

Отчет по проекту 14-08-00939-а за 2015 г

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

Руководитель: Артемов Валерий Иванович

Аннотация:

Проведен дополнительный анализ доступной литературы по тематике проекта, посвященный существующим моделям тепломассообмена при наличии явно выделенной межфазной границы. Основное внимание было уделено отбору тестовых задач, позволяющих объективно оценить работоспособность той или иной математической модели массообмена.

Проведено широкое тестирование предложенного и реализованного на первом этапе в коде Anes VOF- алгоритма на задачах без тепломассообмена. Это тестирование позволило выявить недостатки предложенной математической модели и усовершенствовать как сам VOF-алгоритм, так и численные алгоритмы CFD кода Anes. Был модифицирован алгоритм SIMPLE Anes для решения нестационарных задач, что позволило существенно сократить время расчета прикладной задачи. В VOF-алгоритм была добавлена возможность учета краевого угла смачивания и несколько моделей сглаживания свойств двухфазной смеси.

На основе отобранных тестовых задач с массообменом на фазовой границе была проведена верификация предложенной на первом этапе модели тепломассообмена. Это позволило, не только существенно модифицировать предложенную ранее модель, но и выявить ряд новых проблем. В частности было показано, что для достоверного описания процессов пленочного кипения и конденсации реальных двухфазных сред необходимы модели пристенного тепломассообмена, аналогичные пристенным функциям моделей турбулентности.

Для публичного доступа к компьютерному коду Anes, разработанным моделям и результатам моделирования, полученным в рамках выполненного этапа работы была создана первая версия сайта кода.

Развернутый научный отчет

Список обозначений

$\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$	- вектор скорости смеси,
$\rho_g, \mu_g, \nu_g, \lambda_g$	- плотность, коэффициенты динамической и кинематической вязкости и коэффициент теплопроводности газообразной g-фазы,
$\rho_f, \mu_f, \nu_f, \lambda_g$	- плотность, коэффициенты динамической и кинематической вязкости и коэффициент теплопроводности жидкой f-фазы,
ϕ	- объемная доля жидкой f-фазы (VOF-переменная),
T	- температура смеси,
T_{sat}	- температура насыщения,
T_{int}	- температура межфазной поверхности,
M_{gf}	- объемный удельный источник потока массы из g-фазы в f-фазу [кг/(м ³ ·с)],
m_{gf}	- плотность потока массы из g-фазы в f-фазу на межфазной границе [кг/(м ² ·с)],
A_{int}	- удельная площадь межфазной поверхности [1/м],
h_g, h_f	- полные энтальпии фаз,
c_{pg}, c_{pf}	- удельные теплоемкости фаз,
$h_{g,sat}, h_{f,sat}$	- энтальпии фаз на линии насыщения,
Δh_{gf}	- теплота парообразования при температуре насыщения T_{sat} ,
\mathbf{g}	- вектор ускорения свободного падения,
\mathbf{n}_{int}	- вектор нормали к межфазной поверхности, направленный в сторону f-фазы,
K_{int}	- кривизна межфазной поверхности,

σ	- коэффициент поверхностного натяжения,
ΔV_P	- объем ячейки (КО) "P" сетки расчетной области,
ΔA_P	- площадь грани ячейки,
\mathbf{n}_k	- вектор внешней нормали грани ячейки
b_0	- постоянная Лапласа (капиллярная постоянная),
l_0	- характерная длина волны Релея-Тейлора,
Re	- число Рейнольдса для задачи пленочного кипения,
Ra	- число Релея для задачи пленочного кипения,
Ja^*	- Модифицированное число Якоба

Введение

Как отмечалось в отчете по первому этапу [1] в ближайшем будущем в задачах моделирования процессов кипения и конденсации будет наблюдаться постепенный переход от полумпирических CFD моделей к методам прямого DNS-моделирования двухфазных потоков с явно выделенной поверхностью раздела фаз. Наиболее перспективной для прямого моделирования указанных течений является модель, основанная на использовании однофазных уравнений для описания двухфазной смеси и введении поля специальной функции, позволяющего «раскрасить» распределение фаз в пространстве. В качестве такой функции можно использовать либо объемную долю жидкой фазы (Volume Of Fluid - алгоритм), либо расстояние до фазовой границы (Level Set -алгоритм). В большинстве работ используется та или иная модификация VOF-алгоритма, предложенного Хиртом и Николсом (Hirt & Nichols) [2]. Заметим, что модели с явным отслеживанием движения границы раздела (Front Tracking - алгоритм), предложенные самими первыми (G. Tryggvason), не получили развития и в настоящее время не используются.

Главная идея VOF-алгоритма Хирта заключается в способе реконструкции межфазной поверхности на основе непрерывного поля объемной доли жидкости (VOF-переменной), которая рассчитывается на основе обычного уравнения сохранения массы жидкой фазы. Для «борьбы» со схемной диффузией, которая быстро размывает межфазную границу, был предложен алгоритм «донор-акцептор» в котором фактически вводится специальная схемная антидиффузия. Для реконструкции поверхности использовался простой алгоритм «граница скорее горизонтальная» - «граница скорее вертикальная». Все последующие модификации VOF-алгоритма отличаются способами решения этих двух задач: борьба со схемной диффузией и реконструкции межфазной поверхности. После анализа различных алгоритмов на первом этапе работы в качестве VOF-алгоритма был выбран CISIT (Conservative Interpolation Scheme for Interface Tracking) алгоритм, предложенный Цуи (Tsui & Lin) [3]. Этот алгоритм фактически является развитием алгоритма «донор-акцептор», при этом его оригинальный способ реконструкции поверхности раздела практически не зависит от размерности задачи.

CISIT алгоритм на первом этапе был реализован в коде Anes и продемонстрировал свою работоспособность на типичных задачах со свободной поверхностью. При этом для проведения расчетов с использованием CISIT использовался стандартный алгоритм SIMPLE согласования поля скорости и поля давления, являющийся основой численных алгоритмов кода Anes, а не алгоритм PISO, который используется в реализации VOF-алгоритма в других CFD кодах (например, Fluent и OpenFOAM).

Поскольку для моделирования сложных задач (особенно при наличии массообмена на фазовой границе) требуются очень мелкие сетки, то время расчета может быть очень большим. В связи с этим на первое место выходит задача оптимизации алгоритмов решения по времени выполнения. Эта работа была проведена в 2015 г. на втором этапе проекта.

Для моделирования процессов кипения и конденсации необходимо добавить в VOF-алгоритм уравнение энергии и модель массообмена на фазовой границе. В этом случае в уравнениях неразрывности, баланса VOF-переменной и уравнении энергии появляется объемный источник массы, который отличен от нуля только в ячейках сетки с межфазной

поверхностью. В существующей литературе предложено несколько моделей для расчета этого источника, краткий обзор которых приведен ниже. Все эти модели связаны с тем или иным алгоритмом расчета тепловых потоков, направленных от фаз к фазовой поверхности. Качественно результаты расчетов с использованием различных моделей для массового источника очень похожи, поскольку во всех моделях в той или иной форме в ячейках с фазовой границей температура принимается равной температуре насыщения. Поэтому для верификации модели массообмена необходимо иметь хорошие тестовые примеры, с помощью которых можно провести количественные сравнения. Ниже приведен обзор таких верификационных тестовых задач.

На первом этапе работы была предложена простая модель массового источника, принципиальная работоспособность которой продемонстрирована на простых задачах. Однако дальнейшие тестовые расчеты выявили важные недостатки этой модели, которые были исправлены на данном этапе выполнения проекта.

Для доведения до научного сообщества результатов исследования, несомненно, лучшим способом является публикация в научном журнале. Это планируется сделать после окончания верификационного этапа работы. Но в настоящее время в связи с развитием Интернета существует и второй способ. Код Anes является авторским исследовательским CFD кодом, который распространяется бесплатно. Поэтому для ознакомления с текущим состоянием данной работы удобным представляется создание сайта кода Anes. Это позволит более подробно ознакомиться с результатами моделирования и, если возникнет необходимость, скачать код и провести свои собственные расчеты. Создание такого сайта запланировано и выполнено на втором этапе проекта в 2015 г.

Целями второго этапа проекта являлись:

1. Тестирование и оптимизация базового VOF-алгоритма кода Anes на широком классе задач со свободной поверхностью раздела фаз.
2. 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, предложенных на первом этапе работы.
3. Тестирование и уточнение модели VOF-алгоритма Anes на многомерных задачах моделирования процессов кипения и конденсации.
4. Подготовка публикации в научный журнал.
5. Создание в рамках Интернет портала МЭИ сайта компьютерного CFD кода Anes с целью публичного доступа к разработанным в рамках проекта математическим моделям.

1. Анализ существующих подходов для моделирования массообмена на фазовой поверхности

1.1 Основные уравнения математической модели

При наличии массообмена на фазовой поверхности в уравнении для VOF-переменной ϕ (объемной доли жидкой f-фазы) появляются дополнительные слагаемые, описывающие удельный объемный источник массы жидкой фазы \dot{M}_{gf} [1]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{div}(\phi \mathbf{u}) = \frac{\dot{M}_{gf}}{\rho_f}, \quad (1.1)$$

В уравнении энергии также появляется дополнительный источниковый член вида:

$$S_T = \dot{M}_{gs} \Delta h_{gf} \quad (1.2)$$

Если межфазная поверхность находится в состоянии термодинамического равновесия, то для источника \dot{M}_{gf} можно получить следующее выражение [1]:

$$M_{gf} = m_{gf} A_{int}, \quad T_{int} = T_{sat}, \quad A_{int} = |\nabla \phi|,$$

$$m_{gf} = \frac{(\lambda \mathbf{n}_{int} \cdot \nabla T)_g - (\lambda \mathbf{n}_{int} \cdot \nabla T)_f}{\Delta h_{gf}(T_{sat})} = \frac{\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_g - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_f}{\Delta h_{gf}(T_{sat})} \quad (1.3)$$

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, T_{int} – температура межфазной поверхности.

К настоящему времени разработано несколько групп моделей межфазного массообмена для алгоритмов с явно выделенной границей. Все эти модели условно можно разделить на три группы:

- 1) использование линеализированного источника в уравнении энергии,
- 2) «точный» расчет тепловых потоков к границе раздела фаз,
- 3) фиксация температуры ячейки с межфазной границей.

Типичным представителем первой группы является модель Де Шеппер (De Schepper et al) [4], в которой для расчета массового источника используется соотношение вида:

$$M_{gs} = C \cdot (T_{sat} - T), \quad C = 0.1 \frac{\phi \rho_f}{T_{sat}} \quad \text{или} \quad C = 0.1 \frac{(1 - \phi) \rho_g}{T_{sat}} \quad (1.4)$$

Поскольку в настоящее время эта модель включена в состав CFD кода Fluent, то она используется для решения достаточно сложных двухфазных задач. Например, в работах [5,6] эта модель используется для моделирования процессов в термосифонах. Этой модели можно дать простое физическое обоснование. Источник (1.3) и (1.4) будучи добавлен в уравнение энергии приведет к тому, что температура в областях, где $0 < \phi < 1$ будет близка к температуре насыщения. При этом, как показывает опыт использования подобных источников, в довольно широком диапазоне больших значений постоянной C значение массового источника слабо зависит от значения самой постоянной C . У этой модели есть один существенный минус – она не верифицировалась на хорошо известных тестовых задачах. Де Шеппер сразу применяет ее для моделирования сложного двухфазного расслоенного течения.

Ко второй группе моделей относится большинство моделей массообмена на фазовой поверхности. В этих моделях с помощью алгоритмов FT, LS или VOF реконструируется положение межфазной поверхности в ячейках расчетной сетки и определяется значение нормали \mathbf{n}_{int} . С использованием различных интерполяций рассчитываются градиенты температуры со стороны g- и f-фаз и определяется массовый источник по соотношениям (1.3). При этом предпринимаются определенные меры для «фиксации» температуры в ячейках с фазовой границей.

В работе Джурица (D. Juric, G. Tryggvason) [7] для реконструкции фронта используется FT-алгоритм, а для расчета градиента температуры в g-фазе (жидкая f-фаза находится в состоянии насыщения) применяется интерполяция второго порядка по значениям температуры в соседних ячейках. В классической работе Уэлча (S. Welch, J. Wilson) [8] используется аналогичный подход для расчета градиентов и метод VOF для реконструкции границы. Похожие алгоритмы, отличающиеся только способом расчета градиентов, предлагаются в работах [9,10]. В работе Цуй [11] для моделирования движения фазовой поверхности используется алгоритм CISIT, а для расчета потоков тепла к фазовой поверхности – интерполяция температур вдоль нормали к поверхности, при этом значение температуры в центре ячейки с границей фиксируется с помощью «большого» источника. Оригинальный алгоритм расчета массообмена предложен в работе Харда (S. Hardt & F. Wondra) [12], который в дальнейшем был модифицирован Кункельманом (C. Kunkelmann) [13]. Для проведения расчетов авторы используют «сторонние» CFD коды в которых реализованы свои VOF-алгоритмы: Хард – код Fluent, Кункельман – код OpenFOAM. Для избежания нежелательно-

го влияния дополнительного массового источника на процесс движения поверхности раздела фаз авторы разбивают источник массы на две составляющие, располагающиеся вне ячеек с фронтом. Например, при моделировании процесса кипения в жидкости находится отрицательный источник массы, а в паре – положительный источник.

К третьей группе относятся модели, в которых источник массы рассчитывается непосредственно из уравнения энергии. Эта группа моделей похожа на модель первой группы, однако она позволяет более детально описать процессы на фазовой поверхности. Идея этого подхода состоит в следующем: если в ячейке с межфазной поверхностью «зафиксировать» значение температуры $T = T_{\text{sat}}$, то уравнение энергии для этой ячейки можно использовать для расчета массового источника. По видимому, впервые эта модель была реализована в работе Таката (Y. Takata & al) [14]. Для отслеживания фронта авторы применяют стандартный VOF-алгоритм Хирта SOLA-VOF. Для расчета массового источника используется дискретное уравнение энергии для ячейки с границей раздела, которое «удаляется» из системы дискретных уравнений и заменяется уравнением $T_p = T_{\text{sat}}$.

Алгоритм расчета массообмена на фазовой границе кода Anes, предложенный на первом этапе работы и модифицированный на данном этапе, относится к третьей группе моделей. По своей сути он очень похож на алгоритм Таката, хотя и содержит ряд важных отличий.

1.2 Тестовые задачи для верификации моделей массообмена

Для проверки работоспособности и точности моделей массообмена необходимо использовать тестовые задачи, на основе которых можно провести количественное сравнение результатов. В настоящее время для этого используются три группы верификационных задач:

- 1) аналитические решения, основанные на автомодельных решениях задач Стефана и Скривена;
- 2) двумерное пленочное кипение,
- 3) рост пузырька пара на твердой поверхности.

Для последней из верификационных задач требуется разработка дополнительных математических моделей микрослоя жидкости, что само по себе является нетривиальной задачей. Поэтому в данной работе рассмотрим первые две группы тестов, которые позволяют провести верификацию моделей массообмена только на межфазной поверхности.

Существуют две задачи, имеющие аналитические автомодельные решения, и которые можно использовать для верификации моделей массообмена: задача Стефана и задача Скривена (описание и решение задач приведены в отчете по первому этапу [1]). С точки зрения физики задачу Стефана можно рассматривать как одномерное пленочное кипение, в которой подвод тепла к фазовой границе осуществляется через неподвижный пар. В задаче Скривена тепло к границе подводится от перегретой жидкости, поэтому ее можно рассматривать как рост одномерного парового пузыря в перегретой жидкости.

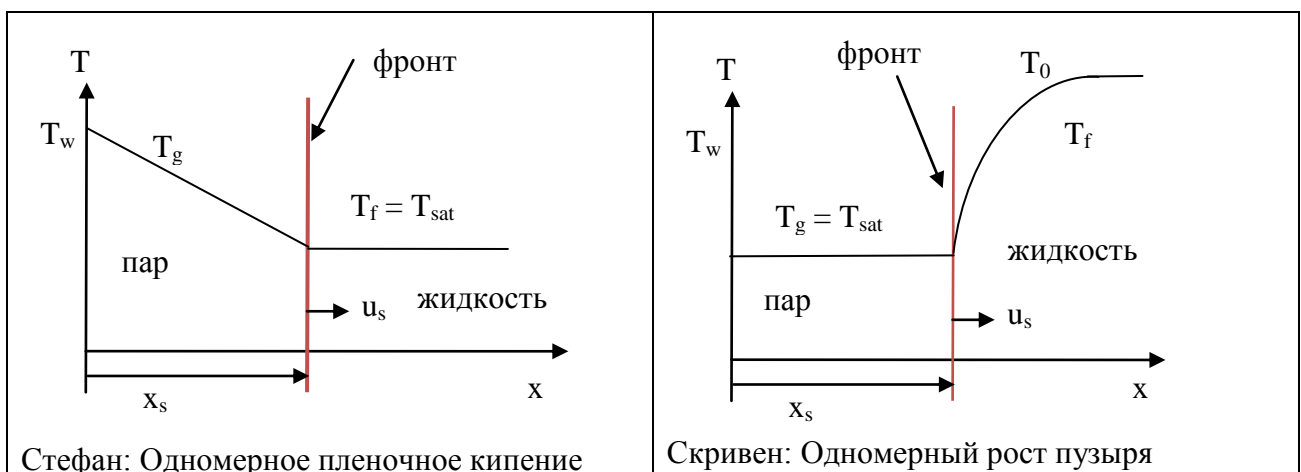


Рисунок 1.1 - Постановка одномерных задач

Эти задачи еще удобны и тем, что их можно использовать для верификации двумерных и трехмерных алгоритмов массообмена. Задача Скривена имеет аналитические решения в цилиндрической и сферической системах координат (СК), поэтому их можно использовать для моделирования развития цилиндрического пузыря в двумерной декартовой СК или сферического пузыря в трехмерной декартовой СК. К сожалению, задача Стефана не имеет автомодельных решений в цилиндрической и сферической СК. Однако если заменить нагретую стенку постоянным объемным тепловыделением в паре (в этом случае поток к фазовой поверхности известен и постоянен), то можно получить приближенное аналитическое решение задачи.

В качестве второй тестовой задачи, впервые предложенной в работах Джуриса и Уэлча [7,8], используется задача о двумерном пленочном кипении. Постановка задачи следующая. Рассматривается двумерная (x,y) расчетная область (РО) «ячейки симметрии» вблизи твердой обогреваемой поверхности. Обычно ширина этой области в направлении оси x выбирается равной половине длине волны наиболее опасной моды неустойчивости Релея-Тейлора для двумерных возмущений l_0 :

$$b_0 = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_f - \rho_g)}}, \quad l_0 = 2\sqrt{3}\pi \cdot b_0 \quad (1.5)$$

Высота РО в направлении оси y варьируется от l_0 до $3 \cdot l_0$.

В начальный момент времени вблизи стенки располагается пар и над ним жидкость, а высота границы раздела h_v возмущается по закону:

$$h_v = h_{v0} + \Delta h_v \cos\left(\frac{2\pi \cdot x}{l_0}\right) \quad (1.6)$$

где h_v - начальная толщина пленки, Δh_v - амплитуда возмущения. Температура жидкости полагается равной T_{sat} , а температура пара линейно изменяется от температуры стенки T_w до температуры T_{sat} на границе раздела.

При $\tau > 0$ начинает происходить деформация межфазной поверхности, связанная с двумя конкурирующими механизмами: развитием неустойчивости Релея-Тейлора, которая переводит пленку пара в пузырь, и генерацией пара на межфазной границе, которая не дает «исчезнуть» пару вблизи стенки. В итоге у стенки формируется нестационарная пленка пара, а в объеме жидкости - набор паровых пузырьков.

В этой задаче для верификации модели используется среднее число Нуссельта, которое рассчитывается по средней плотности теплового потока со стенки к пару в пленке. Для этого числа Нуссельта имеются полуэмпирическое соотношение, предложенное Беренсоном [15]:

$$Nu = \frac{q_w}{T_w - T_{sat}} \frac{b_0}{\lambda_g} = 0.425 \left[\frac{Ra}{Ja^*} \right]^{0.25}, \quad Ra = Gr \cdot Pr, \quad (1.7)$$

$$Gr = \frac{\rho_g (\rho_f - \rho_g) g b_0^3}{\mu_g^2}, \quad Pr = \frac{c_{pg} \mu_g}{\lambda_g}, \quad Ja^* = \frac{c_{pg} (T_w - T_{sat})}{\Delta h_{gf}}$$

Рассмотрим результаты решения этих тестовых задач в работах [7-14]. Для одномерной задачи пленочного кипения (задача Стефана) во всех работах получено очень хорошее совпадение, что не удивительно, поскольку в паре тепловой поток постоянен. Более интересны результаты моделирования одномерной задачи Скривена. Здесь совпадение с положением фронта и профилем температуры за фронтом зависит от размера ячейки сетки (или числа ячеек nx). В качестве эталона используется постановка задачи в работе Уэлча [8]: длина РО - 8 мм, среда - вода и пар при давлении 1 атм, начальное положение фронта - 2 мм. В работе Уэлча для практически полного совпадения результатов расчета с аналитическим реше-

нием требуется сетка с размером $\Delta x = 0.025$ мм. В других работах этот шаг варьируется в пределах 0.01 - 0.03 мм.

Физически одномерные задачи являются хорошим тестом для многомерных численных алгоритмов. Результаты многомерного моделирования физически одномерных процессов приведены в работах [12] (двумерный цилиндрический пузырек) и [10] (сферический пузырек в трехмерной декартовой СК). В работе [10] моделируется рост пузырька, начиная с радиуса 0.1 мм. После увеличения радиуса в 3 раза пузырек сохраняет сферическую форму, температурный слой перед фронтом не размазывается, а зависимость радиуса от времени хорошо совпадает с аналитическим решением. В работе Харда [12] моделируется рост пузыря за счет тепловыделения в паре (задача Стефана с заданным объемным тепловыделением). Однако совпадение результатов [12] с точным решением не такое хорошее. Хард объясняет причину этого рассогласования - паразитные вихревые структуры на поверхности раздела фаз, связанные с моделью сил поверхностного натяжения. Если учесть, что в работе [10] для моделирования поверхностного натяжения используется та же модель, что и в работе [12] (CSF - модель размазанных сил поверхностного натяжения), то отсутствие «паразитных» скоростей в работе [10] вызывает сильные сомнения.

