

Отчет по проекту 14-08-00939-а за 2014 г

Разработка математических моделей и численное моделирование сопряженных процессов теплообмена в термосифонных системах стабилизации многолетнемерзлых грунтов

Руководитель: Артемов Валерий Иванович

Аннотация:

Проведен анализ доступной литературы по тематике проекта, посвященный численному моделированию двухфазных потоков при наличии тепло- и массообмена на межфазной поверхности. Цель анализа – методы и алгоритмы прямого численного моделирования процессов испарения и конденсации в термосифонах. Для целей настоящего проекта предложено использовать математические модели, основанные на VOF-алгоритме расчета двухфазных потоков с явно выделенной поверхностью раздела при отсутствии теплообмена. Разработана модифицированная версия VOF-модели с учетом фазовых переходов, которая была реализована в авторском компьютерном коде Apes.

Проведена верификация VOF-модели кода Apes на классических тестовых задачах о движении двухфазного потока с явно выделенной непроницаемой границей (обрушение водяной колонны, неустойчивость Релея-Тейлора, всплытие воздушного пузырька и т. п.). Расчеты показали эффективность реализованного алгоритма для данного класса задач.

Показано, что численный алгоритм SIMPLE для решения уравнений гидродинамики обладает той же эффективностью, что и алгоритм PISO, обычно используемый для численного моделирования с использованием VOF-алгоритмов.

В VOF-модели кода Apes была реализована оригинальная модель массообмена и были предложены тесты для верификации этой модели для одномерных и многомерных задач. Проведено тестирование модели массообмена на примере одномерных задач. Показана работоспособность предложенной модели массообмена.

Развернутый научный отчет

Введение

Теплопередающие устройства, работающие по замкнутому естественно-конвективному циклу, получившие название термосифонов, применяются в различных областях техники, в частности для укрепления оснований зданий и сооружений, построенных на вечной мерзлоте.

Наибольшее распространение получили двухфазные термосифоны, основанные на использовании замкнутого испарительно-конденсационного цикла. Главным преимуществом термосифонов по сравнению с другими устройствами охлаждения является их простота и «пассивность». Для их работы не требуются перекачивающие устройства, необходимые для теплообменников-холодильников, или сложных капиллярных структур, используемых в тепловых трубах. Несмотря на то, что термосифонные устройства для охлаждения грунта в зимнее время известны давно и производятся в промышленном масштабе, вопрос о повышении их эффективности является открытым. В частности, недостаточно проработаны вопросы об эффективной конструкции верхней конденсационной части термосифона, которая фактически представляет собой воздушный конденсатор, работающий в режиме смешанного охлаждения (конвективного за счет ветра и естественно-конвективного за счет нагрева корпуса относительно окружающего воздуха). Возможно, что используемые в настоящее время вертикальные оребренные трубы не являются наиболее эффективными конструкциями. Не менее важной проблемой эффективности является оптимизация процессов теплообмена внутри термосифона.

В этом случае важное значение приобретают расчетно-теоретические методы исследования при проектировании более эффективных устройств. В настоящее время наиболее перспективными являются методы численного моделирования процессов гидродинамики и теплообмена на основе CFD технологий. Главной проблемой, сдерживающей прогресс CFD

подхода, является разработка адекватных реальности математических моделей и их алгоритмическая реализация для моделирования двухфазных течений. За последние 30 лет были разработаны различные алгоритмы для моделирования двухфазных течений (наиболее известным является алгоритм IPSA Б. Сполдинга). Однако они оказались эффективными только для одномерных задач (типичными примерами являются теплогидравлические коды улучшенной оценки типа Trac, Relap5 и Корсар). В первую очередь это связано с отсутствием приемлемых математических моделей для описания кипения жидкости вблизи твердой нагретой стенки. Только в последнее время появились работы, в которых сформулированы более или менее физически обоснованные математические модели пристенного кипения.

Однако процессы в термосифонах обладают важной особенностью, состоящей в том, что в квазистационарных условиях в конструкции имеет место не кипение, а интенсивное испарение. В этом случае двухфазную среду можно рассматривать как смесь двух фаз с явно выделенной поверхностью раздела, а для моделирования гидродинамики и теплообмена в ней можно использовать алгоритмы, учитывающие это обстоятельство.

Здесь уместно провести аналогию с проблемой моделирования турбулентных течений. В настоящее время в качестве базового подхода для моделирования используются двухпараметрические модели турбулентного переноса ($k-\varepsilon$ или $k-\omega$ модели) и осредненные по времени уравнения сохранения (RANS уравнения - осредненные уравнения Рейнольдса). Многолетний опыт использования такого подхода позволил выявить области, где осредненные уравнения работают и области, где ошибки моделирования могут достигать сотни процентов. Познее стал развиваться подход, основанный на прямом решении нестационарных уравнений Навье-Стокса, который получил название прямое численное моделирование турбулентности (DNS). Этот метод лишен эмпирики (в отличие от двухпараметрических моделей), но зато требует на несколько порядков большие вычислительные ресурсы. В прошлом веке этот метод был научной экзотикой, в настоящее время наблюдается бурное развитие DNS-подхода. Интенсивно развиваются новые математические модели и алгоритмы (LES -модель крупных вихрей, DES -гибридная RANS+LES модель), DNS-модели для моделирования практически важных задач.

По нашему мнению такая тенденция в ближайшем будущем сложится и в моделировании двухфазных течений: постепенный переход от полуэмпирических CFD моделей к методам прямого DNS-моделирования некоторых двухфазных потоков. Очевидно, что до прямого моделирования процессов кипения в каналах (с числом паровых пузырьков порядка десятка тысяч) еще очень далеко. Но и точное DNS-моделирование турбулентного переноса для реальных задач также в настоящее время недоступно (LES и DES – это приближенные модели). Однако двухфазные процессы с более простой межфазной границей, такие как процессы в термосифонах, вполне могут быть смоделированы с использованием DNS-моделирования двухфазной системы. Отметим, что в настоящее время попытки таких исследований уже появились [1,2].

Именно такая постановка задачи (прямое моделирование двухфазной системы с явно выделенной межфазной границей при наличии процессов испарения и конденсации) и является целью данного проекта. В связи с этим, целями первого этапа проекта были:

- 1) анализ доступной литературы по методам математического моделирования течений двухфазных сред с явно выделенной межфазной границей;
- 2) разработка алгоритмов для моделирования течений двухфазных сред с выделенной границей при наличии тепло- и массообмена, связанных с процессами испарения и конденсации, на основе VOF-алгоритма;
- 3) реализация разработанной модели в компьютерном CFD коде Anes;
- 4) верификация модели на классических тестах для двухфазных течений с явно выделенной границей.

1. Анализ существующих подходов для моделирования двухфазных потоков с явно выделенной границей раздела

Строгая математическая постановка задачи о моделировании двухфазного потока с явно выделенной границей достаточно проста и заключается в следующем. При использовании численного моделирования область моделирования или расчетная область (РО) разбивается на совокупность ячеек или контрольных объемов (КО), которая называется сеткой КО. Для каждой фазы (паровой или жидкой) записывается обычная система уравнений Навье-Стокса и уравнение энергии однофазной среды. Каждая фаза расположена в своей группе ячеек, а граница раздела представляет собой совокупность граней ячеек. Поскольку фазовая граница движется, то для моделирования необходимо использовать деформируемые или движущиеся сетки КО. Такой подход успешно используется для моделирования задач с «малоподвижной» фазовой границей, например, задач пленочной конденсации (см. например работу [3]). Если фазовая граница многосвязная и скорости фаз трехмерные, то движущиеся сетки очень быстро усложняются и процесс моделирования «разрушается».

В связи с этим обстоятельством дальнейшее развитие алгоритмов пошло по пути использования фиксированных сеток КО. Первый алгоритм – MAC (Marker And Cell) алгоритм - был предложен Харлоу и Вельчем и основан на использовании маркеров для «раскраски» фаз [4]. В дальнейшем Хирт и Николс усовершенствовали этот алгоритм и разработали новый - VOF (Volume Of Fluid) алгоритм, который и стал базовым для всех остальных алгоритмов моделирования двухфазных сред с явно выделенной межфазной границей [5]. Заметим, что исходный алгоритм VOF Хирта предназначен для моделирования однофазной несжимаемой жидкости со *свободной* поверхностью, на которой задано постоянное давление. В модели Хирта нет второй фазы, поэтому уравнения VOF-модели Хирта можно строго обосновать (некоторые соображения самого Хирта на эту тему можно посмотреть на сайте CFD кода Flow3d [6]). Развитие VOF-алгоритма на двухфазную среду (особенно при наличии массообмена) является нетривиальной задачей в смысле строгости постановки.

В VOF-алгоритме для «раскраски» фаз используется поле объемной доли жидкой фазы ϕ (для этого поля используются термины VOF-переменная или Color-функция). Если плотности фаз постоянны и межфазный массообмен отсутствует, то уравнение для VOF-переменной легко получить из условия движения границы вместе со средой (как «пассивной» примеси):

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla\phi = 0 \Rightarrow \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0 \Rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial t} + \operatorname{div}(\phi\mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

В жидкой фазе (для нее будет использоваться нижний индекс «f») $\phi = 1$, в газовой фазе (индекс «g») $\phi = 0$. Строго говоря, на границе поле ϕ терпит разрыв, который при численном моделировании переводится в непрерывный интервал $0 < \phi < 1$. Наряду с VOF-алгоритмом для моделирования поверхности раздела используется Level-Set алгоритм [7], в котором вместо ϕ используется функция-уровня L . Эта функция равна нулю на границе раздела, в жидкости она положительна и отрицательна в газе. Ее модуль в любой точке РО равен расстоянию от точки до границы раздела. L -функция не имеет разрывов и в этом смысле она лучше чем VOF-функция. Однако на уровне численной реализации VOF и Level-Set алгоритмы очень близки, поэтому ниже мы рассмотрим особенности только VOF-алгоритмов.

В настоящее время известно несколько версий VOF-алгоритма, которые различаются способами решения в основном четырех проблем:

- 1) размазывание поля ϕ за счет схемной диффузии при решении уравнения переноса (1);
- 2) реконструкция поверхности раздела из непрерывного поля ϕ ;
- 3) учет сил поверхностного натяжения на границе раздела;
- 4) учет эффектов массообмена и теплообмена на межфазной границе.

Если решать уравнение (1) для φ с помощью стандартных численных алгоритмов, то начальное ступенчатое распределение очень быстро «размажется» при интегрировании по времени. Это связано с влиянием схемной диффузии, которая в разной степени присутствует во всех численных алгоритмах. Для борьбы со схемной диффузией в VOF-алгоритмах используется либо численные схемы высокого порядка точности, либо объединение алгоритмов расчета поля φ с алгоритмами реконструкции поверхности (см. монографию [7]).

Первый алгоритм такого объединения – схема Донор-Акцептор – была предложена в первоначальной работе Хирта [5]. В ней поверхность раздела в ячейке с $0 < \varphi < 1$ представляется в виде горизонтальных или вертикальных отрезков в ячейке – так называемый SLIC алгоритм реконструкции (Simple Line Interface Calculation). В дальнейшем Юнгом [7,8] был предложен PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) алгоритм, в котором в ячейке граница аппроксимируется отрезком линии в двумерном случае или поверхностью в трехмерном. В настоящее время алгоритм PLIC используется в VOF алгоритме CFD кода Fluent.

В компьютерном коде OpenFOAM для предотвращения размазывания границы используется оригинальная схема [9], основанная на решении двухфазной версии уравнения сохранения (1):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{u}) + \operatorname{div}[\mathbf{u}_r \varphi(1 - \varphi)] = 0,$$

где \mathbf{u}_r – скорость скольжения фаз, которая в численной схеме используется для генерации своеобразной «антидиффузии» (авторы называют эту скорость «сжимающей скоростью»).

В работе [10] предложена оригинальная версия VOF-алгоритма – CICIT (Conservative Interpolation Scheme for Interface Tracking) схема, являющаяся фактически развитием схемы Донор-Акцептор. Реконструкция границы раздела основана на предположении, что граница – это поверхность постоянного уровня с $\varphi = 0,5$. Для построения поверхности раздела используется простой алгоритм расчета φ в вершинах ячейки сетки. В отличие от PLIC алгоритма, в котором переход от двумерной геометрии к трехмерной существенно усложняет алгоритм реконструкции поверхности раздела, в CICIT алгоритмы реконструкции для 1D, 2D и 3D задач практически идентичны. Кроме того при использовании CICIT схемы гарантируется выполнение баланса объемных потоков и «неразмазанность» границы раздела (область с $0 < \varphi < 1$ всегда занимает один слой ячеек сетки). В данной работе именно эта версия VOF-алгоритма взята за основу для реализации в коде Anes.

При отсутствии массообмена на межфазной границе наряду с уравнением неразрывности, записанном в объемной форме, и уравнения переноса для φ (1) необходимо решать уравнения движения. Во всех версиях VOF-алгоритмов для этого используются *однофазные* уравнения с эффективными свойствами: плотностью ρ и динамической вязкостью μ . Фактически это означает, что для описания двухфазной среды используется гомогенная модель двухфазного потока. Для расчета эффективной плотности используется линейное осреднение по объемной доле

$$\rho = \rho_f \varphi + (1 - \varphi) \rho_g, \quad (2)$$

для расчета вязкости в разных работах используются разные осреднения:

$$\mu = \mu_f \varphi + \mu_g (1 - \varphi) \quad \text{или} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_f} \varphi + \frac{1}{\mu_g} (1 - \varphi).$$

Кроме того при наличии поверхности раздела фаз в гомогенных уравнениях движения появляются объемные силовые источники, связанные с силами поверхностного натяжения [7,11]:

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \mathbf{K} \nabla \varphi, \quad \mathbf{K} = \operatorname{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}), \quad \mathbf{n}_{\text{int}} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}, \quad (3)$$

где σ – постоянный коэффициент поверхностного натяжения, \mathbf{K} – кривизна поверхности раздела, \mathbf{n}_{int} – нормаль к поверхности, направленная в сторону жидкой фазы. Как уже отмечалось выше, «хорошие» VOF-алгоритмы подавляют размазывание φ , что приводит к

расходимости процесса решения уравнений движения из-за больших градиентов самой ϕ и свойств. Для борьбы с этим эффектом было предложено использовать сглаживание этих величин. Впервые это предложил Брэкбилл для расчета объемных источников сил поверхностного натяжения (3) [11]. В настоящее время предложены различные алгоритмы сглаживания, большинство из которых используют итерационный пересчет значений ϕ в разных точках ячейки сетки. В работе [10] для этого используются значения в центре ячейки и в ее вершинах, в работе [12] – значения в центре ячейки и в центрах ее граней. Следует отметить оригинальный алгоритм сглаживания, предложенный в работе [13]. Для получения сглаженного поля q_1 по «разрывному» полю q_0 предлагается решать уравнение Пуассона:

$$\operatorname{div}(D\nabla q_1) = (q_1 - q_0), \quad \frac{\partial q_1}{\partial n} = 0 \text{ на границе } \text{PO},$$

здесь D – коэффициент псевдо-диффузии, определяющий ширину сглаживания. Важным свойством такого сглаживания является равенство интегралов по объему PO для q_1 и исходного поля q_0 .

Для моделирования процессов с фазовым переходом (испарение и конденсация) необходимо добавить в VOF-алгоритм массообмен на межфазной границе и уравнение энергии в решаемую систему уравнений. К настоящему времени разработано несколько версий VOF-алгоритмов с учетом тепло- и массообмена на границе раздела. Большинство работ посвящены моделированию процесса пузырькового кипения на нагреваемых поверхностях различной формы на основе моделирования развития отдельного парового пузырька [14 – 18]. В работах [1,2] моделируются сопряженные процессы испарения и конденсации в моделях термосифонов.

Главными проблемами при моделировании задач с массообменом является запись (и численная аппроксимация) источников членов в уравнениях сохранения массы, движения и энергии и алгоритм расчета плотности потока массы через фазовую границу. Даже на этапе записи уравнений в разных работах появляются разные источниковые члены. Пример подобных уравнений сохранения массы представлен ниже (M_{gf} – объемный поток массы через межфазную поверхность, A_{int} – удельная площадь межфазной границы):

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = M_{gf} \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right), \quad \operatorname{div}(\mathbf{u}) = \frac{M_{gf}}{\rho}, \quad M_{gf} = m_{gs} A_{int}$$

Для расчета плотности массового потока m_{gs} также предлагаются разные модели, которые можно разбить на две группы. В первой группе для расчета плотности потока массы используются полуэмпирические соотношения вида [19]:

$$M_{gs} = 0.1 \varphi \rho_f \frac{T_{sat} - T_p}{T_{sat}}$$

где T_{sat} – температура насыщения, T_p – температура в ячейке сетки с межфазной границей. Вторая группа моделей основана на использовании точных соотношений на фазовой границе (см., например, работу [20]):

$$m_{gf} = \frac{(\lambda \mathbf{n}_{int} \cdot \nabla T)_g - (\lambda \mathbf{n}_{int} \cdot \nabla T)_f}{\Delta h_{gf}(T_{sat})}, \quad (4)$$

где Δh_{gf} – теплота фазового перехода. Главная проблема при использовании (4) – это расчет градиентов температур в жидкой (f) и газовой (g) фазах при решении одного уравнения энергии для общей температуры T .

В заключение заметим следующее. При отсутствии массообмена на границе раздела фаз алгоритмы VOF более или менее «устоялись» и реализованы в существующих CFD кодах (подавляющее большинство исследований, описанных выше, сделаны с использованием кодов Fluent и OpenFOAM). Алгоритмы с массообменом находятся пока на стадии разработки и верификации.

Еще одна особенность имеющихся работ касается численных алгоритмов для решения системы уравнений сохранения. В кодах Fluent и OpenFOAM при работе с VOF-задачами

для решения используется алгоритм PISO. Возникает ощущение, что алгоритм SIMPLE не применим для решения задач с границей раздела фаз. В принципе алгоритмы PISO и SIMPLE [21] близки друг к другу, разница заключается в использовании итераций на шаге по времени. В PISO в отличие от SIMPLE не предусмотрены итерации. Поскольку в коде Anes реализован алгоритм SIMPLE, то представляет интерес проверка возможности его совместной работы с VOF-алгоритмами.

2. Математическая модель двухфазного потока кода ANES

При строгой постановке задачи о двухфазном потоке с явно выделенной межфазной границей для газообразной фазы (g-фаза) и жидкой фазы (f-фаза) справедливы уравнения сохранения однофазной среды [21]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho u u_i - \mu \nabla u_i) &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho \cdot \mathbf{g} + S_{u,i}, \quad x_i = x, y, z \\ \frac{\partial \rho h}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho u h - \lambda \nabla T) &= S_T \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь

ρ , μ , λ - плотность, динамическая вязкость и коэффициент теплопроводности фазы,

$\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$, \mathbf{g} – вектор скорости и вектор ускорения свободного падения,

p - статическое давление,

$S_{u,i}$ - объемные источники импульса, определяемые видом тензора напряжений Ньютона в различных системах координат,

S_T – объемный источник тепла, связанный с вязкой диссипацией и работой сил давления,

$h = h(p, T)$ – энтальпия фазы.

Источники $S_{u,i}$ и S_T автоматически рассчитываются в авторском коде Anes, поэтому для простоты ниже они будут опускаться.

Для замыкания систем уравнений (5) для g- и f-фаз их необходимо дополнить балансовыми соотношениями на фазовой границе. Если отбросить малые (для задач испарения-конденсации) члены, то эти балансовые соотношения можно записать в виде (нижний индекс «int» означает значения параметров на межфазной поверхности) [22]:

$$\begin{aligned} m_{gf} &= \rho_f (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_{int}) \cdot \mathbf{n}_{int} = \rho_g (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{int}) \cdot \mathbf{n}_{int}, \\ p_f - p_g &= K_{int} \sigma + m_{gf}^2 \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right) \\ m_{gf} h_g(T_{int}) + \mathbf{q}_g \cdot \mathbf{n}_{int} &= m_{gf} h_f(T_{int}) + \mathbf{q}_f \cdot \mathbf{n}_{int}, \\ \mathbf{q}_g &= -\lambda_g \nabla T_g, \quad \mathbf{q}_f = -\lambda_f \nabla T_f, \\ T_{int} &= T_{sat}(p_f). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь:

m_{gf} – плотность потока массы (кг/(м²·с)) через межфазную границу, мы будем считать, что поток положителен, если он направлен из g- в f- фазу (идет процесс конденсации),

\mathbf{n}_{int} – единичная нормаль к фазовой поверхности, направленная в сторону f-фазы,

σ - коэффициент поверхностного натяжения, который в данной работе считается постоянным,

T_{sat} – температура насыщения при давлении в f-фазе,

K – кривизна межфазной поверхности, связанная с главными радиусами кривизны R_1 и R_2 соотношением

$$K = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$$

В данной работе считается, что кривизна K во втором уравнении (6) положительна, если центры главных радиусов расположены в f -фазе (давление выше в той фазе, в которой расположены главные радиусы кривизны).

В данной работе будем считать, что температура на межфазной границе T_{int} равна температуре насыщения T_{sat} при давлении жидкой фазы. Это не является принципиальным ограничением, учесть неравновесные процессы на границе можно, например, по методике работы [13].

