



Российская Академия Наук

Отделение математических наук

Н.А. Зайцев, Б.В. Критский

**Об одной модели
диффузного интерфейса
для расчета двухфазных течений
однокомпонентных жидкостей**

Москва 2017

УДК 532.5
ББК 22.2
317

ISBN 978-5-906906-55-7

© Российская академия наук, 2017
© Н.А. Зайцев, Б.В. Критский, 2017

Об одной модели диффузного интерфейса для расчета двухфазных течений однокомпонентных жидкостей

Н.А. Зайцев, Б.В. Критский

(ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

Аннотация: В работе рассмотрены методы и подходы для решения задач газовой динамики на высокопроизводительных вычислительных системах. Для них наиболее предпочтительной является организация структурированного доступа в память, поэтому в предлагаемых методах используются декартовы сетки, включая и разновидность с локальной адаптацией. Рассматриваемые методы позволяют на сетках такого типа решать задачи со сложной геометрией, а предлагаемые параллельные алгоритмы для них обеспечивают хорошую масштабируемость на вычислительных системах с массивным параллелизмом.

Ключевые слова: вычислительная газовая динамика, метод свободной границы, декартовы сетки, адаптация сеток, обтекание движущихся тел.

Afendikov A.L., Menshov I.S., Merkulov K.D., Pavlukhin P.V.

Adaptive cartesian grid method for solving gas dynamics problems

Abstract: *Methods and approaches for solving gas dynamics problems on HPC systems are considered. Structured memory access is preferable for these systems so Cartesian grids including sub-type with local adaptation are employed in proposed methods. It is possible to solve problems with complex geometry using considered methods based on such grids and corresponding parallel algorithms provide good strong scalability on massively-parallel computing systems.*

Key words: *computational fluid dynamics, free boundary method, Cartesian grids, mesh refinement, flow past moving bodies gas.*

Вводные замечания

Современная теория межфазных взаимодействий и капиллярных сил восходит своими корнями к работам начала XIX века. В 1804 г. Томас Юнг обосновал теорию капиллярных явлений на принципе поверхностного натяжения. Юнг, Лаплас и Гаусс рассматривали границу раздела между двумя жидкими фазами (интерфейс) как поверхность нулевой толщины, обладающая физическими свойствами, такими как поверхностное натяжение. В этих исследованиях, основанных на рассмотрении равновесных состояний, предполагалось, что физические параметры, такие как плотность, вообще говоря, терпят разрыв на интерфейсе. Физические процессы, такие как капиллярные явления на границе раздела фаз, описывались соответствующими граничными условиями. Позже Пуассон (1831), Максвелл (1876) и Гиббс (1876) на основе представлений о молекулярном строении вещества указали на то, что переход вещества из одной фазы в другую на самом деле занимает зону ненулевой толщины, в которой параметры среды меняются быстро, но гладко, от значений в одной фазе вне зоны перехода до значений в другой фазе. На самом деле, Юнг упоминал наличие градиента плотности в конечном по толщине слое, но отбросил этот эффект, посчитав его несущественным.

Идея о том, что интерфейс имеет ненулевую толщину (т.е. что он является диффузным) была детально разработана Лордом Рэлеем (1892) [1] и Ван дер Ваальсом (1893) [2], которые предложили градиентные теории интерфейса, основанные на термодинамических принципах. В частности, Ван дер Ваальс построил теорию интерфейса, основанную на его уравнении состояния, и использовал ее для вычисления толщины интерфейса и показал, что она стремится к бесконечности при приближении к критической точке. Но в связи с отсутствием в модели поверхности, которая могла бы быть носителем поверхностного натяжения, которое в свою очередь является источником капиллярных сил, в теории диффузного интерфейса возник вопрос об описании капиллярных явлений и сил межфазного взаимодействия. Кортевег (1981) предположил наличие в жидкости сил, возникающих в следствие неоднородности жидкости, и предложил зависимость тензора капиллярных сил от плотности и ее пространственных производных [3]. Градиентная теория неоднородных жидкостей, переоткрытая Каном и Хилардом в 1958 году [4], позволила понять механизм

спинодального распада – расслоения однородного вещества на различные фазы во всем объеме, в котором вещество находится в термодинамически неустойчивых состояниях. Обширную литературу по различным способам обоснования градиентной теории межфазного взаимодействия, вопросам существования сильных и слабых решений этой системы уравнений, численным методам их решений и т.д. можно найти, например, в [5–9].

В отсутствие источников импульса и энергии уравнения градиентной теории в неизотермическом случае имеют вид (см., например, [7,8]) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \hat{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\quad + \quad), \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (E \mathbf{u}) = \nabla \cdot ((\boldsymbol{\tau} + \mathbf{T}) \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{j}_E, \quad (3)$$

где ρ – плотность, \mathbf{u} – вектор скорости, тензор вязких напряжений

$$\hat{\mathbf{u}} = \eta (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (4)$$

η и μ – коэффициенты вязкости, поток тепла

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (5)$$

T – температура, k – коэффициент теплопроводности, поток энергии, связанный с капиллярными эффектами,

$$\mathbf{j}_E = K (\rho \nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \rho, \quad (6)$$

тензор капиллярных сил

$$\mathbf{T} = \left(-P + \rho K \Delta \rho + \frac{1}{2} K |\nabla \rho|^2 \right) \mathbf{I} - \nabla \rho \otimes \nabla \rho, \quad (7)$$

называемый также тензором Кортвега. Этот же тензор содержит часть, связанную с градиентом термодинамического давления P . Полная энергия единицы объема

$$E = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{2} K |\nabla \rho|^2, \quad (8)$$

где K – пропорциональный коэффициенту поверхностного натяжения коэффициент капиллярной (градиентной) энергии, ε – внутренняя энергия единицы массы.

Для замыкания системы уравнений – необходимы функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$.

