наиболее общей математической моделью течений газа в режиме сплошной среды является система уравнений Навье–Стокса. Наряду с ней в зависимости от конкретных условий применяются и более простые модели "укороченных" и параболизированных уравнений Навье–Стокса [1]. Моделирование турбулентных режимов течения приводится с использованием осреднения по Рейнольдсу и полуэмпирических моделей турбулентного переноса. При учете физико-химических процессов газодинамические уравнения дополняются уравнениями баланса соответствующих составляющих внутренней энергии газа, уравнениями неразрывности для компонент газовой смеси и уравнением переноса излучения [1].

Используемые математические модели приводят к начально-краевым задачам, для решения которых были разработаны эффективные численные методы второго порядка точности, основанные на применении неявных схем постоянного направления [1–3]. В этих методах значения функций на новом шаге по маршевой координате находятся с помощью итераций, в каждой из которых решаются одномерные линейные системы разностных уравнений с блочными трехдиагональными матрицами коэффициентов. При учете неравновесных физико-химических процессов алгоритм расчета включает применение итерационного процесса Ньютона.

Указанная методика численного моделирования применялась для решения широкого круга современных задач сверхзвукового обтекания тел, включающего гиперзвуковое обтекание в условиях движения космических аппаратов в атмосферах планет [4,5], существенно нестационарные течения, возникающие при быстром из-

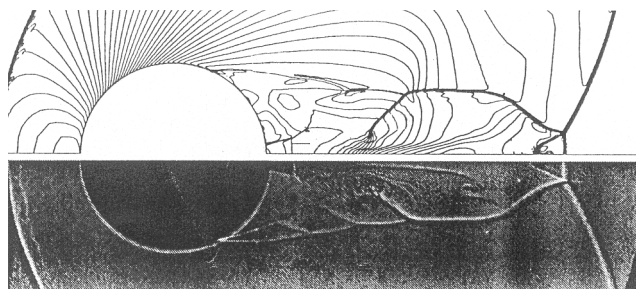


Рис. 1. Дифракция плоской ударной волны на круговом цилиндре. $M_\infty = 3.0$, $\gamma = 1.29$, $Re = 2.07 \cdot 10^5$, $t = 5.8$.

менении условий полета [6–8], обтекание тел в неоднородностях различного происхождения [9–11], отрывные течения. В качестве примера на рис. 1 представлены результаты решения классической задачи о формировании поля течения около кругового цилиндра при воздействии на него плоской ударной волны. На верхней части рис. 1 для одного из моментов времени представлены изолинии плотности, полученные из расчета, нижняя часть — экспериментальная теневая фотография течения, любезно предоставленная М.П.Сыщиковой. Видно, что расчет вполне удовлетворительно воспроизводит все детали наблюдаемой в эксперименте ударно-волновой структуры течения.

Моделирование многофазных течений

Гетерогенные смеси представляют собой, как правило, существенно неравновесные системы, которым присущ большой набор физико-химических процессов, протекающих как внутри каждой из фаз, так и на межфазных границах. Исследование многофазных течений представляет интерес как с точки зрения развития теоретических представлений механики сплошной среды, так и благодаря широкому спектру приложений (проблемы энергетики, химической технологии, транспорта, создания новых материалов и т.п.).

Для численного исследования течений многофазных сред разработан оригинальный лагранжево-эйлеровский алгоритм, который позволяет проводить анализ каждой из фаз наиболее естественным образом: несущая (диспергирующая) фаза описывается при помощи континуальных моделей (Эйлера, Навье–Стокса и т.п.), а дисперсная фаза — дискретной моделью пробных частиц. Такой подход обладает большой гибкостью, позволяющей включать в рассмотрение различные модели компонент гетерогенной смеси, протекающих в них физико-химических процессов и механизмов межфазного переноса. Разработан также алгоритм моделирования реакции конденсированной среды на импульсное высокоэнергетическое воздействие, представляющий собой синтез метода конечных элементов и TVD-схем.

Разработанные алгоритм и программы использовались при моделировании сверхзвукового обтекания тел потоками газа, содержащего твердые частицы или капли воды [14]; эрозионного разрушения тел, обтекаемых сверхзвуковыми запыленными потоками газа [14]; распространения ударных волн в газозвесах, воспламенения газозвесей и перехода горения в детонацию [15]; высокоскоростного взаимодействия капли с твердой преградой или слоем жидкости [16]; распространения ударных и взрывных волн в конденсированных средах, претерпевающих фазовый переход на фронте волны [17].