Моделирование задачи о двумерном пленочном кипении проводилось в работах Джури-са [7], Уэлча [8], Цуи [11], Харда [12] и Гибоу [9]. В пионерской работе [7] для моделирования используется среда с довольно специфическими свойствами. В работе Уэлча [8] анализируется другая модельная смесь, но более приближенная к реальным средам. Эта смесь используется для моделирования и в работах [9, 12]. В работе Цуи исследовалась пароводяная смесь вблизи критической точки ($T_{\text{sat}} = 373$ C). В первых исследованиях [7,8] обнаружен квазипериодический режим кипения, в котором паровые пузыри отрываются от пленки. Это вызывает появление на зависимости числа Nu от времени периодических колебаний с достаточно большой амплитудой. При этом среднее значение расчетного числа Нуссельта достаточно хорошо совпадает с формулой Беренсона. В работах [10,12] было обнаружено, что при использовании более мелкой сетки характер картины принципиально меняется. Вместо отрыва парового пузырька за пузырьком от пленки тянется струйка пара, которая «связывает» пузырь и паровую пленку. Это приводит к исчезновению периодических колебаний числа Нуссельта. В работе Цуи [11] обнаружены оба режима: при малых температурных напорах реализуется режим отрыва пузырей, при больших напорах возникает режим паровых струй.

Описанные выше тесты в данной работе используются для верификации модели массообмена кода Anes. Результаты моделирования приведены ниже.

2. Модификация VOF-алгоритма кода Anes

В данном разделе описаны модификации численных алгоритмов кода Anes, которые потребовались для численной реализации эффективного VOF-алгоритма.

В коде Anes для дискретизации системы уравнений балансов (2.1) используется метод контрольного объема (МКО) [16,17] и два типа сеток: структурные и неструктурные сетки ячеек (Контрольных Объемов). При использовании структурных сеток компоненты вектора скорости задаются на гранях КО (шахматные сетки или модель «сдвинутых» скоростей), при использовании неструктурных сеток компоненты скоростей определены в центрах тех же КО (модель совмещенных скоростей), что и все остальные переменные. Ниже для простоты при описании численных алгоритмов будет использоваться вариант совмещенных скоростей.

Для решения системы дискретных уравнений на каждом шаге по времени используется итерационный алгоритм SIMPLE [16], в котором на каждой итерации последовательно решаются дискретные аналоги системы (2.1). Использование итераций в этом алгоритме необходимо для совместного решения уравнений движения и уравнения для давления. У это-

го “недостатка” есть и большое преимущество - алгоритм позволяет решать уравнения с произвольными нелинейными источниковыми членами.

Ниже при описании численных алгоритмов переменные без индексов будут обозначать значения на текущем шаге по времени и текущей итерации, верхний индекс «0» будет обозначать значения с предыдущего шага по времени, верхний индекс «*» будет обозначать значения с предыдущей итерации.

2.1 Система уравнений VOF-модели

Для описания двухфазной среды в VOF-алгоритмах используются уравнения сохранения для однофазной среды с эффективными свойствами. Способы получения этих уравнений описаны в отчете по первому этапу [1]. Система уравнений, которая используется в коде Anes, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\phi) &= \frac{M_{gf}}{\rho_f}, \\ \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= M_{gf} \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right), \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}_k}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}_k - \mu \nabla \mathbf{u}_k) &= -(\nabla p_g)_k + F_k + S_{\mu,k}, \quad k = x, y, z \end{aligned} \quad (2.1)$$

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

В этой системе первое уравнение является уравнением баланса массы жидкой f-фазы. В VOF-алгоритмах вместо уравнения неразрывности, записанного через плотность массового потока, используется уравнение, записанное через объемные потоки, что позволяет существенно улучшить сходимость численных алгоритмов решения системы уравнений. Источник $S_{\mu,k}$ в уравнениях движения связан с отличием закона Ньютона для касательного напряжения от стандартного градиентного вида в недекарттовых системах координат, а силовой объемный источник F_k описывает силы плавучести и силы поверхностного натяжения на межфазной поверхности:

$$\mathbf{F}_{int} = [-(\rho_f - \rho_g) \cdot (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) + \sigma K_{int}] \nabla \phi, \quad (2.2)$$

где \mathbf{x} - радиус-вектор точки расчетной области, K_{int} - кривизна межфазной поверхности, σ - постоянный коэффициент поверхностного натяжения. Давление p_g , входящее в уравнения движения, является относительным давлением, которое связано со статическим давлением p соотношением:

$$p_g = p - \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.3)$$

По существу p_g - это давление за вычетом локального гидростатического столба. Кривизна межфазной поверхности считается положительной, если ее центры расположены в f-фазе. В этом случае для расчета кривизны можно использовать соотношение:

$$K_{int} = -\operatorname{div}(\mathbf{n}_{int}), \quad \mathbf{n}_{int} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (2.4)$$

Уравнение энергии получено из условия, что энтальпии фаз описываются соотношениями:

$$\rho h_m = \phi \rho_f h_f + (1 - \phi) \rho_g h_g, \quad h_f = c_{pf} (T - T_{sat}) + h_{f,sat}, \quad h_g = c_{pg} (T - T_{sat}) + h_{g,sat},$$

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

Свойства среды в системе (2.1) рассчитываются по соотношениям:

$$\rho = \varphi \rho_f + (1 - \varphi) \rho_g, \quad \mu = \rho \nu, \quad \frac{1}{\nu} = \frac{\varphi}{\nu_f} + \frac{1 - \varphi}{\nu_g}, \quad (2.5)$$

$$\lambda = \varphi \lambda_f + (1 - \varphi) \lambda_g, \quad \rho c_p = \rho_f c_{pf} \varphi + \rho_g c_{pg} (1 - \varphi)$$

Для выполнения расчетов в данной работе использовалось несколько смесей жидкой и паровой фаз. Свойства чистых фаз приведены в таблице 1:

Таблица 1 - Свойства сред

Свойство	Air-Water	Water-100	Water-373	Wilson&Welch	Freon-R12
ρ_f , кг/м ³	1000	958.4	402.4	200	1396
ρ_g , кг/м ³	1.2	0.5973	242.7	5	17.87
ρ_f/ρ_g		1605	1.658	40	78.1
μ_f , Па·с	10^{-3}	$2.82 \cdot 10^{-4}$	$4.67 \cdot 10^{-5}$	0.1	$2.45 \cdot 10^{-4}$
μ_g , Па·с	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$1.23 \cdot 10^{-5}$	$3.24 \cdot 10^{-5}$	0.005	$1.17 \cdot 10^{-5}$
σ , Н/м	0.07	0.07	$7 \cdot 10^{-5}$	0.1	0.0124
λ_f , Вт/(м ² ·К)	-	0.677	0.545	40	$7.65 \cdot 10^{-2}$
λ_g , Вт/(м ² ·К)	-	0.0251	0.538	1	$9 \cdot 10^{-3}$
c_{pf} , Дж/(кг·К)	-	4218	218 000	400	947
c_{pg} , Дж/(кг·К)	-	2033	352 000	200	625
Δh_{gf} , кДж/кг	-	2257	276.4	10	152.9
T_{sat} , °C	-	100	373	227	0

Среда «Air-Water» (вода и воздух при нормальных условиях) используется для проведения всех расчетов без массообмена, «Water-100» (пароводяная смесь при давлении 101 кПа) используется для решения задач Стефана и Скривена. Среды «Water-373», «Wilson&Welch» и «Freon-R12» используются для моделирования двумерного пленочного кипения.

2.2 Модификация CISIT алгоритма

Уравнение баланса для VOF-переменной φ в коде Anes решается с помощью алгоритма CISIT [3], который подробно описан в отчете [1]. Если проинтегрировать первое уравнение по КО, то дискретное уравнение для VOF-переменной можно записать в виде:

$$\frac{\varphi_P - \varphi_P^0}{\Delta \tau} \Delta V_P = - \sum_k \varphi_k V_k + \left(\frac{M_{gf}}{\rho_f} \right)_P \Delta V_P, \quad (2.6)$$

$$V_k = u_k^* \Delta A_k, \quad u_k^* = (\mathbf{u}_k^* \cdot \mathbf{n}_k)$$

Здесь u_k - это нормальная компонента вектора скорости на k -ой грани, V_k - объемный *вытекающий* расход через грань, \mathbf{n}_k - *внешняя* нормаль грани, ΔA_k - площадь грани, ΔV_P - объем ячейки, суммирование в первом члене справа производится по всем граням КО.

Значение VOF-переменной на грани в алгоритме CISIT рассчитывается через *площадь грани*, занятой f -фазой. Для этого используется «простой» алгоритм, в котором межфазная граница рассматривается как поверхность постоянного уровня $\varphi = 0.5$:

- 1) по значениям φ_P в центрах КО рассчитываются значения в вершинах КО,
- 2) по значениям в вершинах рассчитываются положение фронта ($\varphi = 0.5$) на ребрах КО,
- 3) Для каждой грани рассчитывается доля ее площади, занятая f -фазой - это и есть φ_k .

Заметим, что аналогичный алгоритм используется в работе Кункельмана [13] для реконструкции поверхности раздела при работе с VOF- алгоритмом кода OpenFOAM.

Для расчета φ_k можно использовать как значения с текущего шага по времени φ_P (не-явная форма уравнения (2.6)), так и значения с предыдущего шага φ_P^0 (явная схема). В

большинстве VOF-алгоритмах используется явная схема. Наши численные эксперименты также показали, что неявная схема является неустойчивой. Существует еще одно свидетельство в пользу явной схемы: шаг по времени должен быть таким, чтобы граница раздела фаз не «перескакивала» через несколько ячеек (число Куранта должно быть меньше единицы). При использовании явной схемы решение уравнения сразу можно записать в виде:

$$\Phi_P = \Phi_P^0 - \frac{\Delta\tau}{\Delta V_P} \left[\sum_k \Phi_k^0 V_k + \left(\frac{M_{gf}}{\rho_f} \right)_P \Delta V_P \right] \quad (2.7)$$

Если межфазная граница во всех ячейках на шаге по времени не сместилась в другую ячейку, то система (2.7) дает решение на новом шаге по времени. Если в некоторых ячейках граница перешла в другую ячейку, то возникнет ситуация, когда в ячейках ϕ может стать больше единицы или меньше нуля. Для коррекции этих ошибок используется второй шаг алгоритма CISIT: «излишки» (как положительные, так и отрицательные) в ячейке перераспределяются в ячейки-соседи пропорционально *вытекающим* объемным потокам $\max(0, V_k)$.

После выполнения двух шагов алгоритма CISIT получается поле ϕ_P на новом шаге по времени и при этом не происходит потери объема и массы фаз - для замкнутой РО

$$\int_{PO} \phi dV = \text{const}, \quad (2.8)$$

и не происходит размазывания границы раздела ($0 < \phi < 1$) - она всегда занимает только один слой ячеек. Последнее свойство имеет как положительные, так и отрицательные последствия. С одной стороны оно позволяет легко восстановить поверхность раздела фаз (и рассчитать нормаль \mathbf{n}_{int}), с другой стороны свойства смеси и источники, рассчитанные по (2.7), являются практически разрывными, что может сказаться на сходимости итерационного процесса SIMPLE. В частности, использование точного поля для расчета источника (2.2), связанного с силами поверхностного натяжения, приводит к развалу итераций.

Для улучшения сходимости вместо точного поля ϕ используется сглаженное поле $\tilde{\phi}$. В коде Anes для расчета сглаженного поля используется итерационный алгоритм пересчета «Значение в ячейке» \rightarrow «Значения в вершинах» \rightarrow «Значение в ячейке».

Как показали численные эксперименты для получения хорошей сходимости достаточно двух итераций, на которых поле «размаывается» на пять ячеек и при этом условие (2.8) выполняется с приемлемой точностью. Более детальные эксперименты показали, что причина развала связана только с силами поверхностного натяжения, а не с «разрывными» значениями плотности и вязкости (об этом ниже).

При решении уравнения энергии, возникла еще одна проблема, связанная с выполнением баланса объема и массы f-фазы (2.6).

Эта проблема связана со способом получения дискретного уравнения переноса любой переменной, например, компоненты вектора скорости - u . Проинтегрировав уравнение переноса по КО с узлом "P", можно получить следующее дискретное уравнение (для простоты вязкость полагается равной нулю):

$$\frac{\rho_P u_P - \Phi_P^0 u_P^0}{\Delta\tau} \Delta V_P + \sum_k m_k u_k = S_P \Delta V_P, \quad m_k = \rho_k u_k^* \Delta A_k \quad (2.9)$$

где m_k - вытекающий поток массы через грань. Если для значения скорости на грани использовать противопоточную схему (" nb " - это индекс КО-соседа)

$$m_k u_k = \max(0, m_k) \cdot u_P - \max(0, -m_k) \cdot u_{nb},$$

то (2.9) можно привести к виду:

$$\left[\frac{\rho_P}{\Delta\tau} \Delta V_P + \sum_k \max(0, m_k) \right] u_P = \sum_{k,nb} \max(0, -m_k) \cdot u_{nb} + \left[\frac{\rho_P^0 u_P^0}{\Delta\tau} \Delta V_P + S_P \Delta V_P \right], \quad (2.10)$$

которое в свою очередь можно свести к стандартному для CFD виду

$$a_p u_p = \sum_{nb} a_{nb} \cdot u_{nb} + b_p \quad (2.11)$$

Главным недостатком уравнения (2.10) является то, что возможна ситуация отсутствия диагонального преобладания $a_p < \sum_{nb} a_{nb}$, которое обычно приводит к развалу решения алгебраической системы уравнений (2.11).

В коде Anes вместо (2.11) используется другая форма уравнения, предложенная С. Патанкар [16]:

$$\left[\frac{\rho_p^0}{\Delta \tau} \Delta V_p + \sum_k \max(0, -m_k) \right] u_p = \sum_{k, nb} \max(0, -m_k) \cdot u_{nb} + \left[\frac{\rho_p^0 u_p^0}{\Delta \tau} \Delta V_p + S_p \Delta V_p \right] - u_p R_{p,p}, \quad (2.12)$$

$$R_{p,p} = \frac{\rho_p - \rho_p^0}{\Delta \tau} \Delta V_p + \sum_k m_k$$

В этой форме коэффициент a_p всегда больше суммы коэффициентов a_{nb} , а $R_{p,p}$ представляет собой численную невязку уравнения неразрывности, записанного через массовые потоки. Если получено правильное численное решение, то последний член равен нулю. Обычно этот член просто выбрасывается из дискретного уравнения, поскольку уравнение неразрывности всегда выполняется при использовании алгоритма SIMPLE (или PISO).

В случае использования VOF в качестве уравнения неразрывности используется объемная форма этого уравнения

$$\sum_k V_k = M_{gf,p} \left(\frac{1}{\rho_f} - \frac{1}{\rho_g} \right)_p \Delta V_p, \quad (2.13)$$

и именно это уравнение «удовлетворяется» в алгоритме SIMPLE. Поскольку плотность линейно зависит от объемной доли (2.5), и для ее расчета используются значения ϕ или $\tilde{\phi}$ на *текущем* шаге по времени, то невязка уравнения неразрывности $R_{p,p}$ будет определяться невязкой:

$$R_{\phi,p} = \frac{\phi_p - \phi_p^0}{\Delta \tau} \Delta V_p + \sum_k \phi_k V_k - \left(\frac{M_{gf}}{\rho_f} \right)_p \Delta V_p \quad (2.14)$$

В коде Anes реализованы две модели расчета плотности в центре ячеек и на их границах: модель VOF_face_lin - плотность в ячейках рассчитывается по точной ϕ на текущем шаге по времени,

модель VOF_face_smo - плотность рассчитывается по сглаженной $\tilde{\phi}$ на текущем шаге по времени

В обеих моделях плотность на грани рассчитывается по ϕ_k (или $\tilde{\phi}_k$) на грани, полученной линейной интерполяцией между значениями в ячейках - соседях грани.

Для такого алгоритма расчета плотностей возникают достаточно большие значения невязки $R_{p,p}$. На рисунке 2.1-2.3 показаны значения безразмерных невязок объемного уравнения неразрывности (2.13) и уравнения (2.14) для задачи Уилча о пленочном кипении для момента времени 0.8 сек (см. раздел 4.3). В качестве масштаба невязки используется средний объемный поток на всех гранях ячейки.

Несмотря на достаточно большие ошибки невязок в ячейках с границей раздела, результаты моделирования задач без массообмена (см. раздел 3) слабо зависят от выбранной модели расчета плотности. В разделе 3.1 приведены результаты моделирования «эталонной» для VOF задачи об обрушении водной колонны. На рисунке 3.3 показано сравнение результатов расчета высоты и ширины колонны с экспериментальными данными. Хорошо видно, что результаты расчетов и экспериментов практически не отличаются. Не отличаются и поля скоростей. Аналогичные результаты получены и для других задач.

Однако при решении задач с массообменом ситуация изменяется. Как показали предварительные эксперименты необходимо хорошее выполнение уравнения баланса (2.14) для

уравнения энергии. В связи с этим была разработана третья модель для расчета плотности на грани VOF_face_tru. Суть этой модели следующая.

Если граница раздела не перемещается из ячейки в ячейку, то (2.14) можно заменить уравнением (2.6), которое выполняется точно, и в котором значения ϕ на грани равны «геометрическим» значениям, рассчитанным по значениям с предыдущего шага по времени ϕ_k^0 .

Корректор-шаг алгоритма CISIT (переход границы из ячейки в ячейку) выполняется на основе «перемещения» жидкой фазы из переполненных и переосушенных ячеек в ячейки-соседи вниз по потоку. Если включить этот алгоритм «перемещения» в уравнение (2.14), то можно получить правильные значения ϕ на гранях.

Рассмотрим случай, когда в ячейке P значение ϕ_P стало больше единицы. В этом случае в соответствии с алгоритмом CISIT в ячейки-соседи вниз по потоку перераспределяется жидкая фаза [1]:

$$\phi_{nb} = \phi_{nb}^0 + (\phi_P - 1) \frac{\Delta V_P}{\Delta V_{nb}} \frac{\max(0, V_k)}{\sum_{nb} \max(0, V_k)} \quad (2.15)$$

Для того, чтобы такой перелив не был нужен, скорректируем значения на гранях, через которые поток покидает ячейку

$$\frac{1 - \phi_P^0}{\Delta \tau} \Delta V_P = - \sum_k (\phi_k^0 + \delta \phi_k) \max(0, V_k) + \sum_k (\phi_k^0 + \delta \phi_k) \max(0, -V_k) + \left(\frac{M_{gf}}{\rho_f} \right)_P \Delta V_P \quad (2.16)$$

Вычитая (2.16) из (2.6) можно получить уравнение для коррекции объемной доли на грани:

$$\frac{1 - \phi_P}{\Delta \tau} \Delta V_P = - \sum_k \max(0, V_k) \cdot \delta \phi_k$$

Хорошо видно, что алгоритм перераспределения CISIT (2.15) соответствует случаю, когда коррекция на всех гранях постоянна. Из этого следует, что для выполнения баланса уравнения (2.14) нужно использовать для расчета объемной доли на грани соотношение:

$$\phi_k^t = \phi_k^0 + \frac{\phi_P^1 - 1}{\Delta \tau} \frac{\Delta V_P}{\sum_k \max(0, V_k)} \quad (2.17)$$

Здесь ϕ_P^1 - значение объемной доли, полученное на первом шаге CISIT. Соотношение (2.17) реализовано в коде Anes в виде третьей модели расчета плотности на грани - VOF_face_tru. Невязка уравнения (2.14) для этой модели показана на рисунке 2.4. Немногие пики на рисунке связаны с трудностями включения шагов Underfilling и UnderDepleting [1] в соотношение (2.17). Хорошо видно, что невязка уравнения (2.14) уменьшилась на порядки!

В коде Anes для уравнений движения можно использовать любой алгоритм VOF_face_smo, VOF_face_lin или VOF_face_tru, но для решения уравнения энергии всегда используется алгоритм VOF_face_tru (2.17).

Все расчеты, приведенные в данной работе, выполнены с использованием алгоритма VOF_face_lin для скоростей и VOF_face_tru для температуры.

