



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Зайцев Н.А., Критский Б.В.

Об одной трехмерной
модели с диффузным
интерфейсом для расчета
двухфазных течений
реальной воды

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зайцев Н.А., Критский Б.В. Об одной трехмерной модели с диффузным интерфейсом для расчета двухфазных течений реальной воды // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 117. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2016-117](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-117)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-117>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский

**Об одной трехмерной модели
с диффузным интерфейсом для расчета
двухфазных течений реальной воды**

Москва — 2016

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский. *Об одной трехмерной модели с диффузным интерфейсом для расчета двухфазных течений реальной воды.*

Аннотация. В препринте представлено трехмерное обобщение предложенной в предыдущих публикациях модели для расчета двухфазных течений однокомпонентной жидкости. Модель ориентирована на проведение прямого численного моделирования (DNS) сложных двухфазных течений. Модель основана на концепциях односкоростного континуума и диффузного межфазного интерфейса. Термодинамические функции двухфазной среды строятся на основе реальных уравнений состояния чистых фаз. Термодинамическая составляющая позволяет проводить сквозной расчет. Проведены численные трехмерные эксперименты. Проведено исследование эффективности параллельного MPI кода.

Ключевые слова: трехмерные двухфазные течения, прямое численное моделирование, термодинамическая модель, диффузный интерфейс, параллельный MPI код.

N. A. Zaitsev, B. V. Kritskii. *On a 3D model with a diffuse interface for computations of two-phase flows of real water.*

Abstract. The preprint presents 3D generalization of the previously proposed model for computation of two-phase flows of one-component liquids. The model is focused on holding direct numerical simulation (DNS) of complex two-phase flows. The model is based on the single-speed concept and the concept of the diffuse interface. Thermodynamic functions of a two-phase medium are based on the equations of state of real pure phases. The thermodynamic component of the model supplies an opportunity to use the diffuse interface concept. 3D numerical calculations are fulfilled and analyzed. The analysis of numerical effectiveness of the corresponding MPI code is presented.

Key words: 3D two-phase flows, direct numerical simulation, thermodynamic model, diffuse interface, parallel MPI code

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

Вводные замечания

В настоящее время большинство расчетов двухфазных течений основывается на модели взаимопроникающих континуумов, являющихся представителями фаз, которые движутся каждый со своей скоростью и подчиняются своим уравнениям. Эта модель показала свою эффективность и позволяет рассчитывать все более сложные течения. Однако дальнейшее развитие этого подхода все сильнее ощущает нехватку экспериментальных данных и внутренние, присущие этому подходу, проблемы. Прежде всего, это неэволюционность в целом диапазоне параметров [1, 2] основных уравнений, получаемых осреднением микропараметров и микроуравнений (уравнений для микроскопических движений) [3]. Второй существенной проблемой этого подхода является быстро растущий список режимов течений, которые реализуются на разных этапах моделируемого процесса или в разных частях моделируемой области. Для каждого режима строится своя система определяющих уравнений и свой, вообще говоря, численный метод. При этом выбор режима осуществляется оператором на основании его опыта и анализа результатов расчетов.

В условиях стремительного роста производительности компьютеров все более привлекательными становятся расчеты сложных двухфазных течений без использования процедур осреднения на основе законов сохранения и физических свойств неосредненной сплошной среды, которые имеют наибольшую достоверность и универсальность. Подробность этого подхода ограничивается масштабами явлений, для которых справедлива модель сплошной среды.

При моделировании сложных двухфазных течений отслеживание поверхностей раздела фаз становится катастрофически сложной задачей. Поэтому в предлагаемой модели концепция межфазной поверхности не используется. Еще Пуассон, Максвелл и Гиббс показали, что на самом деле межфазный интерфейс представляет собой не поверхность нулевой толщины, а зону хотя и очень быстрого, но все же непрерывного перехода физических параметров от значений в одной чистой фазе к значениям в другой. Затем Ван-дер-Ваальс представил теорию, основанную на уравнении состояния, которая, в частности, позволяет предсказать реальную толщину интерфейса. В этой теории толщина переходной зоны стремится к бесконечности при приближении к критическому состоянию. Для описания в рамках модели диффузных интерфейсов эффектов, связанных с поверхностным натяжением, Кортвег предложил для части тензора статических напряжений представление через плотность и ее градиенты (см., например, [4]). Например, в [5] для учета сил поверхностного натяжения энтропия системы выражается не только через плотность и внутреннюю энергию, но еще и через градиент плотности.