Как отмечалось выше, главная особенность VOF-подобных алгоритмов - это использование однофазных уравнений гидродинамики для описания двухфазного потока. При отсутствии массообмена на межфазной границе различные подходы «объединения» соотношений (5) и (6) приводят к одной и той же системе уравнений. При наличии массообмена ситуация изменяется: в зависимости от способа получения уравнений VOF-модели, их вид отличается. Для анализа этих отличий в данной работе будем использовать два развиваемых подхода:

- 1) VOF-модель основана на гомогенном приближении для описания двухфазного потока в рамках модели взаимопроникающих континуумов,
- 2) VOF-модель основана на формальных законах сохранения для однофазной среды с эффективными свойствами.

2.1 Уравнения сохранения массы

Уравнения баланса массы для фаз в модели взаимопроникающих континуумов можно записать в виде [23]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_f \varphi_f}{\partial \tau} + \text{div}(\rho_f \mathbf{u}_f \varphi_f) &= M_{gf}, \\ \frac{\partial \rho_g \varphi_g}{\partial \tau} + \text{div}(\rho_g \mathbf{u}_g \varphi_g) &= -M_{gf}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$M_{gf} = m_{gf} A_{\text{int}}$$

Здесь

M_{gf} – межфазный *объемный* поток массы (кг/(м³·с) из газовой g -фазы в жидкую f -фазу,

φ_g, φ_f – объемные доли g - и f - фаз,

A_{int} – удельная межфазная поверхность (м⁻¹).

Если считать, что плотности фаз ρ_g, ρ_f постоянны, то сложив эти уравнения, можно получить уравнения сохранения массовых потоков, объемных потоков и объемной доли жидкой фазы φ ($\varphi = \varphi_f$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \text{div}(\tilde{\mathbf{u}}) &= M_{gf} \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right), \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \text{div}(\varphi \mathbf{u}) &= \frac{M_{gf}}{\rho_f}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\rho = \rho_f \varphi + (1 - \varphi) \rho_g,$$

$$\mathbf{u} = \frac{\rho_f \varphi \mathbf{u}_f + (1 - \varphi) \rho_g \mathbf{u}_g}{\rho}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_f \varphi_f + \mathbf{u}_g \varphi_g$$

В VOF-модели в качестве уравнения сохранения массы используется второе уравнение (4) – уравнение сохранения объемных потоков. Заметим, что уравнения сохранения массы

и объема содержать разные «гомогенные» скорости \mathbf{u} и $\tilde{\mathbf{u}}$. В областях с $\varphi = 0$ и $\varphi = 1$ эти скорости совпадают, отличаются они в ячейках расчетной сетки содержащих фазовую границу. В дальнейшем будем считать, что эти скорости одинаковы $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$. Для обоснования этого утверждения можно привести следующие соображения:

- 1) скорости фаз различны только вблизи фазовой поверхности, в остальной области скорость \mathbf{u} равна либо \mathbf{u}_f , либо \mathbf{u}_g . Если нет массообмена, то скорости равны и на межфазной поверхности. Если есть массообмен, то различие скоростей частично учитывается массовым источником;
- 2) численный алгоритм VOF использует для описания фазовой границы приближенные модели, основанные на поле «сглаженной» φ , поэтому введение единой скорости в ячейках вряд ли приведет к большим погрешностям, чем указанные приближения.

В качестве второго способа получения уравнений можно использовать подход, используемый в работах [13,20]. Будем считать, что двухфазный поток представляет собой смесь двух фаз, свойства которых линейно зависят от объемной доли f-фазы, и для которых справедливы общие уравнения сохранения (5). В этом случае уравнение неразрывности в «объемной» форме можно получить с помощью обычного дифференцирования, а уравнение сохранения объемной доли f-фазы – из условия, что межфазная поверхность движется вместе с нашей средой как «пассивная» примесь:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 & \Rightarrow \operatorname{div}(\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{d\tau} = \frac{M_{gf}}{\rho}, \\ \frac{d\varphi}{d\tau} = \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \mathbf{u} \nabla \varphi = 0 & \Rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\varphi \mathbf{u}) = \varphi \frac{M_{gf}}{\rho} \end{aligned} \quad (9)$$

Заметим, что этот подход дает другие источниковые члены в уравнениях (9), чем подход гомогенной двухфазной модели (7) и(8). Главное преимущество уравнений (9) заключается в возможности «сглаживания» источников вблизи межфазной границы [13,20].

В данной работе были протестированы оба подхода, результаты такого тестирования приведены ниже.

2.2 Уравнения движения

Аналогичным образом можно получить уравнения движения (сохранения импульса) для VOF-смеси. Уравнения сохранения импульса для фаз можно записать в виде [23] ($k = x, y, z$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_f \rho_f \mathbf{u}_{f,k}}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\varphi_f \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_{f,k} - \varphi_f \mu_f \nabla \mathbf{u}_{f,k}) &= -\varphi_f \frac{\partial p_f}{\partial x_k} + \varphi_f \rho_f \mathbf{g}_k + F_{f-int,k}, \\ \frac{\partial \varphi_g \rho_g \mathbf{u}_{g,k}}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\varphi_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_{g,k} - \varphi_g \mu_g \nabla \mathbf{u}_{g,k}) &= -\varphi_g \frac{\partial p_g}{\partial x_k} + \varphi_g \rho_g \mathbf{g}_k + F_{g-int,k}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$F_{f-int,k} + F_{g-int,k} = 0$$

Объемные источники импульса \mathbf{F}_{f-int} и \mathbf{F}_{g-int} связаны с взаимодействием фаз с межфазной поверхностью. Вид этих членов можно получить из балансов импульса на фазовой границе (6). Для нас важно, что сумма этих источников равна нулю. Складывая эти уравнения можно получить уравнение импульса для смеси:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}_k}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}_k - \mu \nabla \mathbf{u}_k) = -\varphi_f \frac{\partial p_f}{\partial x_k} - \varphi_g \frac{\partial p_g}{\partial x_k} + \rho \mathbf{g}_k \quad (11)$$

Отметим, что в уравнении (11) отсутствуют члены межфазного взаимодействия, но присутствуют два давления. Преобразуем члены с давлением

$$-\varphi_f \nabla p_f - \varphi_g \nabla p_g = -\nabla [\varphi_f p_f + \varphi_g p_g] + (p_f - p_g) \nabla \varphi = -\nabla p + (p_f - p_g) \nabla \varphi,$$

$$p = \varphi_f p_f + \varphi_g p_g = \varphi p_f + (1 - \varphi) p_g,$$

Таким образом, если в качестве давления смеси рассматривать давление, осредненное по объему фаз, то уравнения движения смеси можно записать в виде:

$$\frac{\partial \rho u_k}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \mathbf{u} u_k - \mu \nabla u_k) = -\frac{\partial p}{\partial x_k} + \rho g_k + F_{\text{int},k}, \quad (12)$$

которое отличается от уравнения для однофазной среды дополнительным объемным источником

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = (p_f - p_g) \nabla \varphi,$$

который с учетом второго уравнения (2) можно записать в виде

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \sigma K_{\text{int}} \nabla \varphi + m_{\text{gf}}^2 \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right) \nabla \varphi \quad (13)$$

Отметим, что появление члена с поверхностным натяжением связано только с нашим определением давления смеси как объемно осредненного давления фаз.

При использовании второго подхода при выводе общих уравнений сохранения для смеси получить член с поверхностным натяжением сложнее (подробности можно найти в монографии [7]).

Для улучшения сходимости итерационного процесса при решении системы уравнений объемный источник, связанный с силами плавучести, требует некоторой модификации. В данной работе используется подход, используемый в коде OpenFOAM [12]. Введем новое относительное давление p_d , которое связано со статическим давлением p соотношением:

$$p_d = p - \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \quad (14)$$

В этом случае сумму сил давления и плавучести можно записать в виде

$$\mathbf{F} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} = -\nabla p_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho = -\nabla p_d - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) (\rho_f - \rho_g) \nabla \varphi \quad (15)$$

2.3 Уравнение энергии

При получении уравнения энергии для VOF-модели используется аналогичный подход. В двухфазной модели взаимопроникающих континуумов уравнения для фаз можно записать в виде (для простоты члены, выражающие работу сил давления и вязкую диссипацию, опущены):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_f \rho_f h_f}{\partial \tau} + \text{div}(\varphi_f \rho_f \mathbf{u}_f h_f - \varphi_f \lambda_f \nabla T_f) &= Q_{f,\text{int}}, \\ \frac{\partial \varphi_g \rho_g h_g}{\partial \tau} + \text{div}(\varphi_g \rho_g \mathbf{u}_g h_g - \varphi_g \lambda_g \nabla T_g) &= Q_{g,\text{int}}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$h_f = c_{\text{pf}} (T_f - T_{\text{sat}}) + h_{f,\text{sat}}, \quad h_g = c_{\text{pg}} (T_g - T_{\text{sat}}) + h_{g,\text{sat}}.$$

Здесь h_k – полные энтальпии фаз, $h_{k,\text{sat}}$ – энтальпии фаз на линии насыщения, T_{sat} – температура фазовой границы, равная температуре насыщения, $Q_{f,\text{int}}$, $Q_{g,\text{int}}$ – межфазные члены (объемные потоки тепла от фазовой границы к фазе):

$$Q_{f,\text{int}} = A_s \{ m_{\text{gf}} h_f (T_{\text{sat}}) + q_{f,\text{int}} \}, \quad Q_{g,\text{int}} = A_s \{ -m_{\text{gf}} h_g (T_s) + q_{g,\text{int}} \} \quad (17)$$

$$Q_{f,\text{int}} + Q_{g,\text{int}} = 0$$

Эти соотношения эквивалентны третьему уравнению в системе (6.). Отметим, что $q_{f,\text{int}}$, $q_{g,\text{int}}$ – это проекции плотности тепловых потоков на нормали к поверхности, направленные от межфазной поверхности к фазе.

Сложив уравнения (12) можно получить уравнение смеси, записанное через энтальпию смеси h_m :

$$\frac{\partial(\rho h_m)}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \mathbf{u} h_m - \lambda \nabla T) = M_{gf} \Delta h_{gf},$$

$$h_m = x_f c_{pf} (T - T_{sat}) + (1 - x_f) c_{pg} (T - T_{sat}), \quad x_f = \frac{\rho_f \phi}{\rho}, \quad (18)$$

$$\Delta h_{gf} = h_{g,sat}(T_{sat}) - h_{f,sat}(T_{sat})$$

Здесь x_f – массовая доля жидкой фазы, Δh_{gf} – теплота парообразования при температуре насыщения T_{sat} . Уравнение (18) можно записать и в виде уравнения, выраженного через температуру:

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \mathbf{u} c_p T - \lambda \nabla T) = M_{gf} [\Delta h_{gf} + (c_{pf} - c_{pg}) T_{sat}],$$

$$\rho c_p = \rho_f \phi c_{pf} + \rho_g (1 - \phi) c_{pg}. \quad (19)$$

Уравнение (19) используется в большинстве работ по VOF-моделированию с учетом массообмена. Мы будем использовать уравнение (18), записанное через энтальпию смеси, поскольку эта форма уравнения энергии является базовой для кода Anes.

При использовании второго подхода для получения уравнений (использования общих уравнений сохранения для смеси) можно представить энтальпию смеси в виде:

$$h = c_p T + (1 - \phi) \Delta h_{gf}$$

В этом случае можно получить

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \mathbf{u} c_p T - \lambda \nabla T) = \phi M_{gf} \Delta h_{gf} \quad (20)$$

2.4 Расчет свойств и межфазного потока массы

Как следует из «вывода» уравнений VOF-модели свойства системы рассчитываются через объемную долю f -фазы:

$$\rho = \rho_f \phi + \rho_g (1 - \phi), \quad \mu = \mu_f \phi + \mu_g (1 - \phi), \quad \lambda = \lambda_f \phi + \lambda_g (1 - \phi), \quad (21)$$

$$\rho c_p = \rho_f c_{pf} \phi + \rho_g c_{pg} (1 - \phi)$$

В некоторых работах (например, в [15]) для расчета динамической вязкости и теплопроводности смеси используется интерполяция обратных величин

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_f} \phi + \frac{1}{\mu_g} (1 - \phi), \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_f} \phi + \frac{1}{\lambda_g} (1 - \phi) \quad (22)$$

Обоснованность такой интерполяции отсутствует, однако, как показали наши численные эксперименты, формулы (21) и (22) дают достаточно близкие результаты и практически не сказываются на сходимости решения дискретных уравнений.

Для расчета плотности массового потока m_{gf} через межфазную границу в большинстве работ используется уравнение баланса тепла на фазовой границе (6), которое можно записать в следующем виде:

$$m_{gf} = \frac{(\lambda \mathbf{n}_{int} \cdot \nabla T)_g - (\lambda \mathbf{n}_{int} \cdot \nabla T)_f}{\Delta h_{gf}(T_{sat})} = \frac{\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_g - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_f}{\Delta h_{gf}(T_{sat})}, \quad (23)$$

$$T_{int} = T_{sat}.$$

Здесь \mathbf{n}_{int} – нормаль к межфазной поверхности, направленная в сторону f -фазы, $(\nabla T)_g$ и $(\nabla T)_f$ – градиенты температур со стороны g - и f - фаз «вблизи» межфазной поверхности, m_{gf} – плотность межфазного массового потока направленного из g -фазы в f - фазу.

Уравнение (23) можно записать в другой, более удобной для численной реализации форме:

$$m_{gf} = \frac{\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)_g (T_{sat} - T_g) + \left(\frac{\lambda}{\delta}\right)_f (T_{sat} - T_f)}{\Delta h_{gf}(T_{sat})} \quad (24)$$

Здесь T_g и T_f – температуры среды на расстоянии δ_g и δ_f от фазовой границы.

Для вычисления массового потока необходимо либо рассчитать градиенты температуры с обеих сторон фазовой границы, либо определить значения температур g- и f-фаз вблизи межфазной границы.

В настоящее время существует несколько подходов для расчета этих величин. В ряде работ используются «полуэмпирическое» выражение для массового потока, основанное на соотношении (24). «Родителем» этой группы работ является работа [19]. Для расчета плотности потока используется набор соотношений вида (отметим, что соотношения разнятся для случая испарения и конденсации):

$$M_{gs} = m_{gf} A_{int} = 0.1 \varphi \rho_f \frac{T_{sat} - T_p}{T_{sat}}, \quad (25)$$

где T_p – температура среды в ячейке сетки с фазовой границей.

В группе работ (типичный пример – работа [20]), посвященных моделированию процесса кипения, для расчета потока используется соотношение (24), градиенты температуры рассчитываются с помощью экстраполяции градиентов из ячеек, занятых полностью f- или g-фазами, граничащих с ячейками с фазовой границей.

В работе [17] для расчета потока используется аналог соотношения (24):

$$m_{gf} = \frac{\lambda_k (T_{sat} - T_p)}{\delta_k} \quad (26)$$

где δ_k – расстояние от центра ячейки P до межфазной поверхности, индекс $k = g$ или f , в зависимости от того, в какой фазе располагается центр ячейки P.

В работе [18] используется соотношение (20), а в качестве T_g и T_f берутся значения (и соответственно расстояния δ_g и δ_f) либо в центрах соседних ячеек, либо на гранях ячейки с межфазной границей. Дополнительно с помощью интерполяции этих значений рассчитывается значение в центре ячейки T_p . При решении уравнения энергии это рассчитанное значение фиксируется в ячейке с помощью источникового члена. Такая фиксация позволяет существенно ускорить сходимость итерационного процесса решения уравнения энергии. Заметим, что использование соотношений (25) и (26) также позволяет «застабилизировать» значение температуры в ячейке с межфазной границей.

В данной работе предложен другой способ расчета массового потока, изложенный ниже.

Главной проблемой при использовании (23) и (24) является корректный расчет градиентов или расстояний, что является нетривиальной задачей для трехмерных задач. Наш подход заключается в следующем.

Зафиксируем в ячейке с фазовой границей температуру

$$T_p = T_{sat} \quad (27)$$

с помощью задания источника в уравнении энергии (19) $S_T = C \cdot (T_{sat} - T)$, где C – большая величина. Поскольку условие (27) «исключает» уравнение энергии (18) для ячейки с фазовой границей, его можно использовать для расчета массового потока. Поскольку в ячейке с $T = T_{sat}$ $h_m = 0$, то для фазовой границы

$$M_{gf} = \frac{1}{\Delta h_{gf}} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} h_m - \lambda \nabla T)$$

Если проинтегрировать это уравнение по объему $V_{ко}$ и считать что величина M_{gf} постоянна в этом объеме, то можно получить следующее соотношение для расчета объемного массового потока:

$$M_{gf} = \frac{1}{V_{KO} \Delta h_{gf}} \left\{ \oint_{A_{KO}} (\rho \mathbf{u} h_m)_{in} dA - \oint_{A_{KO}} (\lambda \nabla T) dA \right\} \quad (28)$$

В первом интеграле соотношения (28) учитываются только вытекающие потоки, поскольку вытекающие равны нулю ($h_m = 0$). Главное достоинство (28) заключается в том, что в численной процедуре все члены в правой части уже рассчитаны в дискретных уравнениях для уравнения энергии. Эффективность и точность соотношения (28) были проверены на ряде тестовых задач, которые обсуждаются ниже.

2.2 Описание параметров межфазной поверхности

Система уравнений (8), (12) и (18) содержит две характеристики межфазной поверхности: удельную поверхность A_{int} и кривизну межфазной поверхности K_{int} . Для замыкания VOF_ модели необходимо выразить эти параметры через поле объемной доли жидкой f- фазы φ .

Удельную поверхность A_{int} можно выразить через δ - функцию Дирака (строгий вывод этой формулы можно найти в [11]), а саму δ - функцию можно связать с VOF-переменной

$$A_s = \delta \{ \mathbf{n}_{int} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{int}) \} = |\nabla \varphi| = \sqrt{\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2} \quad (29)$$

Заметим, что соотношение (29) является точным и оно справедливо для любых распределений φ , как гладких, так и скачкообразных (в этом случае φ - это единичная разрывная функция Хевисайда). Поясним смысл этого утверждения. Если функция φ «сглажена», то компоненты градиента φ легко рассчитать обычным численным дифференцированием. Если мы точно выделяем поверхность раздела, то для расчета компонент градиента в КО можно использовать теорему Грина. Пусть имеется замкнутый объем V_{KO} (например, контрольный объем расчетной сетки) с поверхностью A_{KO} . В этом случае компонента градиента по оси x рассчитывается по формуле Грина:

$$\int_{V_{KO}} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dV = \oint_{A_{KO}} \varphi \mathbf{n}_x dA \quad (30)$$

Здесь \mathbf{n}_x – единичный вектор, направленный вдоль оси x , dA – вектор элементарной площадки, направленный по внешней нормали к поверхности V_{KO} .

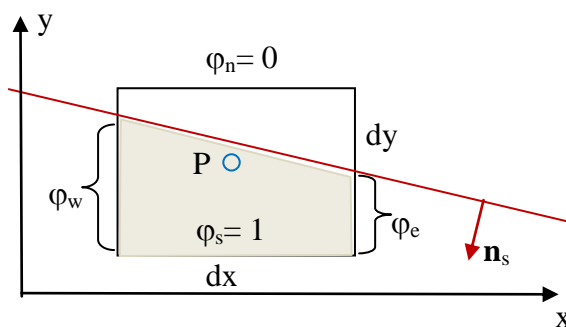


Рисунок 1 – Расчет производных для явной поверхности раздела

Рассмотрим КО, изображенный на рисунке 1, в котором расположена плоская межфазная поверхность. Используя (29) и (30) можно получить выражение для удельной поверхности

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_p = \frac{\varphi_e \cdot \Delta A_e - \varphi_w \cdot \Delta A_w}{\Delta V_p} = \frac{\varphi_e \cdot \Delta y - \varphi_w \cdot \Delta y}{\Delta x \Delta y} = \frac{\varphi_e - \varphi_w}{\Delta x},$$

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)_p = \frac{\varphi_n \cdot \Delta A_n - \varphi_s \cdot \Delta A_s}{\Delta V_p} = \frac{0 \cdot \Delta y - 1 \cdot \Delta y}{\Delta x \Delta y} = -\frac{1}{\Delta y},$$

$$A_{\text{int}} = \frac{\sqrt{\Delta x^2 + [(\varphi_e - \varphi_w) \Delta y]^2}}{\Delta x \Delta x}$$

Для расчета кривизны K_{int} можно использовать выражение, строгий вывод которого можно найти в работах [7,11]:

$$K = -\text{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}) \quad (31)$$

В этом соотношении \mathbf{n}_{int} – единичный вектор, направленный по нормали к поверхности в любую сторону. Мы будем в качестве нормали использовать нормаль, направленную в сторону f-фазы. В этом случае

$$\mathbf{n}_{\text{int}} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}, \quad K = -\text{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}) = -\text{div}\left[\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}\right] \quad (32)$$

Легко показать, что (32) хорошо согласуется со вторым уравнением (6):

$$p_f - p_g = K_{\text{int}} \sigma, \quad (33)$$

в котором K_{int} считается положительным, если главные радиусы кривизны лежат внутри f-фазы. Рассмотрим два «цилиндрических» пузырька с радиусам R_0 , показанные на рисунке 2. Кривизна поверхности раздела равна

$$K = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) = \left(\frac{1}{R_0} + \frac{1}{\infty}\right) = \frac{1}{R_0},$$

а центр радиуса кривизны лежит внутри цилиндра. В этой ситуации, как следует из (33), давление будет больше в той фазе, которая находится внутри пузырька.