1. Уравнение состояния для двухфазной области

В подавляющем числе работ по двухфазным жидкостям (жидкостям, которые могут находиться в двух различных фазах) используется аналитическое уравнение состояния типа Ван-дер-Ваальса, которое описывает существенные свойства таких жидкостей: наличие критической температуры T_{crit} такой, что при температуре жидкости больше T_{crit} при изменении давления фазового перехода не происходит, а при температуре ниже T_{crit} существует давление насыщения $P_s(T)$, отделяющее область параметров, соответствующих жидкой фазе, от области параметров газообразной фазы.

Для жидкости Ван-дер-Ваальса давление, температура, плотность и внутренняя энергия связаны следующими соотношениями:

$$T(\varepsilon, \rho) = \frac{1}{c_v}(\varepsilon + a\rho), \quad P(\varepsilon, \rho) = \frac{\rho b R T(\varepsilon, \rho)}{b - \rho} - a\rho^2, \quad (9)$$

где R – универсальная газовая постоянная, параметры a и b связаны с параметрами вещества в критической точке следующим образом:

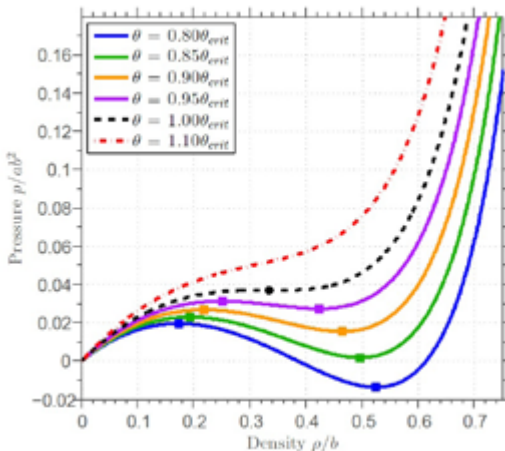


Рис. 1. Зависимость давления от плотности при различных значениях безразмерной температуры θ жидкости Ван-дер-Ваальса.

$$P_{crit} = \frac{ab^2}{27}, \quad \rho_{crit} = \frac{b}{3}, \quad T_{crit} = \frac{8ab}{27R}.$$

На Рис. 1 показаны графики зависимости давления от температуры при различных значениях безразмерной температуры $\theta = T/T_{crit}$. При $T > T_{crit}$ функции $P(\rho)$ являются монотонно возрастающими, и нет двух различных фаз. При $T < T_{crit}$ функция $P(\rho)$ имеет два локальных экстремума, и при некоторых значениях давления обратная функция является трехзначной. В области трехзначности функции $\rho(P)$ левое значение соответствует газообразной фазе вещества, правое – жидкой фазе, среднее значение физически не реализуемо.

Таким образом, при некоторых значениях температуры и давления жидкости Ван-дер-Ваальса могут сосуществовать две фазы. Для этого должны быть равны также химические потенциалы фаз. Это требование удовлетворяется с помощью правила Максвелла.

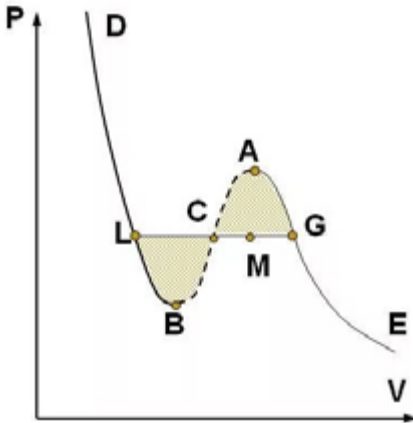


Рис. 2. Схематическое изображение зависимости давления от удельного объема при температуре $T < T_{crit}$.

Рассмотрим график зависимости давления в жидкости Ван-дер-Ваальса от удельного объема $V = 1/\rho$ при заданной температуре $T < T_{crit}$, схематически изображенной на рис. 2. Равновесие газообразной и жидкой фаз реализуется при током положении горизонтальной линии LG, соответствующей давлению насыщения P_s , что площади заштрихованных фигур LBC и CAG равны. Давление насыщения $P_s(T)$ является функцией температуры, при котором фазы находятся в равновесии.

Об одной модели диффузного интерфейса для расчета двухфазных течений однокомпонентных жидкостей

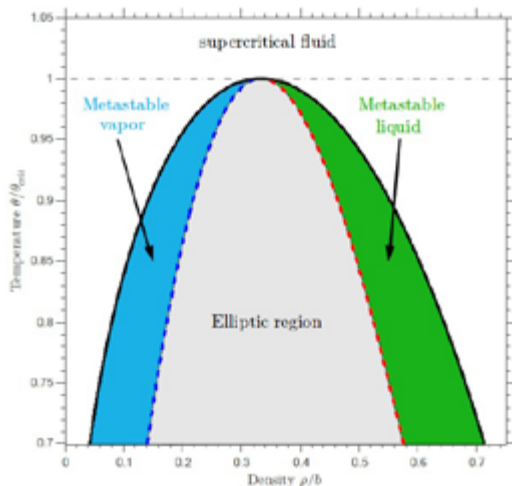


Рис. 3. Схематическое разбиение плоскости (ρ, T) для жидкости Ван-дер-Ваальса на зоны суперкритической жидкости, метастабильного пара, метастабильной жидкости, зоны эллиптичности и термодинамически устойчивых зон.

Точки L и G рис. 2 соответствуют состояниям Максвелла (точки равновесного сосуществования жидкой и газообразной фаз). Множество этих точек для разных температур образуют в плоскости (ρ, T) бинадальные кривые, которые изображены на Рис. 3 сплошной черной линией. Точки A и B рис. 2 образуют в плоскости (ρ, T) спинадальные кривые, показанные на Рис. 3 штриховыми линиями.