Конечной целью разработки предлагаемого подхода является DNS — прямое численное моделирование сложных двухфазных течений. Существующие вычислительные мощности пока не позволяют провести моделирование полноразмерной содержательной задачи, и такое положение дел сохранится еще не один год. Но, чтобы быть готовыми использовать для DNS необходимые мощности, когда они появятся, уже сейчас нужно начинать разрабатывать соответствующие модели, компьютерные коды и методики.

Хотя предлагаемые конструкции являются достаточно общими, всюду в этой работе подразумевается, что речь идет о двухфазном течении воды.

Односкоростные модели для описания двухфазных течений разрабатываются и другими авторами, но в них, как правило, рассматриваются осредненные движения среды, в которых по той или иной причине отсутствует проскальзывание осредненных фаз. Как правило, используются либо двучленные уравнения состояния, либо уравнение состояния совершенного газа. Критический анализ моделей двухфазных течений представлен в [6], более подробный обзор работ можно найти, например, в [7].

Разрабатываемый авторами подход к моделированию двухфазных течений однокомпонентной среды обладает следующими основными чертами: ориентация на прямое численное моделирование, в качестве уравнений движения используются законы сохранения в исходном виде (а не их следствия). В частности, они применяются к микропараметрам среды [3], в них используются не зависящие от режима течения коэффициенты физической (молекулярной) вязкости и теплопроводности. В каждой точке рассматриваемого объема течения определены одна плотность, одна скорость, одна внутренняя энергия, и эти параметры полностью описывают состояние сплошной среды. Интерфейс между фазами является диффузным, т.е. интерфейс между жидкостью и её паром является объемной зоной перехода, в которой плотность меняется непрерывно. Для описания эффектов поверхностного натяжения на межфазном интерфейсе используется тензор статических напряжений, зависящий от градиента плотности. Входящие в математическую модель функции, в том числе давление и температура, являются для всего диапазона изменений параметров единой функцией плотности и внутренней энергии. Эти функции строятся на основе аналогичных функций для чистых фаз.

Первоначально авторами настоящей статьи с соавторами была предложена в [8] простейшая одномерная модель указанного выше типа (без диссипации, с простейшим способом построения функций температуры и давления на основе уравнения состояния типа Ван-дер-Ваальса) и представлены результаты решения простейшей задачи, демонстрирующие работоспособность подхода. В [9] усовершенствован метод построения функции температуры и давления на основе уравнения состояния типа Ван-дер-Ваальса, добавлен учет теплопроводности, приведены результаты решения более содержательных задач. В [6] модель и численный метод [9] обобщены на двумерный случай. В

[10] двумерная модель [6] обобщена на случай реальных уравнений состояний для жидкости и пара [11], проведены двумерные расчеты. Кроме того, в модель добавлен учет эффектов поверхностного натяжения, которые имеют место в окрестности зоны раздела фаз.

В настоящем препринте двумерная модель [10] обобщена на трехмерный случай двухфазных течений воды с реальными свойствами [11], проведены трехмерные расчеты, показывающие работоспособность параллельного MPI кода, исследована его эффективность.