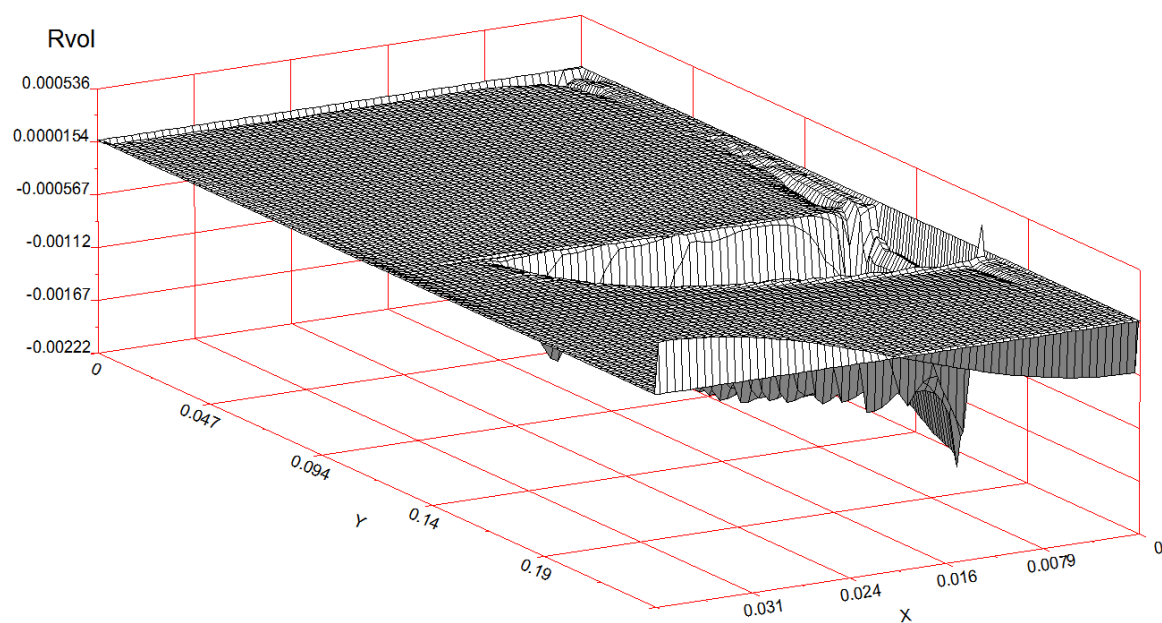


Рисунок 2.1 - Невязка объемного уравнения неразрывности (2.13)

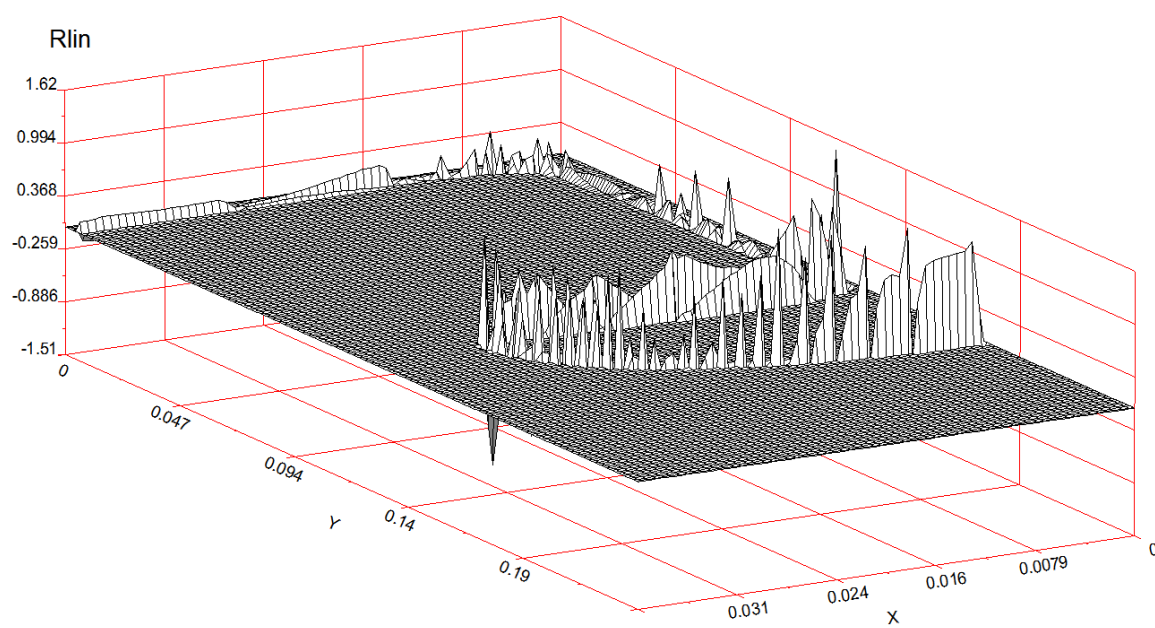


Рисунок 2.2 - Невязка уравнения баланса (2.14) для модели VOF_face_lin

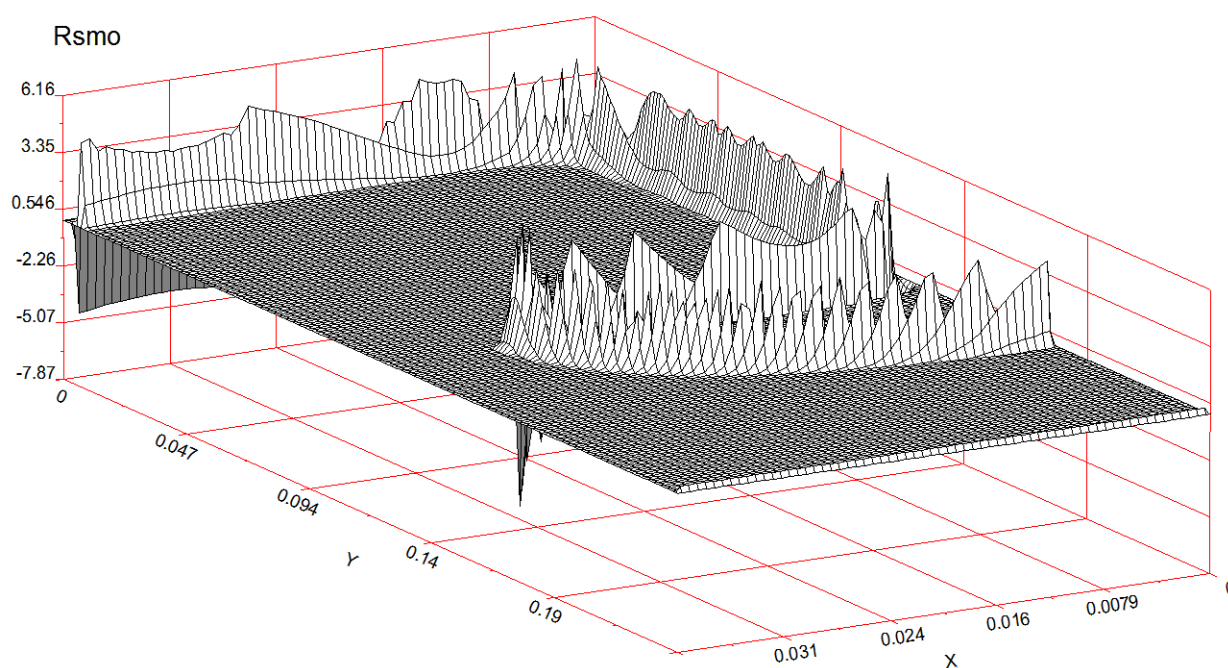


Рисунок 2.3 - Невязка уравнения баланса (2.14) для модели VOF_face_smo

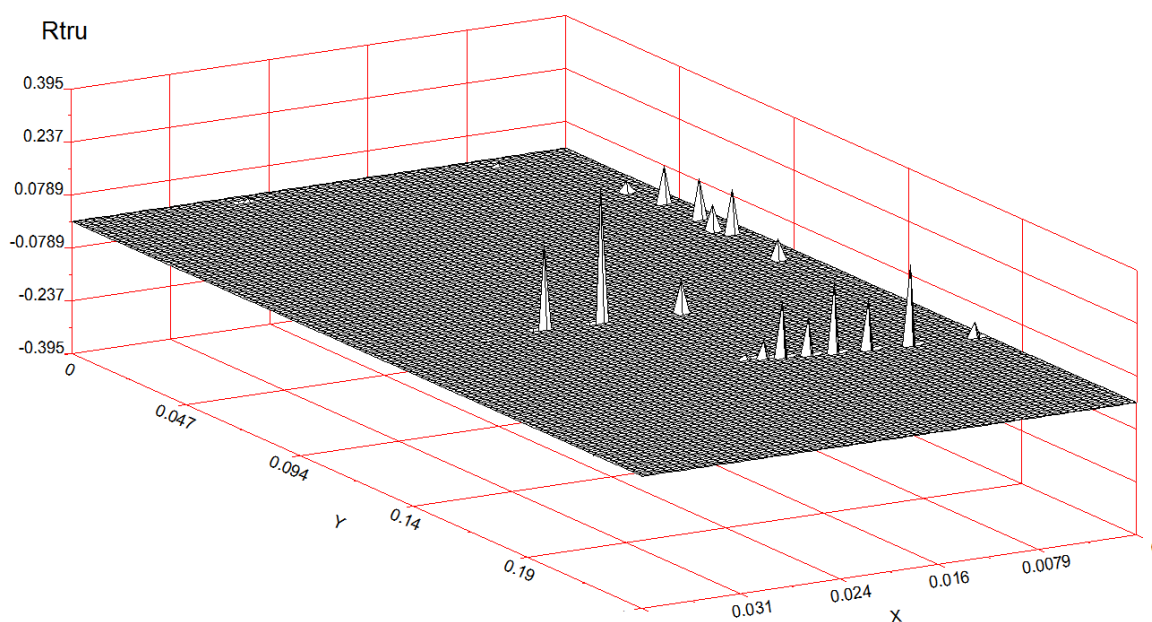


Рисунок 2.4 - Невязка уравнения баланса (2.14) для модели VOF_face_tru

2.2 Моделирование силовых источников членов

В задачах без массообмена главным источником движения двухфазной среды являются силы плавучести и силы поверхностного натяжения (2.2):

В большинстве реализаций VOF-алгоритма для расчета этих источников используется сглаженное тем или иным способом поле VOF-переменной. Такой подход - CSF-алгоритм (Continuum Surface Force), предложенный Бракбиллом (Brackbill and al) [18], продемонстрировал хорошую работоспособность.

В коде Anes в качестве сглаженного поля для расчета источников (2.18) используется поле $\tilde{\phi}$, полученное с использованием итерационного алгоритма «значение в центре ячейки» - «значения в вершинах»:

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \left[-(\rho_f - \rho_g) \cdot (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) + \sigma K_{\text{int}} \right] \nabla \tilde{\phi} \quad (2.18)$$

Кривизна межфазной поверхности определяется из соотношения (2.4)

$$K_{\text{int}} = -\text{div}(\mathbf{n}_{\text{int}}), \quad \mathbf{n}_{\text{int}} = \frac{\nabla \tilde{\phi}}{|\nabla \tilde{\phi}|}, \quad (2.19)$$

На дискретном уровне значение кривизны в ячейке рассчитывается с использованием теоремы Гаусса:

$$K_{\text{int},P} = -\frac{1}{\Delta V_P} \sum_k \mathbf{n}_{\text{int},k} \Delta A_k, \quad (2.20)$$

$$\mathbf{n}_{\text{int},k} = (\mathbf{n}_{\text{int},k} \cdot \mathbf{n}_k), \quad \mathbf{n}_{\text{int},k} = \left(\frac{\nabla \tilde{\phi}}{|\nabla \tilde{\phi}|} \right)_k$$

Здесь $\mathbf{n}_{\text{int},k}$ - единичный вектор градиента VOF-переменной на k-той грани ячейки. Для его расчета применяется обычная интерполяция между значениями в центрах ячеек.

Соотношения (2.20) позволяют включить эффекты смачивания на границе раздела трех фаз: «жидкость» - «пар» - «твердая стенка».

При решении уравнений (2.6) значение ϕ на граничной грани - твердой стенке не используется, поскольку объемный поток на такой грани равен нулю. Значения на граничной грани могут быть любые, по умолчанию в коде Anes используется «адиабатическое» условие:

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = (\nabla \phi \cdot \mathbf{n}_w) = 0, \quad (2.21)$$

где \mathbf{n}_w - нормаль к стенке, направленная из расчетной области. Это означает, что вектор нормали направлен параллельно поверхности стенки, что в свою очередь означает отсутствие смачиваемости (точнее говоря «нейтральную» смачиваемость).

Эффект смачивания описывается краевым углом смачивания θ_c - углом между плоскостью стенки и плоскостью, касательной к межфазной поверхности, отсчитываемый от поверхности стенки в жидкой фазе. Плохая смачиваемость соответствует углам смачивания больше 90° , хорошая - углам смачивания меньше 90° , отсутствие смачиваемости - $\theta_c = 90^\circ$.

Для учета смачиваемости необходимо подменить «параллельную» нормаль к фазовой поверхности в соотношении (2.20).

Если задача двумерна и стенка горизонтальна (рисунок 2.5), то положение вектора нормали на стенке \mathbf{n}_{int} можно получить из геометрических соображений:

$$\mathbf{n}_{\text{int}} = (\mathbf{n}_{\text{int},x}, \mathbf{n}_{\text{int},y}) = [-\cos(\theta_c), \sin(\theta_c)]$$

Это соотношение легко обобщается на произвольную геометрию:

$$\mathbf{n}_{\text{int}} = \mathbf{n}_w \cos(\theta_c) + \mathbf{n}_{\text{int},0} \sin(\theta_c) \quad (2.22)$$

Здесь $\mathbf{n}_{\text{int},0}$ - вектор нормали, полученный из соотношения (2.21). Именно это соотношение и используется в коде Anes для учета краевого угла смачивания.

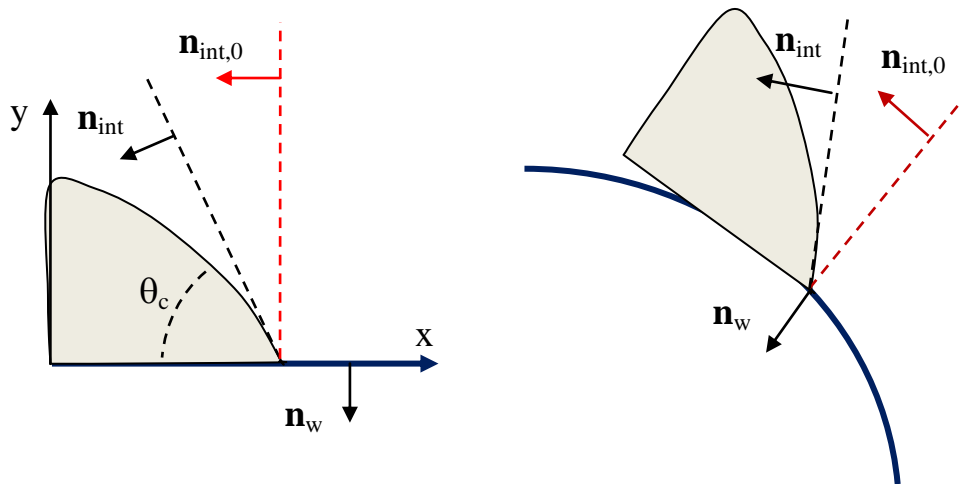


Рисунок 2.5 - Учет эффектов смачивания

CSF - алгоритм Бракбилла хорошо описывает скачек давления Лапласа, связанный с силами поверхностного натяжения.

В качестве демонстрации можно привести двумерную задачу о превращении квадратной капли жидкости в цилиндрическую каплю за счет сил поверхностного натяжения. Исходный размер квадрата соответствует цилиндрической капле радиуса $R_0 = 50$ мкм. Свойства среды - «Air-Water». В начальный момент времени давление и скорость равны нулю во всей РО. На рисунке 2.6 показаны поля объемной доли жидкости для четырех характерных моментов времени: Время 400 мкс соответствует стационарному состоянию сформировавшейся цилиндрической капли. На рисунке 3.5 показана эволюция относительного поля давления во времени. В качестве характерного давления p_0 используется лапласовский скачек давления для цилиндрической капли $p_0 = \sigma/R_0$.

Как следует из рисунков 2.6, 2.7 и 2.9b после нескольких циклов колебаний поверхности раздела капля принимает форму цилиндра (с большой степенью точности), а давление внутри капли совпадает с лапласовским скачком давления.

Однако после формирования цилиндрической капли поле скорости не равно нулю. Это поле в стационарном режиме показано на рисунке 3.8, а изменение модуля максимальной скорости во времени - на рисунке 2.9a. Заметим, что аналогичные «паразитные» вихревые структуры были обнаружены и другими авторами.

В коде Anes сглаженная объемная доля в силовом источнике (2.18) используется в том случае, когда для свойств используется также сглаженная объемная доля (модель VOF_face_smo). При использовании модели с точными свойствами (модели VOF_face_lin и VOD_face_tru) для расчета силового источника используется точное поле ϕ :

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = [\sigma K_{\text{int}}] \nabla \phi$$

В обоих случаях кривизна всегда рассчитывается по сглаженной ϕ (2.20). На рисунке 2.9a показаны кривые максимальной скорости для этих трех моделей. Для модели с точной величиной ϕ амплитуда «паразитной» скорости уменьшилась почти в два раза, но сами вихри остались.

Попытки рассчитать кривизну по точной объемной доле и соотношению (2.20) оказались безуспешными. Причина этого понятна, кривизна - это фактически вторая производная от ϕ по координатам. Поэтому использование дивергенции применительно к почти разрывной функции приведет к появлению больших ошибок. По-видимому, для расчета точной кривизны нужно использовать другие подходы. Это планируется сделать на третьем этапе проекта.