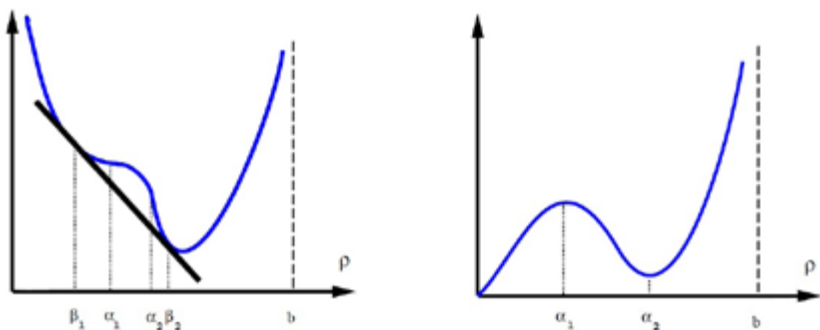


Рис. 4. Слева: схематическое изображение функции свободной энергии единицы объема жидкости Ван-дер-Ваальса при фиксированной температуре $T < T_{crit}$, наклонная прямая – общая касательная для двух точек; справа: схематическое изображения соответствующей функции плотности

В областях между спиноподальной кривой и биноподальной кривой вещество находится в метастабильном состоянии: перегретая жидкость и переохлажденный пар. Область над биноподальной кривой является зоной термодинамически устойчивых состояний. Область под спиноподальной кривой называется областью эллиптичности. Дело в том, что при формальном использовании уравнений состояния (9) в этой области параметров «гиперболическая» часть системы определяющих уравнений (1)–(8), которая получается пренебрежением в ней вязкими, теплопроводными и капиллярными явлениями, теряет свою гиперболичность: собственные числа, которые определяют наклон звуковых характеристик, становятся мнимыми, и система уравнений становится неэволюционной.

Спиноподальные и биноподальные кривые можно получить также другим способом. Уравнению состояния (9) соответствует следующая функция свободной энергии единицы объема:

$$W(\rho, T) = RT\rho \ln\left(\frac{b}{b-\rho}\right) - a\rho^2. \quad (10)$$

На Рис. 4 слева схематически показана изотерма свободной энергии $W(\rho)$ жидкости Ван-дер-Ваальса для $T < T_{crit}$. На том же рисунке справа показана соответствующая функции зависимость давления P . Точки $\rho = \alpha_1$ и $\rho = \alpha_2$ являются точками локальных экстремумов (максимума и минимума соответственно) функции $P(\rho)$ и точками нулевой кривизны функции $W(\rho)$ (точки В и А на Рис.2). Слева на Рис. 4 показана касательная прямая к кривой $W(\rho)$. Точки касания $\rho = \beta_1$ и $\rho = \beta_2$ совпадают с состояниями Максвелла (точки L и G на рис. 2). Таким свойством обладают не только жидкости Ван-дер-Ваальса, но и все жидкости, подчиняющиеся законам термодинамики. Таким образом, точки бинодалей можно определить как точки касания прямой «снизу» кривой $W(\rho)$. Следовательно, область параметров, в которой система уравнений теряет гиперболичность есть у всех жидкостей с невыпуклой функцией свободной энергии.

Такое свойство уравнений состояния не является критичным для классического описания взаимодействия фаз, в котором интерфейс является поверхностью нулевой толщины, на которой ставятся условия непрерывности температуры и нормальной компоненты скорости, а также перепад давления в фазах (формула Лапласа):

$$\Delta P = K \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right),$$

где R_1 и R_2 радиусы главных кривизн в точке интерфейса. Если учитываются эффекты теплопроводности, то ставится также условия непрерывности нормального потока тепла. В вязкой жидкости дополнительно ставится непрерывность касательных скоростей. Плотность жидкости при таком моделировании двухфазных жидкостей никогда не оказывается в области эллиптичности: если при заданной температуре попытаться сжать паровую фазу так, чтобы плотность стала больше α_1 , то вещество перейдет в жидкую фазу. Аналогично, при уменьшении плотности жидкой фазы левее точки $\rho = \alpha_2$ вещество перейдет в паровую фазу. Плотность никогда не оказывается в интервале $(\alpha_1(T), \alpha_2(T))$.

Иначе обстоит дело у модели диффузного интерфейса: плотность в области между чистыми фазами проходит все промежуточные значения, включая те, при которых «гиперболическая» часть задачи, как отмечалось выше, теряет гиперболичность, приобретает мнимую скорость звука, а система уравнений – неэволюционность: задача Коши для эллиптической системы некорректна, так как возмущения в начальных данных растут неограниченно быстро.

Диссипация делает задачу параболической, эволюционной, но диссипативные слагаемые начинают играть заметную роль только когда возмущения разовьются достаточно сильно, т.е. решение такой задачи должно иметь осцилляционный характер.

На рис. 5 приведен результат расчета плотности жидкости Ван-дер-Ваальса в периодической задаче с начальными данными, лежащими в области эллиптичности (на рис. 5 пунктирная линия в окрестности $\rho = 120$ кг/м³). Штрих-пунктирная, штриховая и сплошная линии соответствуют моментам времени $t = 0.11$ мс, $t = 0.12$ мс и $t = 0.135$ мс.

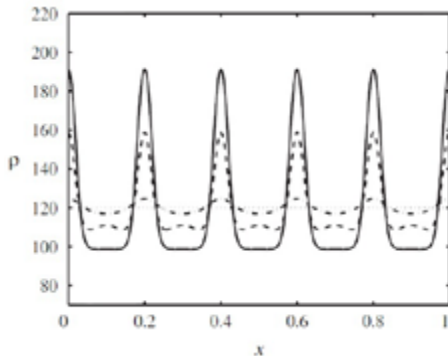


Рис. 5. Плотность в различные моменты времени для периодической задачи с начальными данными в области эллиптичности (взято из [10]).

Есть два часто используемых пути борьбы с этой сложностью.

Первый путь заключается в том, чтобы подробно разрешать все осцилляции решения. Но это очень дорого. Мало того, что толщина интерфейса обычно гораздо меньше характерных размеров задачи (размеров пузырьков, размеров расчетной области и т.д.), но характерный размер осцилляций многократно меньше толщины интерфейса. Кроме того, такой результат, даже если он будет получен, представляет собой сомнительную ценность: фактически в зоне интерфейса будет располагаться несколько переходов из одной фазы в другую с соответствующим изменением плотности. Звуковая волна, падающая на такой интерфейс из глубины однофазной области, будет отражаться от каждого перепада плотности, чего фактически не наблюдается, так как прохождение звуковых волн через поверхность раздела фаз хорошо согласуется с моделью интерфейса нулевой толщины, в которой плотность меняется от значений в одной фазе до значений в другой однократно.