§1. Уравнения движения

Рассматривается движение однокомпонентной сплошной среды, подчиняющееся законам сохранения массы, импульса и энергии, которые в декартовой системе координат можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = R_\rho, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u - p_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v - p_{xy})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u w - p_{xz})}{\partial z} = R_x, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v u - p_{yx})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v - p_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v w - p_{yz})}{\partial z} = R_y, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w u - p_{zx})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w v - p_{zy})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w w - p_{zz})}{\partial z} = R_z, \quad (4)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(Eu + q_x + Q_x) + \frac{\partial}{\partial y}(Ev + q_y + Q_y) + \frac{\partial}{\partial z}(Ew + q_z + Q_z) = R_E, \quad (5)$$

где u, v, w — компоненты скорости среды вдоль осей x, y, z соответственно, $E = \rho e$ — полная энергия единицы объема, $e = (u^2 + v^2 + w^2)/2 + \varepsilon$ — полная энергия единицы массы, ε — внутренняя энергия единицы массы, $q_a = \kappa \hat{\partial T} / \partial x_a$ — компонента вектора потока тепла,

$$Q_a = p_{ax}u + p_{ay}v + p_{az}w,$$

p_{ab} — компоненты симметричного тензора напряжений, $R_\rho, R_x, R_y, R_z, R_E$ — источники массы, импульса и энергии.

Тензор напряжений состоит из тензора статических напряжений σ_{ab} , т.е. такой составляющей полного тензора напряжений p_{ab} , которая не зависит от скорости и не дает вклада в производство энтропии, и тензора вязких напряжений τ_{ab} :

$$p_{ab} = \sigma_{ab} + \tau_{ab}. \quad (6)$$

Тензор вязких напряжений выражается через тензор скоростей деформации $e_{ab} = (\partial v_a / \partial x_b + \partial v_b / \partial x_a) / 2$ по следующей формуле:

$$\tau_{ab} = \left(\eta_v - \frac{2}{3} \eta_s \right) e_{cc} \delta_{ab} + 2\eta_s e_{ab}, \quad (7)$$

где η_v и η_s — коэффициенты объемной и сдвиговой вязкости, δ_{ab} — символ Кронекера, по повторяющимся индексам производится суммирование (e_{cc} — это дивергенция скорости).

Тензор статических напряжений σ_{ab} в декартовой системе координат в однофазной классической жидкости имеет вид $\sigma_{ab} = -P\delta_{ab}$, где P — давление. Но такой тензор статических напряжений при диффузном описании межфазного интерфейса приводит к отсутствию эффектов поверхностного натяжения при взаимодействии фаз. На основе анализа возможных видов функционала энтропии в [5] предложено использовать тензор статических напряжений, зависящий также от градиента плотности. А именно:

$$\sigma_{ab} = T \left\{ \left[\frac{\mu\rho - P}{T} + \frac{\alpha(\rho)}{2} \left(\frac{\partial\rho}{\partial x_a} \right)^2 + \Theta_{\rho\rho} \right] \delta_{ab} - \alpha(\rho) \frac{\partial\rho}{\partial x_a} \frac{\partial\rho}{\partial x_b} \right\}, \quad (8)$$

где

$$\Theta_{\rho\rho} = \sum_a \left[-\frac{\mu}{T} - \frac{1}{2} \frac{\partial\alpha}{\partial\rho} \left(\frac{\partial\rho}{\partial x_a} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_a} \left(\alpha \frac{\partial\rho}{\partial x_a} \right) \right], \quad (9)$$

μ — химический потенциал, α — скалярный коэффициент.

Скалярная функция $\alpha(\rho)$ является настроечным параметром модели, который необходимо подбирать путем сравнения решения сферически симметричной задачи и данных экспериментов. Всюду ниже в этом препринте считается $\alpha = 0$.

§2. Уравнение состояния

Уравнения (1) – (3), выражающие законы сохранения массы, импульса и энергии сплошной среды, должны быть дополнены функциями $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$. Существенным для данной модели является умение вычислять функции $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ для всех значений плотности и внутренней энергии, которые могут появиться при сквозном расчете двухфазного течения. Обычно эти функции хорошо известны для чистых фаз. Используемый в настоящей работе способ построения требуемых функций на основе известных функции $\varepsilon(P, T)$ и $\rho(P, T)$ для чистых фаз был описан в [10]. Ниже мы приведем его кратко для полноты описания модели.