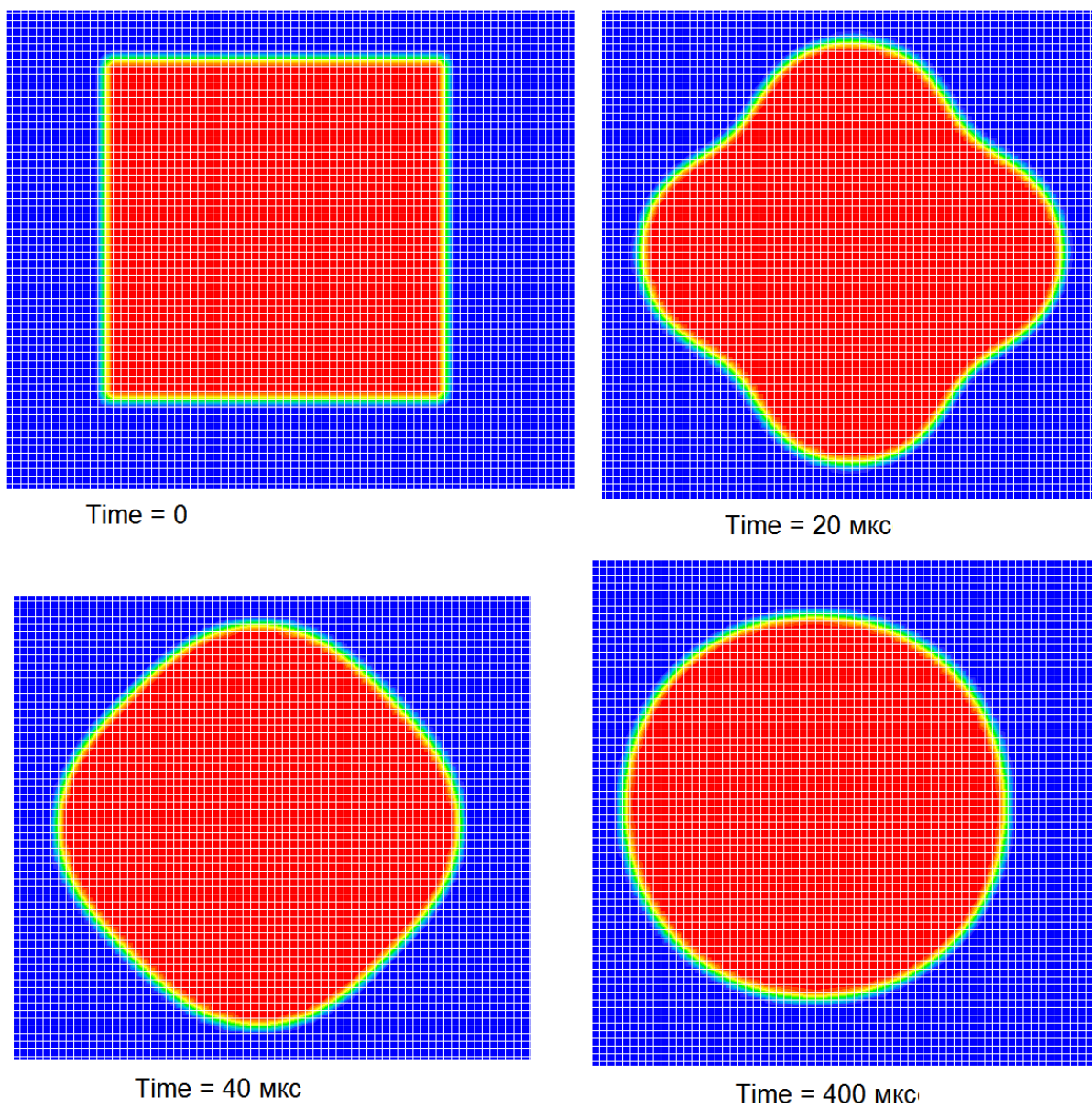


Рисунок 2.6 - Эволюция формы капли жидкости

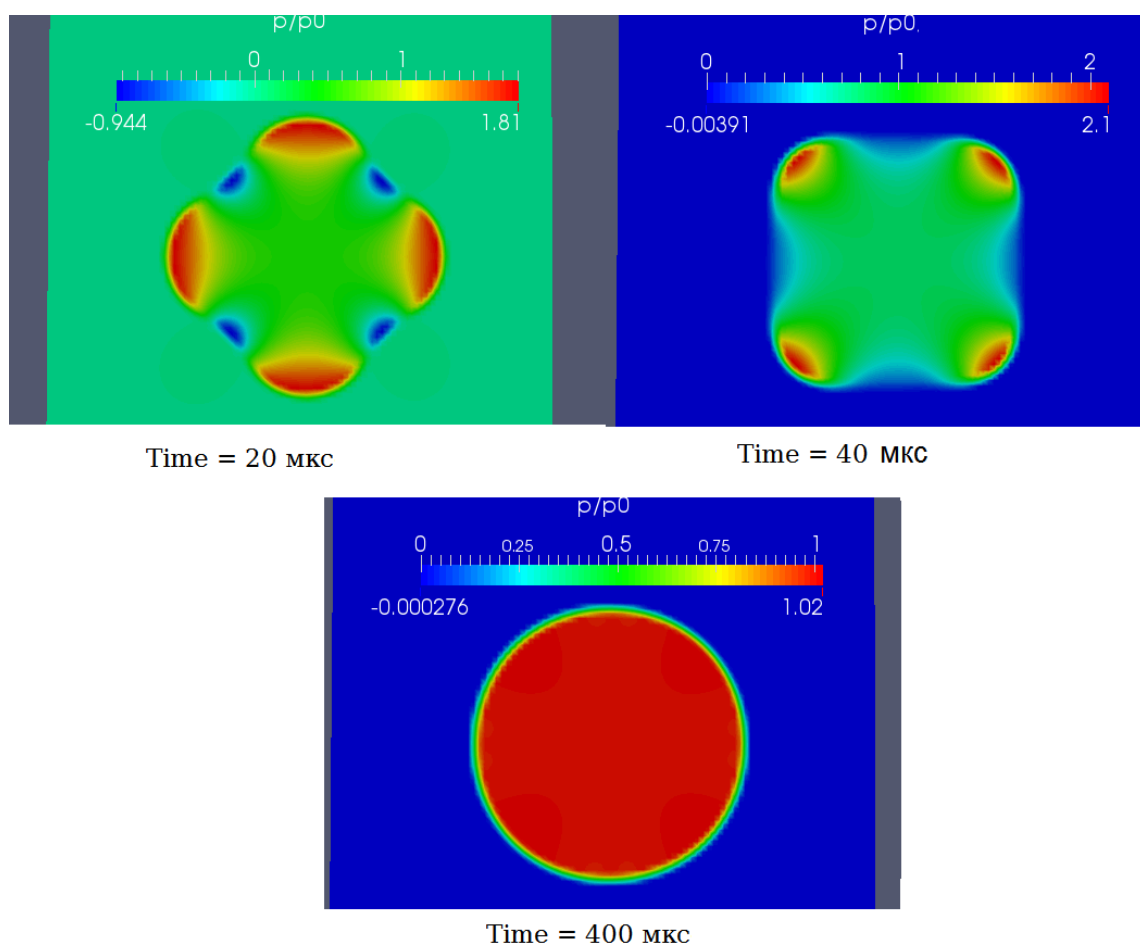


Рисунок 2.7 - Эволюция относительного поля давления

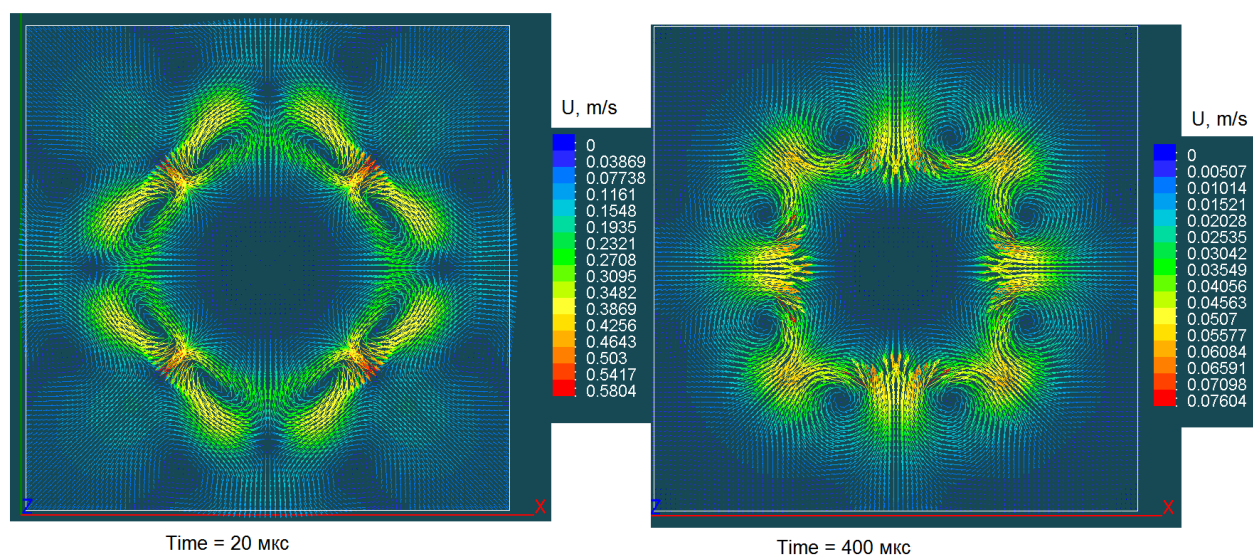


Рисунок 2.8 - Поле вектора скорости для начального и конечного момента формирования цилиндрической капли

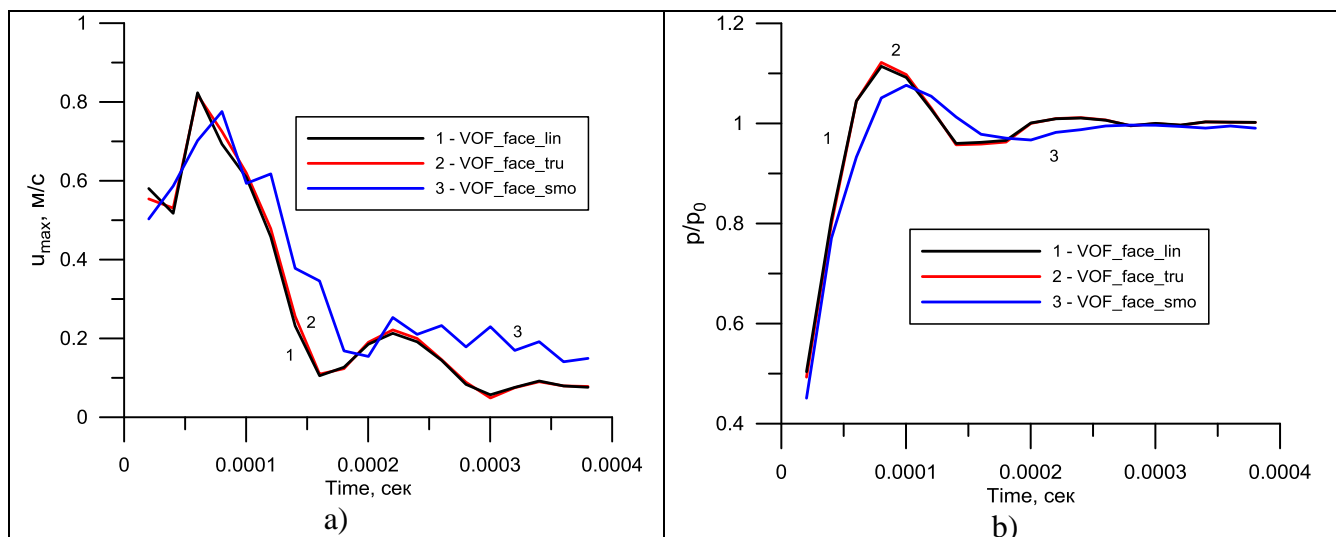


Рисунок 2.9 - Зависимость модуля вектора максимальной скорости (а) и относительного давления в центре капли жидкости (b)

2.3 Модификация численного алгоритма Anes

На первом этапе работы для решения системы (2.1) использовался алгоритм SIMPLE, который является базовым численным алгоритмом кода Anes. Этот алгоритм показал хорошую сходимость, масштабируемость и возможность использования параллельных вычислений.

Для проверки эффективности наших алгоритмов использовалась версия 2.1 открытого CFD кода OpenFOAM [22], в котором имеется эффективный VOF-алгоритм. После детального тестирования и сравнения результатов расчетов с результатами, полученными с помощью OpenFOAM, было обнаружено, что время расчета идентичных задач с помощью Anes было в 2-4 раза больше. Для решения данной проблемы в коде Anes была реализована новая версия алгоритма SIMPLE для нестационарных задач - алгоритм PIMPLE (похожий алгоритм есть в коде OpenFOAM, но он не используется для решения задач с поверхностью раздела фаз).

Новый алгоритм является комбинацией двух алгоритмов SIMPLE и PISO. Чтобы не усложнять данный отчет не будут приводиться довольно объемные формулы численных алгоритмов SIMPLE и PISO. Они подробно описаны в литературе [16, 17, 23]. Ниже рассмотрены качественные особенности этих алгоритмов.

Алгоритм SIMPLE предназначен для нахождения согласованных полей компонент скорости и давления. Для этого используются уравнения баланса импульса компонент скорости и уравнение для коррекции давления, которое получается из уравнения неразрывности на дискретном уровне. Этот алгоритм является итерационным. На каждой итерации выполняется три шага:

- 1) по полю давления с предыдущей итерации и свойствам, рассчитанным по полям с предыдущей итерации, находятся компоненты вектора скорости; эти скорости в общем случае не удовлетворяют уравнению неразрывности;
- 2) вводятся поправки скорости и давления, так, чтобы новые скорости удовлетворяли уравнению неразрывности; итогом этого является уравнение для поправки давления; это уравнение решается, и находятся новые поля скорости и давления;
- 3) решаются остальные уравнения переноса (энергии, диффузии химических компонент, моделей турбулентности ит.д.);
- 4) возврат к шагу №1;
- 5) итерации прекращаются, если выполнены критерии точности решения дискретных уравнений.

Алгоритм SIMPLE применим для решения стационарных и нестационарных задач, в него можно включить любое количество дополнительных уравнений сохранения, коэффици-

енты уравнений и источники могут быть нелинейными. Главный «недостаток» SIMPLE заключается в необходимости использования нижней релаксации для сходимости итерационного процесса.

После появления алгоритма SIMPLE было предложено большое количество его модификаций и, в том числе, алгоритм PISO [23].

Алгоритм PISO не использует итераций, он применим только для решения нестационарных задач и в нем не используется нижняя релаксация. Есть у него и ряд недостатков: он не позволяет решать задачи с нелинейными свойствами и источниками, добавление новых уравнений переноса требует существенной переработки алгоритма.

В PISO на шаге по времени процесс решения разбивается на один предиктор-этап и несколько корректор-этапов. Предиктор шаг PISO идентичен одной итерации SIMPLE. Корректор-шаги представляют собой дополнительное повторение второго шага SIMPLE (введение поправки скорости и давления и решение уравнения для давления). Обычно используют два или три корректор-шага. Автор этого алгоритма - R.I. Issa - утверждает, что при использовании двух корректор-шагов ошибка решения порядка $O(\Delta\tau^2)$. Заметим, что в PISO не проверяется ошибка дискретных уравнений (в отличие от SIMPLE), однако опыт его применения показал следующее. Если число Куранта (U - характерная скорость в КО, Δx - характерный размер КО, $\Delta\tau$ - шаг по времени)

$$Co = \frac{U \cdot \Delta\tau}{\Delta x} < 1,$$

то алгоритм PISO дает приемлемое решение на шаге по времени.

Подробный анализ результатов моделирования с помощью SIMPLE показал, что главная причина невысокого быстродействия алгоритма SIMPLE для VOF-задач связана с использованием нижней релаксации для задач с малыми шагами по времени. Именно это приводит к проведению излишних итераций (малый шаг требуется для CISIT алгоритма). При этом отказ от релаксации приводит к расходимости итерационного процесса.

Для исправления этой ситуации в алгоритм итерации SIMPLE была добавлен один корректор-шаг алгоритма PISO. Это позволило получить сходимость итераций без релаксации. На каждой итерации последовательно решаются линейные системы дискретных уравнений (их коэффициенты вычислены по полям с предыдущей итерации), имеющие разреженные матрица большой размерности. Для их решения используются различные, но также итерационные линейные солверы. Был обнаружен интересный факт: после 2-5 SIMPLE итераций количество итераций линейного солвера равно единице. При этом сами поля уже не меняются, за исключением нескольких КО с фронтом. Это позволило использовать тот критерий «число итераций линейного солвера = 1» как основной критерий окончания SIMPLE итераций.

Модифицированный указанным способом алгоритм и есть алгоритм PIMPLE Anes. При его использовании вместе с VOF-алгоритмом возникает вопрос о том, где в итерационный цикл нужно включить решение для VOF-переменной.

При решении задач без массообмена уравнения (2.6) на шаге по времени решаются один раз на первой SIMPLE-итерации. После этого рассчитываются свойства среды, которые в SIMPLE цикле постоянны. Этот вариант в Anes называется OneSweep- режимом.

При решении задач с массообменом уравнения для VOF-переменной решаются в начале каждой SIMPLE-итерации. Этот вариант в Anes называется Explicit режимом. Поскольку уравнение энергии является линейным, то оно не включается в итерационный цикл. Оно решается после SIMPLE итераций, а затем уравнения энергии производится расчет массового источника M_{gf} для следующего шага по времени.

В разделе 3.1 приведено сравнение результатов расчета с помощью Anes и OpenFOAM эталонной задачи об обрушении водной колонны. Хорошо видно, что результаты практически идентичны. Для расчетов использовались двумерные структурные сетки с числом узлов сетки 100×100 . Приведем сравнения времени расчета:

Код OpenFOAM (PISO)	= 123 сек,
Код Anes (SIMPLE)	= 443 сек,
Anes (PIMPLE,OneSweep)	= 135 сек,
Anes (PIMPLE,Explicit)	= 173 сек

2.4 Численный алгоритм решения уравнения энергии и модель массообмена Anes

Дискретное уравнение энергии (последнее уравнение (2.1)) получается с помощью стандартного алгоритма МКО (см. уравнение (2.12)). Для простоты рассмотрим случай противопоточной схемы:

$$\frac{(\rho c_p)_P (T_P - T_P^0)}{\Delta \tau} \Delta V_P + \sum_{k,nb} \max(0, -V_k) (\rho c_p)_k \cdot (T_P - T_{nb}) + \sum_{k,nb} \frac{\lambda_k}{\delta_k} \cdot (T_P - T_{nb}) =$$

$$= M_{gf,P} \Delta V_P \left[\Delta h_{gs} + (T_{sat} - T_P) (c_{pf} - c_{pg}) \right] \quad (2.23)$$

Здесь δ_k - расстояние между центрами ячеек P и NB. В коде это уравнение по-разному используется для ячеек с фазовой поверхностью и без нее. Критерием попадания межфазной границы в ячейку является условие, при котором хотя бы на одной грани ячейки значение «точной» объемной доли ϕ^t (см (2.17)) больше нуля и меньше единицы.

В ячейках с фазовой поверхностью температура фиксируется и равна температуре T_{sat} . Это осуществляется вследствие вырождения дискретного уравнения (2.23) в уравнение вида:

$$10^{20} T_P = 10^{20} T_{sat},$$

а само оригинальное уравнение для этой ячейки используется для вычисления притока или оттока массы f-фазы в ячейке:

$$M_{gf,P} \Delta V_P = \frac{1}{\Delta h_{gf}} \left\{ \sum_{k,nb} \max(0, -V_k) (\rho c_p)_k \cdot (T_{sat} - T_{nb}) + \sum_{k,nb} \frac{\lambda_k}{\delta_k} \cdot (T_{sat} - T_{nb}) \right\} \quad (2.24)$$

Для расчета теплоемкости на грани ячейки в конвективных потоках (2.23) и (2.24) используется объемная доля ϕ^t :

$$(\rho c_p)_k = \rho_f c_{pf} \phi_k^t + \rho_g c_{pg} (1 - \phi_k^t) \quad (2.25)$$

Коэффициент теплопроводности на грани λ_k , обе ячейки которой не содержат фазовой границы, выбирается равным либо λ_f , либо λ_g .

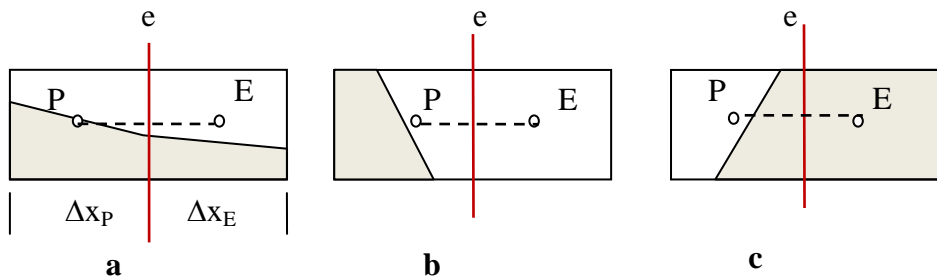


Рисунок 2.10 - Варианты расположения внутренней грани КО

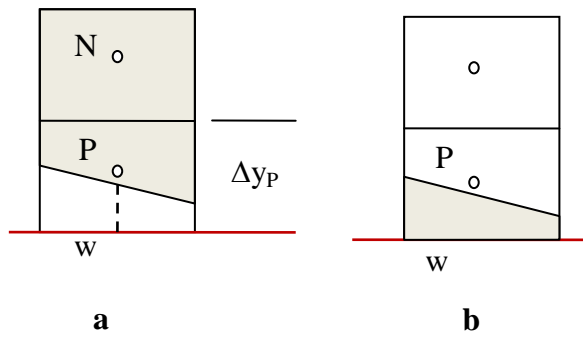


Рисунок 2.11 - Варианты расположения граничной грани КО

Для *внутренней* грани, одна из ячеек которой содержит межфазную поверхность, коэффициент теплопроводности λ_k и расстояние между центрами ячеек δ_k рассчитывается по следующему алгоритму (см. рисунок 2.10):

Вариант **a**: $\lambda_e = \lambda_f \varphi_e^t + \lambda_g (1 - \varphi_e^t), \quad \delta_e = \frac{\Delta x_P + \Delta x_E}{2}, \quad (2.26)$

Вариант **b**: $\lambda_e = \lambda_g, \quad \delta_e = (1 - \varphi_P) \Delta x_P + \frac{\Delta x_E}{2},$

Вариант **c**: $\lambda_e = \lambda_f, \quad \delta_e = \varphi_P \Delta x_P + \frac{\Delta x_E}{2},$

Для *граничной* непроницаемой грани (см. рисунок 2.11) используются аналогичные соотношения:

Вариант **a**: $\lambda_e = \lambda_g, \quad \delta_w = (1 - \varphi_P) \Delta y_P, \quad T_{nb} = T_{wall}, \quad (2.27)$

Вариант **b**: $\lambda_e = \lambda_f, \quad \delta_w = \varphi_P \Delta y_P, \quad T_{nb} = T_{wall},$

Здесь T_{wall} - температура стенки.

Как отмечалось в обзоре (см. пункт 1.1), в моделях второй группы для расчета подвода тепла к фазовой поверхности используются различные *конечно-разностные* аппроксимации второго порядка точности. Наш алгоритм основан на *конечно-объемном* представлении, что в большей степени согласуется с численной схемой МКО. Соотношения (2.26) и (2.27) имеют первый порядок точности (направление нормали \mathbf{n}_{int} фазовой границы не принимается во внимание), который обычно численно более устойчив, чем алгоритмы более высоких порядков. Поэтому он был выбран на данном этапе для тестирования. На следующем этапе работы планируется уточнение порядка аппроксимации.

Соотношения (2.27) являются фактически первой версией модели для учета пристенных микрослоев. Они учитывают увеличение теплоподвода к фазовой поверхности через пленку пара при пленочном кипении и увеличение теплоотвода от пленки жидкости при конденсации при уменьшении толщин пленок. Однако эта модель не может описать, например, следующие ситуации:

- 1) начало процесса конденсации на холодной стенке, когда вблизи нее нет жидкой пленки,
- 2) начало процесса возникновения паровой фазы при перегреве поверхности в чистой жидкости,

- 3) теплоперенос в жидком микрослое при росте парового пузыря на перегретой стенке.

Однако модель, описанная выше, является хорошим начальным приближением. На следующем этапе планируется усложнить эту модель путем введения в (2.27) нелинейных соотношений, аналогичных пристенным функциям в двухпараметрических моделях турбулентности.

2.5 Верификация алгоритма VOF Anes

Разработанные и реализованные в текущей версии кода Anes модели, описанные выше, были протестированы на большой группе задач.

В разделе 3 приводятся результаты моделирования наиболее интересных примеров задач без массообмена. Эти расчеты были проведены с использованием модели VOF_face_lin (точная VOF и линейная интерполяция плотности на грани).

В пункте 3.1 обсуждаются результаты решения задачи об обрушении колонны. Эта задача стала фактически эталоном для верификации VOF-алгоритмов, поскольку имеются экспериментальные данные по высоте и ширине колонны (они были получены еще в 1952 году [19]).

В пункте 3.2 рассматривается задача о вертикальном падении сферической капли на поверхность пленки. Аналогичная задача решается в других работах. Сравнение результатов этих расчетов позволяет также сделать вывод о хорошей работоспособности алгоритма Anes.

В пункте 3.3 приведены три задачи, иллюстрирующие модель поверхностного натяжения и модель краевого угла смачивания.

Первые две задачи посвящены развитию поверхности раздела в плоском и круглом капилляре в невесомости. Отключение силы тяжести позволяет продемонстрировать взаимодействие только двух эффектов: поверхностного натяжения на границе раздела двух и трех фаз и инерционности жидкости. В третьей задаче рассматривается эволюция поверхности жидкости в горизонтальном плоском капилляре. Рассмотрены два варианта: с вытеканием жидкости и с колебаниями поверхности. Критическая высота капилляра, при которой происходит смена режима, хорошо совпадает с теоретическим значением.

И, наконец, в пункте 3.4 приведено решение задачи об отрыве плоского и сферического пузырька от твердой стенки. Эта задача представляет интерес для моделирования пленочного кипения.

В разделе 4 приведены результаты верификации модели тепло- и массообмена алгоритма VOF на тестовых задачах, описанных в пункте 1.2.

3. Верификация VOF-алгоритма без массообмена

3.1 Задача об обрушении колонны

Рассматривается двумерная прямоугольная расчетная область (РО) шириной $L_x = 4 \cdot a$ и высотой $L_y = 3 \cdot a$, где $a = 0.146$ м (это параметры эксперимента [19]). РО заполнена воздухом. В начальный момент времени в левой нижней части РО расположена прямоугольная колонна воды размером $L_{cx} = a$, $L_{cy} = 2a$. Сила тяжести направлена вертикаль и равна $g_y = -9,8$ м/с². На левой, правой и нижней границах расчетной области задаются условия прилипания. На верхней свободной границе задается постоянное *статическое* давление равное нулю, что эквивалентно заданию на границе давления p_g (см. (2.3)) в виде:

$$p_g = \rho \cdot L_y \cdot g_y \quad (3.1)$$

В расчете учитывались как силы плавучести, так и силы поверхностного натяжения. Как показали расчеты, влияние последних пренебрежимо мало.