Второй путь заключается в применении численных методов, которые подавляют возникновение осцилляций в решении. Это приводит к физически разумным решениям в модельной ситуации, когда известно, что в решении должен присутствовать изолированный межфазный интерфейс. Но такие численные схемы могут существенно исказить мелкомасштабные свойства решений сложных задач (мелкие капли, пузыри, взаимодействие «разрывов» и т.д.).

Мы предлагаем третий вариант решения проблемы.

Отметим, прежде всего, что свойства вещества в двухфазной области неочевидны. В реальных средах свойства достаточно далеки от свойств среды Ван-дер-Ваальса. В областях однофазности эти свойства определяются экспериментально. Для области эллиптичности предполагается, что зависимость имеет тот же вид, что и у среды Ван-дер-Ваальса, и определяется как аналитическое продолжение функции из областей однофазности. Правомерность такого продолжения не очевидна. Такое же мнение высказано в [4, стр. 376]: «Корректно ли предсказывается в спиноподобной области зависимость давления от плотности аналитическим продолжением уравнения состояния, полученного теоретически или экспериментально для стабильных и метастабильных однородных жидкостей, есть важный нерешенный теретический вопрос».

Вообще, точность описания узкой зоны межфазных интерфейсов уравнениями континуальной равновесной механики вызывает сомнения.

Главное, что нужно от уравнений сплошной среды в этой области, чтобы их решения были физически разумными и согласовывались с результатами экспериментов. В первую очередь для рассматриваемых явлений существенными являются задача Стефана, прохождение возмущения через границу раздела фаз, капиллярные эффекты. Поэтому мы предлагаем третий способ описания переходной зоны между двумя фазами. Опишем его суть на примере среды Ван-дер-Ваальса, т.е. среды с уравнением состояния типа Ван-дер-Ваальса.

На рис. 2 схематически показана зависимость давления от удельного объема $V = 1/\rho$ для уравнения состояния при некотором значении температуры $T < T_{crit}$. Горизонтальная линия LG показана на этом рисунке для того, чтобы найти такое ее положение и соответствующее ему значение давления, которое по правилу Максвелла является давлением насыщения $P_S(T)$, чтобы площади заштрихованных фигур LBC и CAG были равны. Мы предлагаем изменить уравнение состояния Ван-дер-Ваальса путем замены в зависимости $P(V)$ участка LBAG на прямую LG. Иными словами, мы предлагаем считать, что

$$P(\rho, T) = P_S(T) \text{ при } \beta_1(T) < \rho < \beta_2(T), \quad (11)$$

где $\beta_1(T)$ – плотность паровой фазы при $P = P_S(T)$, а $\beta_2(T)$ – плотность жидкой фазы при том же давлении. В терминах функции свободной энергии эта процедура эквивалентна замене невыпуклой зависимости от плотности при заданной температуре на выпуклую путем замены функции Ван-дер-Ваальса $W(\rho)$ на касательную к ней в точках $\rho = \beta_1(T)$ и $\rho = \beta_2(T)$ при

$$\beta_1(T) < \rho < \beta_2(T).$$

Для реальных газов это правило звучит следующим образом. Пусть термодинамические свойства чистых фаз известны. В том числе известны зависимости давления насыщения $P_S(T)$, $\beta_1(T) = \rho_G(P_S, T)$ и $\beta_2(T) = \rho_L(P_S, T)$ (ρ_G и ρ_L – плотности газовой и жидкой фаз соответственно). Тогда для двухфазной области $\beta_1(T) < \rho < \beta_2(T)$ давление $P = P_S(T)$. Чтобы получить величины свободной энергии на этом отрезке, нужно соединить прямой линией значения на границах двухфазной области.

Состояние жидкости в двухфазной области можно трактовать по-разному. Предложенное выше правило эквивалентно тому, что на самом деле в каждом элементарном объеме, который в расчетах называется точкой, присутствуют обе фазы. В области «чистых» фаз содержание другой фазы исчезающе мало, а на интерфейсе, меняя концентрацию, скажем, жидкой фазы от 0 до 1 при заданных давлении и температуре, мы получим в плоскости $(\varepsilon, 1/\rho)$ изолинию, соединяющую точки L и G. Легко показать, что эти изолинии будут прямыми линиями. Такие изолинии показаны на рис. 6 для жидкости Ван-дер-Ваальса, параметры которой подобраны так, чтобы приблизить свойства воды.

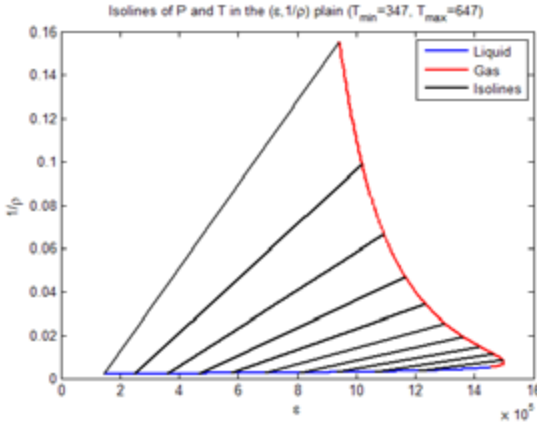


Рис 6. Изолинии давления и температуры (черные) и линии насыщения в жидкости (синяя) и в газе (красная).