Для построения необходимых термодинамических функций воды мы использовали реальные уравнения состояния чистых фаз, предложенных в [11]. На рис. 1 показаны используемое в [11] разбиение плоскости (P, T) на области и задаваемые в них функции. Предполагается, что в каждой из областей функции $\varepsilon(P, T)$ и $\rho(P, T)$ однозначны и обратимы (т.е. перегретая жидкость и переохлажденный пар не рассматриваются в рамках этой модели).

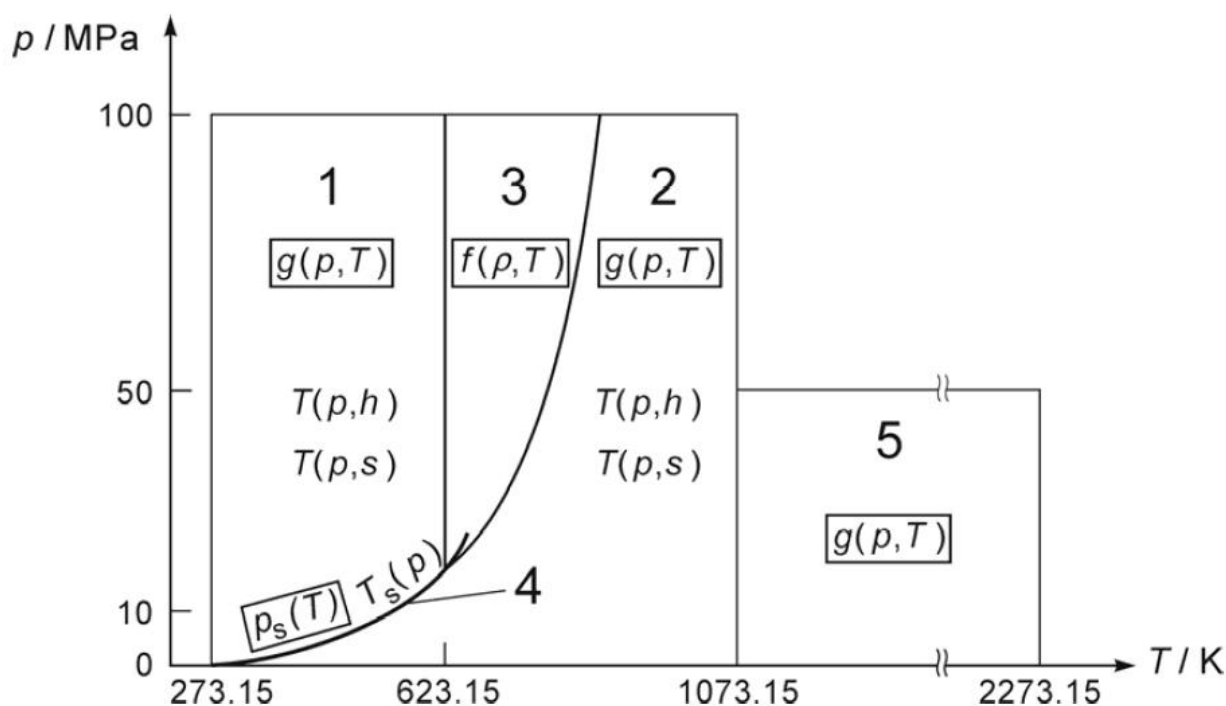


Рис. 1. Разбиение плоскости (P, T) на области и используемые в них функции

На рис. 1 использованы следующие обозначения: f — удельная энергия Гельмгольца, g — удельная энергия Гиббса, h — удельная энтальпия, s — удельная энтропия, P_s — давление насыщения, T_s — температура насыщения.

Для каждой из пяти областей используется своя функция. Например, в области 1 используется полиномиальная функция относительно давления и обратной температуры, состоящая из 34 слагаемых. Использование этих функций непосредственно для вычисления функции $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ забирает слишком много компьютерного времени. Поэтому для областей 1, 2, 3 и 5 заранее насчитывались значения $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ на достаточно подробной сетке, чтобы в процессе расчета течений значения давления и температуры вычислять с помощью интерполяции невысокого порядка (от 1 до 3).