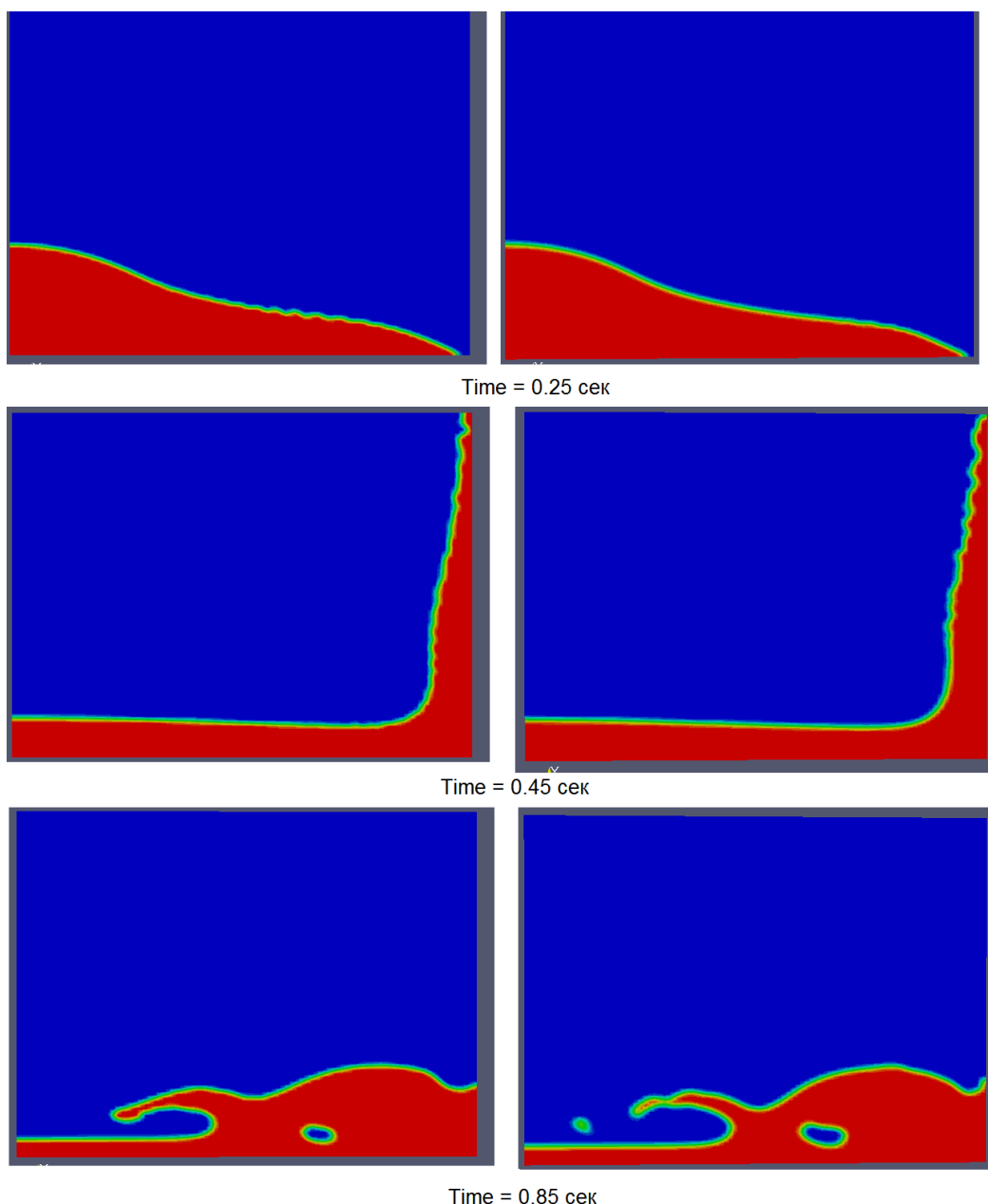


Рисунок 3.1 - Поле VOF-переменной для разных моментов времени: слева - результаты с использованием Anes, справа - OpenFOAM

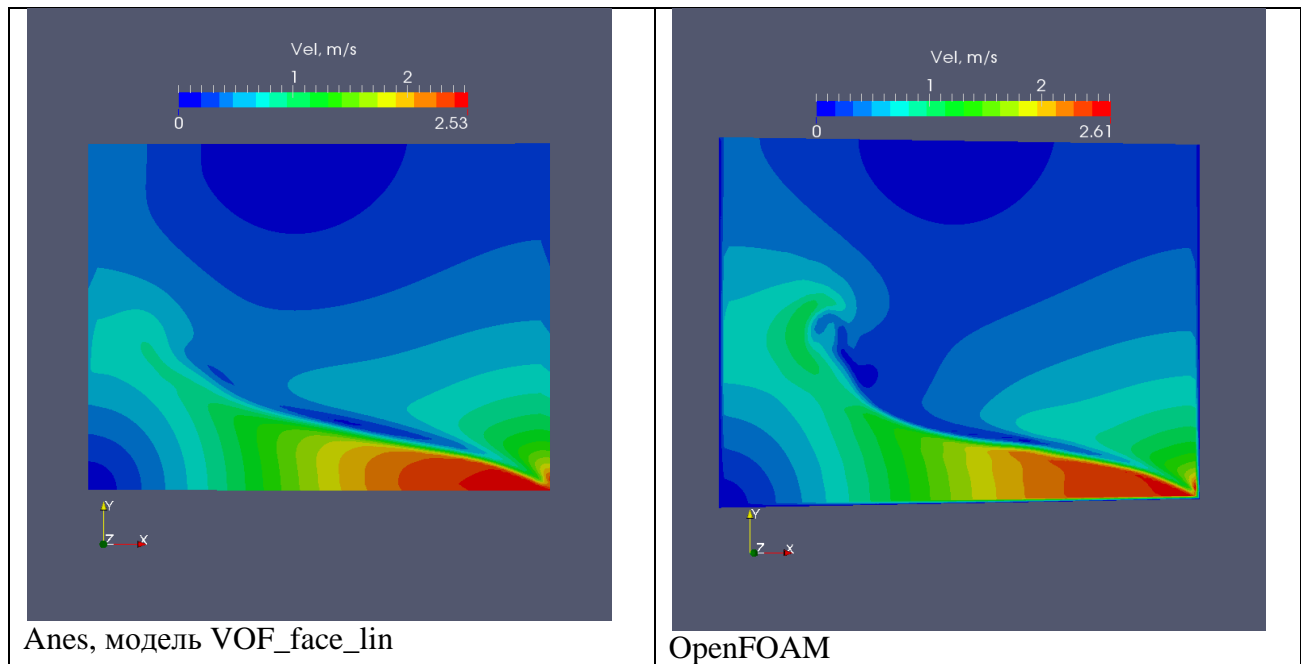


Рисунок 3.2 - Поле модуля скорости для момента времени 0.25 сек.

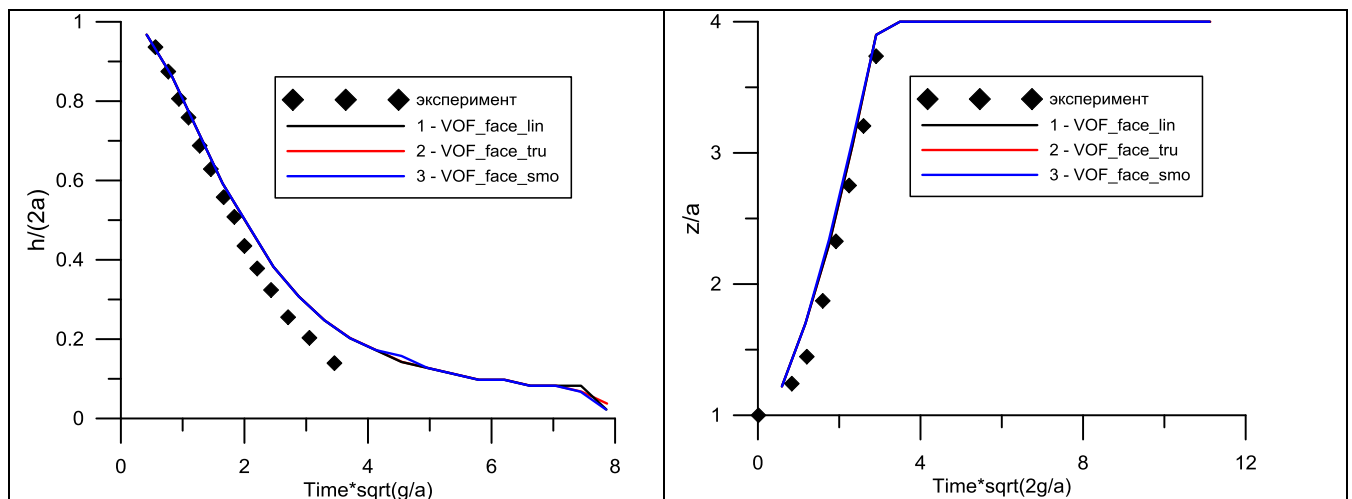


Рисунок 3.3 - Безразмерная высота и ширина колонны, точки - эксперимент [19]

3.2 Вертикальное падение капли на пленку

Рассматривается вертикальное падение в воздухе сферической водяной капли диаметром $d_p = 73$ мкм со скоростью $U_0 = 15.5$ м/с на поверхность жидкой пленки, толщиной 8.8 мкм. Числа Вебера и Рейнольдса были выбраны равными параметрам работы [20]:

$$Re = \frac{U_0 d_p}{\nu_f} = 1130, \quad We = \frac{\rho_f d_p U_0^2}{\sigma} = 250$$

Для выполнения расчета использовалась двумерная цилиндрическая система координат. В начальный момент времени задавалось положение пленки и капли. Давление полагалось равным нулю, а в капле задавалось постоянное отрицательное значение аксиальной скорости, равное U_0 .

На рисунке 3.4 изображены поля объемной доли жидкости для четырех моментов времени. На рисунке 3.5 показано изменение во времени характерных радиусов R_b и R_r кольцевой короны на поверхности возмущенной пленки жидкости. Точками показаны результаты моделирования работы [20].

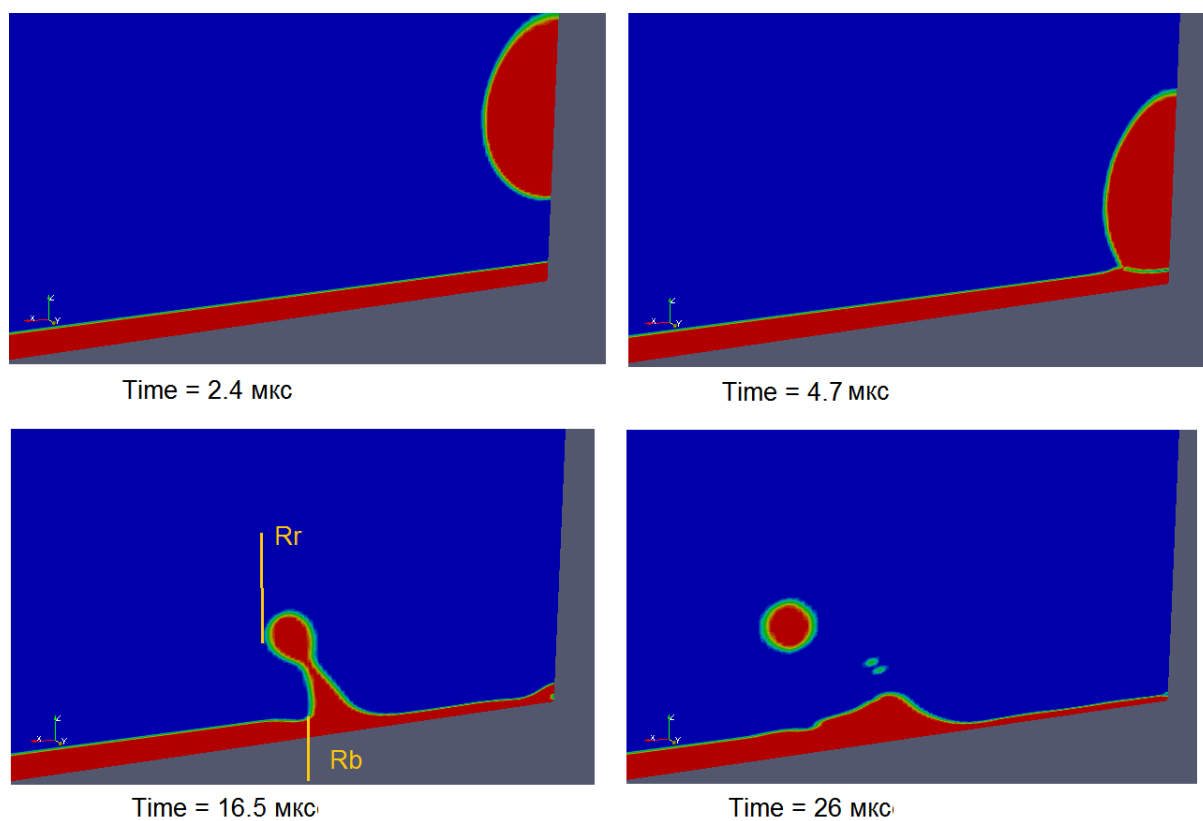


Рисунок 3.4 - Поля объемной доли жидкости для различных моментов времени

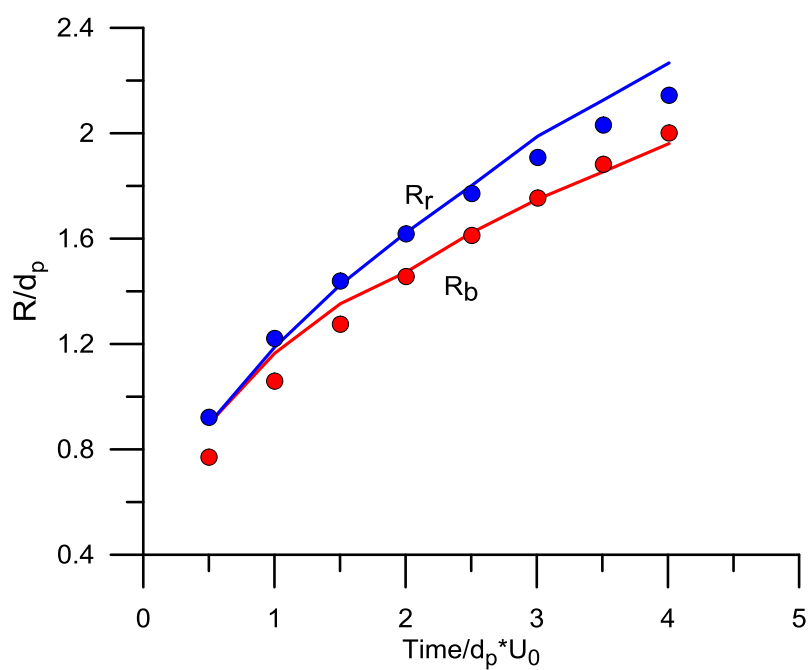


Рисунок 3.5 - Изменение радиусов короны (см. рисунок 1) во времени

3.3 Моделирование эффектов смачивания на твердой поверхности

В данном разделе приводятся примеры использования модели краевого угла смачивания.

Первые два примера - это развитие поверхности раздела в плоском и круглом капилляре в невесомости. Отключение силы тяжести позволяет продемонстрировать взаимодействие только двух эффектов: поверхностного натяжения на границы раздела двух и трех фаз и инерционности жидкости.

На рисунке 3.5 показано развитие поверхности в плоском канале шириной 80 мм для случая плохой смачиваемости (краевой угол смачивания = 170°).

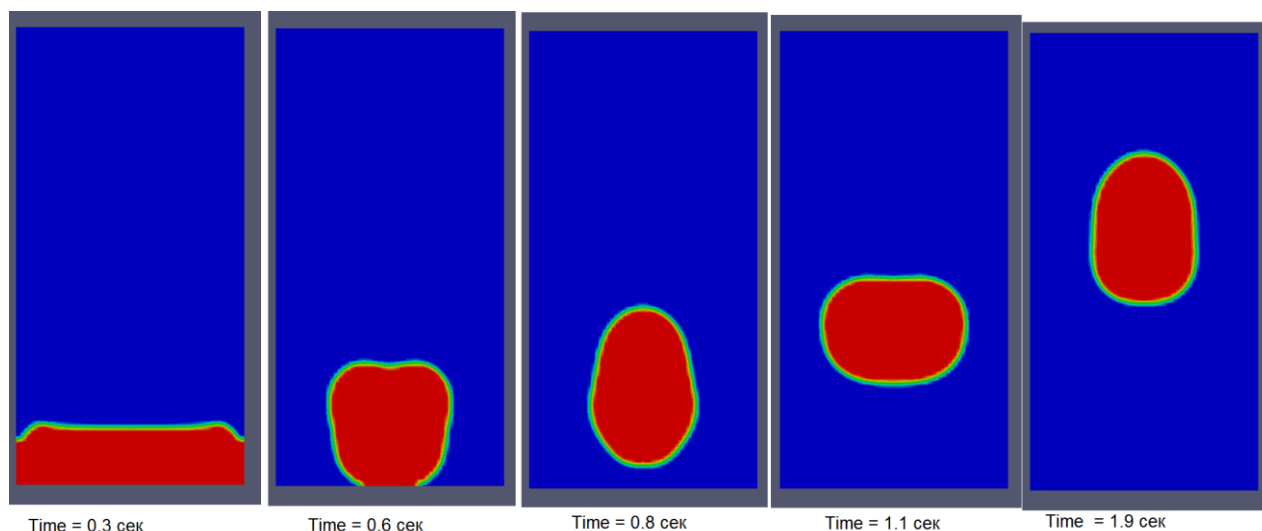


Рисунок 3.5 - Развитие поверхности раздела при плохой смачиваемости ($\alpha_c = 170^\circ$)

На рисунке 3.6 представлены картины развития поверхности в круглом капилляре с радиусом 50 мм при хорошей смачиваемости (краевой угол смачивания = 10°). На рисунке 3.7 показано изменение во времени разницы высоты подъема жидкости у стенки и высота в центре капилляра.

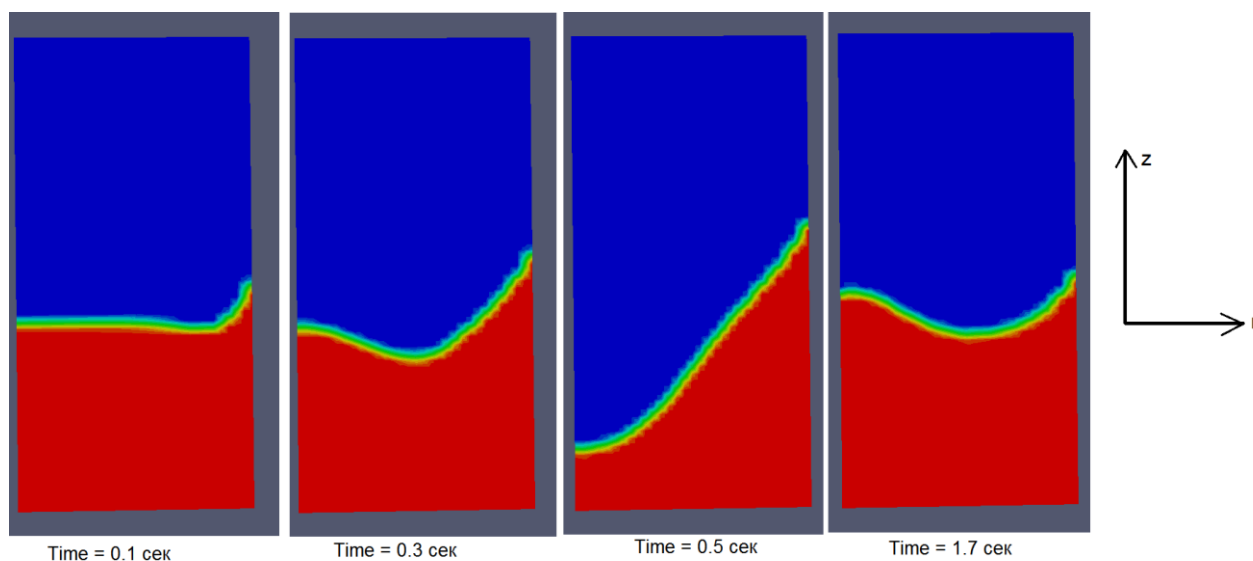


Рисунок 3.6 - Развитие поверхности раздела при хорошей смачиваемости ($\theta_c = 170^\circ$)

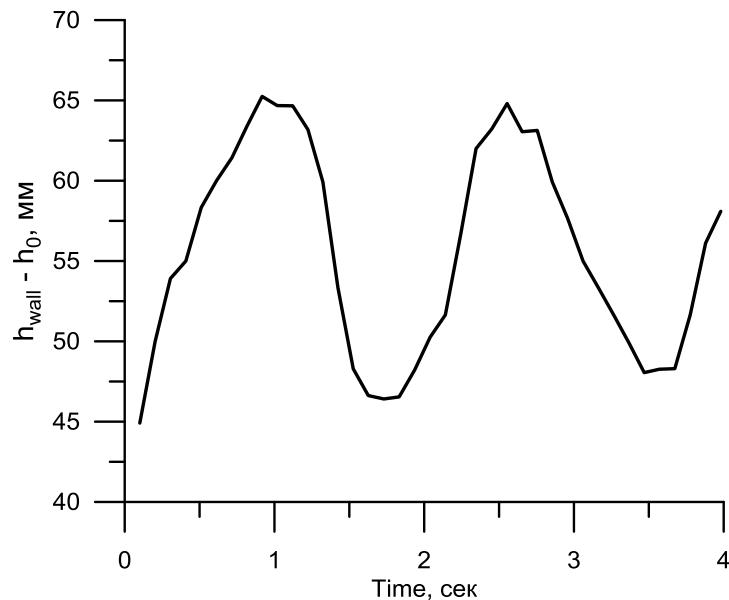


Рисунок 3.7 - Высота подъема жидкости на стенке при $\theta_c = 170^\circ$

В качестве третьего примера рассматривается эволюция поверхности раздела в горизонтальном капилляре. Как следует из теоретического анализа [20], критическая высота капилляра, при увеличении больше которой происходит вытекание жидкости, равна:

$$h_{cr} = 2b_0\sqrt{1 + \sin(\theta_c)}, \quad b_0 = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_f - \rho_g)}}$$

Здесь θ_c - краевой угол смачивания, b_0 - постоянная Лапласа. Для рассматриваемой смеси «Air-Wat» и угле смачивания $\theta_c = 10^\circ$ критическая высота равна $h_{cr} = 5.8$ мм.