В качестве примера на рис. 2 представлено сравнение результатов экспериментального исследования (слева) [18] и численного моделирования (справа) взаимодействия цилиндрической капли с твердой преградой.

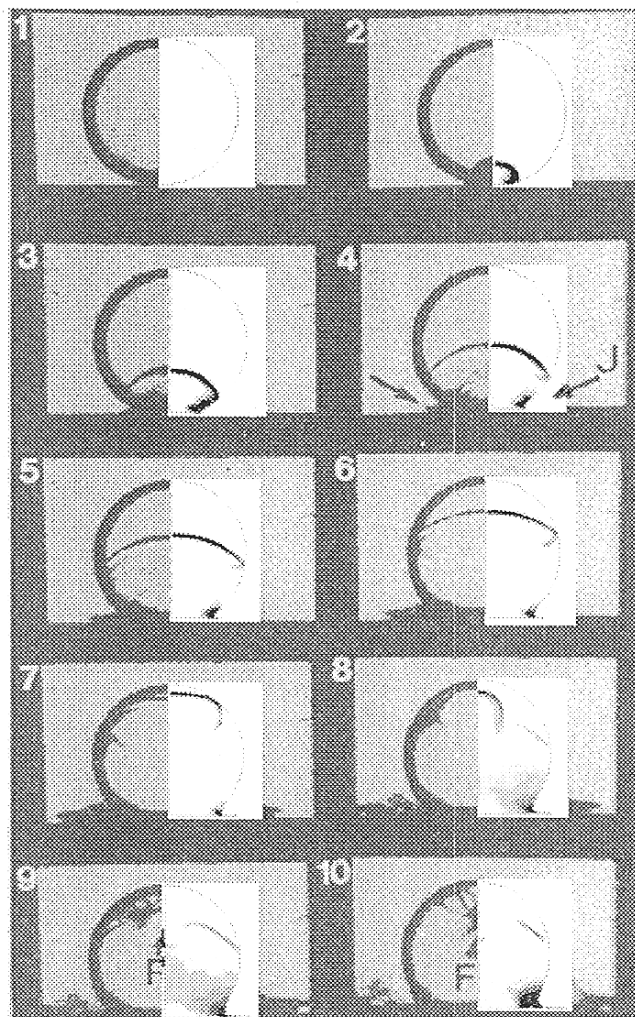


Рис. 2. Взаимодействия цилиндрической капли с твердой преградой. $V = 110 \text{ m/s}$.

Показаны линии равной плотности. Скорость стального ударника, взаимодействующего с боковой поверхностью неподвижной цилиндрической капли, $V = 110 \text{ m/s}$, время между кадрами $1 \mu\text{s}$. Как видно из приведенного сравнения, разработанный алгоритм позволяет получить адекватную картину распространения ударных волн и волн разрежения, образования радиальной пристеночной кумулятивной струи, возникновения и развития кавитационных каверн.

Моделирование гипозвуковых течений

Широкий класс практически важных течений вязкого газа характеризуется малыми (по сравнению со звуковой) скоростями и значительными изменениями температуры. Такие течения реализуются, например, в процессах теплообмена, в проточных импульсно-периодических лазерах, в эпитаксиальных реакторах при выращивании полупроводниковых структур из газовой фазы.