Линия насыщения 4, отделяющая в плоскости (P, T) газовую фазу от жидкой, в плоскости (V, ε) является целой областью D , где $V = 1/\rho$.

При сквозном расчете двухфазного течения пара значений (V, ε) может попасть в область двухфазности D , поэтому в ней тоже нужно уметь вычислять $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$. Мы используем для этого следующий метод.

Пусть в плоскости (P, T) известна линия насыщения $P_s(T)$. И пусть известны функции $\rho(P, T)$ и $\varepsilon(P, T)$, непрерывные всюду в рассматриваемой области изменения параметров, кроме линии насыщения, и допускающие построение обратных функций $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ (перегретая жидкость и переохлажденный пар не рассматриваются). На линии насыщения плотность и внутренняя энергия как функции давления и температуры терпят разрыв. Тогда $\rho_L(P, T)$ и $\varepsilon_L(P, T)$ — известные функции на линии насыщения в жидкости, $\rho_G(P, T)$ и $\varepsilon_G(P, T)$ — те же функции в газе. В пространстве (V, ε) линии насыщения соответствует область межфазового перехода, заключенная между линиями, которые в параметрическом виде задаются следующими формулами:

$$\left\{ \begin{array}{l} V = 1/\rho_L(P_s(T), T) \\ \varepsilon = \varepsilon_L(P_s(T), T) \end{array} \right. \quad \text{и} \quad \left\{ \begin{array}{l} V = 1/\rho_G(P_s(T), T) \\ \varepsilon = \varepsilon_G(P_s(T), T) \end{array} \right. .$$

По предположению $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$ вне области межфазового перехода известны как обратные к $\rho(P, T)$ и $\varepsilon(P, T)$. Внутри области межфазового перехода эти функции строятся следующим образом.

Прямые, соединяющие лежащие на границах области D точки $(V = 1/\rho_L(P_s(T), T), \varepsilon = \varepsilon_L(P_s(T), T))$ и $(V = 1/\rho_G(P_s(T), T), \varepsilon = \varepsilon_G(P_s(T), T))$, образуют однопараметрическое семейство прямых, зависящих от параметра T . Чтобы найти значения температуры T_0 и давления P_0 , соответствующие точке (ρ_0, ε_0) , лежащей в области межфазового перехода, ищется такое значение параметра T , при котором прямая в пространстве (V, ε) из описанного выше

семейства пройдет через точку $(V_0 = 1/\rho_0, \varepsilon_0)$. После этого давление восстанавливается по формуле $P_0 = P_s(T_0)$.

§3. Схема расчета шага по времени

Система законов сохранения (1) – (5) может быть представлена в векторном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{F}^E + \mathbf{F}^{NS}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{G}^E + \mathbf{G}^{NS}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mathbf{H}^E + \mathbf{H}^{NS}) = \mathbf{R}, \quad (10)$$

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{m,j,k}^{n+1} = & \mathbf{Q}_{m,j,k}^n + \tau \mathbf{R}_{m,j,k}^n - \frac{\tau}{h_x} [\mathbf{F}_{m+1/2,j,k} - \mathbf{F}_{m-1/2,j,k}] \\ & - \frac{\tau}{h_y} [\mathbf{G}_{m,j+1/2,k} - \mathbf{G}_{m,j-1/2,k}] - \frac{\tau}{h_z} [\mathbf{H}_{m,j,k+1/2} - \mathbf{H}_{m,j,k-1/2}], \end{aligned} \quad (11)$$

где m , j и k — номера точек сетки по x , y и z , n — номер шага по времени, h_x , h_y и h_z — шаги сетки вдоль x , y и z , τ — величина шага по времени. Для свойств схемы (11) определяющую роль играет способ вычисления потоков.