Прямые, соединяющие точки

$$(V = 1/\rho_L(P_s(T), T), \varepsilon = \varepsilon_L(P_s(T), T))$$

и $(V = 1/\rho_G(P_s(T), T), \varepsilon = \varepsilon_G(P_s(T), T))$, которые лежат на границах области двухфазности, образуют однопараметрическое семейство заметающих двухфазную область прямых, зависящих от параметра T . Чтобы найти значения температуры T_0 и давления P_0 , соответствующие точке (ρ_0, ε_0) , лежащей в области межфазового перехода, ищется такое значение температуры T_0 , при котором прямая в пространстве (ε, V) из описанного выше семейства пройдет через точку $(\varepsilon_0, V_0 = 1/\rho_0)$. После этого давление восстанавливается по формуле $P_0 = P_s(T_0)$.

Таким образом, предложенный подход позволяет построить уравнение состояния в двухфазной области по известным свой-

ствам жидкости в однофазных областях. При этом изотермы $P(\rho)$ будут неубывающими функциями, функция свободной энергии $W(\rho)$ будет выпуклой функцией, и система уравнений, описывающих движение двухфазной жидкости, будет эволюционной при всех значениях термодинамических параметров.

2. Численный метод

Система законов сохранения может быть представлена в векторном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{F}^E + \mathbf{F}^{NS}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{G}^E + \mathbf{G}^{NS}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mathbf{H}^E + \mathbf{H}^{NS}) = \mathbf{R}, \quad (12)$$

где верхним индексом «NS» обозначены потоки \mathbf{F} , \mathbf{G} и \mathbf{H} , соответствующие вязким, капиллярным и теплопроводным слагаемым, а индексом «E» помечены потоки, связанные с недиссипативными слагаемыми,

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ U \\ V \\ W \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \end{pmatrix} = \rho \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ v \\ w \\ e \end{pmatrix}.$$

Для расчета решения на верхнем временном слое используется расщепление по физическим процессам.

Для каждой подзадачи (гиперболической и параболической) решение на новом временном слое вычисляется с помощью «дивергентного замыкания», соответствующего системе законов сохранения:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{m,j,k}^{n+1} = & \mathbf{Q}_{m,j,k}^n + \tau \mathbf{R}_{m,j,k}^n - \frac{\tau}{h_x} [\mathbf{F}_{m+1/2,j,k} - \mathbf{F}_{m-1/2,j,k}] \\ & - \frac{\tau}{h_y} [\mathbf{G}_{m,j+1/2,k} - \mathbf{G}_{m,j-1/2,k}] - \frac{\tau}{h_z} [\mathbf{H}_{m,j,k+1/2} - \mathbf{H}_{m,j,k-1/2}], \end{aligned} \quad (13)$$

где m , j и k – номера точек сетки по x , y и z , n – номер шага по времени, h_x , h_y и h_z – шаги сетки вдоль x , y и z , τ – величина шага по времени. Для свойств схемы определяющую роль играет способ вычисления потоков.

Для вычисления решения на новом слое сначала решается уравнение Эйлера

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^E}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}^E}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}^E}{\partial z} = \mathbf{R}^E \quad (14)$$

по схеме

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{m,j,k}^E = \mathbf{Q}_{m,j,k}^n + \tau \mathbf{R}_{m,j,k}^E - \tau & \frac{\mathbf{F}^E(\mathbf{Q}^n)_{m+1/2,j,k}^{n+1/2} - \mathbf{F}^E(\mathbf{Q}^n)_{m-1/2,j,k}^{n+1/2}}{h_x} \\ & - \tau \frac{\mathbf{G}^E(\mathbf{Q}^n)_{m,j+1/2,k}^{n+1/2} - \mathbf{G}^E(\mathbf{Q}^n)_{m,j-1/2,k}^{n+1/2}}{h_y} \\ & - \tau \frac{\mathbf{H}^E(\mathbf{Q}^n)_{m,j,k+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{H}^E(\mathbf{Q}^n)_{m,j,k-1/2}^{n+1/2}}{h_z} \end{aligned} \quad (15)$$

(процедура вычисления потоков описана в следующем параграфе), затем решается уравнение для диссипативных членов:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^{NS}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}^{NS}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}^{NS}}{\partial z} = \mathbf{R}^{NS} \quad (16)$$

по схеме

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{m,j,k}^{n+1} = \mathbf{Q}_{m,j,k}^E + \tau \mathbf{R}_{m,j,k}^{NS} - \tau & \frac{\mathbf{F}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m+1/2,j,k}^{n+1/2} - \mathbf{F}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m-1/2,j,k}^{n+1/2}}{h_x} \\ & - \tau \frac{\mathbf{G}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m,j+1/2,k}^{n+1/2} - \mathbf{G}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m,j-1/2,k}^{n+1/2}}{h_y} \\ & - \tau \frac{\mathbf{H}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m,j,k+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{H}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m,j,k-1/2}^{n+1/2}}{h_z}. \end{aligned} \quad (17)$$

Способ разбиения правой части на два слагаемых достаточно произволен и выбирается из удобства, важно лишь, чтобы

$$\mathbf{R}^E + \mathbf{R}^{NS} = \mathbf{R}.$$

Такая схема имеет первый порядок точности по времени и обеспечивает строгую консервативность.

Для решения параболической задачи использовалась простейшая явная разностная схема второго порядка аппроксимации по пространству, так как в настоящей работе интерес представляли

свойства решений предложенной модели, а не численная эффективность. Для решения гиперболической подзадачи в виду отсутствия зон больших градиентов необходимо использовать монотонную схему.

3. Решение гиперболической подзадачи

Вычисление потоков для гиперболической задачи должно осуществляться с помощью монотонной или, по крайней мере, безосцилляционной схемы. Для рассматриваемой задачи дополнительной трудностью является тот факт, что потоки не являются однородными функциями второго порядка консервативных величин (именно на однородности основаны большинство методов расщепления потоков на положительные и отрицательные). В данной работе мы используем явную часть метода вычисления потоков, предложенную в [12], модифицированного добавлением HLL-осреднения [13] величин на грани расчетной ячейки.