На рисунке 3.8 показано развитие поверхности для $h = 5.15$ мм, на рисунке 3.9 для $h = 6.3$ мм. На рисунке 3.10 положение поверхности раздела на нижней стенке капилляра (отсчет от левой стенки капилляра).

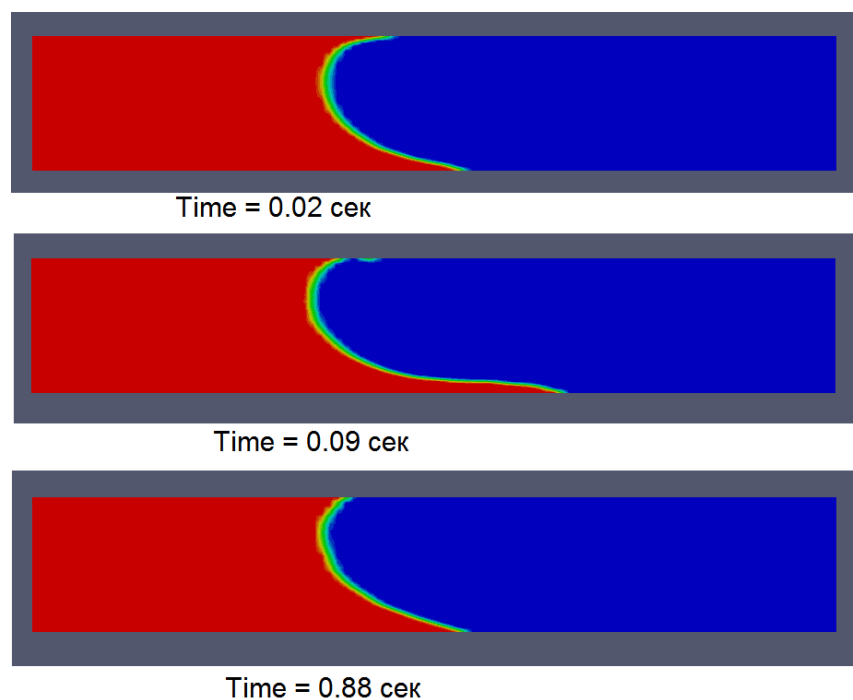


Рисунок 3.8 - Колебание поверхности в горизонтальном капилляре при $h = 5.15$ мм $< h_{cr}$

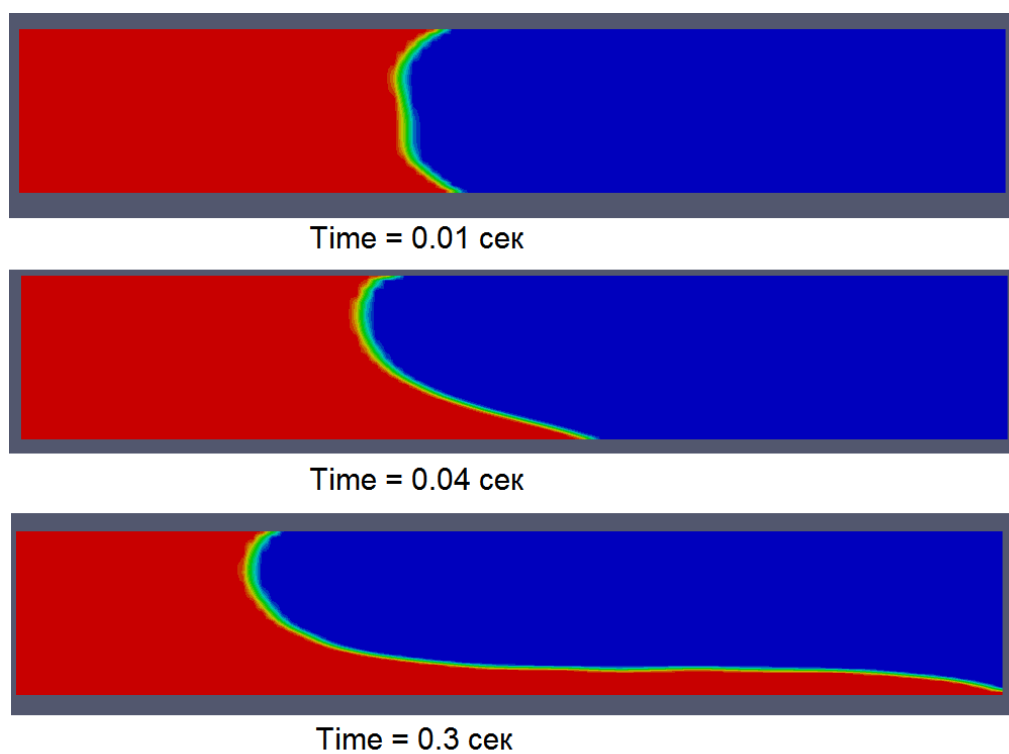


Рисунок 3.9 - Колебание поверхности в горизонтальном капилляре при $h = 6.3 \text{ мм} > h_{cr}$

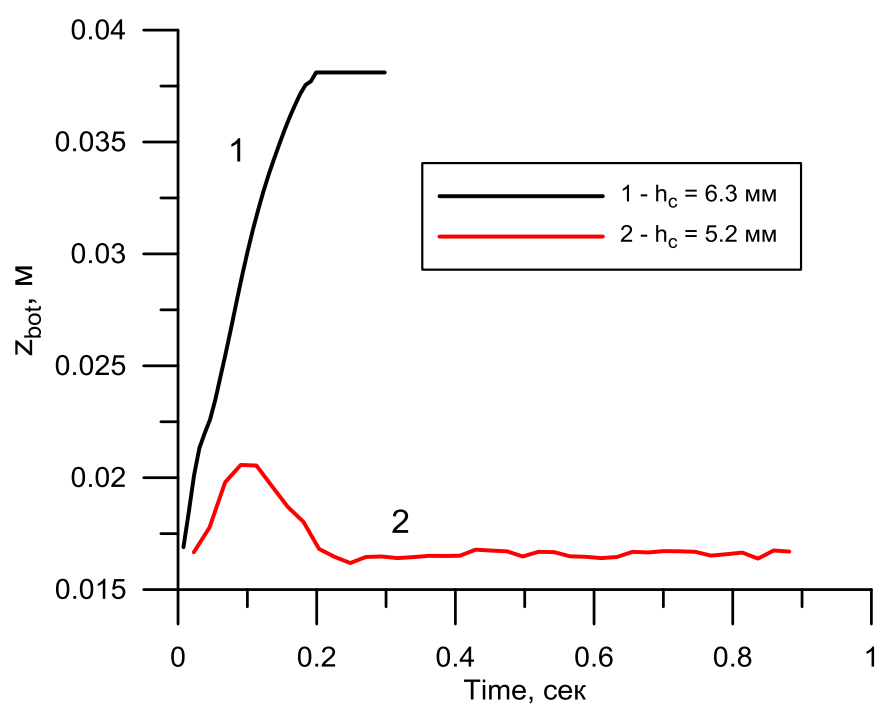


Рисунок 3.10 - Положение поверхности раздела на нижней стенке капилляра

3.4 Всплытие пузыря

Рассматривается задача об отрыве и всплытии парового пузырька с твердой поверхности. Свойства смеси и размеры РО соответствуют постановке задачи Welch & Wilson. В начальный момент времени у стенки располагается усеченный цилиндрический или сферический пузырек диаметром $d = 16$ мм (центр пузыря расположен на расстоянии $d/8$ от стенки). Для моделирования сферического пузырька используется двумерная цилиндрическая СК. Под действием сил плавучести и поверхностного натяжения пузырек отрывается от стенки и всплывает. Для «ускорения» отрыва пузырьков задается хорошая смачиваемость поверхности (угол смачивания $\theta_c = 10^\circ$).

На рисунке 3.11 показан отрыв цилиндрического и сферического пузырька.

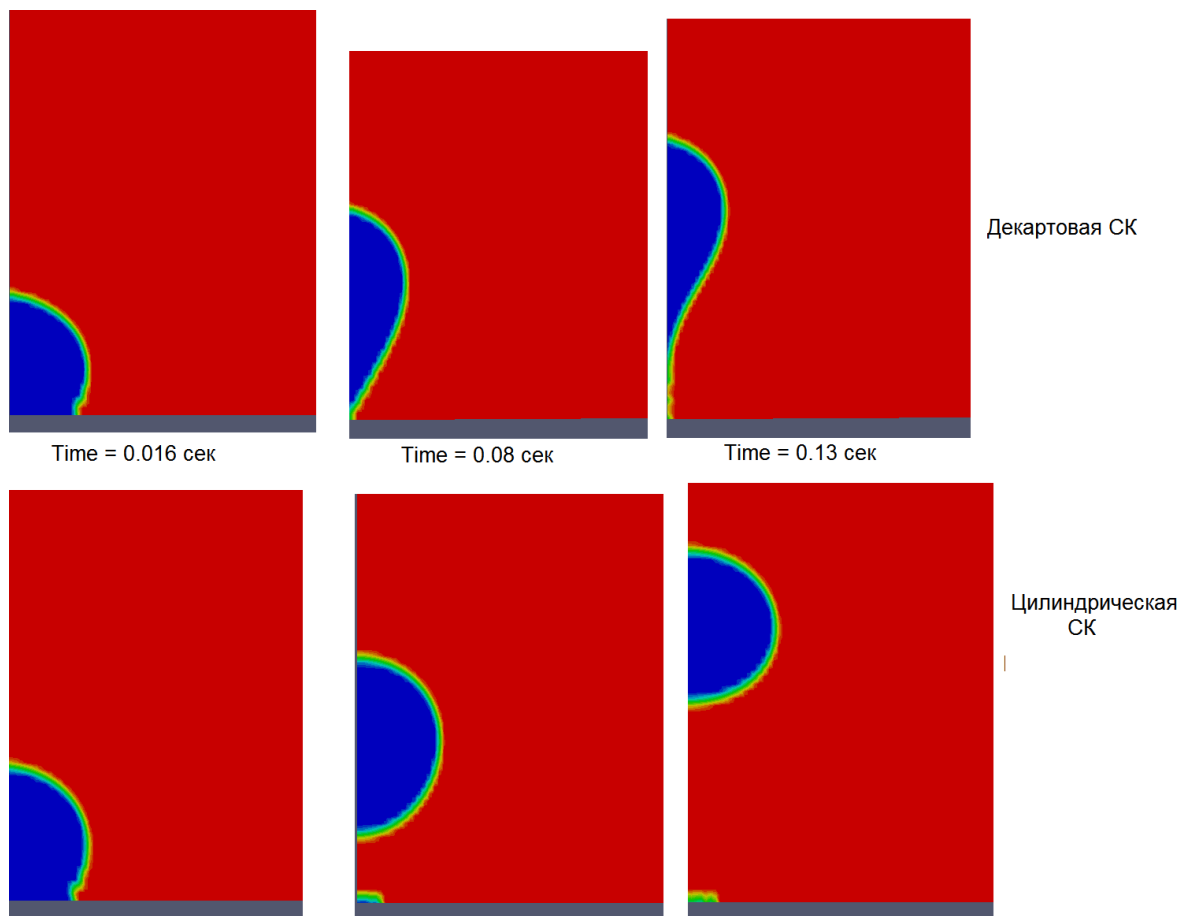


Рисунок 3.11 - Всплытие цилиндрического и сферического пузырька пара

Эти расчеты демонстрируют важный эффект. Всплытие пузыря происходит за счет сил плавучести, а поддержка его цилиндрической или сферической формы - за счет сил поверхностного натяжения. При этом наблюдается существенная разница между плоским и цилиндрическим пузырьком. Сферический пузырек очень быстро отрывается от поверхности, а за плоским довольно долго сохраняется паровой «хвост». Пока трудно объяснить, что является причиной этого хвоста. Возможно, что это дефект численного VOF-алгоритма кода Anes, а возможно это реальное физическое явление. Это требует дополнительного исследования. Однако отсутствие хвоста для сферического пузырька понятно. Хвост в этом случае имеет цилиндрическую форму и поэтому на его границе действует поверхностная сила, направленная к оси. Эта сила очень быстро разрушит этот хвост.

4. Верификация VOF-алгоритма с массообменом

В данном разделе представлены результаты моделирования тестовых задач для верификации модели тепло- и массообмена на межфазной поверхности. Рассмотрены три задачи, перечисленные в пункте 1.2:

- 1) одномерное пленочное кипение (задача Стефана, среда Water-100),
- 2) рост одномерного пузыря в перегретой жидкости (задача Скривена, среда Water-100),
- 3) рост цилиндрического пузыря в перегретой жидкости (двумерная постановка задачи Скривена в декартовой СК, среда Water-100),
- 4) двумерное пленочное кипение для постановки задачи Уэлча (среда Wilson&Welch),
- 5) двумерное пленочное кипение для постановки задачи Цуй (среда Water-373),
- 6) двумерное пленочное кипение для среды Freon-R12.

Характерные параметры для задач двумерного кипения приведены в таблице 2:

Переменная	Water-100	Water-373	Wilson&Welch	Freon-R12
b_0 , мм	2.73	0.22	7.23	0.96
l_0 , мм	29.7	2.3	78.7	10.4
U_0 , м/с	0.16	0.045	0.27	0.097
Re_f	1520	83	3.9	529
Re_g	22	72	1.9	142
Ra	$7.52 \cdot 10^5$	$7.25 \cdot 10^5$	145	$1.26 \cdot 10^6$
Nu	40.6	3.7	2.2	31.7
Ja^*	$9 \cdot 10^{-3}$	12.7	0.2	$4.09 \cdot 10^{-2}$

Здесь:

$$b_0 = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_f - \rho_g)}}, \quad l_0 = 2\sqrt{3}\pi \cdot b_0, \quad U_0 = \sqrt{g \cdot b_0},$$

$$Re_f = \frac{U_0 b_0}{\nu_f}, \quad Re_g = \frac{U_0 b_0}{\nu_g}, \quad Gr = \frac{\rho_g (\rho_f - \rho_g) g b_0^3}{\mu_g^2}, \quad Pr = \frac{c_{pg} \mu_g}{\lambda_g}, \quad (4.1)$$

$$Ra = Gr \cdot Pr, \quad Ja^* = \frac{c_{pg} (T_w - T_{sat})}{\Delta h_{gf}}, \quad Nu = \frac{q_w}{T_w - T_{sat}} \frac{b_0}{\lambda_g} = 0.425 \left[\frac{Ra}{Ja^*} \right]^{0.25}$$

4.1 Одномерные задачи с массообменом

В данном пункте рассматривается две задачи: одномерное пленочное кипение (задача Стефана) и рост пузыря в перегретой жидкости (задача Скривена). Геометрия задач показана на рисунке 1.1.

На рисунке 4.1 представлена зависимость положения границы раздела в функции времени. для задачи одномерного пленочного кипения. Наблюдается хорошее совпадение с аналитическим решением даже для грубых сеток. Это естественно, поскольку подвод тепла к фазовой границе осуществляется через неподвижный пар, в котором тепловой поток постоянен.

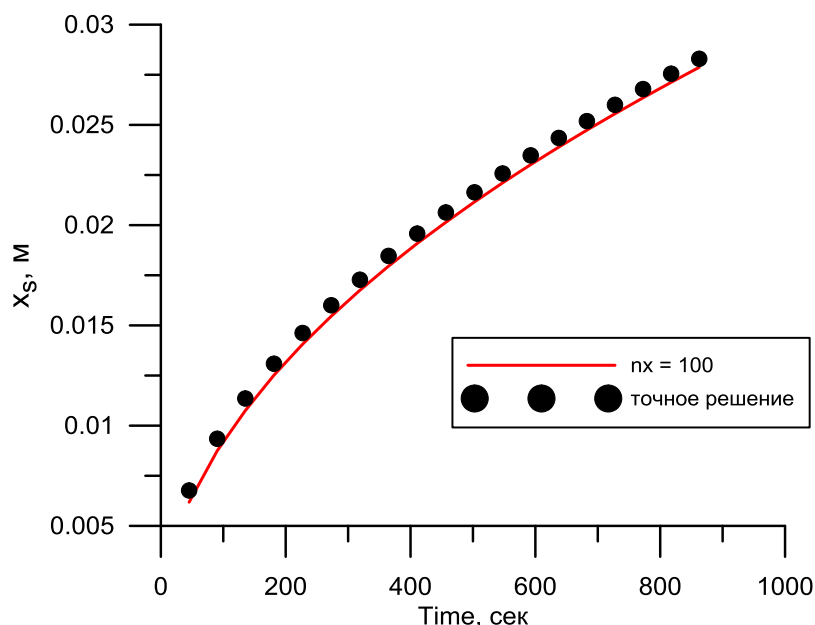


Рисунок 4.1 - Положение межфазной поверхности для задачи пленочного кипения

На рисунке 4.2 показана зависимость положения границы раздела для случая роста одномерного пузыря в перегретой жидкости. В отличие от первой задачи для совпадения с аналитическим решением требуется очень мелкая сетка. Для числа КО $nx = 100$ ширина КО $\Delta x = 0.08$ мкм, для сетки с числом КО $nx = 500$ ширина КО $\Delta x = 0.016$ мкм. Причина расхождения результатов для «грубых» сеток связана с механизмом подвода тепла к фазовой границе. Он осуществляется через тонкий слой перед фронтом, в котором тепловой поток направлен против движения жидкости и сам тепловой слой очень узкий (см. рисунок 4.3). В этом случае важным является численная схема, которая используется для решения уравнения энергии.

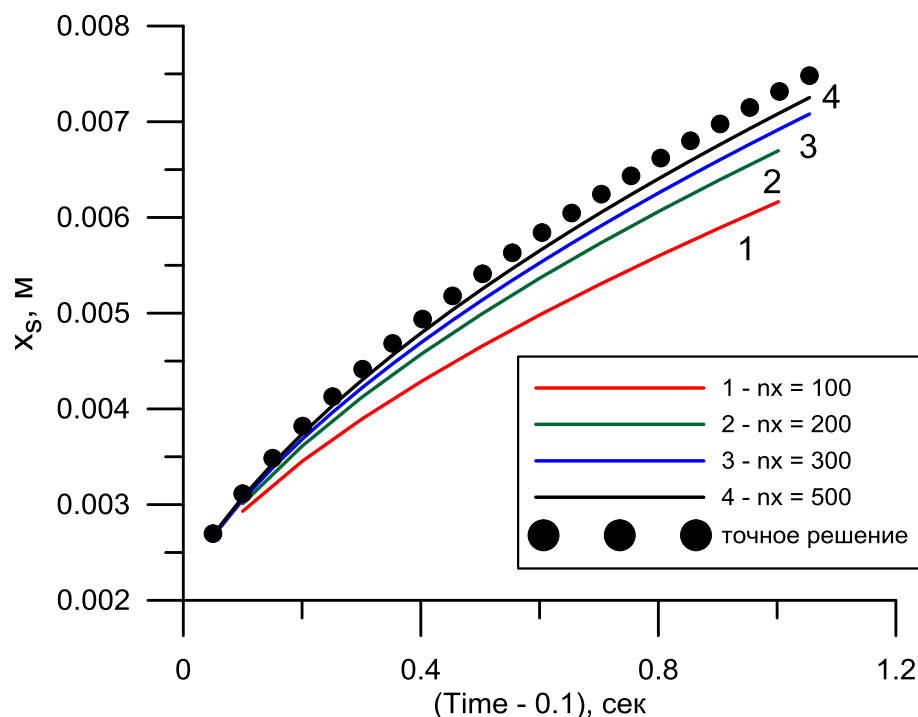


Рисунок 4.2 - Положение межфазной поверхности для задачи роста пузырька в перегретой жидкости

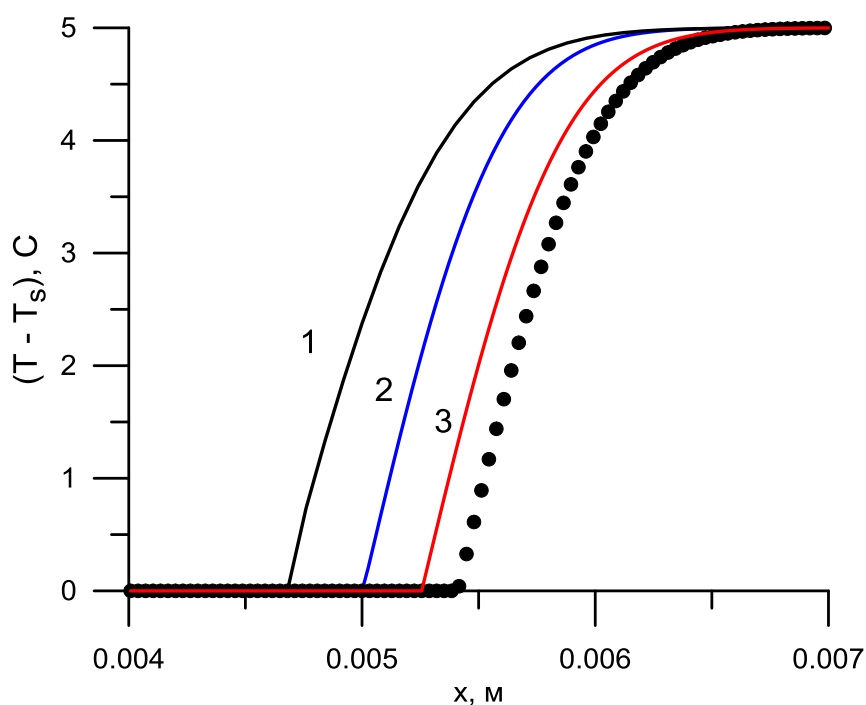


Рисунок 4.3 - Профиль температуры вблизи фронта для момента времени $\tau = 0.5$ сек:

1 - $nx = 100$, 2 - $nx = 300$, 3 - $nx = 500$

В коде Anes реализованы три схемы: Up - схема против потока, Power - степенная схема Патанкара (эта схема используется по умолчанию), Quick - противопоточная схема второго порядка точности. На рисунке 4.4 показано влияние численной схемы на положение фронта. Хорошо видно, что тип численной схемы оказывает заметное влияние на положение фронта.