Для вычисления решения на новом слое сначала решается уравнение Эйлера

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

по схеме

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

(процедура вычисления потоков описана ниже), затем решается уравнение для диссипативных членов:

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

по схеме

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

Способ разбиения правой части (10) на два слагаемых достаточно произволен и выбирается из удобства, важно лишь, чтобы

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

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

§4. Решение гиперболической подзадачи

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

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

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = \mathbf{R}, \quad (16)$$

которое может быть также записано в недивергентном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{a}(\mathbf{Q}) \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = \mathbf{R}, \quad (17)$$

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

В силу гиперболичности системы (16) матрица \mathbf{a} представима в виде $\mathbf{a} = \mathbf{\Phi}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Phi}$, где матрица $\mathbf{\Phi}$ состоит из левых собственных векторов матрицы \mathbf{a} , а на диагонали диагональной матрицы $\mathbf{\Lambda}$ стоят соответствующие собственные числа.

Для расчета потоков на грани ячейки $\mathbf{F}_{m+1/2}$ используется уравнение (17) с "замороженной" матрицей $\mathbf{a}_{m+1/2}^* = \mathbf{a}(\mathbf{Q}^{hll})$:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{a}^* \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = \mathbf{R}. \quad (18)$$

\mathbf{Q}^{hll} — среднее значение \mathbf{Q} Хартена-Лакса-ван-Лиры [8]:

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

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

Если умножить уравнение (18) слева на k -й собственный вектор φ_k^* (k -ю строку матрицы Φ^*), то получится уравнение для k -го инварианта системы (18):

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

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

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

$$(I_k)_{m+1/2} = (I_k)_m^n, \quad (19)$$

если $-1 < q_k^* < 0$, то

$$(I_k)_{m+1/2} = (I_k)_{m+1}^n. \quad (20)$$

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

$$\mathbf{Q}_{m+1/2} = (\Phi_{m+1/2}^*)^{-1} \mathbf{I}_{m+1/2}. \quad (21)$$

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

§5. Решение параболической подзадачи

Поскольку в рассматриваемых примерах вязкость не учитывалась, для вычисления потоков параболической части задачи использовалась простейшая явная схема второго порядка аппроксимации по пространству:

$$\mathbf{F}_{m+1/2,j,k}^{NS} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \left[\kappa(\rho_{m+1,j,k}^n, \varepsilon_{m+1,j,k}^n) + \kappa(\rho_{m,j,k}^n, \varepsilon_{m,j,k}^n) \right] \frac{T_{m+1,j}^n - T_{m,j,k}^n}{h_x} \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$\mathbf{F}_{m,j+1/2,k}^{NS} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \left[\kappa(\rho_{m,j+1,k}^n, \varepsilon_{m,j+1,k}^n) + \kappa(\rho_{m,j,k}^n, \varepsilon_{m,j,k}^n) \right] \frac{T_{m,j+1,j}^n - T_{m,j,k}^n}{h_y} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$\mathbf{F}_{m,j,k+1/2}^{NS} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \left[\kappa(\rho_{m,j,k+1}^n, \varepsilon_{m,j,k+1}^n) + \kappa(\rho_{m,j,k}^n, \varepsilon_{m,j,k}^n) \right] \frac{T_{m,j,j+1}^n - T_{m,j,k}^n}{h_z} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Эта схема имеет ограничение на шаг по времени $\tau \sim h^2$, но в рассмотренных задачах такое ограничение не было чересчур обременительным по сравнению с ограничением из-за требования точности (т.к. величина плотности и энергии при переходе из одной фазы в другую меняется очень сильно).

§6. Проверка эффективности параллельного кода

Для численной реализации предложенной модели двухфазной среды был написан и отлажен параллельный код для расчета трехмерных двухфазных течений воды. Реализована следующая структура программы.

Расчетная область разбивается на блоки, каждый из которых приписывается к одному процессору (ядру). Нарезка на блоки осуществляется вдоль оси x , т.е. каждый (y, z) -слой сетки (слой $x = const$) принадлежит процессору целиком (сеточные функции этого слоя лежат в памяти одного процессора и обрабатываются одним процессором). Направление нарезки можно менять, но в любом случае она будет одномерной.