Потоки \mathbf{F} , \mathbf{G} и \mathbf{H} для гиперболической части задачи вычисляются единообразно и одномерным образом. Поэтому опишем процедуру вычисления эйлеровых потоков на примере уравнения

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = \mathbf{R}, \quad (18)$$

которое может быть также записано в недивергентном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{a}(\mathbf{Q}) \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = \mathbf{R}, \quad (19)$$

где $\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}}$.

В силу гиперболичности системы матрица \mathbf{a} представима в виде $\mathbf{a} = \mathbf{\Phi}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Phi}$, где матрица $\mathbf{\Phi}$ состоит из левых собственных векторов матрицы \mathbf{a} , а на диагонали диагональной матрицы $\mathbf{\Lambda}$ стоят соответствующие собственные числа.

Для расчета потоков на грани ячейки $\mathbf{F}_{m+1/2}$ используется уравнение с «замороженной» матрицей $\mathbf{a}_{m+1/2}^* = \mathbf{a}(\mathbf{Q}^{hll})$:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{a}^* \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = \mathbf{R}. \quad (20)$$

\mathbf{Q}^{hll} – среднее значение \mathbf{Q} Хартена-Лакса-ван-Лира [13]:

$$\mathbf{Q}^{hll} = \frac{\lambda_{\max} \mathbf{Q}_{m+1} - \lambda_{\min} \mathbf{Q}_m + \mathbf{F}(\mathbf{Q}_m) - \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{m+1})}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}},$$

где

$$\lambda_{\max} = ((\lambda_{\max})_{m+1} + (\lambda_{\max})_m) / 2, \quad \lambda_{\min} = ((\lambda_{\min})_{m+1} + (\lambda_{\min})_m) / 2.$$

Если умножить уравнение слева на k -й собственный вектор φ_k^* (k -ю строку матрицы Φ^*), то получится уравнение для k -го инварианта системы (20):

$$\frac{\partial I_k}{\partial t} + \lambda_k^* \frac{\partial I_k}{\partial x} = \varphi_k^* \cdot \mathbf{R},$$

где $I_k = \varphi_k^* \cdot \mathbf{Q}$ – величина, которая при нулевой правой части переносится вдоль k -й характеристики без изменения. Именно эти величины используются для вычисления потока $\mathbf{F}_{m+1/2}$.

Введем число Куранта, соответствующее k -му собственному числу: $q_k = \lambda_k \tau / h$. Тогда формулы для определения k -го инварианта на грани расчетной ячейки $x = x_{m+1/2}$ определяются величиной q_k^* . Если $0 < q_k^* < 1$, то значение инварианта переносится из левой ячейки:

$$(I_k)_{m+1/2} = (I_k)_m^n, \quad (21)$$

если $-1 < q_k^* < 0$, то

$$(I_k)_{m+1/2} = (I_k)_{m+1}^n. \quad (22)$$

После того как все инварианты на грани найдены, по ним восстанавливаются значения консервативных величин на грани по формуле:

$$\mathbf{Q}_{m+1/2} = (\Phi_{m+1/2}^*)^{-1} \mathbf{I}_{m+1/2}. \quad (23)$$

Окончательно, поток $\mathbf{F}^E (\mathbf{Q}^n)_{m+1/2}^{n+1/2} \equiv \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{m+1/2})$.

4. Численные эксперименты

Для проверки работоспособности предложенной конструкции термодинамических свойств в двухфазной области были проведе-

ны расчеты одномерной задачи Стефана и трехмерной задачи об эволюции пузырька, окруженного жидкой фазой.

4.1 Задача Стефана

В этом численном эксперименте проводится сравнение расчетов, проведенных в соответствии с изложенной выше моделью диффузного интерфейса, с расчетами модельной задачи Стефана.

По предложенному методу решались уравнения Эйлера с теплопроводностью (вязкие силы и поверхностное натяжение в этой задаче несущественны). Для замыкания задачи в однофазных областях использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса с константами $a = 1706 \text{ Н} \cdot \text{м}^4 / \text{кг}^2$, $b = 588.2 \text{ кг} / \text{м}^3$, $R = 461.5 \text{ Дж} / (\text{кг} \cdot \text{К})$. Давление, плотность и температура обезразмеривались по их значениям в критической точке.

На единичном отрезке задавались начальные условия: $\rho(x, 0) = 1.4936$, $\varepsilon(x, 0) = 3.997$ (жидкость вблизи линии насыщения). Соответствующие температура и давление $T(x, 0) = 0.943$, $P(x, 0) = 0.7875$. На правой границе ставилось условие непротекания и задавалась температура. В начальный момент времени температура на правой границе мгновенно повышалась до $T_R = 1$ (до критической температуры). На левой границе ставилось условие нулевого градиента. Под действием притока тепла жидкость начала испаряться (переходить в газовую фазу).

Результаты расчетов данной задачи на основе уравнений законов сохранения сравнивались с решением соответствующей модельной задачи Стефана для уравнения теплопроводности (см. [11]). На межфазной границе ставилось дифференциальное условие Стефана:

$$k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{\Gamma_{gl}} - k_2 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{\Gamma_{gl}} = \lambda \rho_l V_{gl}$$

где λ – скрытая теплота перехода, ρ_l – плотность жидкой фазы (предполагается, что происходит испарение), Γ_{gl} – межфазная граница, а V_{gl} – скорость её движения.

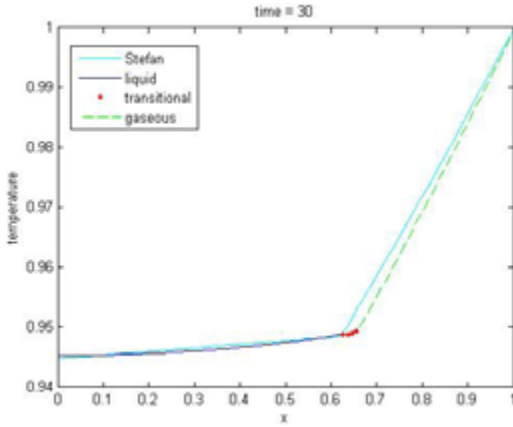


Рис. 7. Температура при $t = 30$, полученная в задаче Стефана и из законов сохранения.