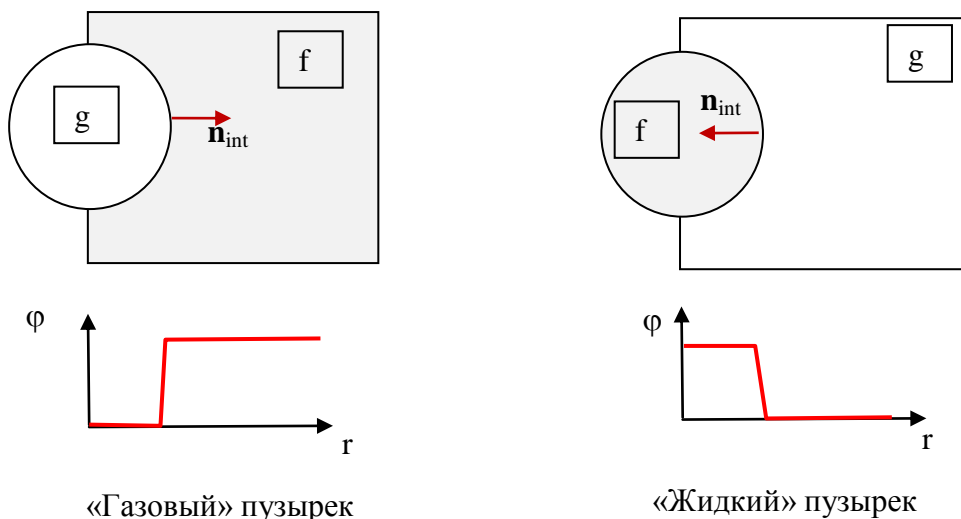


Рисунок 2 – Примеры фазовой поверхности и ее кривизна

Используя цилиндрическую систему координат и соотношения (27) и (29), можно записать для «газового» пузырька:

$$\mathbf{n}_{\text{int}} = (n_r, n_\theta, n_z) = (1, 0, 0); K_{\text{int}} = -\text{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}) = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot n_r) = -\frac{1}{R_0}, p_f - p_g = -\frac{\sigma}{R_0} < 0$$

и для «жидкого» пузырька:

$$\mathbf{n}_{\text{int}} = (n_r, n_\theta, n_z) = (-1, 0, 0); K_{\text{int}} = -\text{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}) = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot n_r) = +\frac{1}{R_0}, p_f - p_g = +\frac{\sigma}{R_0} > 0$$

Окончательно уравнение (13) можно записать в виде:

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \left\{ -\sigma \text{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}) + m_{\text{gf}}^2 \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right) \right\} \mathbf{A}_{\text{int}} \mathbf{n}_{\text{int}}, \mathbf{n}_{\text{int}} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \quad (34)$$

3. Численный VOF-алгоритм кода ANES

При проведении предварительных исследований были протестированы различные численные схемы для решения уравнения переноса VOF-переменной φ

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \text{div}(\varphi \mathbf{u}) = 0 \quad (35)$$

и в частности алгоритмы, основанные на использовании численных схем высокого порядка точности. В результате для реализации в коде Anes был выбран алгоритм CISIT (Conservative Interpolation Scheme for Interface Tracking), который предложен Yeng-Yung Tsui и Shi-Wen Lin в работе [10]. Этот алгоритм с точки зрения его реализации в Anes обладает рядом преимуществ:

- 1) «простота» при реализации многомерных задач,
- 2) автоматическое обеспечение баланса объемных потоков,
- 3) отсутствие «размазывания» положения межфазной границы по ячейкам сетки, граница всегда расположена в одном слое ячеек сетки,
- 4) применимость как для структурных, так и неструктурных сеток,
- 5) относительная простота реконструирования межфазной границы независимо от размерности задачи.

На шаге по времени алгоритм CISIT состоит из двух стандартных шагов: Предиктор-шага и Корректор-шага. Но прежде чем переходить к их описанию, рассмотрим алгоритм реконструкции межфазной поверхности, который является центральным элементом алгоритма.

3.1 Реконструкция межфазной поверхности

Рассмотрим сетку ячеек (КО - Контрольных Объемов). КО может иметь произвольную форму и ограничен набором плоских граней. Каждая грань представляет собой плоский многоугольник. В итоге сам КО и его грани описываются своими точками – вершинами.

Пусть мы вычислили значения VOF-функции φ в центрах ячеек расчетной сетки. Будем считать, что поверхность границы – это поверхность постоянного уровня поля $\varphi = 0.5$. Для определения этой поверхности рассчитаем значения φ_n в вершинах ячеек. Для этого используем весовое осреднение (n – это индекс вершины, «с,к» – индекс соседней ячейки)

$$\varphi_n = \frac{\sum_k w_{c,k} \Phi_{c,k}}{\sum_k w_{c,k}} \quad (36)$$

Суммирование проводится по всем ячейкам, которые содержат эту вершину. В качестве весовых коэффициентов будем использовать обратные объемы ячеек

$$w_{c,k} = \frac{1}{\Delta V_{c,k}} \quad (37)$$

Заметим, что этот алгоритм расчета значений в вершинах не является новым. Он служит основой компьютерной графики для обработки результатов CFD моделирования, в частности, при построении цветных контуров зависимых переменных.

После того, как значения в вершинах рассчитаны, запускается следующий алгоритм:

- 1) перебираются все грани ячейки,
- 2) для каждой грани перебираются все ребра грани (ребро – это отрезок, соединяющий две вершины); находятся на ребре точки с $\phi = 0.5$; эти точки либо существуют на ребре, либо отсутствуют;
- 3) просматриваются вершины грани против часовой стрелки и формируются точки полилинии. Если в вершине $\phi > 0.5$, она добавляется в полилинию; если между двумя вершинами есть точка с $\phi = 0.5$, то добавляем и эта точка;
- 4) рассчитывается площадь полилинии, как площадь замкнутого многоугольника (это сумма площадей треугольников);
- 5) эта площадь делится на площадь грани и получается «точная» доля жидкой фазы на грани.

Далее эту «точную» долю жидкой фазы будем обозначать как ϕ_f^* . Поскольку точки пересечения межфазной поверхности с ребрами ячейки известны на этом этапе, то можно легко восстановить межфазную поверхность в виде многоугольника (в общем трехмерном случае - неплоского). Пример такой межфазной поверхности (в двумерном случае – линии) показан на рисунке 3.

Одновременно с поверхностью на этом этапе легко рассчитать точное значение градиента поля ϕ и удельной поверхности A_{int} с использованием теоремы Гаусса:

$$(\nabla\phi)_p = \frac{1}{\Delta V_p} \sum_{nb} \phi_{nb}^* \Delta A_{nb}, \quad A_{int} = |(\nabla\phi)_p| \quad (38)$$

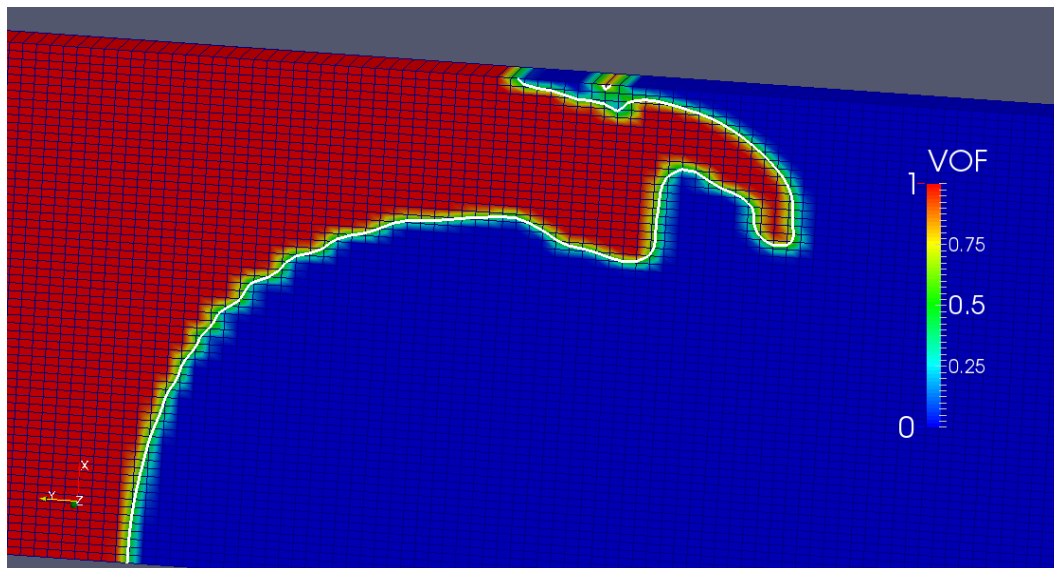


Рисунок 3 – Контур VOF-переменной и реконструированная межфазная поверхность

Этот алгоритм определения линии границы из условия $\phi = 0.5$ обладает одним «дефектом», который проявляется при использовании неравномерных сеток. Поясним этот дефект на примере одномерной задачи (см. рисунок 4).

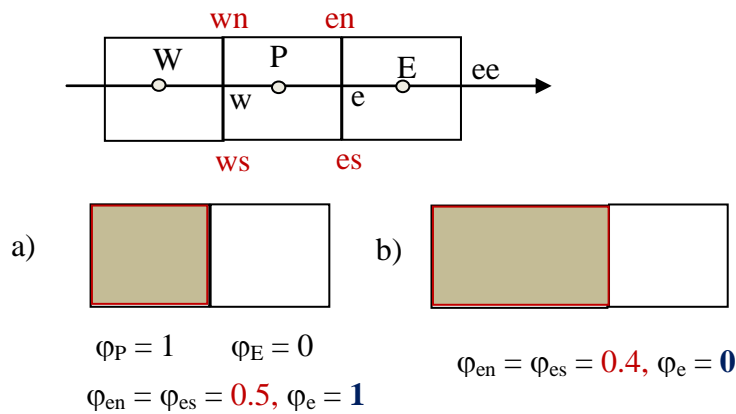


Рисунок 4 – Положение границы раздела в одномерной задаче

В этом случае значения VOF-переменной в вершинах ячеек и граней определяются по соотношениям

$$\varphi_{es} = \varphi_{en} = \frac{\frac{\varphi_P}{\Delta x_P} + \frac{\varphi_E}{\Delta x_E}}{\frac{1}{\Delta x_P} + \frac{1}{\Delta x_E}} = \varphi_P \xi_e + \varphi_E (1 - \xi_e), \quad \xi_e = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_P + \Delta x_E}, \quad (39)$$

$$\varphi_e = \begin{cases} 0, & \varphi_{en} < 0.5 \\ 1, & \varphi_{en} \geq 0.5 \end{cases}$$

Рассмотрим два КО с узловыми точками P и E со значениями $\varphi_P = 1$, $\varphi_E = 0$. Разумно предположить, что поверхность раздела должна совпадать с гранью «е». При использовании равномерной сетки это предположение выполняется (рисунок 2.1а). Однако для неоднородной сетки (рисунок 2.1б) фронт будет располагаться в ячейке P. Он переместится на грань только, когда начнет наполняться ячейка E.

Авторы алгоритма [10] об этом не упоминают. В данной работе внесены коррективы в алгоритм на этапе Корректор-шага.

3.2 Предиктор-шаг

Значение на новом шаге по времени вычисляется по дискретному уравнению, которое легко записать с использованием метода контрольного объема из уравнения баланса (31):

$$\frac{\varphi_P - \varphi_P^0}{\Delta \tau} \Delta V_P = \sum_{nb} \varphi_{nb}^* V_{f,nb} + M_P \Delta V_P, \quad (40)$$

$$V_f = u_{f,nb} \Delta A_{\varphi,nb}$$

Здесь $V_{f,nb}$ – вытекающий объемный поток через грань (вытекающий поток имеет знак минус), м³/сек, φ_f^* – объемная доля жидкой фазы, рассчитанная по алгоритму реконструкции поверхности. В коде Anes используется явная форма уравнения (40), в которой φ_f^* рассчитывается по полю с предыдущего шага по времени φ_P^0 . Поэтому

$$\varphi_P = \varphi_P^0 + \frac{\Delta \tau}{\Delta V_P} \left\{ \sum_{nb} \varphi_{nb}^* V_{f,nb} + M_P \Delta V_P \right\} \quad (41)$$

Причина отказа от неявной схемы (уравнения гидродинамики решаются с помощью неявного метода SIMPLE Anes) заключается в том, что шаг по времени все равно должен быть ограничен критерием Куранта:

$$\Delta\tau \leq C_K \min \left\{ \frac{\Delta V_P}{\sum_f \langle -V_{P,f} \rangle} \right\} \quad (42)$$

Здесь $\langle x \rangle = \min(0, x)$, $-V_{P,f}$ – вытекающий объемный поток через грань «f» ячейки «P». В (42) величина в скобках рассчитывается для каждого КО и берется минимальное значение этой величины. Постоянная C_K – критическое число Куранта, значение которого должно быть меньше единицы (в расчетах принималось $C_K = 0.5$). Заметим, что это условие имеет ясный физический смысл: оно гарантирует, что за шаг по времени поверхность раздела может сместиться только на одну ячейку.

3.3 Корректор-шаг

В процессе решения уравнения (41) могут возникнуть четыре «неприятные» ситуации, связанные с переходом фазовой поверхности из одной ячейки в другую и выходом значения φ_P из интервала $0 \dots 1$ (английские названия – из статьи [10]):

- 1) Overfilling – перелив ячейки ($\varphi_P > 1$).
- 2) Overdepleting – переочистка ячейки ($\varphi_P < 0$).
- 3) Underfilling – недолив ячейки без фронта ($\varphi_P < 1$).
- 4) Underdepleting – недоочистка ячейки без фронта ($\varphi_P > 0$).

Алгоритм Корректор-шага подробно описан в работе [10]. При его реализации в коде Apes возникли проблемы, которые потребовали модификации алгоритма Корректор-шага. Эти модификации описаны ниже подробно.

Алгоритм Корректор-шага выполняется в виде внутреннего итерационного цикла:

- 1) на итерации последовательно выполняются указанные четыре шага;
- 2) после выполнения первых двух шагов производится пересчет значений φ в вершинах всех ячеек;
- 3) итерационный процесс прекращается, если ячейки для коррекции отсутствуют.
- 4) на каждом шаге просто независимо перебираются все ячейки и обрабатываются алгоритмами описанными ниже.

Overfilling: Перелив ячейки

Рассмотрим эту ситуацию на примере одномерного случая (рисунок 4). Если грань w «проницаема» ($\varphi_w = 1$), то из ячейки W в ячейку P будет «перенесена» объемная доля жидкости:

$$\delta\varphi_P = \frac{u_w \Delta\tau}{\Delta V_P}$$

Если при этом грань «e» «непроницаема» ($\varphi_e = 0$), то значение в ячейке P станет больше 1. Для исправления этой «ошибки» (связанной с «некорректностью» φ_e) нужно просто перераспределить излишек φ_P в ячейку E - $\delta\varphi_E$ (в ячейку вниз по потоку), а в КО P установить $\varphi_P = 1$. Это можно сделать из условия выполнения объемного баланса:

$$\delta\varphi_E \Delta V_E = (\varphi_P - 1) \Delta V_P$$

Этот алгоритм легко обобщить на 3D случай:

$$\varphi_{Nk} = \varphi_{Nk} + (\varphi_P - 1)w_{Nk} \frac{\Delta V_P}{\Delta V_{Nk}},$$

$$w_{Nk} = \frac{f_w(V_{f,k})}{\sum_{nb} f_w(V_{f,nb})}, \quad f_w(V_{f,k}) = \max(0, -V_{f,k})$$
(43)

Здесь $-V_{f,k}$ – вытекающие объемные потоки через грани КО Р. Логика соотношений (43) проста – мы перераспределяем излишек в КО-соседи, и таким образом, чтобы перераспределение φ было пропорционально вытекающим через грани потокам. Величина V_f положительна, если поток втекает в КО с точкой Р.

Как показали наши численные эксперименты алгоритм (43) необходимо скорректировать для 3D задач.

В редких случаях в число ячеек по потоку «nb» могут попасть ячейки, в которых $\varphi_{nb} = 1$. В этом случае исправление ситуации в ячейке Р вызовет появление аналогичных ситуаций в ячейке «nb». В принципе в этом нет ничего драматического. На следующих итерациях этот излишек будет перенесен на границу жидкой фазы, где появятся ячейки, которые его «проглотят». Но при неудачном переборе ячеек такой перенос может потребовать очень большого числа итераций Корректор-шага.

Для исправления этой ситуации в алгоритм перелива было добавлено еще одно условие: в (43) перелив в «ячейки-соседи-вниз-по-потоку», в которых $\varphi_{nb} = 1$ не производится. Алгоритмически это сводится к коррекции функции f_w :

$$f(nb) = \begin{cases} -V_{f,nb}, & V_{f,nb} < 0 \text{ и } \varphi_{nb} < 1 \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases}$$
(44)

После перераспределения масс, φ_P полагается равным единице ($\varphi_P = 1$).

Overdepleting – переочистка ячейки

Эта ситуация «противоположна» первой и может возникнуть в ячейке с точкой Р в случае, например:

$$\varphi_P = 0, \quad \varphi_E = 1, \quad \varphi_w = 0, \quad \varphi_e = 1.$$

В этом случае φ_P станет отрицательной. Решение этой проблемы реализуется по аналогии с переливом. Единственное отличие заключается в том, что в ячейки вниз по потоку переносятся отрицательные значения φ :

$$\varphi_{Nk} = \varphi_{Nk} + \varphi_P w_{Nk} \frac{\Delta V_P}{\Delta V_{Nk}},$$

$$w_{Nk} = \frac{f_w(V_{f,k})}{\sum_{nb} f_w(V_{f,nb})}, \quad f_w(V_{f,k}) = \max(0, -V_{f,k}).$$
(45)

После этой коррекции устанавливается $\varphi_P = 0$.

Как показали наши численные эксперименты алгоритм (45) тоже требует коррекции для 3D задач. Для этого в алгоритм переочистки нужно добавить еще одно условие: в (44) не производится переочистка в «ячейки-соседи-вниз-по-потоку», в которых $\varphi_{nb} = 0$. Алгоритмически это сводится к коррекции функции f_w :

$$f(nb) = \begin{cases} -V_{f,nb}, & V_{f,nb} < 0 \text{ и } \varphi_{nb} > 0 \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases}$$
(46)

Underfilling – недолив в ячейку

Третий шаг соответствует случаю, когда в ячейке $\varphi_P < 1$, а значения φ , рассчитанные в вершинах ячейки $\varphi_{n,k} > 0,5$. Последнее означает, что на следующем шаге по времени зна-

чения φ_f^* на всех гранях станет равным единице. Таким образом граница раздела уже ушла из этой ячейки. Поскольку при решении уравнения неразрывности (9) будет выполнен баланс объемных потоков, то значение φ_p больше меняться не будет.

Для решения этой проблемы нужно дозаполнить ячейку до $\varphi = 1$. Для этого можно использовать алгоритм первого шага (43). При этом в отличие от первого шага величина $(\varphi_p - 1)$ будет отрицательной, и мы фактически будем «доливать» ячейку из соседей по потоку.

Здесь тоже потребовалась коррекция алгоритма: используется модифицированная функция (44), т.е. из заполненных ячеек жидкость не забирается, иначе эти ячейки также окажутся с «недоливом».

Underdepleting – недоочистка ячейки

Четвертый шаг аналогичен третьему и связан с ситуацией, когда в ячейке $\varphi_p > 0$, а значения φ , рассчитанные в вершинах ячейки - $\varphi_{n,k} < 0.5$. Последнее означает, что на следующем шаге по времени значения φ_f^* на всех гранях станут равными нулю. Т.е. граница раздела уже ушла из этой ячейки.

Для решения этой проблемы используется алгоритм второго шага (45). Здесь тоже потребовалось некоторая коррекция алгоритма. Мы добавили два дополнительных условия:

- 1) используется модифицированная функция (46): из заполненных ячеек жидкость не забираем, иначе эти ячейки превратятся в недоочищенные ячейки,
- 2) при переборе ячеек-соседей проверяется заполненность ($\varphi = 1$) ячеек *вверх* по потоку (соседи-доноры); если есть хотя бы одна такая ячейка, то устанавливается флаг IsDonorOK;
- 3) если флаг IsDonorOK = TRUE (есть такие ячейки), то для данной ячейки этот шаг не выполняется.

Причина очень простая – на следующей итерации (или на следующем шаге по времени) донорские ячейки будут перелиты и данная ячейка будет дозаполнена первым этапом Корректор-шага.

В разработанном алгоритме используется также коррекция маленьких значений φ и значений φ , близких к единице. Коррекция состоит в следующем:

- 1) если в ячейке $\varphi_p < 10^{-5}$ и значения во всех вершинах $\varphi_{n,k} < 0.5$, то без всяких перераспределений полагается $\varphi_p = 0$;
- 2) если в ячейке $1 < \varphi_p < 1.001$ и значения во всех вершинах $\varphi_{n,k} > 0.5$, то без всяких перераспределений полагается $\varphi_p = 1$.

Это позволяет уменьшить число «бессмысленных» итераций для первого и второго шагов, когда последовательно на границы расчетной области будут переноситься маленькие значения.

При использовании предложенных модификаций алгоритмов Корректор-шага для большинства рассмотренных задач число внутренних итераций не превышало 2 (в худшем случае 3-7 итераций).

3.3 Особенности решения уравнений движения

В кодах, реализующих VOF-алгоритм (например, CFD коды Fluent или OpenFOAM), используется безитерационный алгоритм PISO для решения уравнения неразрывности в объемной форме (4) и уравнений движения (8). В основе кода Anes лежит итерационный алгоритм SIMPLE. Как показали наши численные эксперименты алгоритм SIMPLE (так же и как алгоритм PISO) с успехом можно использовать для решения задач с межфазной поверхностью.

Для улучшения процесса сходимости итерационного процесса при решении уравнений гидродинамики используются методы сглаживания распределений VOF-функции.