Каждый блок представляет собой структурированную сетку. Узлы сетки разделены на внутренние и внешние. Данные на внутренних узлах могут быть получены (вычислены) из данных во внутренних и внешних узлах данного блока, данные на внешних узлах должны быть заданы из граничных условий или значений на внутренних узлах другого блока; считается, что значения могут быть получены из данных только соседнего блока. Различные блоки могут принадлежать одному процессору. Обмены между блоками, принадлежащими различным процессорам, осуществляются с использованием MPI (Message Passing Interface).

Расчеты производились на декартовой сетке размером 4200x4200 на различном количестве процессоров (ядер): от 11 до 176.

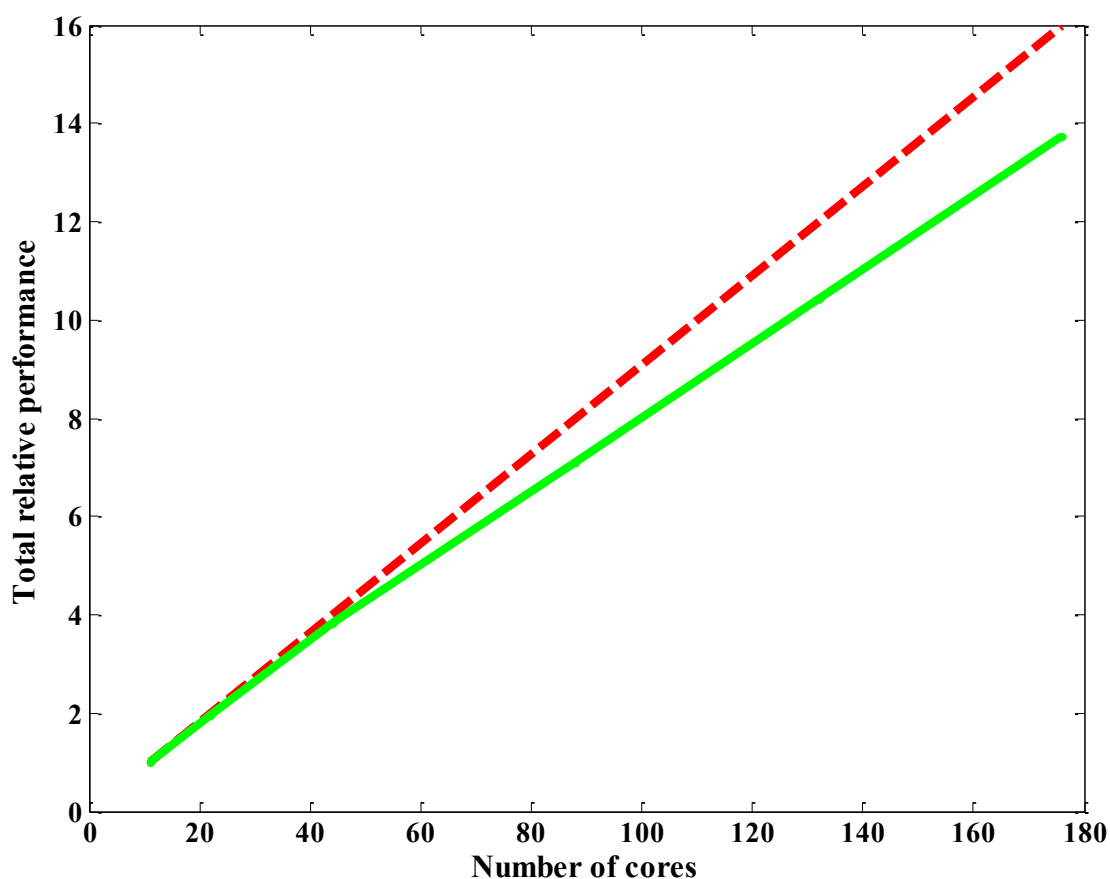


Рис. 2. Производительность в зависимости от числа используемых процессоров

На рис. 2 показана зависимость производительности вычислительной системы от числа задействованных ядер. За единицу принята производительность вычислительной системы, состоящей из 11 ядер. Из графика видно, что зависимость производительности вычислительного комплекса от числа используемых ядер на рассмотренном интервале близка к линейной. При большом количестве процессоров каждый процессор выдает производительность около 86%, что оказалось на 1% больше, чем у

аналогичного двумерного кода [10]. Поскольку архитектура кода не изменилась, этот эффект можно объяснить относительно большим объемом вычислений на одну точку в 3D коде.