Слева и справа от границы эволюция системы описывается уравнением теплопроводности:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} T_1 = a_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_1, & 0 < x < \Gamma_{gl}, \\ \frac{\partial}{\partial t} T_2 = a_2^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_2, & \Gamma_{gl} < x < 1, \end{cases}$$

где $a_{1,2}$ – коэффициенты температуропроводности, $k_{1,2}$ – коэффициенты теплопроводности. На межфазной границе, как сказано выше, температура постоянна:

$$T_1|_{\Gamma_{gl}} = T_2|_{\Gamma_{gl}} = T_B$$

где T_B – температура кипения.

В качестве начального распределения температуры в задаче Стефана использовалось решение полной системы законов сохранения в момент времени $t = 12$. За температуру кипения была принята срединная температура области межфазового перехода в решении полной системы законов сохранения: $T_B = 0.949$.

На рис. 7 представлены графики температуры, полученные решением двух задач до момента безразмерного времени $t = 30$: голубая сплошная линия – решение задачи Стефана, сплошная синяя линия – решение законов сохранения в точках, которые

находятся в жидкой фазе, штриховая зеленая линия – решение законов сохранения в точках, которые находятся в газовой фазе, пунктирная красная линия – решение законов сохранения в точках, которые находятся в двухфазной области. Видно, что между решениями имеется хорошее совпадение. Фронт фазового перехода в задаче Стефана для уравнения теплопроводности движется немного быстрее, чем в газодинамической задаче, но на этих временах все время остается внутри области двухфазности (в зоне размазанного интерфейса). Несколько большую скорость продвижения межфазной границы в модельной задаче можно объяснить тем, что в этой постановке задачи Стефана приток тепла не расходуется на изменение скорости вещества и его плотности, за исключением самого фазового перехода.

4.2 Остывающий пузырек, окруженный жидкостью

В этом численном эксперименте проводился расчет эволюции сферического пузырька на декартовой сетке под воздействием остывания его за счет излучения энергии.

В начальный момент времени сферический пузырек пара покоился в окружении покоящейся жидкой фазы. Такой покой возможен только на линии насыщения. В расчетах использовались следующие значения параметров: температура $T = 342^\circ\text{C}$, давление $P = 15$ МПа.

При $t = 0$ внутри пузырька включился отток энергии (через правую часть). На границах расчетной области ставились «мягкие» граничные условия, которые в некотором приближении позволяют моделировать безграничность объема, заполненного жидкой фазой.

Термодинамические свойства среды в области однофазности соответствуют свойствам реальной воды, аппроксимационные формулы для которых взяты из [13]. В области двухфазности уравнение состояния было получено предложенным выше образом.

Расчеты показали, что в результате понижения температуры в пузырьке, как и ожидалось, радиус пузырька стал уменьшаться. На рис. 8–10 показаны размеры пузырька в начальный момент времени, средний и в конце времени моделирования (расчет проводился на декартовой сетке по 201 ячейке в каждом направлении). В качестве границы пузырька принята поверхность постоянной плотности (изохора).

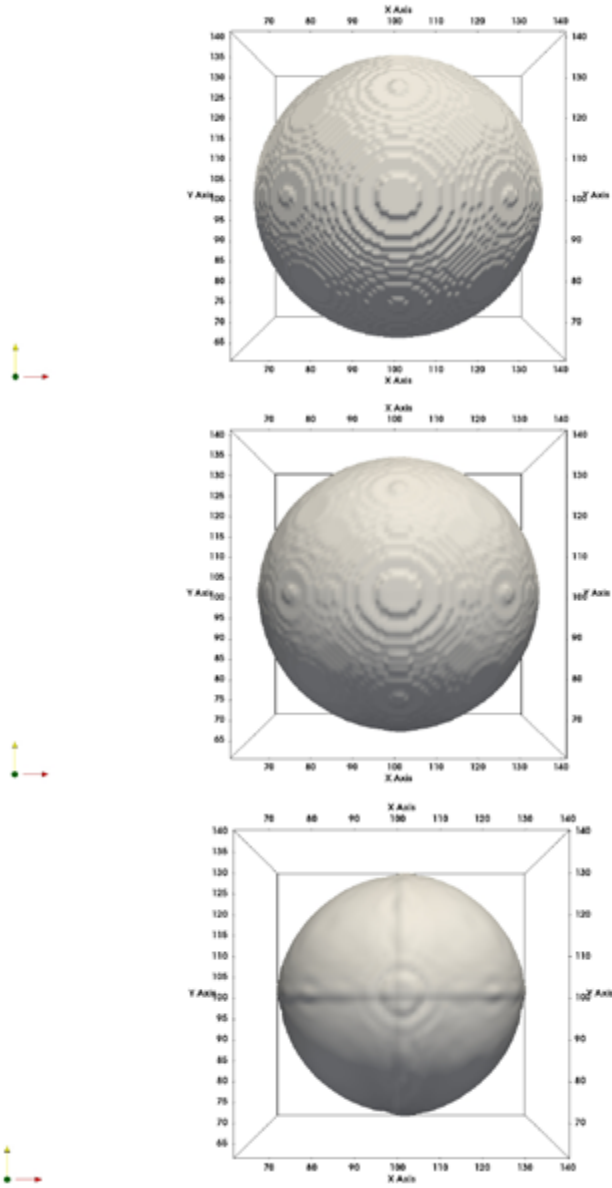


Рис. 8–10. Размеры пузырька в различные моменты времени (изохорная поверхность).

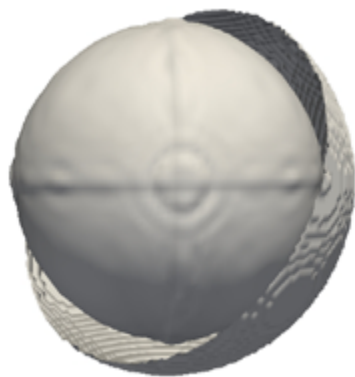


Рис. 11. Начальный и конечный размеры пузырька (поверхности изохоры).