Алгоритмы сглаживания полей

В алгоритме VOF Anes предполагается, что область с $0 < \varphi < 1$ занимает один слой ячеек. Фактически это означает, что все свойства смеси и источники являются разрывными. В литературе предложены несколько алгоритмов сглаживания. Математическую теорию сглаживания можно найти в работе [11]. Если говорить о практике, то как правило используются специальные итерационные алгоритмы, основанные на решении уравнений диффузии или на циклическом перерасчете значений в центре КО и в разных точках ячейки (в вершинах или центрах грани). В коде Anes для проверки эффективности были реализованы два алгоритма. Первый алгоритм основан на решении уравнения Пуассона для сглаженной функции $\tilde{\varphi}$:

$$\operatorname{div}(D\nabla\tilde{\varphi}) = (\tilde{\varphi} - \varphi_0), \quad \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial n} = 0 \text{ на границе РО} \quad (47)$$

Здесь φ_0 – это исходное разрывное поле, D – коэффициент «диффузии» для размазывания (РО – расчетная область). Важным свойством полученного сглаженного поля является сохранение интеграла от функций по объему (это легко получить, если проинтегрировать уравнение (47) по объему):

$$\int_{\text{РО}} \tilde{\varphi} dV = \int_{\text{РО}} \varphi_0 dV \quad (48)$$

Степень сглаживания зависит от значения коэффициента диффузии D . По порядку величины $D = C(\Delta x)^2$, где постоянная $C \sim 0,1 \dots 1$. Главные недостатки этого подхода: необходимость решения дополнительного уравнения переноса (47) и трудность подбора коэффициента D при использовании сеток ячеек с существенно различными размерами. Ниже этот алгоритм сглаживания будет называться DIF-алгоритмом.

Второй алгоритм сглаживания основан на циклическом перерасчете значений в центре КО и в разных точках ячейки. В работе [10] в качестве вторичных точек используются вершины КО и обратные объемы в качестве весовых коэффициентов, в работе [12] – центры граней и площади граней. В алгоритме Anes используется подход [10]:

- 1) по соотношениям (36) рассчитываются значения в вершинах ячеек - Φ_{iV} ,
- 2) по этим значениям в вершинах рассчитываются новые сглаженные значения в центрах КО

$$\tilde{\varphi}_P = \frac{\sum_{iV=1}^{N_{\text{Vert}}} \Phi_{iV}}{N_{\text{Vert}}} \quad (49)$$

где N_{Vert} – число вершин ячейки,

- 3) шаги (1) – (2) повторяются NoSmooth раз.

Ниже данный алгоритм сглаживания будет называться C2V-алгоритмом сглаживания. Заметим, что в C2V-алгоритм условие сохранения (44) выполняется приближенно. Однако даже для очень неоднородных сеток ошибка не превышает 2%.

В качестве примера на рисунке 5 показаны поля исходной несглаженной φ и сглаженные $\tilde{\varphi}$ для двух и четырех циклов сглаживания (NoSmooth = 2 и 4).

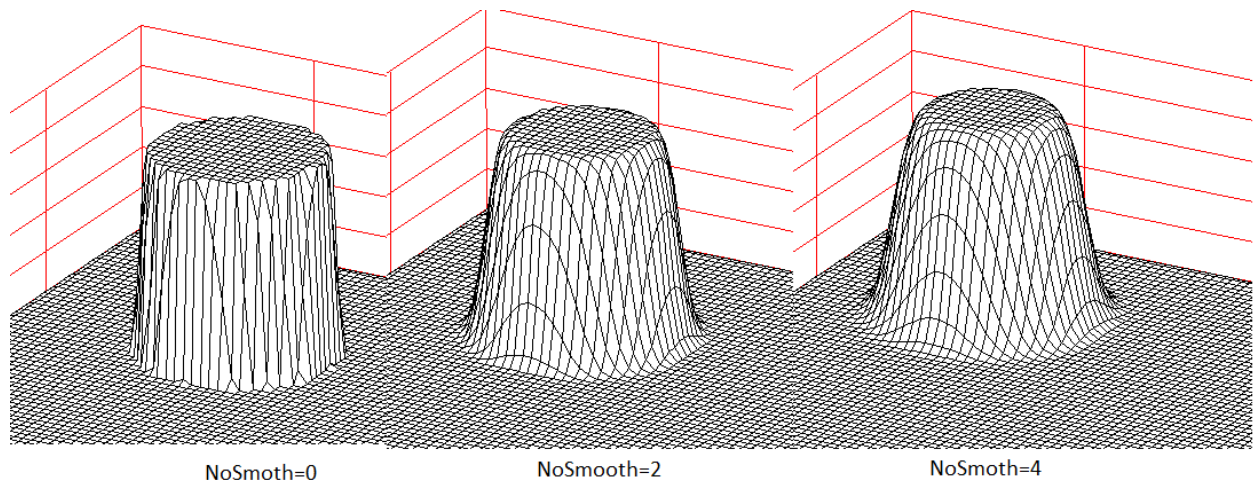


Рисунок 5 – Сглаживание VOF-функции

При расчете свойств в коде Anes сглаженное $\tilde{\varphi}$ используется только для расчета плотности ($\text{NoSmooth} = 2$):

$$\rho^* = \rho_f \tilde{\varphi} + (1 - \tilde{\varphi}) \rho_g, \quad (50)$$

Остальные свойства рассчитываются с помощью несглаженной φ .

Источники массы

Объемный источник массы M_{gf} входит в уравнение неразрывности, уравнение баланса объемной доли жидкой фазы и в уравнение энергии:

$$S_v = M_{gf} \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right), \quad S_\varphi = \frac{M_{gf}}{\rho_f}, \quad S_T = M_{gf} \Delta h_{gs} \quad (51)$$

В VOF-модели Anes используются два подхода для расчета этих источников. Первый основан на непосредственном использовании (51) и точечном характере M_{gf} . Второй подход основан на сглаженном «двухзнаковом» источнике. Идея второго алгоритма предложена в работе [13] и модифицирована в работе [20]. Суть этого подхода основана на следующей идее:

- 1) источник M_{gf} действует на фазовой границе и переводит f- фазу в g-фазу (или наоборот),
- 2) с точки зрения физики такой источник можно заменить двумя объемными источниками, расположенными в «чистых» g- и f-фазе и удалить его непосредственно с фазовой границы,
- 3) эти двойные источники должны иметь разные знаки (в f-фазе отрицательный, в g-фазе положительный для режима кипения) и интегралы по объему РО от них должны быть равны интегралу от исходного массового источника.

Первое достоинство такого подхода связано с удалением массообмена из ячеек с межфазной границей, что позволяет ослабить влияние массообмена на алгоритмы решения уравнения переноса для φ (которые изначально оптимизированы для задач без него). Второе – появляется возможность использовать алгоритм сглаживания для массового источника (в (51) нет полей для сглаживания).

Для этого подхода используются источники массы в форме (9):

$$S_v = \frac{M_{gf}}{\rho_f}, \quad S_\varphi = \frac{\varphi M_{gf}}{\rho}, \quad S_T = \varphi M_{gf} \Delta h_{gs} \quad (52)$$

Процесс расчета сглаженного источника разбивается на два этапа. На первом этапе точный поверхностный источник M_0 сглаживается с использованием DIF-алгоритма или C2V алгоритма. В итоге получается сглаженное поле M_1 .

На втором этапе производится расчет двухзнакового сглаженного источника M_2 :

$$\dot{\rho} = N_g H(\varphi_{\text{cut}} - \varphi) M_1 - N_f H(\varphi - 1 + \varphi_{\text{cut}}) M_1,$$

$$N_f = \frac{M_{\text{int}}}{\int_{\text{PO}} H(\varphi - 1 + \varphi_{\text{cut}}) M_1 dV}; \quad N_g = \frac{M_{\text{int}}}{\int_{\text{PO}} H(\varphi_{\text{cut}} - \varphi) M_1 dV}, \quad (53)$$

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}, \quad M_{\text{int}} = \int_{\text{PO}} M_0 dv$$

Здесь N_f и N_g – нормирующие коэффициенты, φ_{cut} – граничное значение φ (в области $\varphi_{\text{cut}} < \varphi < 1 - \varphi_{\text{cut}}$ источник будет отсутствовать).

На рисунке 6 показан пример использования этого алгоритма. Рассматривается одномерная задача кипения. На графике слева от $x = 0,5$ расположена g-фаза ($\varphi = 0$), в ячейке при $X = 0.5$ расположена межфазная поверхность, справа при $x > 1$ расположена f-фаза. В ячейке с межфазной поверхностью $\varphi = 0,63$, а значение точного объемного источника равно $M_0 = 12$. На рисунке красной линией (и кружками) показан сглаженный источник M_1 , построенный по DIF-алгоритму, зеленая линия (и крестики) – это источник M_2 , рассчитанный с использованием DIF-алгоритма, синяя линия (и ромбики) – это источник M_2 , рассчитанный с использованием C2V-алгоритма.

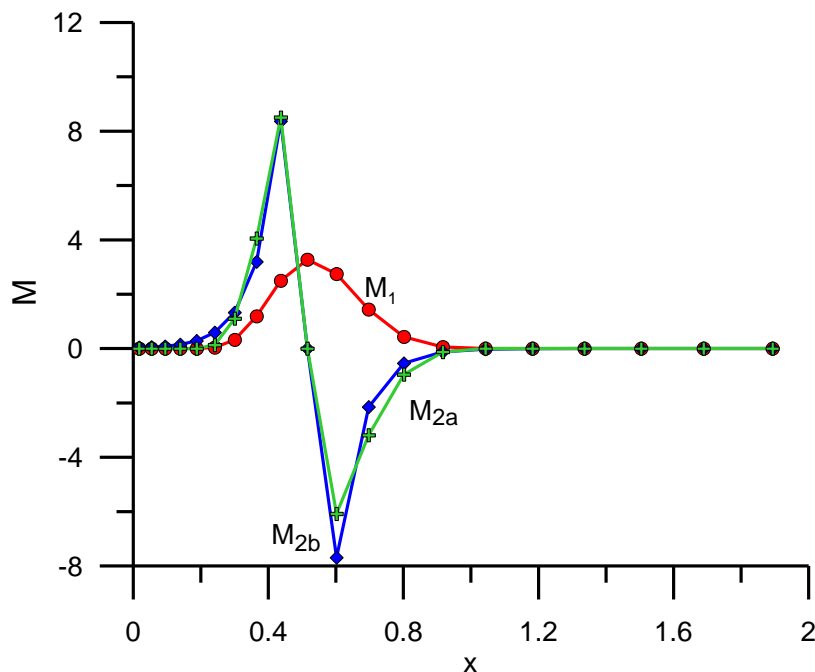


Рисунок 6 – Сглаженный источник

Источники в уравнениях движения

В текущей версии VOF-алгоритма Anes учитывается два источника: силы плавучести и силы поверхностного натяжения. Для их расчета применяется соотношение (34), в котором используется сглаженная $\tilde{\varphi}$ с $\text{NoSmooth} = 2$.

Для расчета кривизны K_{int} можно использовать несколько вариантов. После различных численных экспериментов было обнаружено, что наилучший вариант дает соотношение

$$K = -\operatorname{div}\left(\frac{\nabla\tilde{\phi}}{|\nabla\tilde{\phi}|}\right), \quad (54)$$

где для $\tilde{\phi}$ используется более сильное сглаживание ($\text{NoSmooth} = 4$). На рисунке 7 показан результат работы этого алгоритма для жидкой фазы в виде цилиндра:

- безразмерная рассчитанная кривизна,
- безразмерная x-компонента силы, связанная с поверхностным напряжением,
- безразмерная y-компонента силы,
- безразмерный модуль силы.

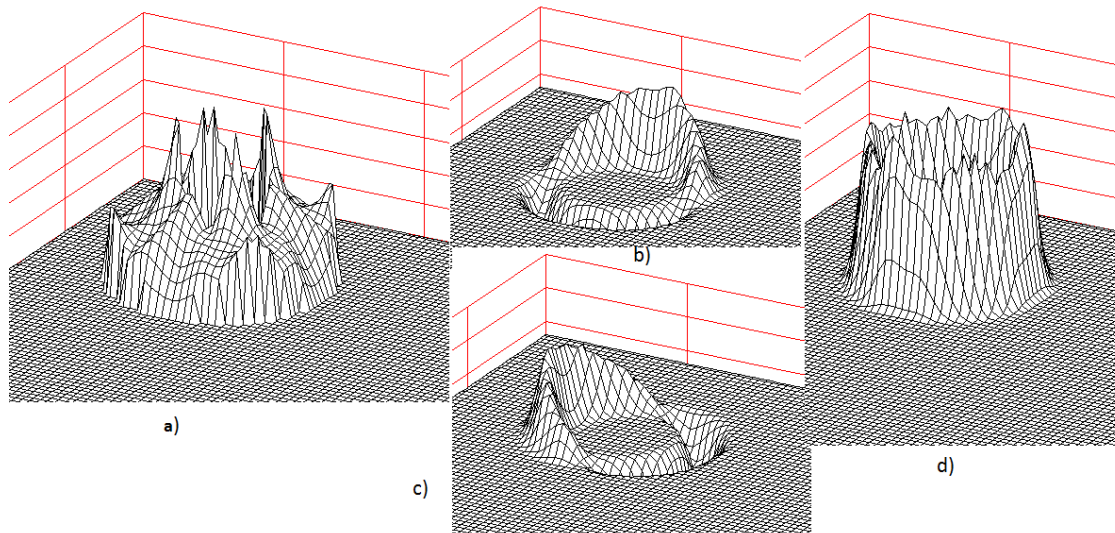


Рисунок 7 – Расчет кривизны и сил

4. Верификация VOF-алгоритма ANES на задачах без массообмена

Для проверки работоспособности алгоритмов, описанных выше, была проведена большая серия расчетов, основанных на классических для метода VOF тестах. Некоторые результаты моделирования приведены ниже.

4.1 Моделирование переноса объемной доли жидкости.

На первом этапе использовались тесты, в которых поле скорости было задано и решалось только уравнение (35) для ϕ . Эти тесты позволяют оценить степень размазывания VOF-переменной и качество реконструкции межфазной поверхности.

Движение жидкого круглого цилиндра в однородном потоке

В тесте рассматривается прямоугольная расчетная область (РО) с размерами по оси x и y равными $L_x = 10$, $L_y = 10$. Вектор скорости постоянен ($u_x = 1$, $u_y = 1$) и наклонен под углом 45° . Это вариант является самым «неприятным» для численного моделирования, поскольку в этом случае все эффекты схемной диффузии максимальны.

На рисунке 7 показан контур ϕ для моментов времени $\tau = 0$ и 5 сек. Аналогичный результат для неоднородной сетки показан на рисунке 8.

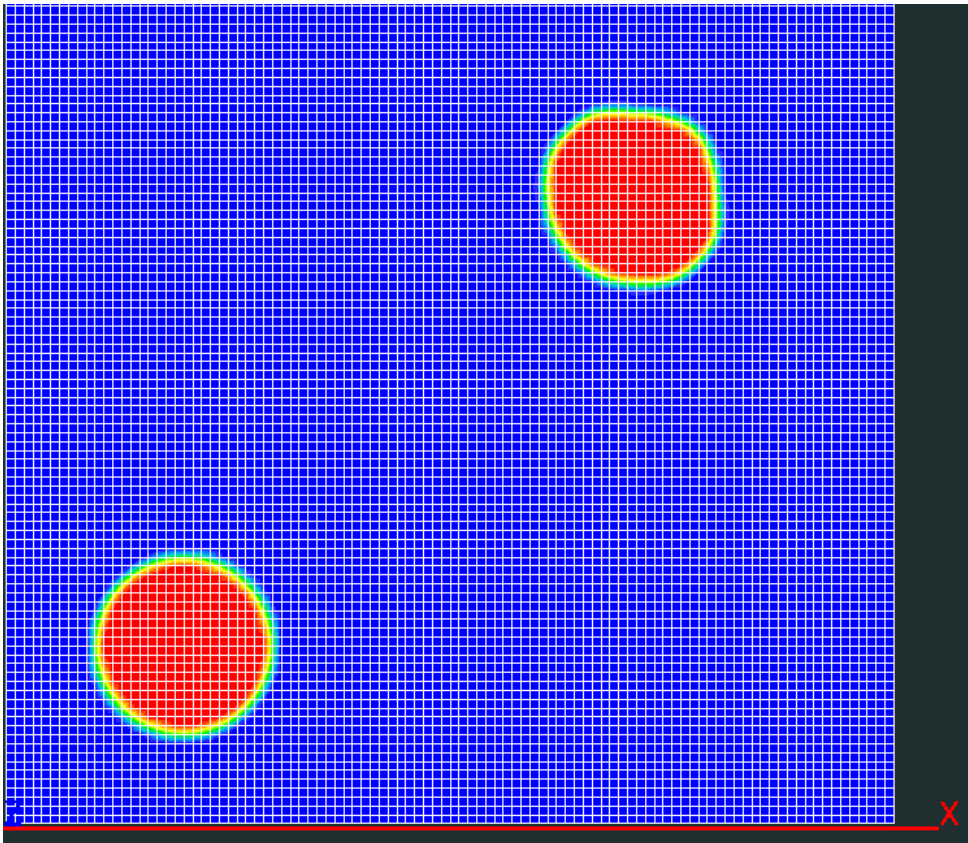


Рисунок 7 – Движение цилиндра по углом 45° на равномерной сетке

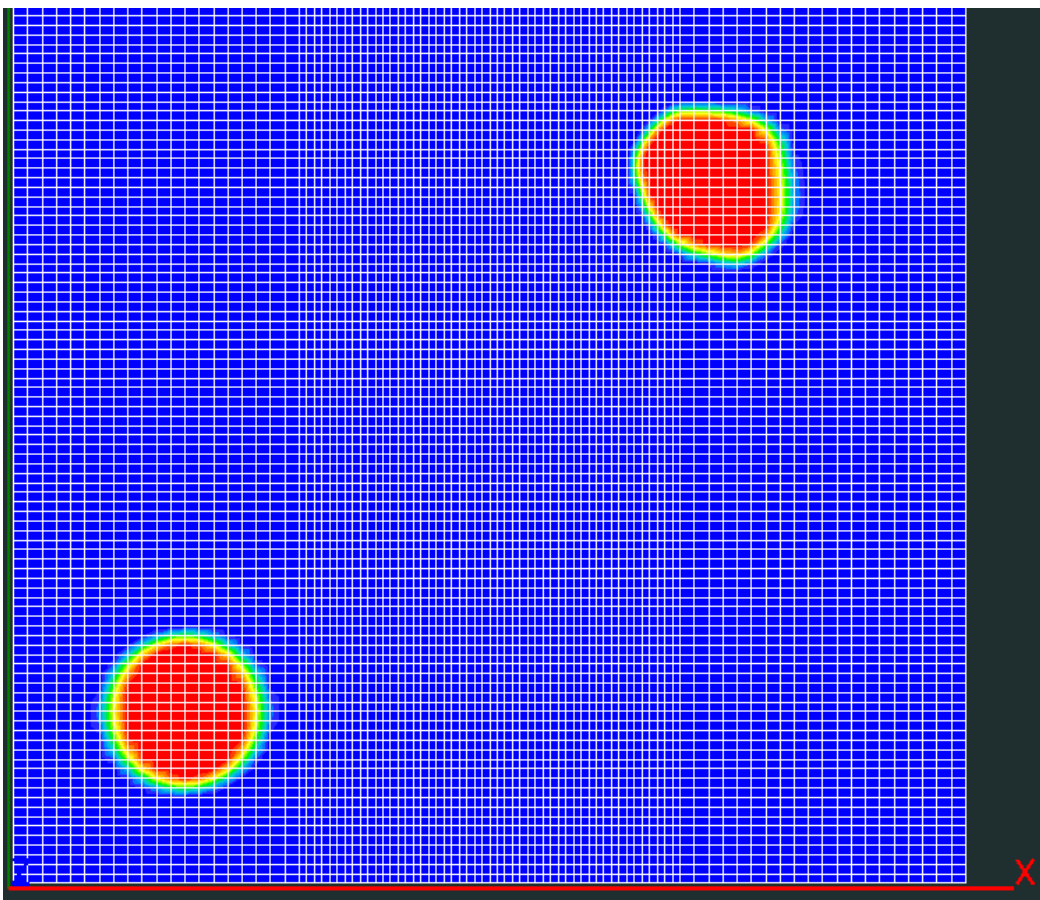


Рисунок 8 – Движение цилиндра под углом 45° на неравномерной сетке

Движение параллелепипеда в однородном потоке

В этом тесте вместо цилиндра рассматривается квадратный жидкий объект. Поля ϕ для $\tau = 0$ и 5 сек показаны на рисунке 9.