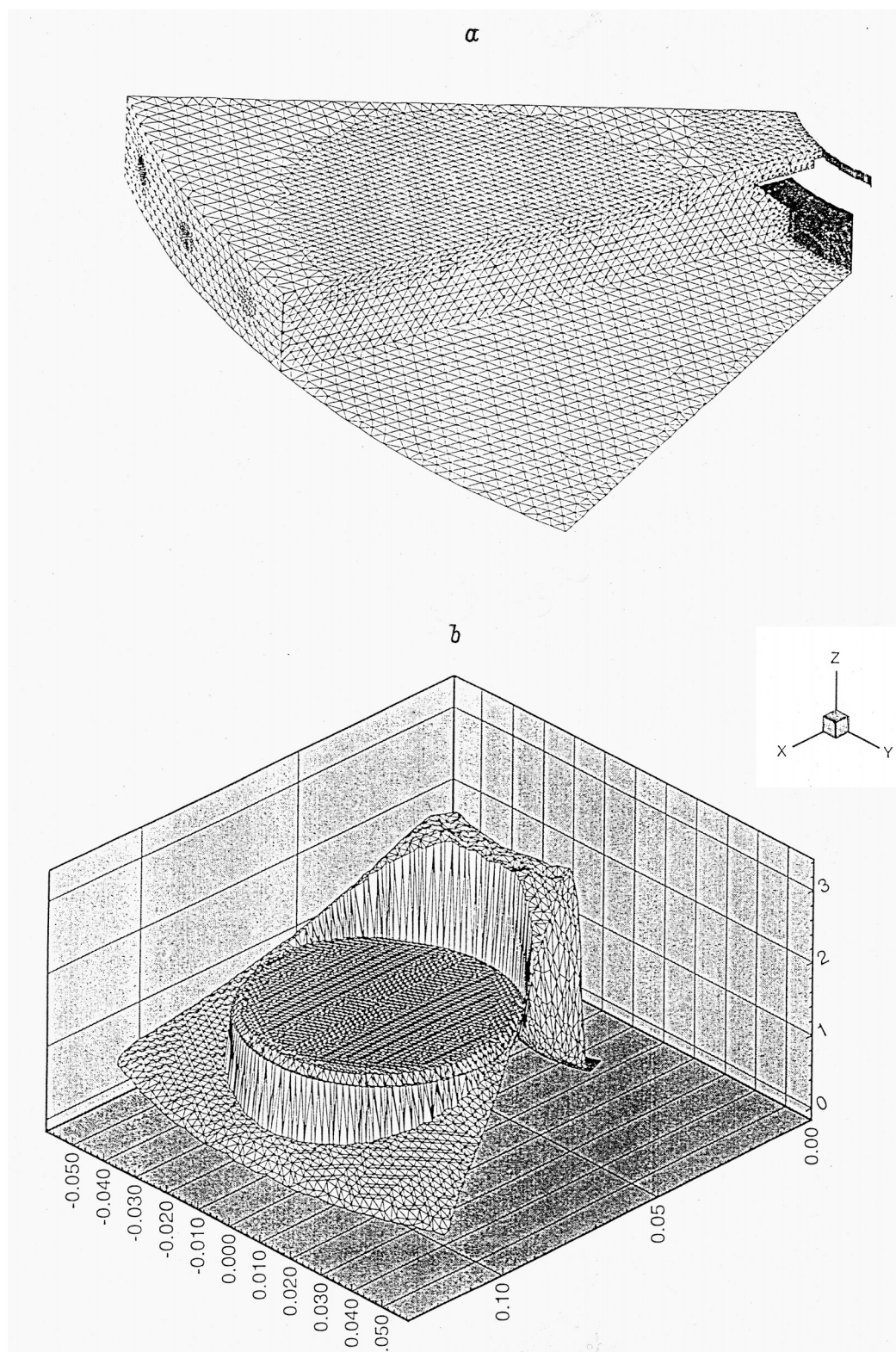


Рис. 3. Расчетная сетка и распределение скорости роста GaAs для планетарного реактора: 1–10 — последовательные моменты времени $\Delta\tau = 1 \mu\text{s}$.

Решение указанного класса задач в рамках известного приближения Буссинеска невозможно. В то же время использование полных уравнений Навье–Стокса приводит к серьезным проблемам, связанным с трудоемкостью расчетов, потерей точности и сложностью постановки граничных условий на проницаемых границах. Наиболее адекватной моделью являются так называемые гипозвуковые уравнения Навье–Стокса, получаемые в пределе малых значений числа Маха и параметра гидростатической сжимаемости.

Для исследования гипозвуковых течений на структурированных сетках был разработан ряд численных методов, основанных на неявной модификации метода Чорина–Херта для несжимаемых течений [19] и блочной итерации [20]. Для ускорения сходимости итераций при нахождении поправки давления был использован метод сопряженных градиентов, а при расчетах течений в простых областях — быстрое преобразование Фурье [21].

Были проведены исследования роста слоев GaAs и твердого раствора AlGaAs в двух- и трехмерной постановке, нестационарных процессов при получении гетероструктур, возможности управления составом эпитаксиального слоя [22–24]. Сочетание макроскопического газодинамического подхода с кинетическим описанием в рамках метода Монте-Карло позволило провести моделирование роста на профилированной поверхности, а модификация численного метода — исследование жидкофазной эпитаксии на движущуюся подложку [25].