На рис. 11 показаны начальный вид пузырька (половина сферы удалена) и конечный. Видимое перемещение внешней границы пузырька осуществляется, главным образом, за счет переноса этой поверхности потоком вещества (воды), устремившегося к центру пузырька в результате падения давления в охлаждаемом пузырьке.

На рис. 12 Показаны поверхности постоянной плотности в средний момент времени, при этом половина внешней поверхности убрана (она соответствует внешней границе пузырька). Видно, что в результате охлаждения в центре пузырька возникает и растет капелька сконденсировавшегося пара, то есть движение внутренней поверхности осуществляется навстречу двигающемуся к центру потоку вещества за счет фазового перехода.

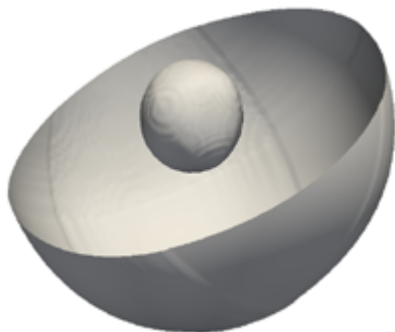


Рис. 12. Поверхности постоянной плотности в средний момент времени (половина внешней поверхности удалена).

Выводы

В работе сформулирован метод построения термодинамических свойств двухфазных жидкостей в области двухфазности, обеспечивающий в этой области сохранение эволюционности (неэллиптичности) уравнений модели диффузного интерфейса Навье-Стокса-Кортевега. Полученная этим методом зависимость давления от плотности при постоянной температуре является неубывающей, а функция свободной энергии выпуклой.

Проведены численные эксперименты, подтверждающие работоспособность метода. В частности, показано, что решение задачи о продвижении фронта испарения под воздействием теплопроводности, полученное данным методом, близко к решению задачи Стефана. Показано, что данный метод позволяет в режиме сквозного счёта отслеживать эволюцию межфазных границ (возникновение, передвижение, исчезновение пузырей и капель).

Исследование выполнено за счет Российского научного фонда (проект № 14-21-00025).

Список литературы

1. *Lord Rayleigh*. 1892. On the theory of surface forces – II. Compressible fluids. *Philosophical Magazine*, XXXIII, pp. 209–220, 1892.
2. *Van der Waals J.D.* 1893. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous density variation. *Transl. JS Rowlinson*, 1979, in *J. Stat. Phys.* 20:197–244 (From Dutch, German, French).
3. *Korteweg D.J.* 1901. Sur la forme que prennent es ´equations du mouvements des fluides si l’on tient compte des forces capillaires caus´ees par des variations de densit´e consid´erables mais continues et sur la th´eorie de la capillarit´e dans l’hypoth`ese d’une variation continue de la densit´e. *Arch. N´eerl. Sci. Exactes Nat. Ser. II* 6:1–24.
4. *J.W. Cahn* and *J.E. Hilliard*. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *J. Chem. Phys.*, 28, 258 (1958).
5. Труды ИБРАЭ РАН. Вып. 14: Методы прямого численного моделирования в двухфазных средах / Ред. Л.А. Большов. – М.: Наука, 2013, 197 с.
6. *Davis H.T.* and *Scriven L.E.* Stress and Structure in Fluid Interfaces, in *Advances in Chemical Physics*, Volume 49, pp. 357–454 (eds I. Prigogine and S. A. Rice), 1982.
7. *D.M. Anderson*, *G.B. McFadden*, *A.A. Wheeler*. Diffuse-interface methods in fluid mechanics, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30 (1998) 139–165.
8. *Tian L.*, *Xu Ya.*, *Kuerten J.G.M.*, *van der Vegt J.J.W.* «а Local Discontinuous Galerkin Method For the (Non)-Isothermal Navier-Stokes-Korteweg Equations», *J. Comput. Phys.*, 295 (2015), 685–714.
9. *Liu Ju & Landis, Chad & Gomez, Hector & J.R. Hughes, Thomas*. Liquid-Vapor Phase Transition: Thermomechanical Theory, Entropy Stable Numerical Formulation, and Boiling Simulations. ICES REPORT 15-14, May 2015.
10. *A. Pecenko, L.G.M. van Deurzen, J.G.M. Kuerten, C.W.M. van der Geld*. Non-isothermal two-phase flow with a diffuse-interface model, In *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 37, Issue 2, 2011, Pages 149-165.
11. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. Издательство Московского Университета, 1994, 799 с.
12. *Зайцев Н. А., Радвоин Ю.Б., Рыков Ю.Г.* Расчет нестационарного закрученного потока в соплах и трубах с использованием схем нового, ‘явно-неявного’, типа // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2004, № 52. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2004-52>
13. *Harten A.*, *Lax P.* and *van Leer B.* On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review* 25(1) (1983), 35–61.
14. IAPWS, Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for Thermodynamic Properties of Water and Steam (International Association for the Properties of Water and Steam, 2007), www.iapws.org

Содержание

Вводные замечания	4
1. Уравнение состояния для двухфазной области	6
2. Численный метод	14
3. Решение гиперболической подзадачи	16
4. Численные эксперименты	17
4.1 Задача Стефана	18
4.2 Остывающий пузырек, окруженный жидкостью	20
Выводы	23
Список литературы	24

Отделение математических наук

Н.А. Зайцев, Б.В. Критский

**Об одной модели диффузного интерфейса
для расчета двухфазных течений
однокомпонентных жидкостей**

Формат 60 x 84/16
Гарнитура Таймс
Усл. печ. л. 1,5. Усл. изд. л. 0,76
Тираж 20 экз.

Издатель – Российская академия наук

Подготовлено к печати
Управлением научно-издательской деятельности РАН

Отпечатано на оборудовании Управления делами РАН

Издано в авторской редакции

Издается в соответствии с распоряжением
президиума Российской академии наук
от 24 октября 2017 г. №10106-765,
распространяется бесплатно.