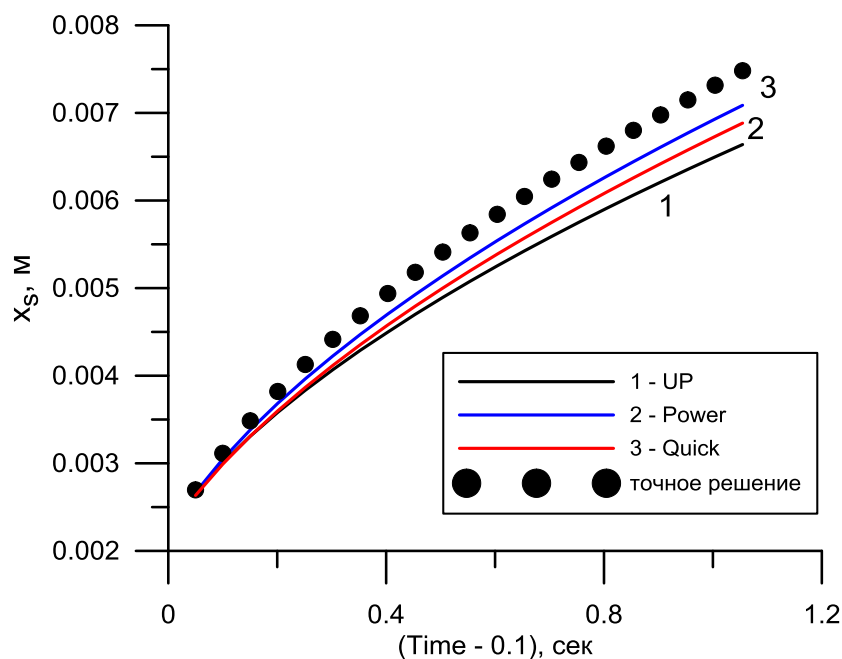


Рисунок 4.4 - Положение межфазной поверхности для задачи роста пузырька в перегретой жидкости для разных численных схем ($nx = 300$)

4.2 Двумерный рост пузырька в перегретой жидкости

Рассматривается задача о росте одномерного цилиндрического пузырька в перегретой жидкости. Для моделирования выбрана двумерная декартова СК. Среда - «Water-100». В качестве начального распределения используется аналитическое решение задачи Скривена для цилиндрической системы (см. отчет по первому этапу [1]) для момента времени $\tau = 0.1$ мс. В этом случае радиус пузырька равен $R_b = 100$ мкм. В начальный момент скорость среды полагается равной нулю, распределение объемной доли жидкости ϕ и температуры соответствует аналитическому решению, давление в области пузырька ($\phi < 1$) принималось равным σ / R_b , а вне пузырька ($\phi = 1$) полагалось равным нулю. В силу симметрии задачи моделируется четвертая часть цилиндрического пузыря в квадратной РО с размером $L_x = L_y = 250$ мкм и числом ячеек $n_x \cdot n_y = 100 \cdot 100$. На границах $x = 0$ и $y = 0$ задавались условия симметрии, на границах $x = L_x$, $y = L_y$ задавались выходные условия с $p=0$.

На рисунке 4.5 показаны поля объемной доли и вектора скорости для двух моментов времени $\tau = 0.1$ мс и $\tau = 0.53$ мс, на рисунке 4.6 представлено поле температуры для тех же моментов времени.

«Негладкие» изотермы связаны с наличием «паразитных» вихрей, возникающих при использовании CSF модели для сил поверхностного натяжения (см. раздел 2.2). Несмотря на это наблюдается неплохое совпадение с аналитическим решением, аналогичным одномерной задаче. При $\tau = 0.53$ мс радиусы пузырька равны:

R_b (аналитическое решение) = 232 мкм,

Расчет: $R_b(y = 0) = 216$ мкм, $R_b(x = 0) = 211$ мкм, $R_b(xy = 45^\circ) = 203$ мкм

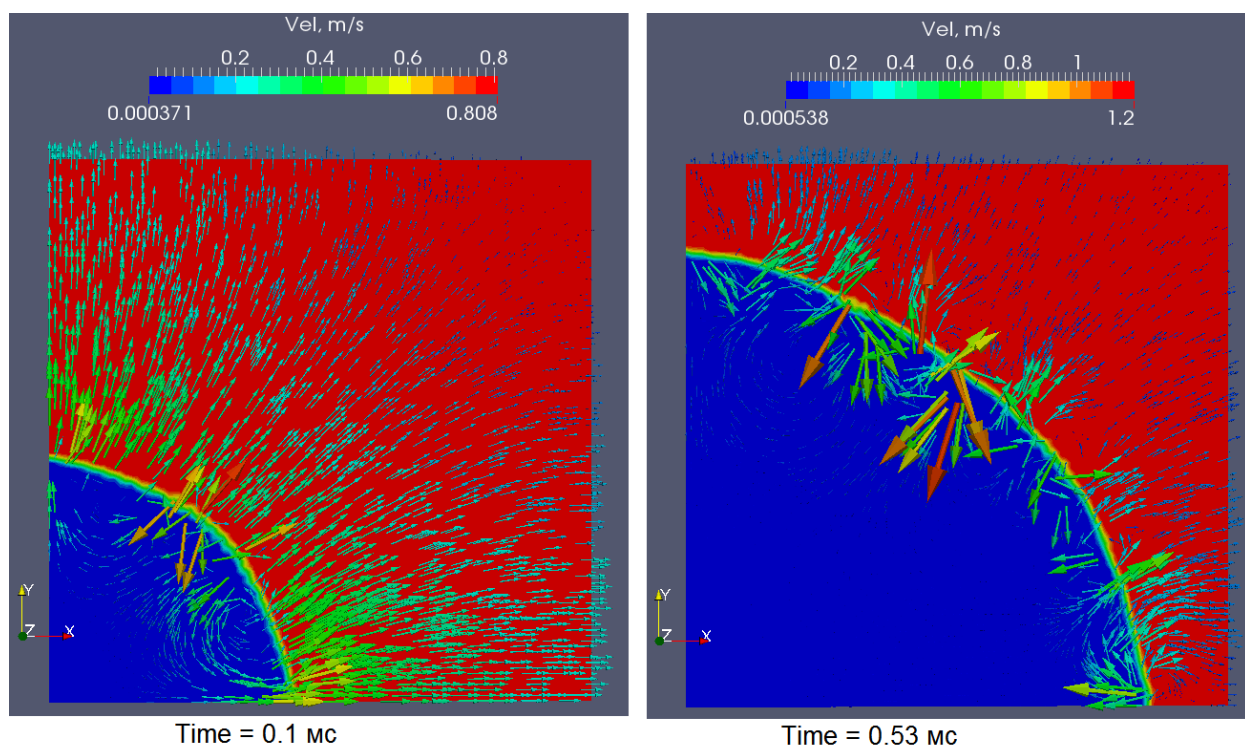


Рисунок 4.5 - Поле объемной доли жидкости и вектора скорости

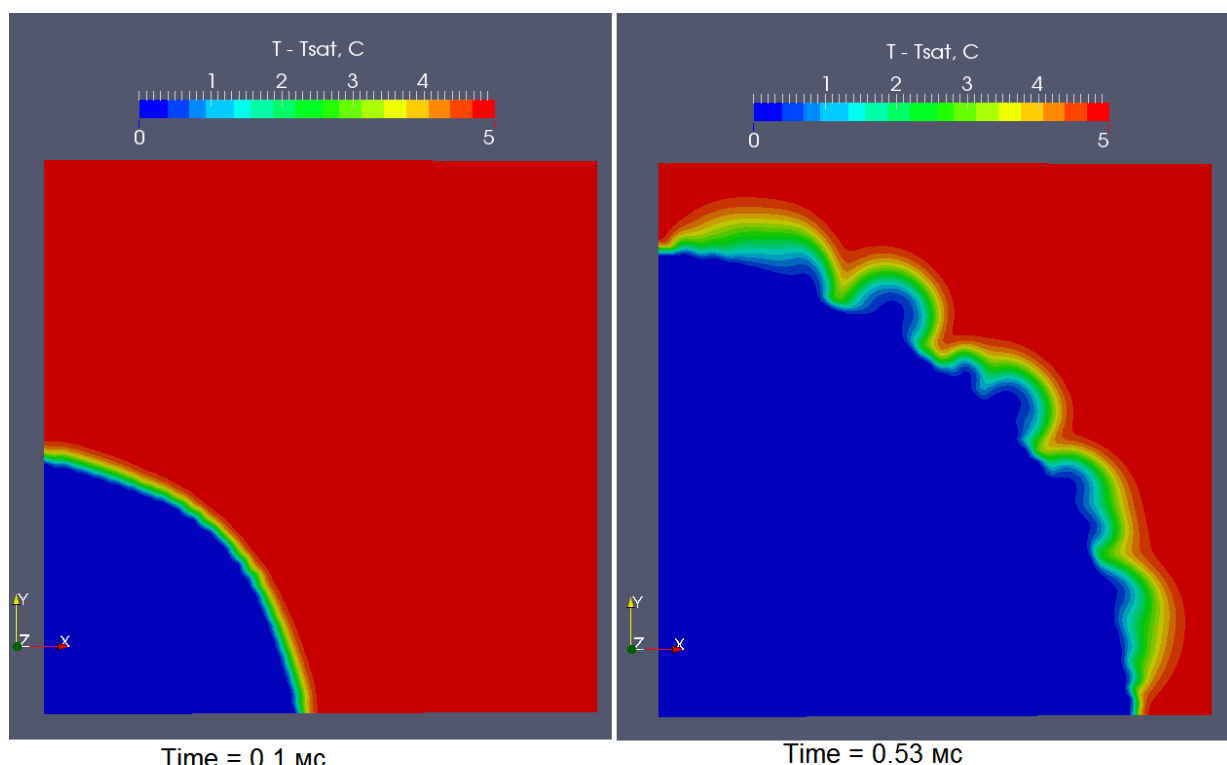


Рисунок 4.6 - Поле температуры

4.3 Двумерное пленочное кипение (Welch & Wilson)

Рассматривается процесс пленочного кипения в ячейке симметрии шириной $L_x = l_0$ и высотой $L_y = 3 \cdot l_0$. Режимные параметры соответствуют постановке задачи Уэлча. На стенке ($y = 0$) задавалась температура на 10°C выше температуры насыщения T_{sat} . На верхней границе РО при $y = L_y$ задавалось постоянное статическое давление $p = 0$, что эквивалентно заданию на границе давления p_g (см. (2.3)) в виде:

$$p_g = \rho \cdot L_y \cdot g_y \quad (4.2)$$

На рисунке 4.7 показана эволюция объемной доли жидкости для различных моментов времени. Можно выделить два качественно различных режима. На первом этапе процесс определяется Релей-Тейлоровской неустойчивостью, которая генерирует грибообразные пузыри с «ножками» в виде струй пара. Эти струи пара существуют до момента ухода пузырей через верхнюю границу. На втором этапе формируется квазистационарный режим, в котором струи пара начинают генерировать отдельные пузыри на высоте порядка l_0 . При этом пленка пара вблизи поверхности практически не меняется. Это приводит к тому, что среднее число Нуссельта перестает изменяться во времени. На рисунке 4.8 показано зависимость числа Нуссельта в функции времени для двух сеток КО. Пунктиром показано значение числа Нуссельта, рассчитанное по формуле Беренсона. Кривая 3 - результаты моделирования, взятые из оригинальной работы Уэлча.

Как следует из рисунков наши результаты отличаются от результатов оригинальной работы Уэлча [7]. У Уэлча с разных сторон формируются пузыри, у которых паровые струи быстро обрываются. Результаты Уэлча, как уже говорилось в пункте 1.2, вызывают сомнения у авторов работ Гибоу [9] и Харда [10]. К сожалению эти авторы не приводят зависимости среднего числа Нуссельта от времени.

У нас так же возникают сомнения в результатах Уэлча, демонстрирующих периодический отрыв пузырей. В пункте 3.4 моделируется отрыв цилиндрического и сферического пузырей без массообмена для режимных параметров данной задачи. Показано, что в плоском случае за пузырем тянется струя пара, а за цилиндрическим пузырем нет струи. При наличии массообмена струя пара должна становится еще более устойчивой.

Вторая причина отличия наших результатов от результатов Уэлча может заключаться в граничных условиях на верхней границе. ГУ на этой границе оказывают сильное влияние на результаты расчета. Эта граница одновременно является и выходной (через нее «уходят» паровые пузыри) и входной (через нее приходит жидкость). Этот эффект хорошо виден на рисунке 4.9, на котором показано изменение массы жидкости в РО.

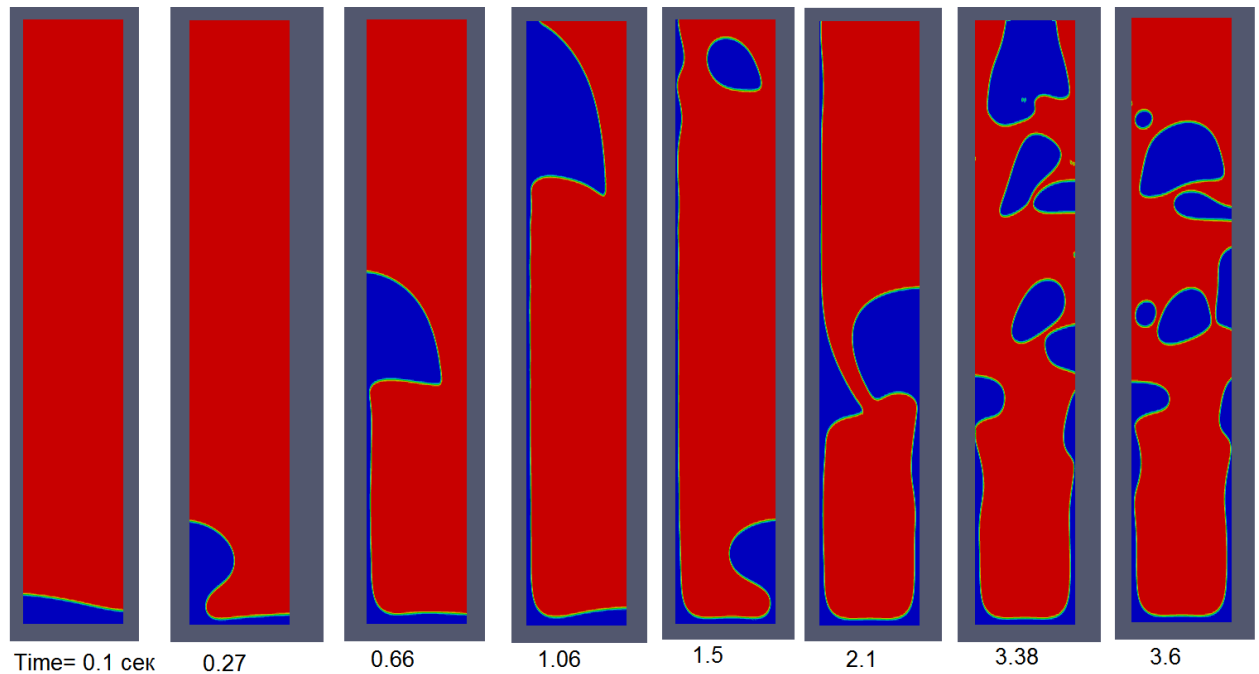


Рисунок 4.7 - Объемная доля жидкости в ячейке симметрии

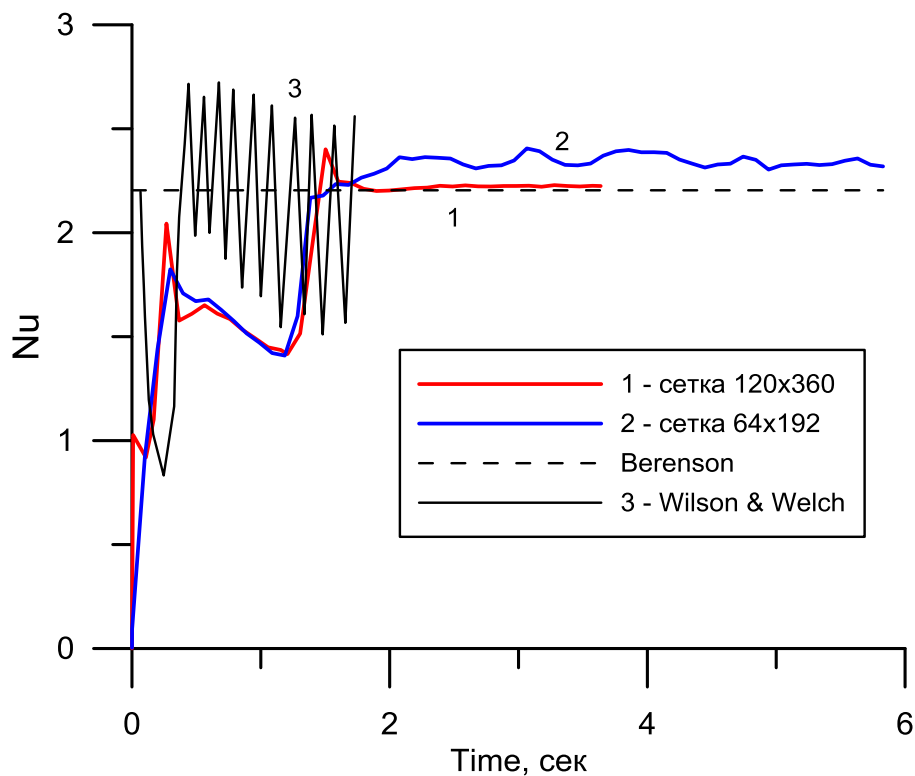


Рисунок 4.8 - Среднее число Нуссельта в функции времени

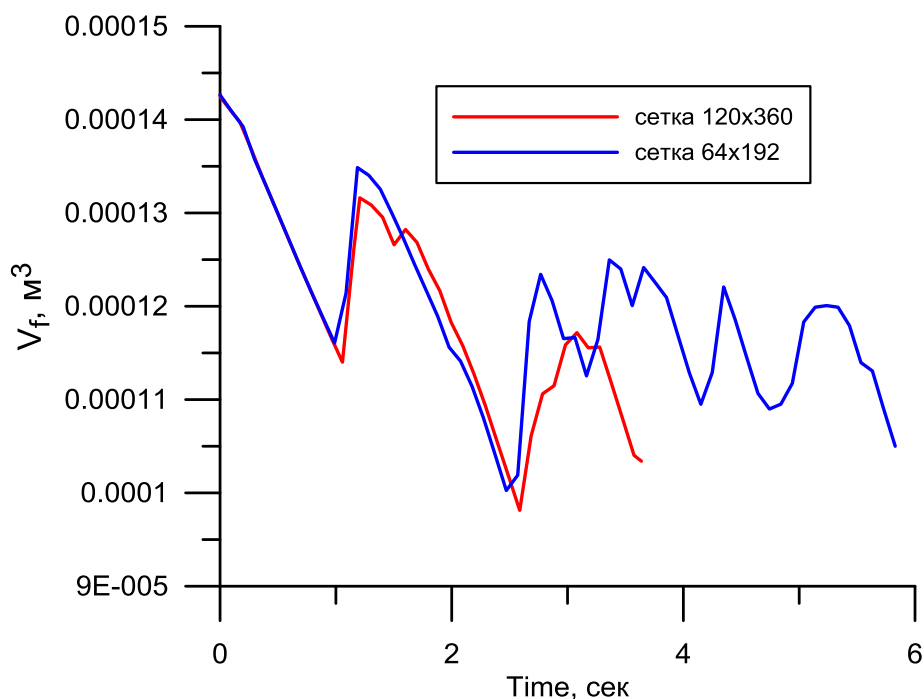


Рисунок 4.9 - Объем жидкости в расчетной области

4.4 Двумерное пленочное кипение (Tsui)

В данном разделе приводятся результаты моделирования задачи пленочного кипения для режимных параметров Цуи [11] и температуре стенки на 10 °C выше температуры насыщения. Здесь, как и в расчете Уэлча, происходит формирование устойчивых струй пара, которые тянутся до верхней границы, что приводит к возникновению практически стационарного режима кипения. На рисунке 4.10 показана эволюция пленки пара. На рисунке 4.11 и 4.12 представлены поля объемной доли жидкости, вектор скорости и поле температуры для квазистационарного режима кипения. На рисунке 4.13 показана зависимость среднего числа Нуссельта от времени. Пунктиром показано эмпирическое значение Nu , рассчитанное по эмпирической формуле Беренсона. Кривая 3 соответствует расчетному значению Nu из работы Цуи для перегрева стенки в 10 °C.

Как и в случае задачи Уэлча, в нашем расчете также возникают устойчивые струи пара и именно они вызывают возникновение квазистационарного режима. Отметим, что в расчетах Цуи возникают аналогичные режимы, но при более высоких перегревах стенки порядка 25 °C.