В последнее время были разработаны методы расчета гипозвуковых течений на двумерных и трехмерных неструктурированных сетках [26,27]. Для получения количественного описания процессов в реальных технологических установках рассматривается течение неразбавленных газовых смесей, учитываются теплопроводность в твердых блоках и теплообмен излучением.

В качестве примера для планетарного реактора с вращающимися подложками на рис. 3 представлены расчетная сетка (а) и скорость эпитаксиального роста GaAs (b).

Список литературы

- [1] Головачев Ю.П. Численное моделирование течений вязкого газа в ударном слое. М.: Физматлит, 1996.
- [2] Головачев Ю.П., Попов Ф.Д. // ЖВМиМФ. 1972. Т. 12. № 5. С. 1292–1303.
- [3] Белоусов В.Л., Головачев Ю.П., Земляков В.В. // Математическое моделирование. 1994. Т. 6. № 10. С. 66–76.
- [4] Golovachov Yu.P. // Int. J. Heat Mass Tr. 1981. Vol. 4. N 4. P. 649–657.
- [5] Головачев Ю.П., Леонтьева Н.В. // Ученые записки ЦАГИ. 1982. Т. 13. № 5. С. 40–48.
- [6] Головачев Ю.П., Леонтьева Н.В. // Изв. АН СССР. МЖТ. 1989. № 2. С. 186–189.
- [7] Белоусов В.Л., Головачев Ю.П., Леонтьева Н.В. // Моделирование в механике. 1988. Т. 2(19). № 2. С. 31–38.
- [8] Drikakis D., Ofengeim D., Timofeev E., Voinovich P. // J. Fluid and Structures. 1997. Vol. 11. P. 665–691.
- [9] Головачев Ю.П., Леонтьева Н.В. // Изв. АН СССР. 1985. № 3. С. 143–148.
- [10] Головачев Ю.П., Леонтьева Н.В. // ИФЖ. 1986. Т. 51. № 6. С. 955–959.
- [11] Белоусов В.Л., Головачев Ю.П. // Изв. АН СССР. МЖТ. 1990. № 3. С. 183–185.
- [12] Головачев Ю.П., Леонтьева Н.В. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 10. С. 2726.
- [13] Golovachov Yu.P., Leontieva N.V. // Comp. Fluid Dyn. J. 1997. Vol. 5. № 4. P. 439–450.
- [14] Golovachov Yu.P., Ramm M.S., Belousov V.L. et al. // Gas Dynamics / Ed. Yu.P. Koptev. New York: Nova Science, 1992. P. 231–247.
- [15] Куракин Ю.А., Шмидт А.А. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 6. С. 26–32.
- [16] Чижов А.В., Шмидт А.А. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 22. Вып. 3. С. 57–62.
- [17] Чижов А.В., Чистяков В.О., Шмидт А.А. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 9. С. 33–39.
- [18] Lesser M., Field J. // Proc 18th Intern. Symp. on Shock Waves. Sendai, 1991. P. 61–72.
- [19] Жмакин А.И., Макаров Ю.Н. // Математическое моделирование. 1990. Т. 2. № 7. С. 62–84.
- [20] Makarov Yu.N., Subashieva E.A., Zabolotskikh A.N. et al. // Proc. VIII Intern. Conf. Swansea, 1993. P. 1298–1309.
- [21] Kadinskii L.A., Makarov Yu.N., Zhmakin A.I. // Gas Dynamics / Ed. Yu.P. Koptev. New York: Nova Science, 1992. P. 261–278, 1298–1309.
- [22] Makarov Yu.N., Zhmakin A.I. // J. Cryst. Growth. 1989. Vol. 94. P. 537–550.
- [23] Makarov Yu.N., Zhmakin A.I. // Cryst. Res. Technol. 1990. Vol. 25. P. 31–40.
- [24] Makarov Yu.N., Ramm M.S., Subashieva E.A., Zhmakin A.I. // J. Cryst. Growth. 1994. Vol. 145. P. 271–276.
- [25] Garbuzov D.Z., Zhuravkevich E.V., Zhmakin A.I. et al. // J. Cryst. Growth. 1991. Vol. 110. P. 955–959.
- [26] Egorov Yu.N., Zhmakin A.I. // Comput. Mater. Sci. 1998. Vol. 11. P. 204–220.
- [27] Zhmakin A.I. // Comm. Numer. Meth. Engineer. 1997. Vol. 13. P. 219–228.