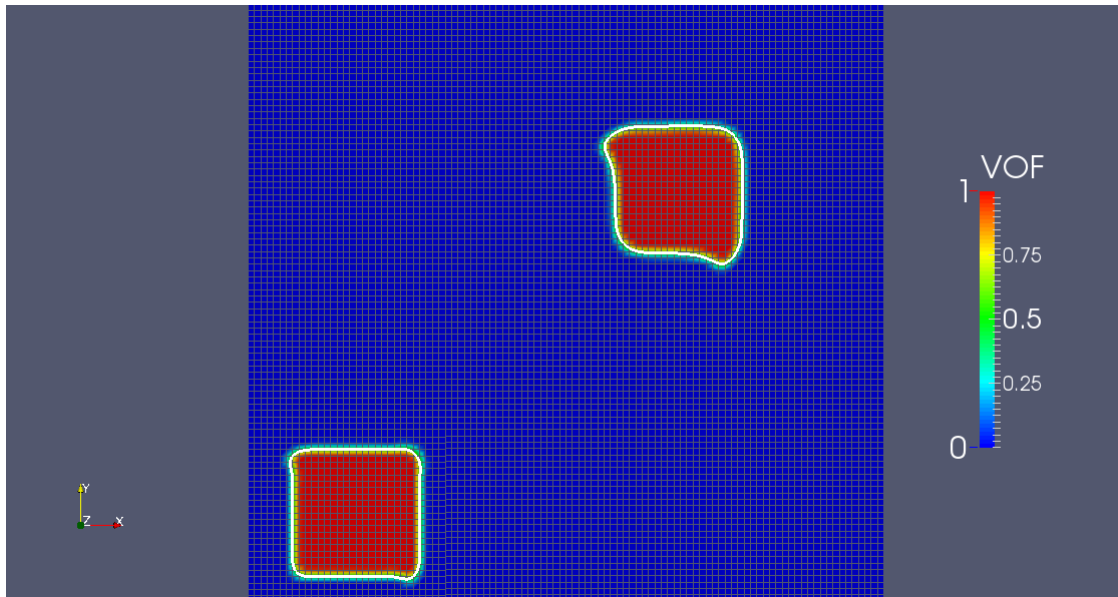


Рисунок 9 – Движение квадрата под углом 45°

Движение жидкого цилиндра в соленоидальном потоке

В тестах рассматривается прямоугольная РО с $L_x = \pi$, $L_y = \pi$. В первом тесте задан неоднородный профиль скорости, независимый от времени:

$$u_x = \sin(x) \cos(y),$$

$$u_y = -\sin(y) \cos(x)$$

Это поле описывает вращение потока как твердого тела относительно центра РО. В начальный момент времени в точке $(\pi/2, (1+\pi)/5)$ расположен жидкий цилиндр с радиусом $\pi/5$. При $\tau > 0$ начинается движение и деформация цилиндра. Расчет производится до момента времени $\tau = T = 16$ сек.

Во втором тесте поле скорости зависит от времени

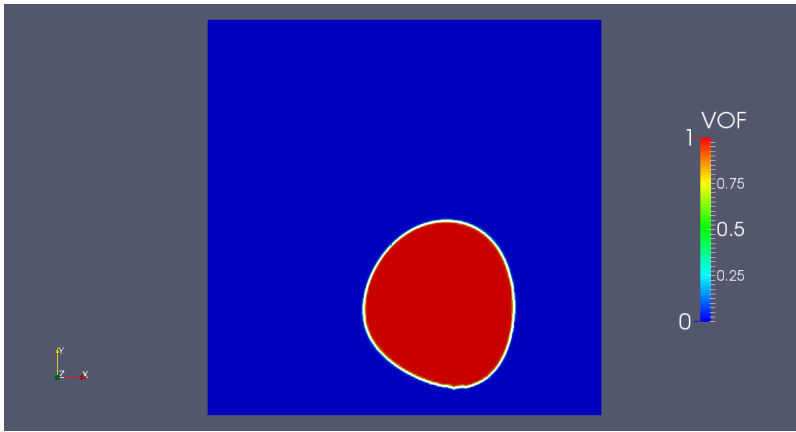
$$u_x = \sin(x) \cos(y) \cos\left(\pi \frac{\tau}{T}\right),$$

$$u_y = -\sin(y) \cos(x) \cos\left(\pi \frac{\tau}{T}\right)$$

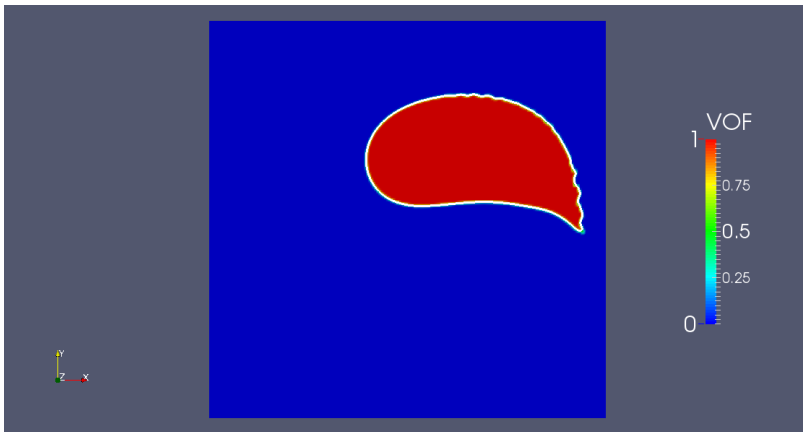
Это поле скорости соответствует вращению потока сначала против часовой стрелки, а затем по часовой стрелке. В силу симметрии задачи по времени цилиндр должен вернуться в свое исходное состояние.

Для расчетов обоих тестов использовалась равномерная сетка $n_x * n_y = 200 * 200$.

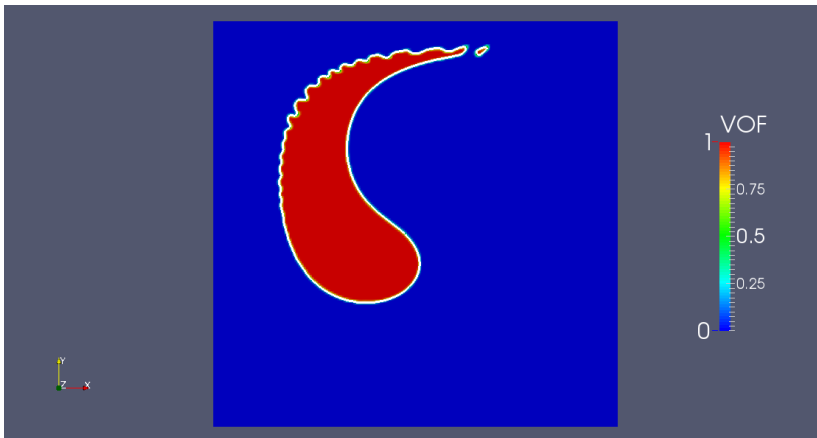
Результаты первого теста показаны на рисунке 10, второго – на рисунке 11.



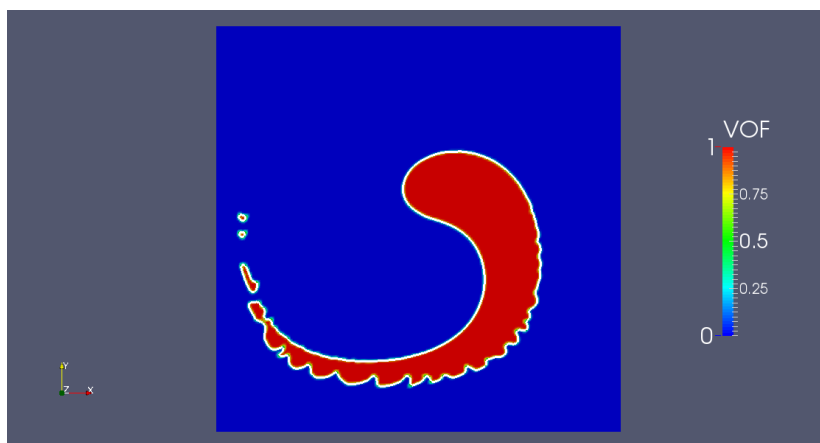
$\tau = 0.5$ сек



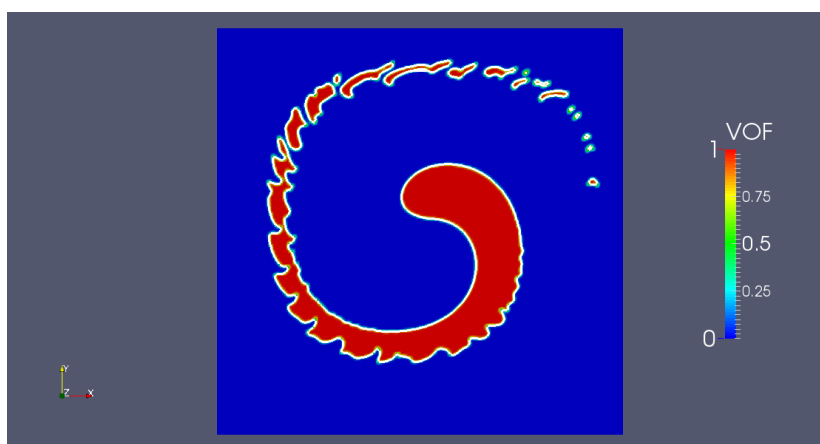
$\tau = 3.0$ сек



$\tau = 5.0$ сек

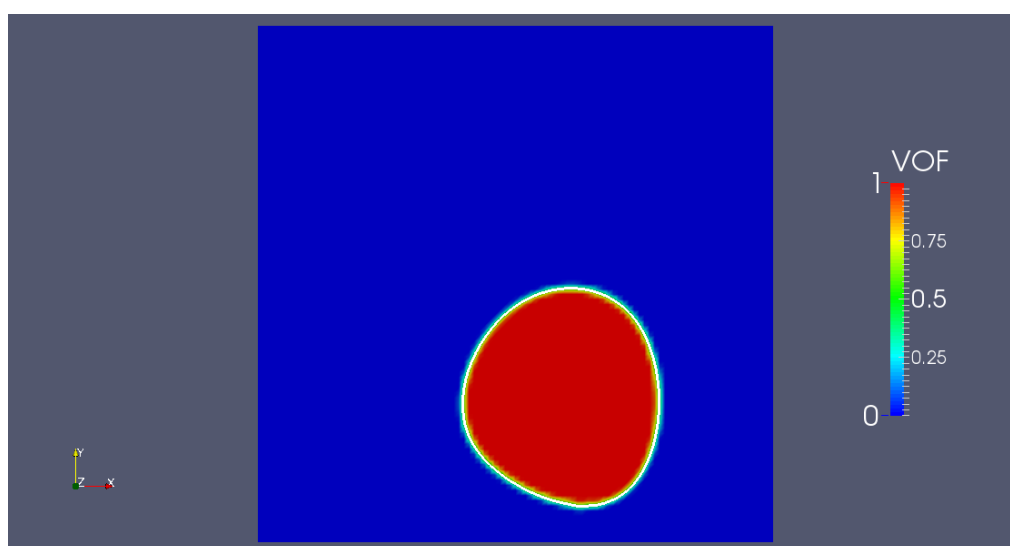


$\tau = 10.0$ сек

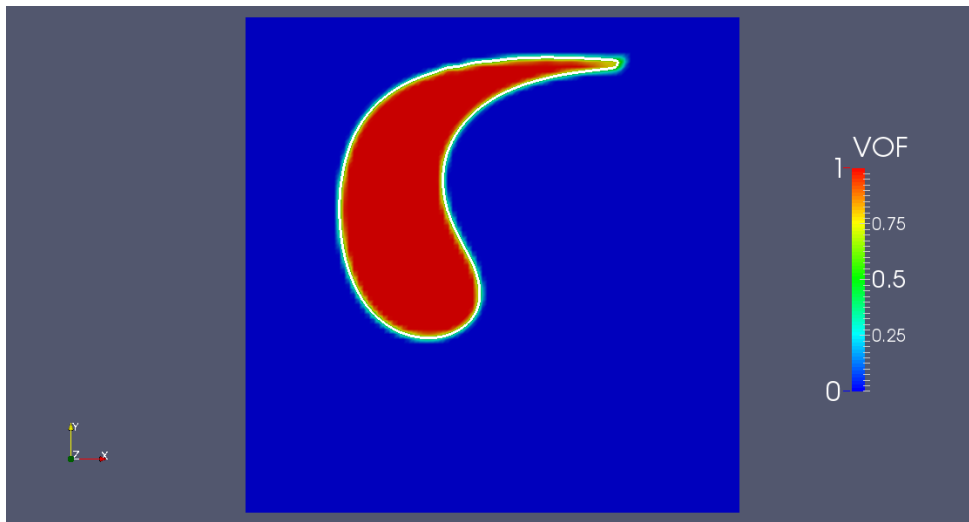


$\tau = 16.0$ сек

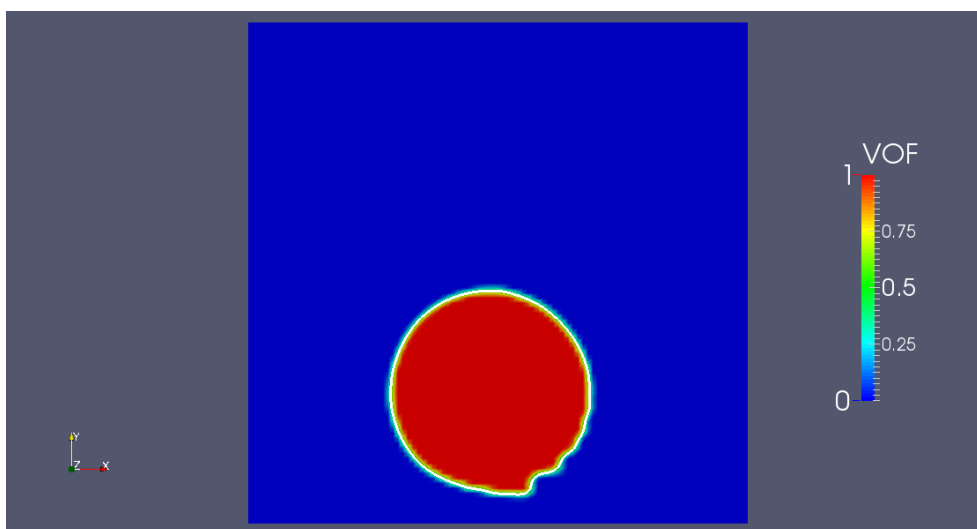
Рисунок 10 – Тест №1: движение цилиндра в соленоидальном поле



$\tau = 0.5$ сек



$\tau = 8.0$ сек



$\tau = 16.0$ сек

Рисунок 11 – Тест №2: движение цилиндра в нестационарном соленоидальном поле

4.2 VOF-алгоритм с расчетом гидродинамики

В этих классических задачах решается полная система уравнений: уравнение неразрывности, два уравнения движения и уравнение для VOF-переменной.

Обрушение водяной колонны

Рассматривается прямоугольная РО с $L_x = 4 \cdot a$, $L_y = 2 \cdot a$, где $a = 0.146$ м.

Расчетная область заполнена воздухом со свойствами:

$$\rho_g = 1,2 \text{ кг/м}^3, \nu_g = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$$

В начальный момент времени в левой нижней части РО расположена прямоугольная колонна воды размером $L_{cx} = a$, $L_{cy} = 2a$ со следующими свойствами:

$$\rho_f = 1000 \text{ кг/м}^3, \nu_f = 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$$

Расчетная область расположена в поле силы тяжести с $g_y = -9,8 \text{ м/с}^2$.

На левой, правой и нижней границы расчетной области задаются условия прилипания, на верхней границе задается постоянное давление.

В расчете учитывались только силы плавучести, силы поверхностного натяжения не учитывались.

Для верификации использовались результаты расчета, полученные аспирантом кафедры Криогенной техники НИУ «МЭИ» Д. Симушевым с помощью кода OpenFOAM (за что авторы выражают ему благодарность, VOF-алгоритм кода OpenFOAM описан в [12]).

На рисунке 12 показаны поле VOF-переменной и вектора скорости смеси для момента времени $\tau = 0.2$ сек, полученные с помощью кода Anes. На рисунке 13 представлены аналогичные поля, полученные с помощью кода OpenFOAM.

На рисунке 14 показана зависимость высоты колонны на левой границе расчетной области от времени. На рисунке 15 показана зависимость ширины колонны на нижней поверхности от времени. Точками на рисунках показаны экспериментальные данные работы [24].

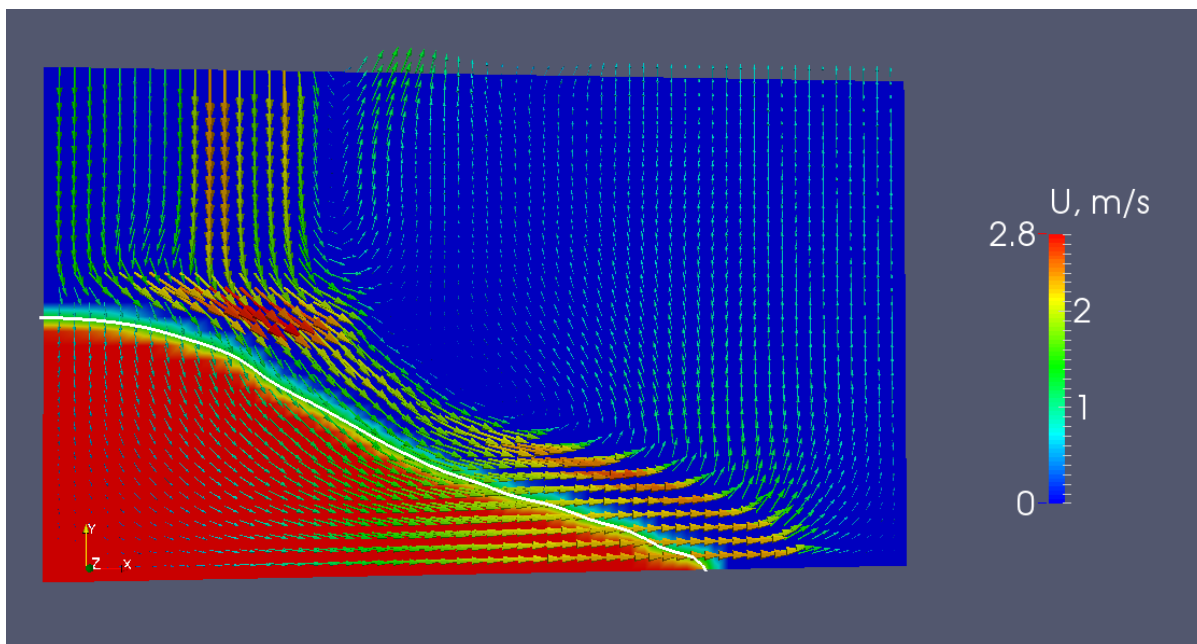


Рисунок 12 – Anes: векторное поле скорости и поле VOF-переменной для $\tau = 0,2$ сек

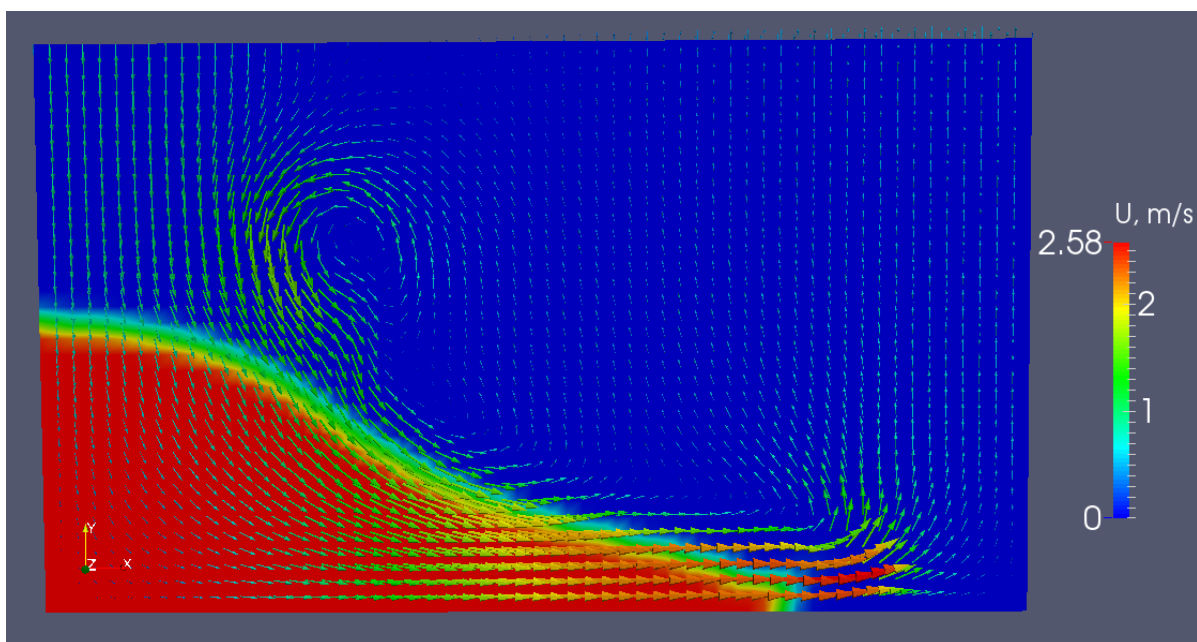


Рисунок 13 – OpenFOAM: векторное поле скорости и поле VOF-переменной для $\tau = 0,2$ сек

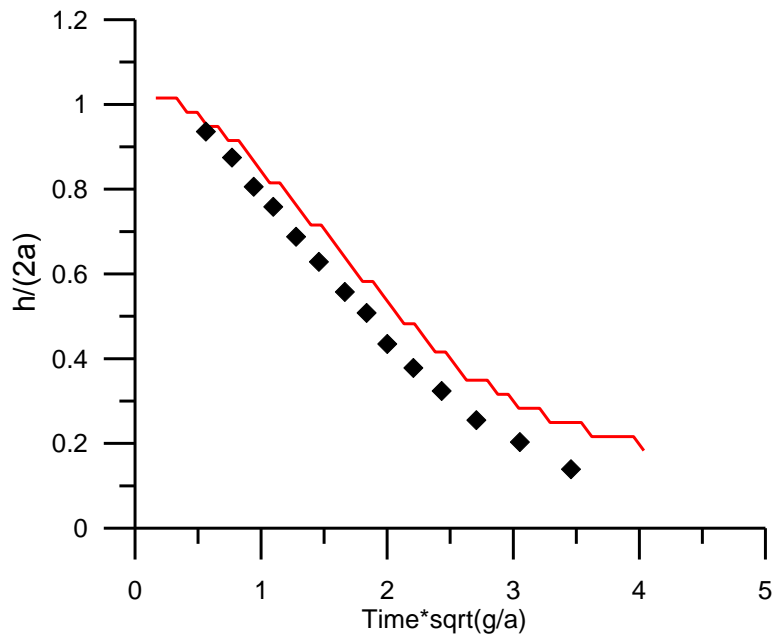


Рисунок 14 – Зависимость высоты водяной колонны от времени

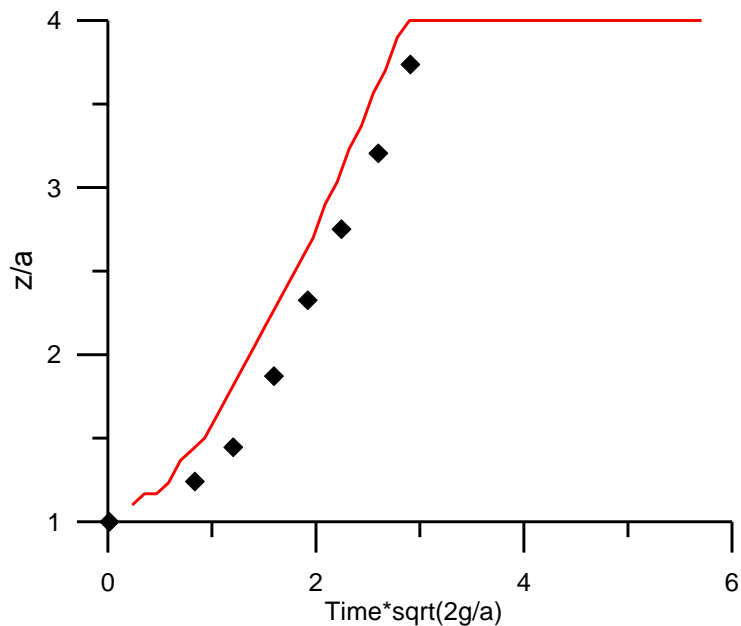


Рисунок 15 – Зависимость ширины водяной колонны от времени при $y = 0$

Обрушение водяной колонны в каверне с препятствием

Отличие этой задачи от предыдущей заключается в наличии на нижней поверхности в центре прямоугольного препятствия, которое вызывает появление струи воды при ударе колонны о нее. На рисунке 15 показано поле VOF-переменной и векторное поле скорости для момента времени $\tau = 0,2$ сек. На рисунке 16 показаны аналогичные поля, полученные с помощью кода OpenFOAM (данные из работы [12]).