Выполненные к настоящему времени работы не позволяют ответить на вопрос, чьи результаты являются более достоверными. Для этого требуются тщательные дополнительные исследования, которые планируются выполнить на следующем этапе.

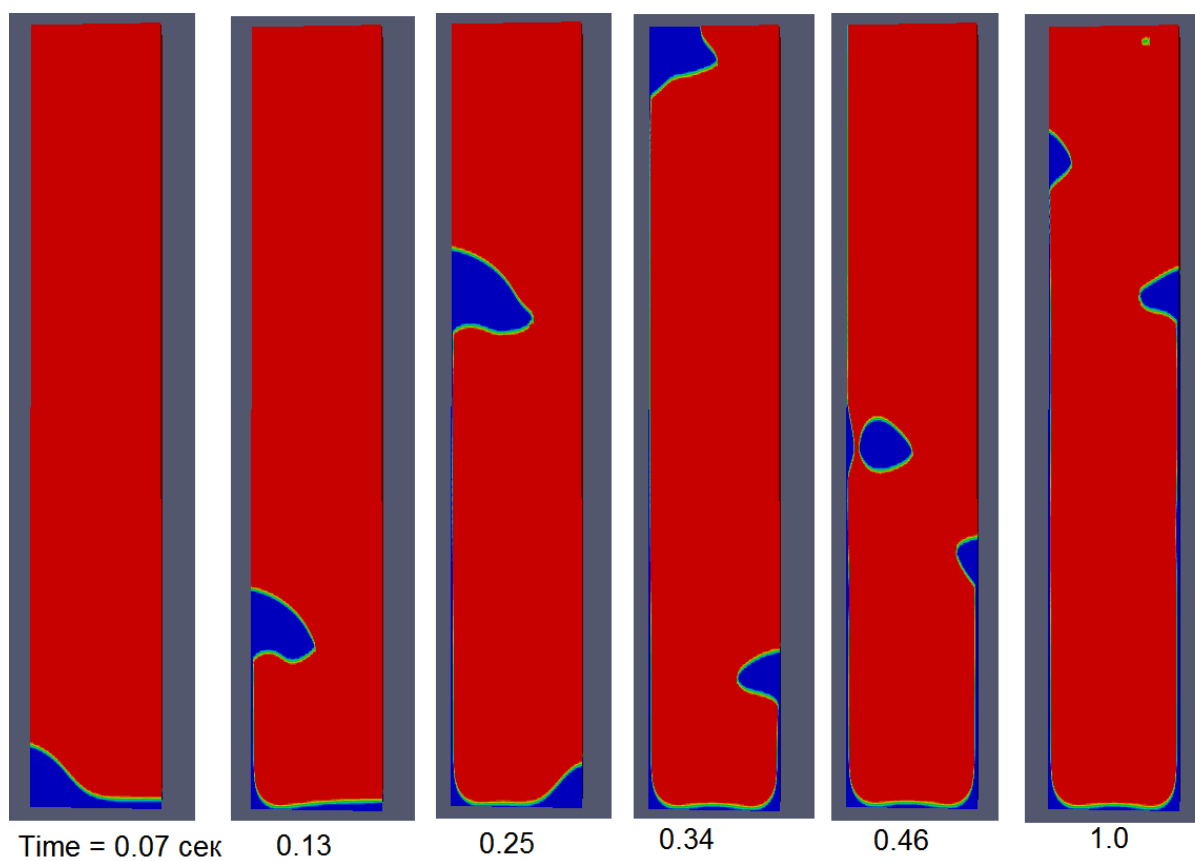


Рисунок 4.10 - Объемная доля жидкости в ячейке симметрии

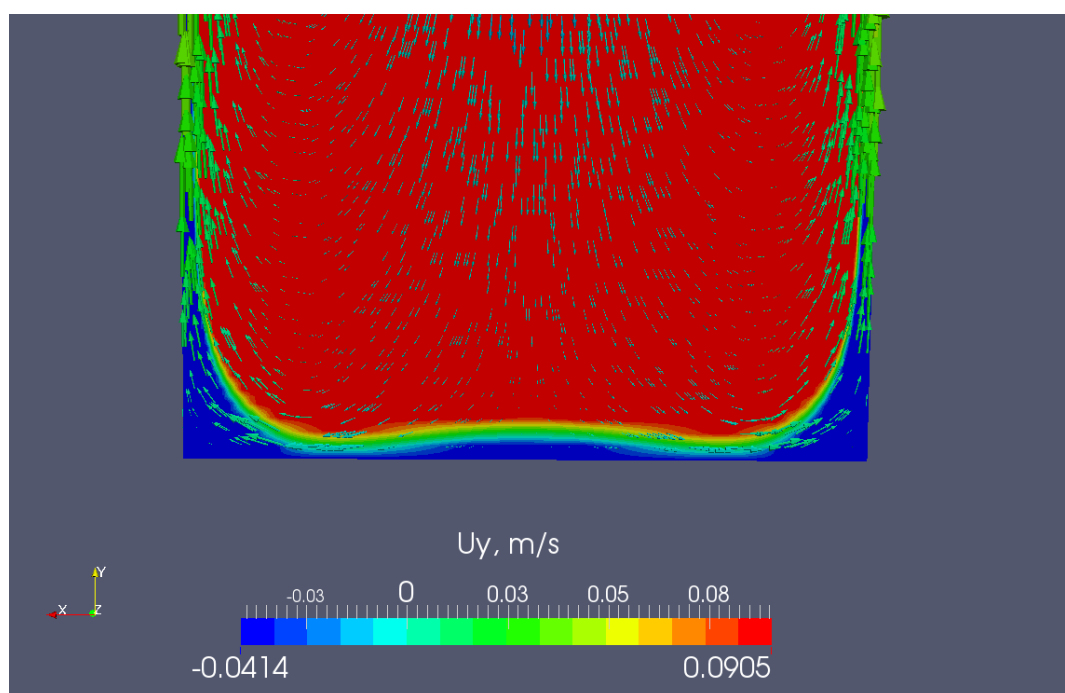


Рисунок 4.11 - Объемная доля жидкости и поле вектора скорости на квазистационарном режиме кипения

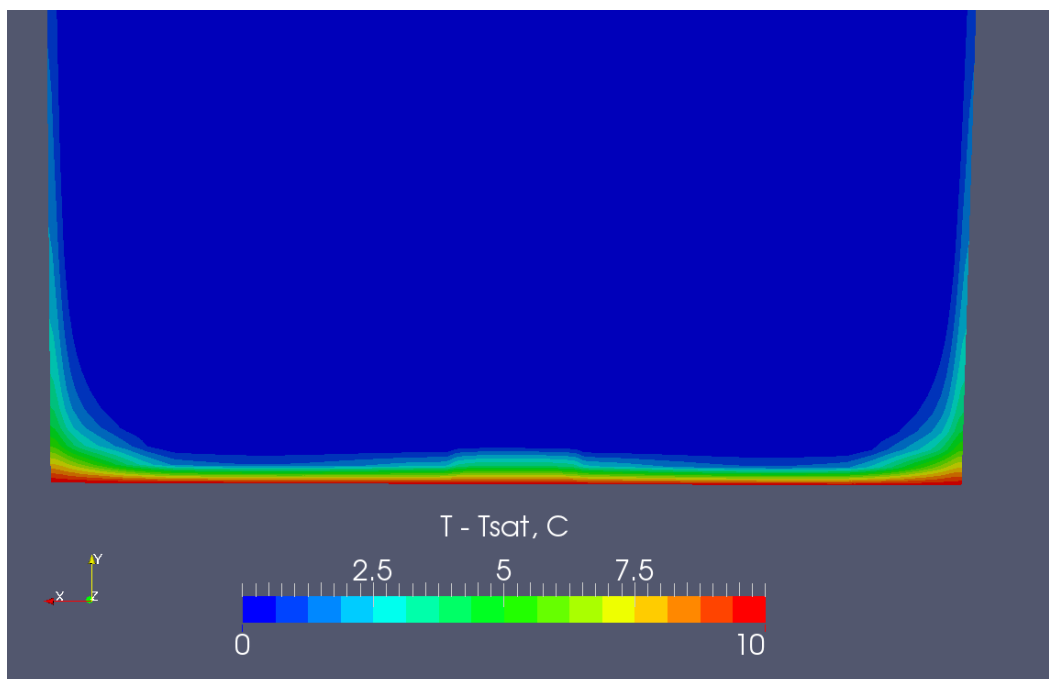


Рисунок 4.12 - Поле температуры вблизи стенки на квазистационарном режиме кипения

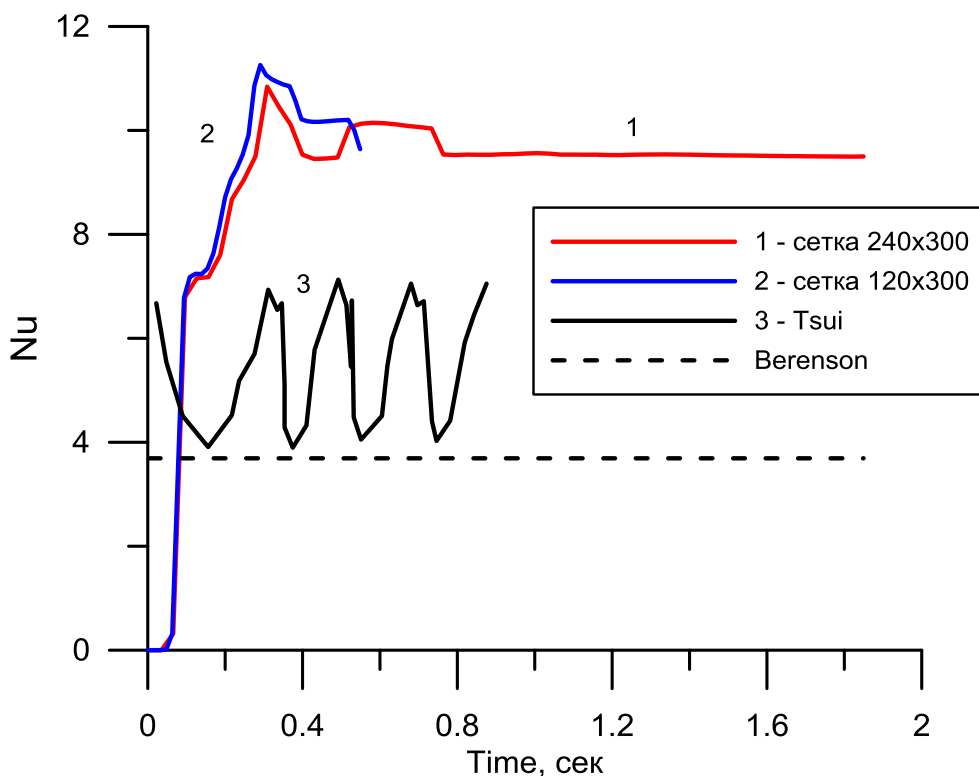


Рисунок 4.13 - Зависимость среднего числа Нуссельта от времени

4.5 Двумерное пленочное кипение (Фреон-12)

Среди немногочисленных работ, посвященных моделированию многомерных задач пленочного кипения, нет работ, в которых моделировались бы реальные жидкости и реальные режимные параметры. Поэтому была предпринята попытка смоделировать кипение фреона при давлении 3 атм (этот теплоноситель используется в термосифонах). Результаты моделирования приведены на рисунках 4.14 - 4.16.

Нам удалось довести расчет только до момента времени 0.13 сек. В этот момент на участке стенки исчезла пленка пара и произошло касание жидкости стенки. Поскольку теплопроводность жидкости на порядок выше чем теплопроводность пара, то основной тепловой поток направляется в жидкость.

Эти расчеты показывают, что для моделирования реальных теплоносителей необходимо разработать более детальную, чем (2.27) модель пристенного теплообмена. Это планируется выполнить на следующем этапе.

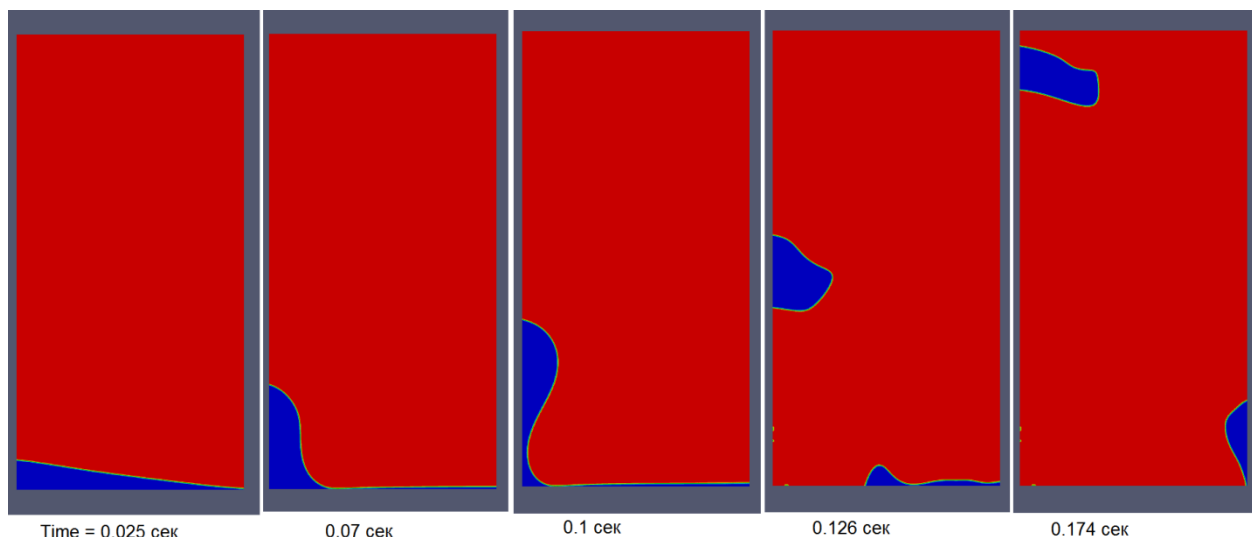


Рисунок 4.14 - Объемная доля жидкости в ячейке симметрии

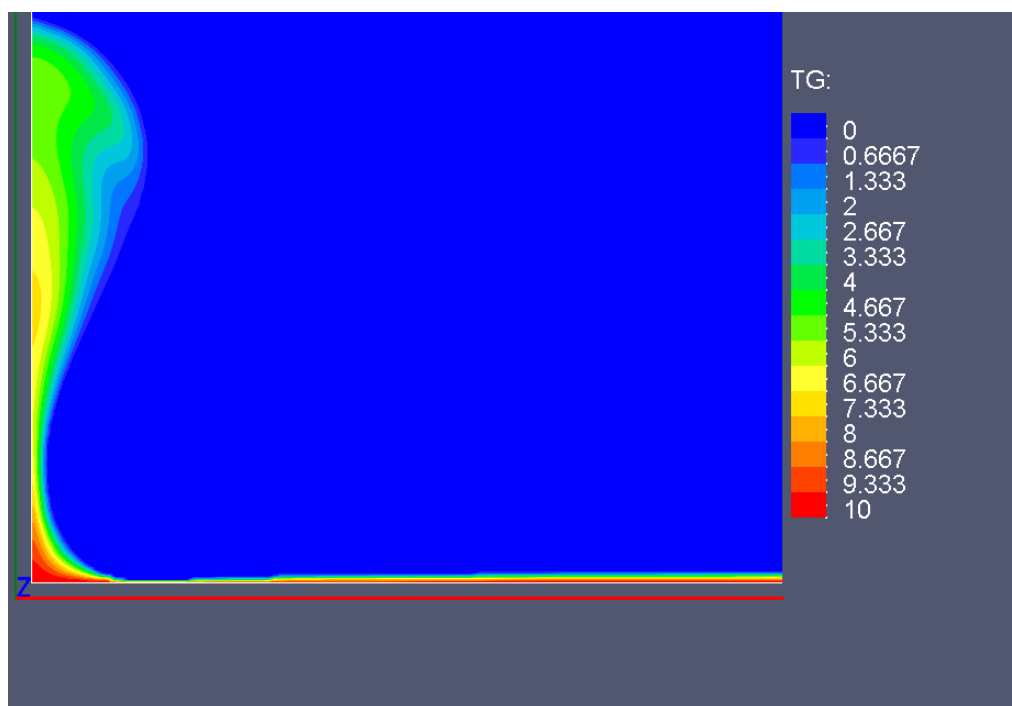


Рисунок 4.15 - Поле температуры для момента времени 0.1 сек

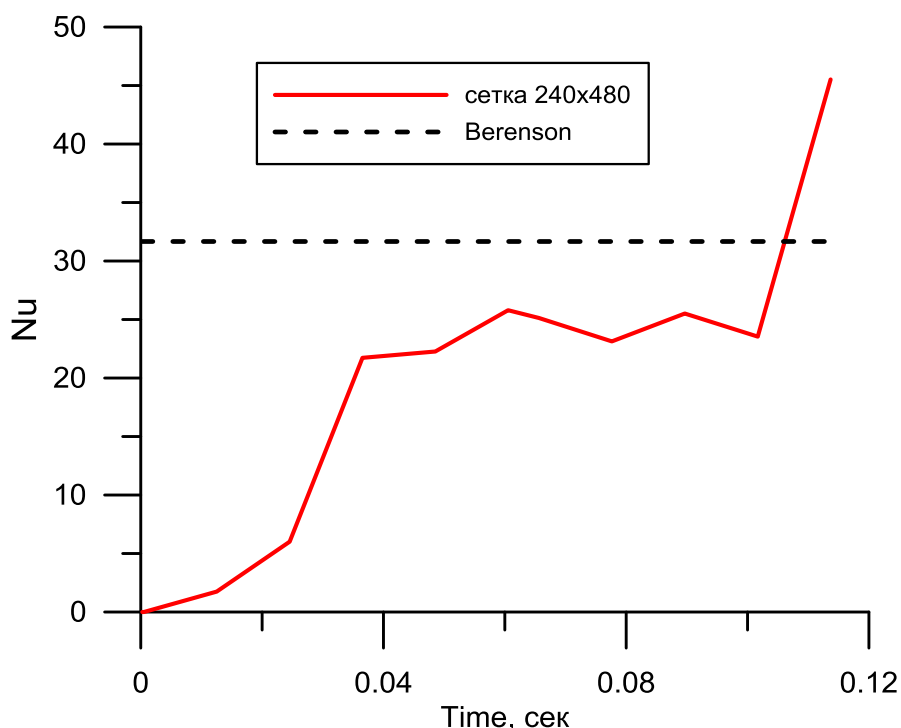


Рисунок 4.16 - Зависимость среднего числа Нуссельта от времени

Выводы

За отчетный период авторами выполнена следующая работа:

- 1) Проведено широкое тестирование базового VOF-алгоритма кода Anes на широком классе задач со свободной поверхностью раздела фаз. На основе этого тестирования существенно улучшен VOF-алгоритм кода Anes.
- 2) Уточнены модели тепло- и массообмена на межфазной границе в VOF-алгоритме, реализованном в коде Anes. Проведено тестирование моделей на аналитических решениях для одномерных и двумерных задач.
- 3) Проведено тестирование Anes на многомерных задачах моделирования процессов пленочного кипения.
- 4) Подготовлены тезисы доклада на Минскую международную конференцию ММФ-XV. Тезисы приняты Оргкомитетом в качестве устного доклада.
- 5) В рамках Интернет портала МЭИ создан сайта компьютерного CFD кода Anes с целью публичного доступа к разработанным в рамках проекта математическим моделям.

Таким образом, план 2015 года в основном выполнен.

Литература

1. Развернутый научный отчет по проекту 14-08-00939-а за 2014 г.// 14-08-00939_2014.pdf.
2. C.W. Hirt, B.G. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries// J. Comput. Phys., 1981, Vol. 39, pp. 201-225.
3. 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, 2013, vol. 63:4, pp. 263-283.
4. 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, 2009, vol. 33, pp. 122-132.
5. 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.

6. 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.
7. D. Juric, G. Tryggvason. Computations of boiling flows// Int. J. Multiphase Flow, 1998, Vol. 24, No. 3, pp. 387-410.
8. 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.
9. F. Gibou, L. Chen, D. Nguyen, S. Banerjee, A level set based sharp interface method for the multi-phase incompressible Navier-Stokes equations with phase change// J. Comput. Phys., 2007, vol. 222, pp. 536-555.
10. Y. Sato, B. Niceno. A New Conservative Phase Change Model for Nucleate Boiling// Proceedings of the International Conference Nuclear Energy for New Europe, Bovec, Slovenia, Sept. 12-15, 2011.
11. 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, 2014, vol. 70, pp. 745-757.
12. S. Hardt, F. Wondra. Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms// Journal of Computational Physics 2008, vol. 227, pp. 5871-5895.
13. 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.
14. 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.
15. P.J. Berenson. Film-boiling heat transfer from a horizontal surface// ASME J.Heat Transfer, 1961, vol. 83, pp. 351-358.
16. С. Патанкар. Численные методы решения задач тепломассообмена и динамики жидкости: Пер. с англ. - М.: Энергоатомиздат, 1984. - 152 с.
17. Ferziger, J.H. and Peric, M.: Computational methods for fluid dynamics: Springer Verlag, Berlin-New York, 1995.
18. J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach, A Continuum Method for Modeling Surface Tension// J. Comput. Phys., 1992, vol. 100, pp. 335-354.
19. 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., 1952, Ser. A, vol. 244, pp. 312-324.
20. N. Nikolopoulos, A. Theodorakakos, G. Bergeles. Normal impingement of a droplet onto a wall film: a numerical investigation // Int. Journal of Heat and Fluid Flow, 2005, vol. 26 pp. 119-132.
21. Д.А. Лабунцов, В.В. Ягов. Механика двухфазных систем: Учебное пособие для вузов// М.: Издательство МЭИ, 2000. 374 с.
22. OpenFOAM for Windows: <http://openfoamwiki.net/index.php/Installation/Windows>.
23. R.I. Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. // J.Comput. Phys., 1986, Vol. 62(1), p. 40-65.