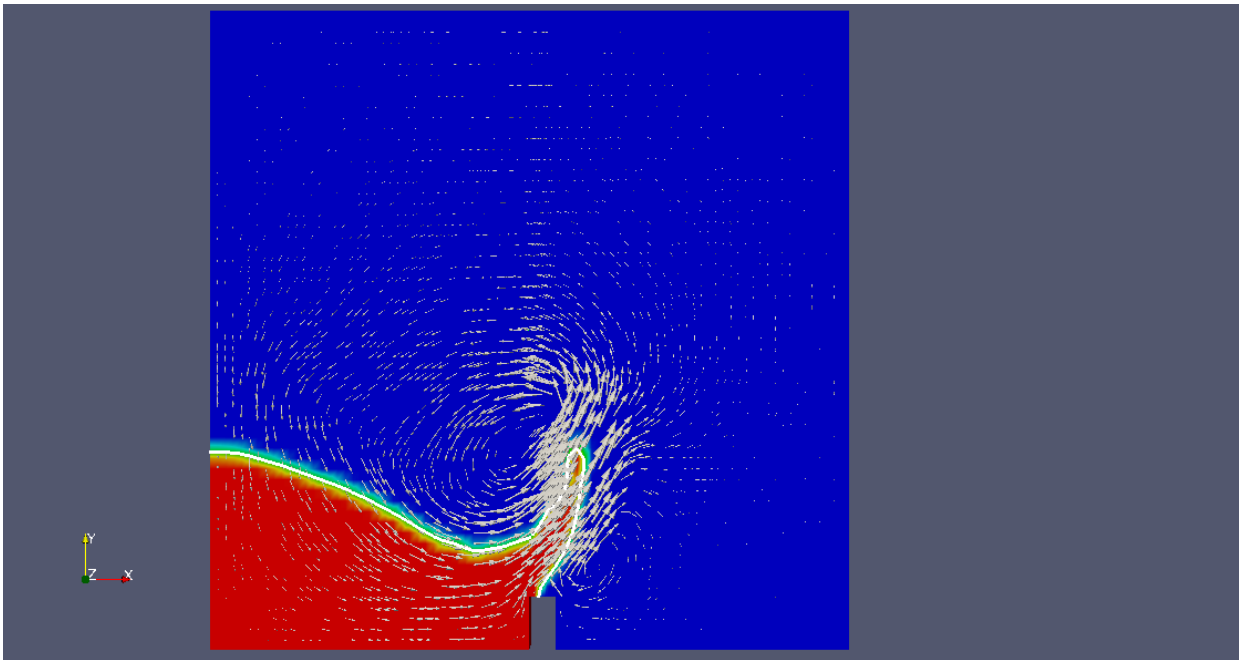


Рисунок 15 – Векторное поле скорости и поле VOF-переменной для $\tau = 0,2$ сек

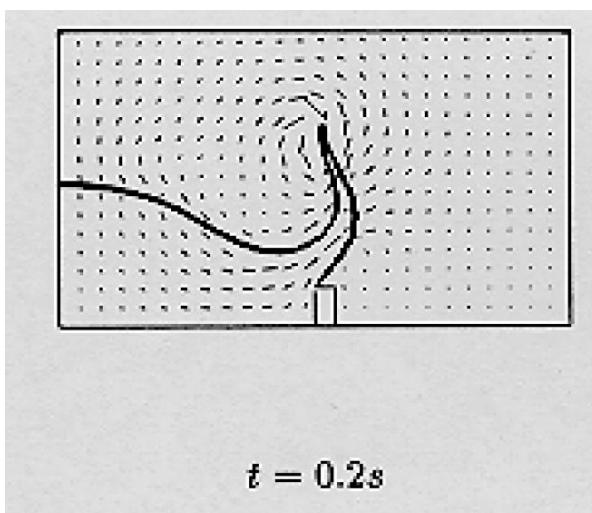


Рисунок 16 – Векторное поле скорости и поле VOF-переменной (код OpenFOAM [12])

Колебание свободной поверхности

В этом тесте рассматривается прямоугольный бак с размерами $L_x = 100$ мм, $L_y = 75$ мм, заполненный водой. В начальный момент времени поверхность раздела возмущается в соответствии с соотношением:

$$y_s = 50 + 10 \cos\left(\pi \frac{x}{L_x}\right), \text{ мм.}$$

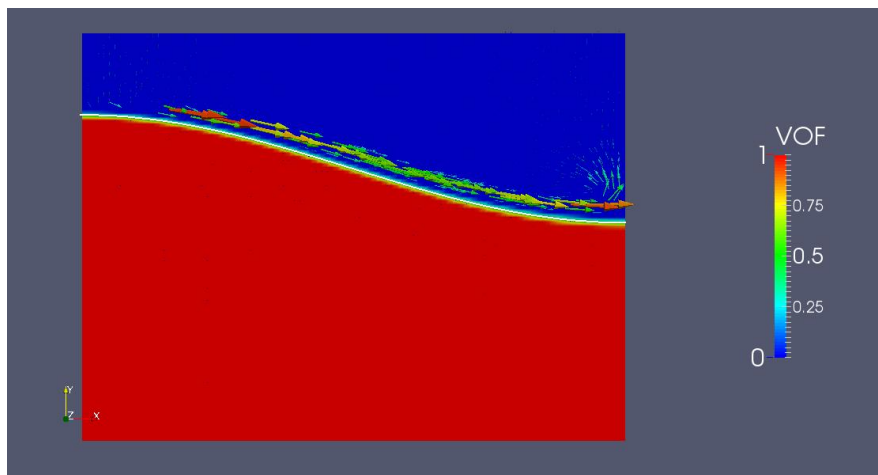
Свойства воздуха и воды принимались постоянными:

$$\begin{aligned} \rho_g &= 1,2 \text{ кг/м}^3, \quad \nu_g = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}, \\ \rho_f &= 1000 \text{ кг/м}^3, \quad \nu_f = 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с} \end{aligned}$$

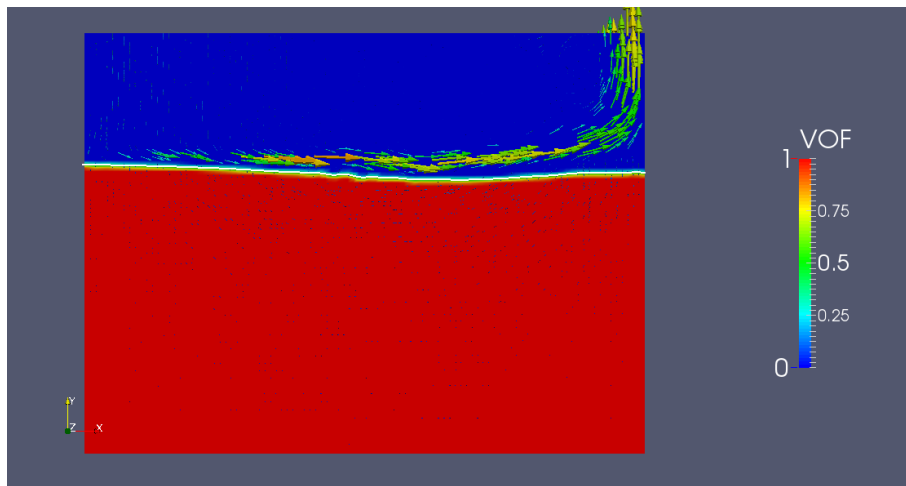
Ускорение свободного падения направлено вдоль оси y и принималось равным $g_y = 9,8 \text{ м/с}^2$. Сила поверхностного натяжения не учитывалась.

На левой, правой и нижней стенках задавались условия прилипания, на верхней границе задавалось постоянное давление..

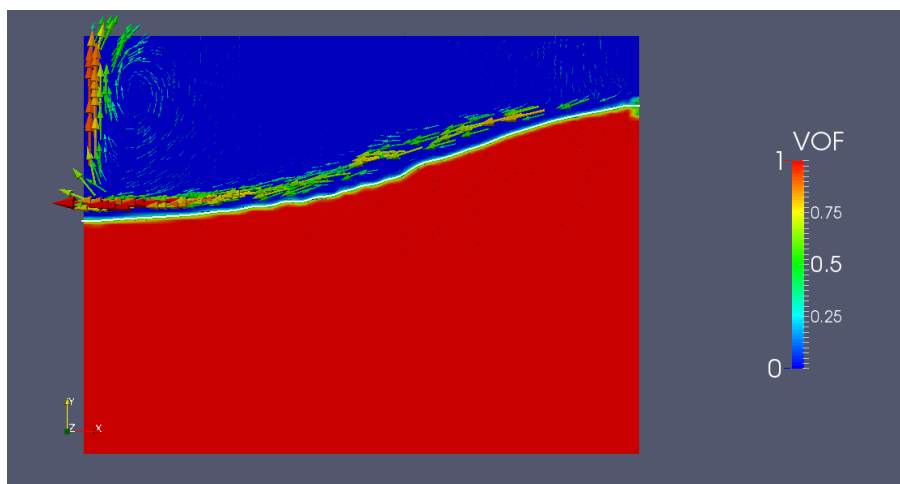
На рисунке 17 показаны поля VOF-переменной и скорости для $\tau = 0,01, 0,09, 0,18$ и $0,30$ сек.



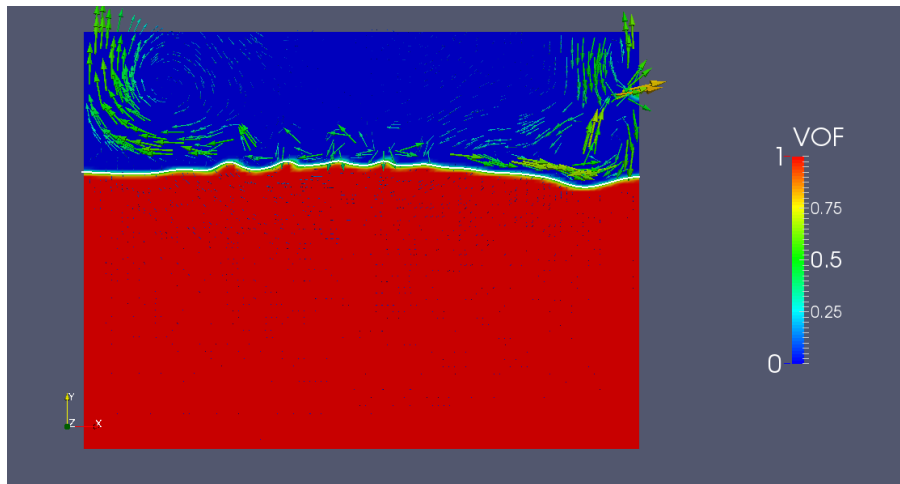
$\tau = 0,01$ сек



$\tau = 0,09$ сек



$\tau = 0,18$ сек



$\tau = 0,3$ сек

Рисунок 17 – Поле VOF-функции и поле вектора скорости

Неустойчивость Релея-Тейлора

Рассматривается плоская каверна $L_x = 0.5$ м, $L_y = 4$ м, заполненная двумя жидкостями с разными свойствами:

$\rho_f = 1.225$, $\mu_f = 0.00313$: для жидкости сверху каверны,

$\rho_g = 0.1694$, $\mu_g = 0.00313$: для жидкости внизу каверны.

Ускорение свободного падения направлено вертикально вниз $g_y = -9,8$, силы поверхностного натяжения не учитываются.

В начальный момент времени на поверхности раздела задано возмущение в виде

$$y_s = 2 + 0.05 \cdot \cos(2\pi x)$$

Для расчета использовалась равномерная мелкая сетка с числом узлов $n_x \cdot n_y = 64 \cdot 500$.

Шаг по времени принимался равным $\Delta\tau = 10^{-4}$ сек. Все четыре границы РО были непроницаемы и на них задавались условия полного проскальзывания.

На рисунке 18 показаны рассчитанные поля VOF-переменной, на рисунке 19 показаны результаты расчета с использованием Level-Set метода (данные из работы [25]).

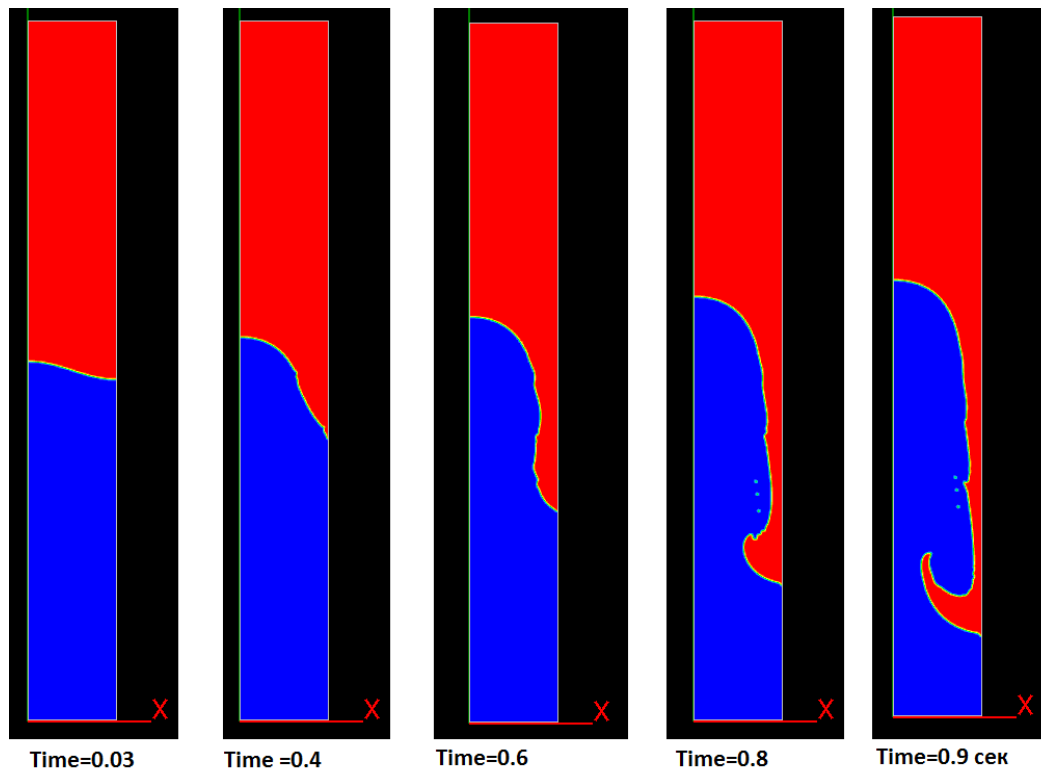


Рисунок 15 – Поля VOF-переменной для разных моментов времени

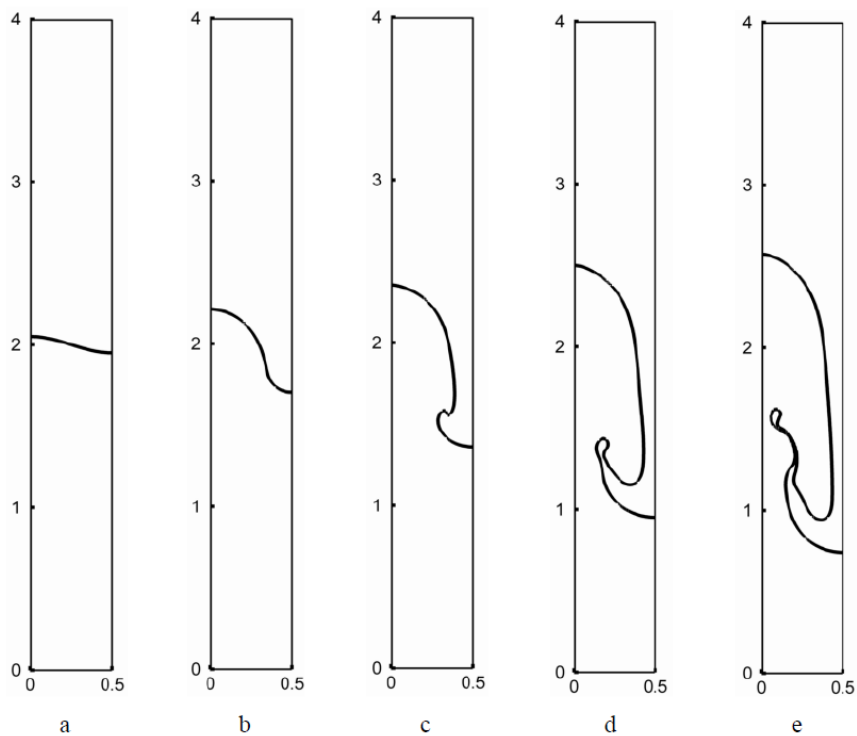


Рисунок 16 – Результаты моделирования с использованием Level-Set метода [5]:

a - Time = 0, **b** - 0,4 сек, **c** - 0,6 сек, **d** - 0,8 сек, **e** - 0,9 сек

Всплытие цилиндрического воздушного пузырька в декартовой системе координат

Это классический тест для проверки влияния сил плавучести и поверхностного натяжения. Рассматривается прямоугольная камера, заполненная водой. Размеры камеры: $L_x = 50$ мм, $L_y = 100$ мм. В нижнюю часть камеры помещается цилиндрический пузырек воздуха диаметром $D_a = 10$ мм. Свойства фаз:

$$\rho_f = 1000, \mu_f = 0,556$$

$$\rho_g = 1, \mu_g = 5,56 \cdot 10^{-4}$$

В данном примере учитываются силы поверхностного натяжения. Расчеты проводились для трех значений коэффициента поверхностного натяжения:

$$\sigma_1 = 9,79 \cdot 10^{-1}, \sigma_2 = 9,79 \cdot 10^{-2}, \sigma_3 = 9,79 \cdot 10^{-3},$$

которые соответствуют числам Бонда:

$$Bo = \frac{g(\rho_f - \rho_g)D_a^2}{\sigma}, \quad Bo_1 = 1, Bo_2 = 10, Bo_3 = 100$$

Число Мортон для этих значений (обратное числу Капицы Ca) равно:

$$Mo = \frac{g\mu_f^4}{\rho_f\sigma^3}, \quad Mo_1 = 0.001, Mo_2 = 1, Mo_3 = 1000$$

На рисунке 17 показаны поля VOF-переменной вблизи пузырька для трех значений числа Бонда и времени. На рисунке 18 показаны результаты расчетов из работы [10].

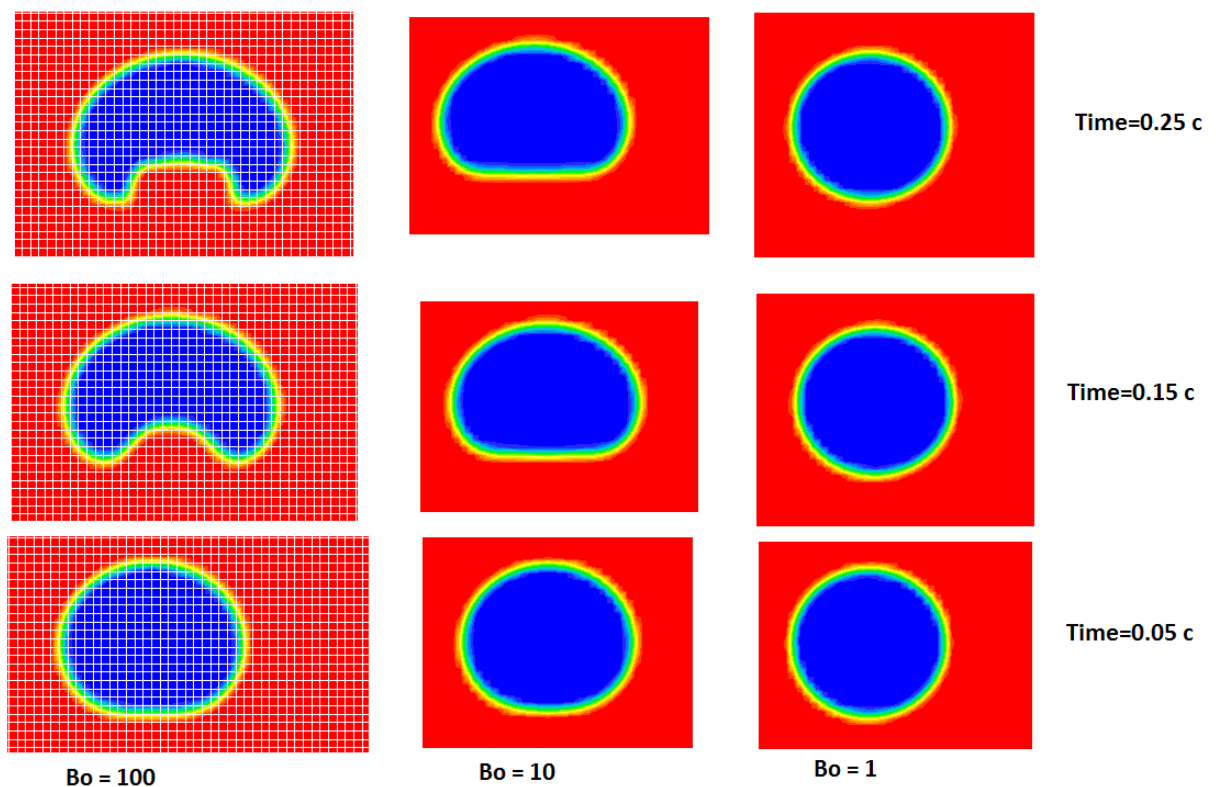


Рисунок 17 – Поля VOF-переменной для подъема цилиндрического пузырька

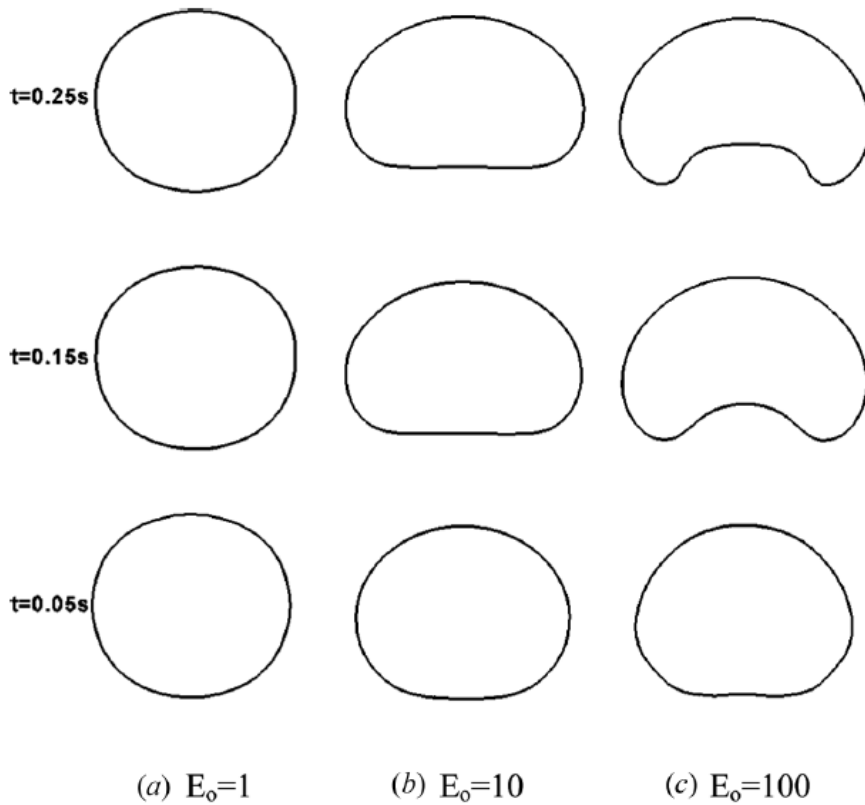


Рисунок 18 – Поля VOF-переменной для подъема цилиндрического пузырька (результаты расчета работы [10], E_0 – число Бонда)

Всплывание сферического воздушного пузырька в цилиндрической системе координат

Этот пример полностью аналогичен предыдущему, но расчет выполняется с использованием цилиндрической системы координат. Поэтому в этом случае всплывает не цилиндрический пузырек, а сферический (и соответственно кривизна увеличивается в два раза).

На рисунке 19 показаны формы пузырька, аналогичные изображенным на рисунке 17 для цилиндрического пузырька.

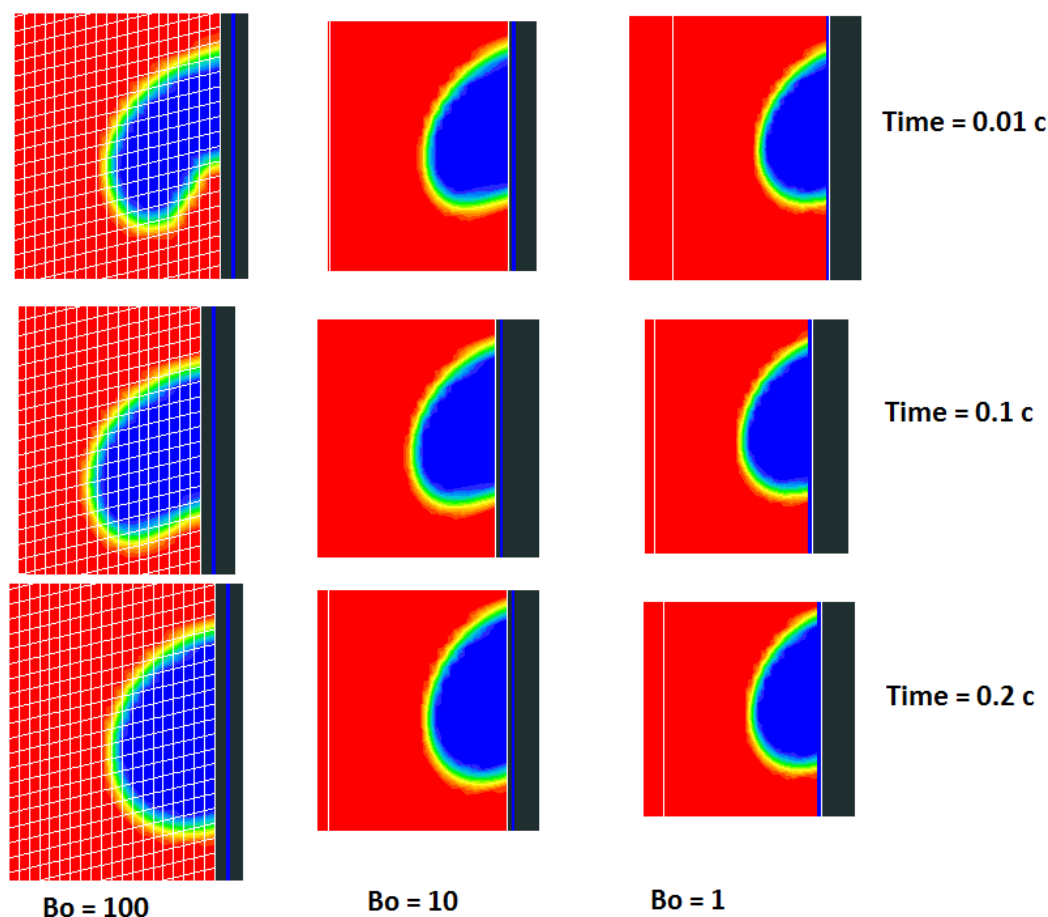


Рисунок 19 – Поля VOF-переменной для подъема сферического пузырька

5. Верификация VOF-алгоритма ANES на задачах с массообменом

Для отладки и верификации VOF-алгоритма Anes с массообменом в первую очередь необходимы тестовые задачи, имеющие аналитическое решение. В качестве таких задач выбраны две задачи – задача Стефана [26] и задача Сквивена [22]. Отметим, что эти задачи в той или иной форме используются для верификации VOF-алгоритмов в других работах [13, 18, 19, 20, 27].

Эти задачи являются одномерными и в них не учитываются эффекты плавучести и поверхностного натяжения, поэтому они наиболее удобны для детальной отдельной проверки алгоритмов массообмена. Ниже будет показано, что на основе второй задачи можно подготовить тесты для верификации двумерных и трехмерных задач.

В задачах Стефана и Сквивена рассматриваются одномерные процессы в декартовой, цилиндрической или сферической системах координат (СК). Левая граница области $x = 0$ считается непроницаемой (в цилиндрической и сферической систем координат – это центр СК). Граница раздела фаз в момент времени $\tau > 0$ расположена в точке x_s . Слева от границы раздела расположен пар (g), справа – жидкость (f). Поскольку задача одномерна, и слева находится «непроницаемая» граница, то пар неподвижен и движение возникает только в жидкости.

В задаче Стефана при $\tau = 0$ и пар и жидкость имеет температуру $T = T_{sat}$. При $\tau > 0$ температура левой стенки $T(x=0) = T_w > T_{sat}$. У стенки возникает перегретый пар, а фронт испарения (фазового перехода) распространяется вправо. Поскольку пар не движется, то из-за разности плотностей фаз возникает движение жидкости в положительном направлении оси x .

Постановка задачи Сквивена другая. В начальный момент времени жидкость перегрета

$T(\tau = 0) = T_0 > T_{\text{sat}}$. При $\tau > 0$ температура левой стенки устанавливается равной T_{sat} и начинается процесс кипения перегретой жидкости и образование неподвижного пара в состоянии насыщения. Фактически это задача о росте парового «пузыря» в бесконечном объеме перегретой жидкости.

Для описания этих одномерных задач можно использовать отдельные решения в областях пара и жидкости и сшивку этих решений на фронте.

Будем считать, что пар и жидкость несжимаемы. В этом случае из уравнения неразрывности следует, что

$$u_g = 0, \quad x^m \rho_f u_f = \text{const} \quad . \quad (55)$$

Здесь:

- $m = 0$ для декартовой СК,
- $m = 1$ для цилиндрической СК ($x = r$),
- $m = 2$ для сферической СК ($x = r$).

Уравнения энергии для фаз можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_g}{\partial \tau} + u_g \frac{\partial T_g}{\partial x} &= a_g \frac{1}{x^m} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^m \frac{\partial T_g}{\partial x} \right), \quad a_g = \frac{\lambda_g}{\rho_g c_{pg}}, \\ \frac{\partial T_f}{\partial \tau} + u_f \frac{\partial T_f}{\partial x} &= a_f \frac{1}{x^m} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^m \frac{\partial T_g}{\partial x} \right), \quad a_f = \frac{\lambda_f}{\rho_f c_{pf}} \end{aligned} \quad (56)$$

На фазовой границе должны выполняются условия баланса массы и энергии, которые в лабораторной СК можно записать в виде:

$$\begin{aligned} m_{gf} &= \rho_g (u_g - u_s) = \rho_f (u_f - u_s), \\ m_{gf} h_g(T_{\text{sat}}) - \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} &= m_{gf} h_f(T_{\text{sat}}) - \lambda_f \frac{\partial T_f}{\partial x} \end{aligned} \quad (57)$$

Граничные условия зависят от задачи и они описаны ниже. Отметим, что в обоих задачах пар всегда неподвижен ($u_g = 0$), поскольку левая стенка непроницаема. В этом случае легко связать скорость жидкости со скоростью фронта

$$u_f = \gamma \frac{u_s(\tau)}{x^m}, \quad \gamma = \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_f} \right) \quad (58)$$

5.1 Задача Стефана

Геометрия задачи показана на рисунке 20. Поскольку температура жидкости постоянна и равна $T_f = T_{\text{sat}}$, то нас интересует только поле температуры в газе и скорость движения фронта. Поле температуры T_g можно найти из уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T_g}{\partial \tau} = a_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} \quad (59)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} x = 0: \quad T_g &= T_w, \\ x = x_s(\tau): \quad T_g &= T_{\text{sat}} \end{aligned} \quad (60)$$

Положение фронта и скорость его движения определяется из уравнения

$$u_s = \frac{\partial x_s}{\partial \tau} = - \frac{\lambda_g}{\rho_g \Delta h_{gf}} \left(\frac{\partial T_g}{\partial x} \right)_{x=x_s}, \quad (61)$$

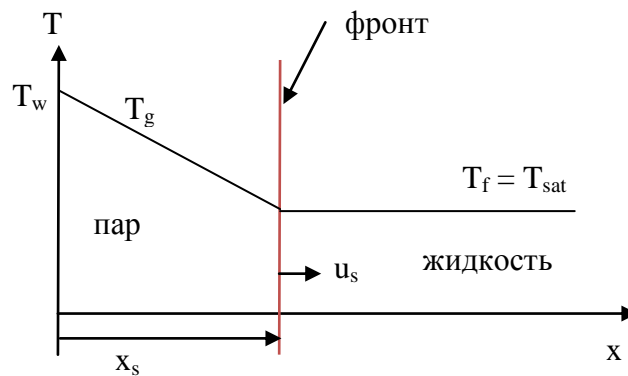


Рисунок 20 – Одномерная задача Стефана

Решения системы (59)-(61) легко найти, используя подход [15]. Если ввести автономную переменную

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{\tau}}, \quad (62)$$

и считать, что (m_s – неизвестная постоянная)

$$T_g = T_g(\xi), \quad x_s = 2m_s \sqrt{a_g \tau}, \quad u_s = m_s \sqrt{\frac{a_g}{\tau}}, \quad (63)$$

то решение легко получить в виде

$$T_g = T_w + (T_{sat} - T_w) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2\sqrt{a}}\right)}{\operatorname{erf}(m_s)}, \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\gamma^2} d\gamma \quad (64)$$

Здесь $\operatorname{erf}(x)$ – функция интеграла ошибок, а постоянная m_s удовлетворяет нелинейному уравнению вида

$$m_s \cdot \operatorname{erf}(m_s) \cdot \exp(m_s^2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Ja}^*, \quad \operatorname{Ja}^* = \frac{c_{pg}(T_w - T_{sat})}{\Delta H_{gf}} \quad (65)$$

где Ja^* – модифицированное число Якоба. Заметим, что обычное число Якоба содержит отношение плотностей:

$$\operatorname{Ja} = \frac{\rho_f c_{pg}(T_w - T_{sat})}{\rho_g \Delta H_{gf}} = \frac{\rho_f}{\rho_g} \operatorname{Ja}^*.$$

Уравнение (62) легко решается с помощью любого итерационного метода.

Для моделирования использовалась вода при трех давлениях. Свойства фаз и характерные параметры приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Свойства фаз

Параметр	Вариант 1	Вариант 2	Вариант 3
P_{sat} , МПа	0,1013	0,5433	14,61
T_{sat} , С	100	155	340
ρ_f / ρ_g	1605	315,9	6,577
Ja^*	$0,2252 \cdot 10^{-1}$	$0,2818 \cdot 10^{-1}$	0,2912
Ja	36,13	8,903	1,915
m_s	0,1059	0,1187	0,4343
Time, сек	1000	1000	1000
x_s , мм	30,45	16,35	8,256

$u_s, \text{ мм/с}$	0,0152	0,00817	0,00413
---------------------	--------	---------	---------

5.2 Задача Сквивена (одномерный паровой пузырь)

Геометрия задачи показана на рисунке 21. В этой задаче подвод тепла к фазовой границе осуществляется со стороны перегретой жидкой фазы, а температура пара постоянна и равна T_{sat} .

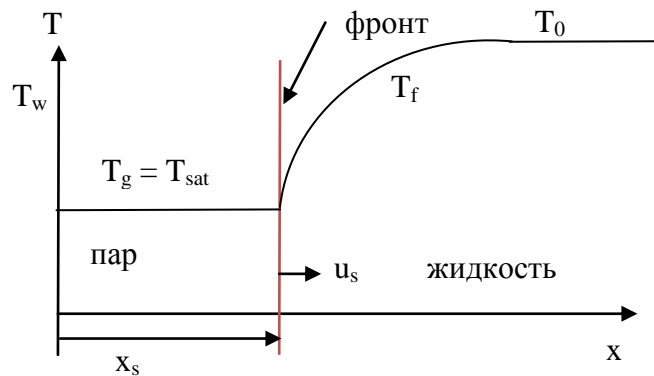


Рисунок 21 – Одномерная задача Сквивена

Для расчета поля температуры жидкой фазы используется следующая версия системы (50) – (52):

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_f}{\partial \tau} + u_f \frac{\partial T_f}{\partial x} &= a_f \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2}, \\ x = x_s: \quad T_f &= T_{\text{sat}}, \\ x = \infty: \quad T_f &= T_0, \\ x = x_s: \quad -\rho_g u_s &= \rho_f (u_f - u_s) = -\frac{\lambda_f}{\Delta h_{gf}} \frac{\partial T_f}{\partial x} \end{aligned} \quad (66)$$

Эта задача имеет несколько алгоритмов решения. Один из них изложен в работе [27]. Мы будем использовать алгоритм, изложенный в работе [22]. Это позволит легко обобщить его на случай двумерных тестов.

Если ввести безразмерную температуру и автомодельную переменную вида

$$\begin{aligned} \Theta &= \frac{(T_f - T_{\text{sat}})}{\Delta T_0}, \quad \Delta T_0 = T_0 - T_{\text{sat}}, \\ \xi &= \frac{x}{x_s(\tau)}, \end{aligned} \quad (67)$$

то систему уравнений (66) можно свести к следующей краевой задаче:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \theta}{d\xi^2} + \text{Ja} [\xi - \gamma] \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1} \frac{d\theta}{d\xi} &= 0, \quad \xi = 1: \theta = 0, \quad \xi = \infty: \theta = 1, \\ \text{Ja} &= \frac{\rho_f c_{pf} \Delta T_0}{\rho_g \Delta h_{gf}}. \end{aligned} \quad (68)$$

Все остальные параметры задачи можно определить из соотношений:

$$u_s = \frac{Ja \cdot a_f}{x_s} \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1} = \frac{m_s^2 a_f}{2 x_s} = \frac{m_s}{2} \sqrt{\frac{a_f}{\tau}},$$

$$x_s = m_s \sqrt{a_f \tau}, \quad m_s = \sqrt{2Ja \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1}}.$$
(69)

Уравнение (68) легко решается с использованием метода Рунге-Кутты и метода деления пополам для решения краевой задачи. Результат решения $\Theta(\xi)$ показан на рисунке 22.

Уравнения (68) можно записать в цилиндрической и сферической системах координат. Например, для сферической СК уравнение (65) выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d\theta}{d\xi} \right) + Ja \left[\xi - \frac{\gamma}{\xi^2} \right] \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1} \frac{d\theta}{d\xi} = 0,$$

$$u_s = \frac{m_s}{2} \sqrt{\frac{a_f}{\tau}}, \quad x_s = m_s \sqrt{a_f \tau}, \quad u_f = \gamma \left(\frac{x_s}{r} \right)^2,$$

$$m_s = \sqrt{2Ja \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1}}, \quad Ja = \frac{\rho_f c_{pf} \Delta T_0}{\rho_g h_{GF}},$$
(70)

а для цилиндрической СК следующим образом:

$$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d\theta}{d\xi} \right) + Ja \left[\xi - \frac{\gamma}{\xi} \right] \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1} \frac{d\theta}{d\xi} = 0,$$

$$u_s = \frac{m_s}{2} \sqrt{\frac{a_f}{\tau}}, \quad x_s = m_s \sqrt{a_f \tau}, \quad u_f = \gamma \left(\frac{x_s}{r} \right)^2,$$

$$m_s = \sqrt{2Ja \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)_{\xi=1}}, \quad Ja = \frac{\rho_f c_{pf} \Delta T_0}{\rho_g h_{GF}}$$
(71)

Решения $\Theta(\xi)$ для этих СК также показаны на рисунке 22. Решения для цилиндрической СК можно использовать для верификации двумерной задачи. Для этого достаточно смоделировать расширение цилиндрического парового пузыря в двумерной декартовой СК (x,y). Решение для сферической СК можно использовать как для верификации двумерной задачи в цилиндрической системе координат, так и для верификации трехмерной задачи в трехмерной декартовой системе координат.

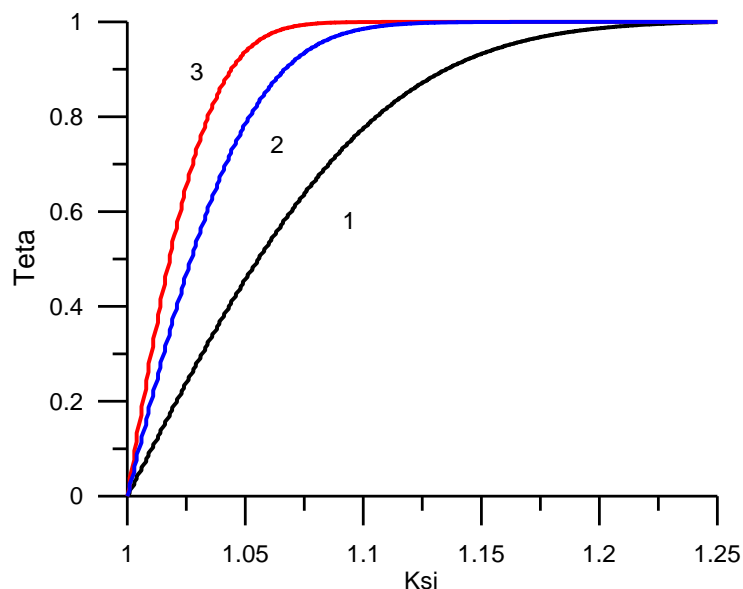


Рисунок 22 – Решение $\Theta(\xi)$ для трех СК:
1 – декартовая, 2 – цилиндрическая, 3 - сферическая

5.2 Моделирование одномерной задачи Стефана

Для первого тестирования модели массообмена в VOF модели Anes использовалась задача Стефана. Расчетная область представляла собой двумерную РО с размерами $L_x = 40$ мм. Для моделирования использовалась вода при трех давлениях, свойства которой указаны в таблице 1. Температура стенки при $x = 0$ принималась равной $T = T_{\text{sat}} + 25$ С. Время интегрирования составляло 1000 сек, шаг интегрирования – 1 сек. По оси x использовалась структурная равномерная сетка с числом узлов $N_x = 100$.

Для моделирования массообмена использовался алгоритм (27) – (28). Источник массы моделировался без сглаживания (соотношения (52)).

В качестве начального распределения задавалось точное решение для $\tau = 0,8$ сек.

На рисунке 23 показано изменение положение фазовой поверхности в зависимости от времени для варианта 2 свойств ($T_{\text{sat}} = 155$ С).

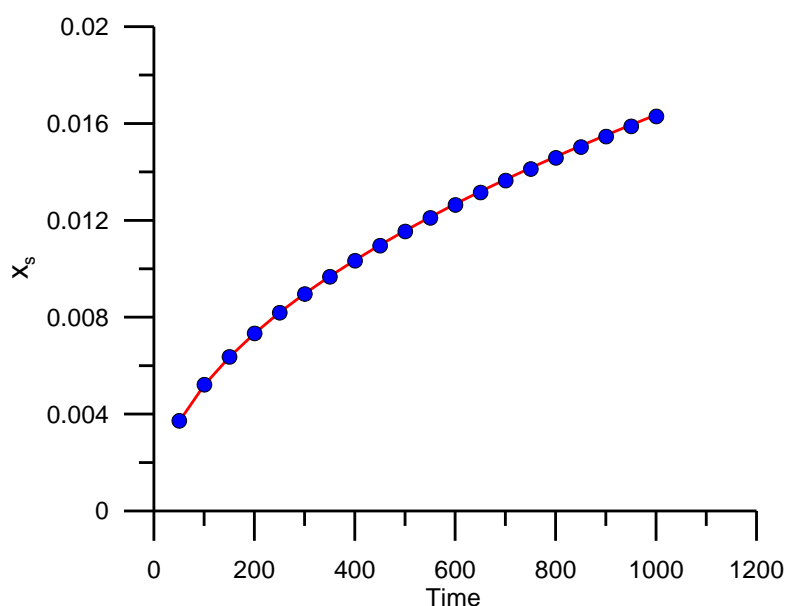


Рисунок 23 – Положение межфазной поверхности в функции времени для задачи Стефана:
красная линия – аналитическое решение (60), точки - расчет
На рисунке

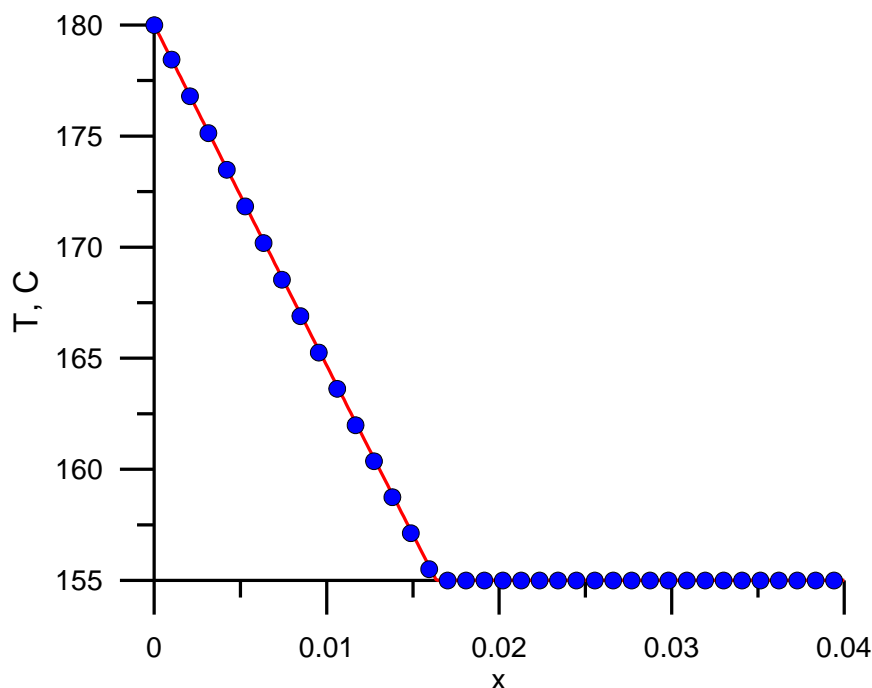


Рисунок 24 – Профиль температуры для задачи Стефана для момента времени $\tau = 1000$ сек: красная линия – решение (64), точки – расчет

Как следует из этих рисунков, наблюдается хорошее совпадение расчетных и аналитических данных. Расчеты для других давлений показывают такое же совпадение.

5.2 Моделирование одномерной задачи о росте пузырька

Для моделирования одномерной задачи Сквивена использовалась аналогичная постановка, но с другими параметрами. В качестве среды использовалась вода при давлении 1 атм ($P_{\text{sat}} = 101.3$ кПа). В начальный момент времени вода была перегрета на 5°C относительно температуры насыщения ($T_0 - T_{\text{sat}} = 5$ C). Для данных параметров аналитическое решение приводит к следующим значениям:

$$\rho_f / \rho_g = 1605, \quad \text{Ja} = 15$$

$$(d\Theta/d\xi)_1 = 9,703, \quad m_s = 17,06$$

Профиль $\Theta(\xi)$ для данных параметров показан на рисунке 22 (кривая 1).

Размер расчетной области вдоль оси x составлял $L_x = 8$ мм, а время расчета

$\tau_{\text{max}} = 1,1$ сек. В расчетах использовались две равномерные сетки с числом ячеек $N_x = 100$ и 200 . В качестве начального распределения использовалось точное решение для времени $\tau_{\text{max}} = 0,1$ сек.

Результаты моделирования показаны на рисунках 25 и 26. На рисунке 25 сравниваются зависимости положения межфазной поверхности в функции времени, на рисунке 26 – профили температуры для момента времени $\tau = 0,6$ сек.

Как следует из рисунков для задачи о росте пузырька совпадение аналитических результатов и расчетных несколько хуже, чем в задаче Стефана.

Несмотря на это можно заключить, что первые тесты задач с массообменном продемонстрировали работоспособность VOF-алгоритма кода Anes и в частности, разработанного алгоритма расчета межфазного массового потока. Дальнейшее тестирование и усовершенствование VOF-алгоритмов может быть проведено при решении двумерных и трехмерных задач о росте парового пузырька. Эта исследования будут проведена на втором этапе данного проекта.

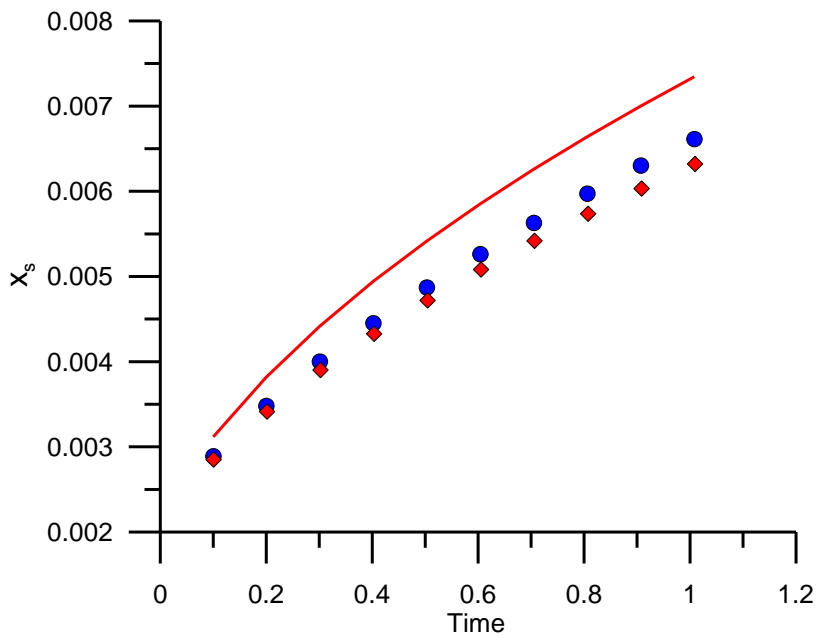


Рисунок 25 – Положение межфазной поверхности в функции времени для задачи Сквивена: красная линия – аналитическое решение (69), точки-окружности - расчет с $N_x = 200$, точки-ромбы - расчет с $N_x = 100$

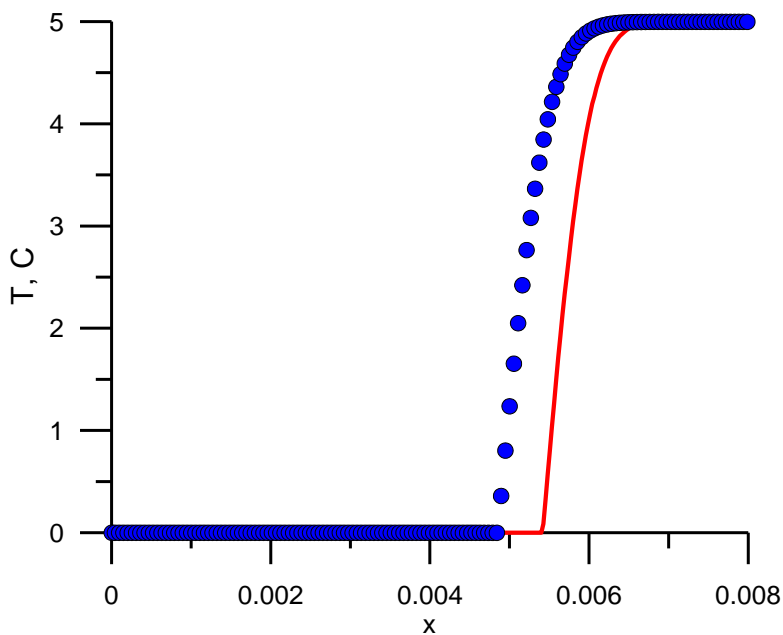


Рисунок 26 – Профиль температуры задачи Сквивена для времени $\tau = 0,6$ сек: красная линия – решение (68), точки - расчет с $N_x = 200$

6. Выводы

За отчетный период авторами выполнена следующая работа:

- 1) проведен анализ доступной литературы по методам математического моделирования течений двухфазных сред с явно выделенной межфазной границей;
- 2) разработан алгоритм для моделирования течений двухфазных сред с выделенной границей при наличии тепло- и массообмена, связанных с процессами испарения и конденсации, на основе модификации существующих VOF-алгоритмов;

- 3) разработанная модель реализована в компьютерном CFD коде Anes;
- 4) проведена верификация модели на классических тестах для двухфазных течений с явно выделенной границей без массообмена;
- 5) разработаны верификационные тесты для 1D, 2D и 3D задач с массообменом, имеющие аналитические решения; проведена верификация модели на тестах для одномерных задач.

Таким образом, план 2014 года выполнен.

Литература

1. A. Alizadehdakhel, M. Rahimi, A. Alsairafi. CFD modeling of flow and heat transfer in a thermosyphon// International Communications in Heat and Mass Transfer, v. 37, 2010, pp. 312–318.
2. L. Asmaie, M. Haghshenasfard, A. Mehrabani-Zeinabad, • M. N. Esfahany. Thermal performance analysis of nanofluids in a thermosyphon heat pipe using CFD modeling// Heat Mass Transfer, DOI 10.1007/s00231-013-1110-6.
3. C.K. Chen, Y.T. Lin. Turbulent film condensation in the presence of non-condensable gases over a horizontal tube // Int. Journal of Thermal Sciences, v. 48 (2009), pp. 1777–1785.
4. F.H. Harlow, J.E. Welch. Numerical Calculation of Time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface// The Physics of Fluids, V. 8, N. 12, pp. p. 2182-2189, 1965.
5. C.W. Hirt, B.G. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. J. Comput. Phys., Vol. 39, 1981, p. 201-225.
6. <http://www.flow3d.com/home/resources/cfd-101/modeling-techniques/vof-whats-in-a-name>.
7. G. Tryggvason, R. Scardovelli, S. Zaleski. Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows // Cambridge University Press 2011, 324 p.
8. D.L. Youngs. Time dependent multimaterial flow with large fluid distortion// In Numerical Methods for Fluid Dynamics (editors K.M. Morton and M.J. Baines) Academic Press, New York, 1982, pp. 27–39.
9. E. Berberovic, N.P. van Hinsberg, S. Jakirlic, I.V. Roisman, C. Tropea. Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution// PHYSICAL REVIEW E 79, 036306, 2009.
10. Y.Y. Tsui, S.W. Lin. A VOF-Based Conservative Interpolation Scheme for Interface Tracking (CISIT) of Two-Fluid Flows // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology, 63:4, 263-283.
11. J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach, A Continuum Method for Modeling Surface Tension, J. Comput. Phys., vol. 100, pp. 335–354, 1992
12. O. Ubbink. Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces// Thesis submitted for the Degree of Doctor of Philosophy of the University of London and Diploma of Imperial College, 1997.
13. S. Hardt, F. Wondra. Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms// Journal of Computational Physics 227 (2008) 5871–5895
14. D. Juric, G. Tryggvason. Computations of boiling flows// Int. J. Multiphase Flow Vol. 24, No. 3, pp. 387±410, 1998
15. Y. Takata, H. Shirakawa, T. Kuroki, T. Ito. Numerical analysis of single bubble departure from heated surface// Heat Transfer 1998, Proceedings of 11 IHTC, Vol. 4, pp. 355-360
16. S.W.J. Welch, J. Wilson, A volume of fluid based method for fluid flows with phase change// J. Comput. Phys., 2000, vol. 160, pp. 662–682.
17. J. Dietl & P. Stephan. NUMERICAL SIMULATION OF BOILING FROM A SINGLE REENTRANT-CAVITY // Proceedings of the 15th International Heat Transfer Conference, IHTC-15 August 10-15, 2014, Kyoto, Japan.
18. Y.Y. Tsui, S.W. Lin, Y. N. Lai, F. C. Wu. Phase change calculations for film boiling flows// International Journal of Heat and Mass Transfer 70 (2014) 745–757.
19. S. De Shepper, G. Heynderickx, G. Marin. Modeling the evaporation of a hydrocarbon feedstock in the convection section of a steam cracker// Computers and Chemical Engineering 33 (2009) 122–132.
20. C. Kunkelmann, Numerical Modeling and Investigation of Boiling Phenomena. PhD thesis, Darmstadt University of Technology, available free at <http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de>, 2011

21. Ferziger, J.H. and Peric, M.: Computational methods for fluid dynamics: Springer Verlag, Berlin-New York, 1995.
22. Д.А. Лабунцов, В.В. Ягов. Механика двухфазных систем // М.: Издательство МЭИ, 2000, 374 с..
23. Р.И. Нигматулин. Динамика многофазных сред. Ч. I // М.: Наука, Глав. Ред. физ.-мат. лит., 1987, 464 с.
24. J. C. Martin and W. J. Moyce, An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., Ser. A, vol. 244, pp. 312–324, 1952.
25. H. Montazeri. A Consistent Numerical Method for Simulating Interfacial Turbulent Flows// A thesis submitted in conformity with the requirements for the degree of Doctor of Philosophy Mechanical and Industrial Engineering University of Toronto, 2010.
26. V. Alexiades, A.D. Solomon, Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes, first ed., Hemisphere, Washington, D.C., 1993.
27. S.W.J. Welch, J. Wilson, A volume of fluid based method for fluid flows with phase change// J. Comput. Phys., 2000, vol. 160, pp. 662–682.

Разработка математических моделей и численное моделирование сопряженных процессов теплообмена в термосифонных системах стабилизации многолетнемерзлых грунтов

(материал, в научно-популярной форме иллюстрирующий основные результаты проекта)

Что исследуем?

Для укрепления оснований зданий и сооружений, построенных на вечной мерзлоте, необходимо эту вечную мерзлоту «охлаждать», отбирая тепло от нижних горизонтов слоя мерзлоты и выбрасывать ее в окружающий воздух в зимнее время года. Самый простой способ – поместить в грунт сваи из материала с высокой теплопроводностью, например, из меди, но это очень дорого. Есть способ проще с использованием термосифонов. Термосифон – это цилиндр, внутри которого помещена специальная среда, которая испаряется при «горячей» температуре и конденсируется при «холодной» температуре его режима работы. Поскольку передача тепла вдоль оси цилиндра осуществляется конвекцией с фазовыми переходами жидкость-пар, то эффективный коэффициент осевой теплопроводности может в десятки и сотни раз превышать коэффициент теплопроводности среды. Естественно, что важной проблемой эффективности термосифона является оптимизация процессов теплообмена внутри него.

Какие средства можно использовать для оптимизации термосифона?

Наиболее перспективным методом моделирования и оптимизации «тепловых» устройств является CFD технология, основанная на методах численного моделирования процессов гидродинамики и теплообмена. Если говорить о моделировании двухфазных течений, то главной проблемой является разработка адекватных реальности математических моделей и их алгоритмическая реализация. За последние 30 лет были разработаны различные алгоритмы для моделирования двухфазных течений, но, во-первых, они оказались эффективными только для одномерных задач, и, во-вторых, их модели требуют привлечения достаточно большой эмпирической информации. В настоящее время в различных областях CFD технологии начинают развиваться направления, связанные с прямым численным моделированием (Direct Numerical Simulation) физических процессов. Типичный пример – DNS модели турбулентности. По нашему мнению, такая тенденция в ближайшем будущем сложится и в моделировании двухфазных течений: постепенный переход от полуэмпирических CFD моделей к методам прямого DNS-моделирования некоторых двухфазных потоков. Очевидно, что до прямого моделирования процессов кипения в каналах (с числом паровых пузырьков порядка десятка тысяч) еще очень далеко. Но и точное DNS-моделирование турбулентного переноса для реальных задач также в настоящее время недоступно. Однако двухфазные процессы с более простой межфазной границей, такие как процессы в термосифонах, вполне могут быть смоделированы с использованием DNS-моделирования двухфазной системы.

Поэтому двухфазные термосифоны являются очень удобным объектом исследования, позволяющим объединить фундаментальную задачу (DNS моделирование двухфазного потока) и практическую задачу (оптимизация конкретной конструкции термосифона).

Что может стать основой DNS моделирования двухфазного потока?

В качестве базового алгоритма можно использовать VOF-алгоритм для моделирования двухфазной системы с явно выделенной межфазной поверхностью. Главная идея этого алгоритма заключается в использовании для описания двухфазного потока однофазной среды с эффективными свойствами. Для «раскраски» среды используется специальное поле, которое называется VOF-переменная. Эта переменная равна единице в жидкой фазе, нулю в газовой фазе, а на границе раздела фаз она испытывает разрыв, который и описывает межфазную поверхность. Для VOF-переменной можно написать специальное уравнение пере-

носа, решив которое можно отследить межфазную поверхность, как по пространству, так и по времени.

При отсутствии массообмена на границе раздела фаз алгоритмы VOF более или менее «устоялись» и уже реализованы в существующих CFD кодах. Алгоритмы с массообменом (а именно они необходимы для DNS-моделирования) находятся пока на стадии разработки и верификации.

Что сделано на первом этапе проекта?

Самое главное – разработана модифицированная версия VOF-модели с учетом фазовых переходов, которая была реализована в авторском компьютерном коде Anes.

Проведена верификация VOF-модели кода Anes на классических тестовых задачах о движении двухфазного потока с явно выделенной непроницаемой границей (обрушение водяной колонны, неустойчивость Релея-Тейлора, всплытие воздушного пузырька и т. п.). Расчеты показали эффективность реализованного алгоритма для данного класса задач.

Проведено тестирование модели массообмена, реализованной в VOF-модели Anes, на примере одномерных задач, имеющих аналитическое Решение и показана работоспособность предложенной модели массообмена.

Что дальше?

1. Уточнение моделей тепло- и массообмена на межфазной границе в VOF-алгоритме, реализованном в коде Anes. Тестирование моделей на аналитических решениях для двумерных и трехмерных задач.
2. Тестирование и уточнение модели VOF-алгоритма Anes на многомерных задачах моделирования процессов кипения и конденсации.