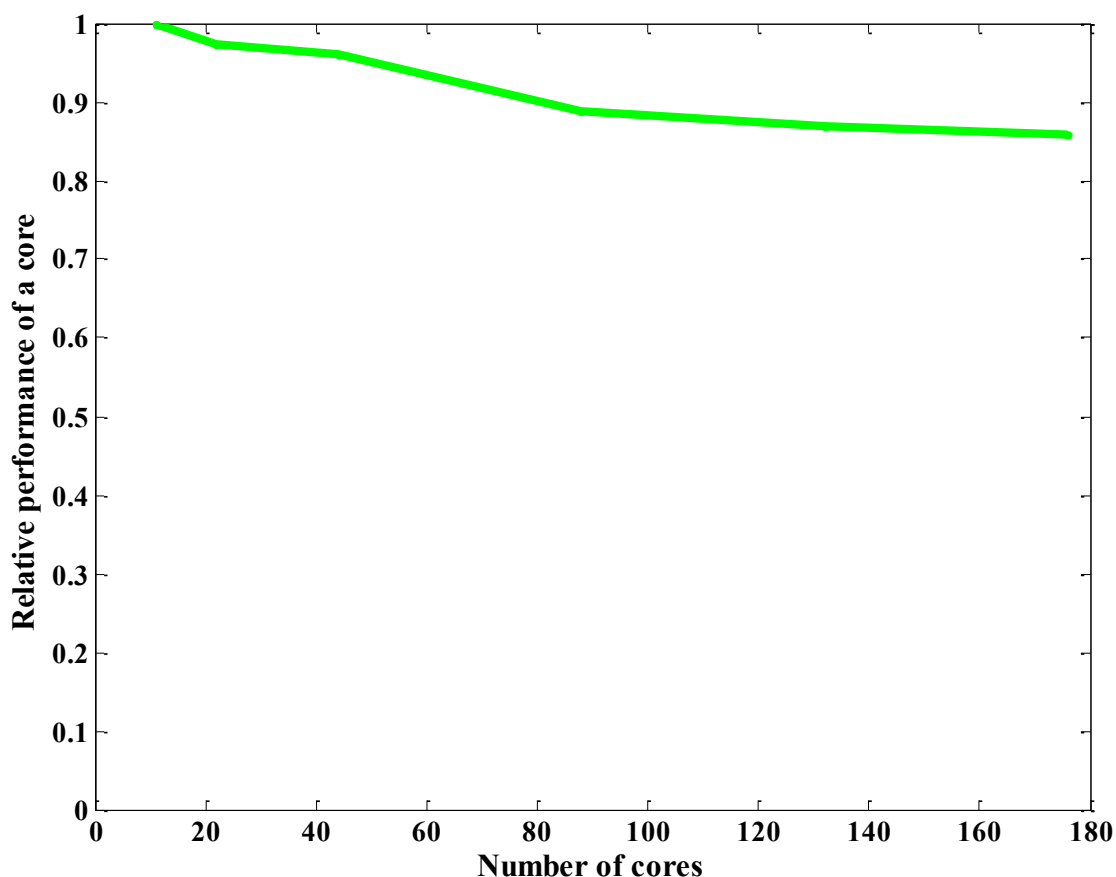


Рис. 3. Относительная производительность одного ядра в зависимости от числа используемых ядер

На рис. 3 показана зависимость относительной производительности одного ядра от числа используемых ядер, то есть эффективность использования процессоров. График на рис. 3 показывает, что с ростом числа используемых ядер эффективность использования процессоров уменьшается, но стабилизируется.

§7. Численные эксперименты

Правильность работы кода была проверена на одномерных тестах и сравнением с результатами расчетов двумерного кода.

Для проверки правильности работы кода и модели при расчете трехмерных задач были проведены численные эксперименты, в которых решалась следующая задача.

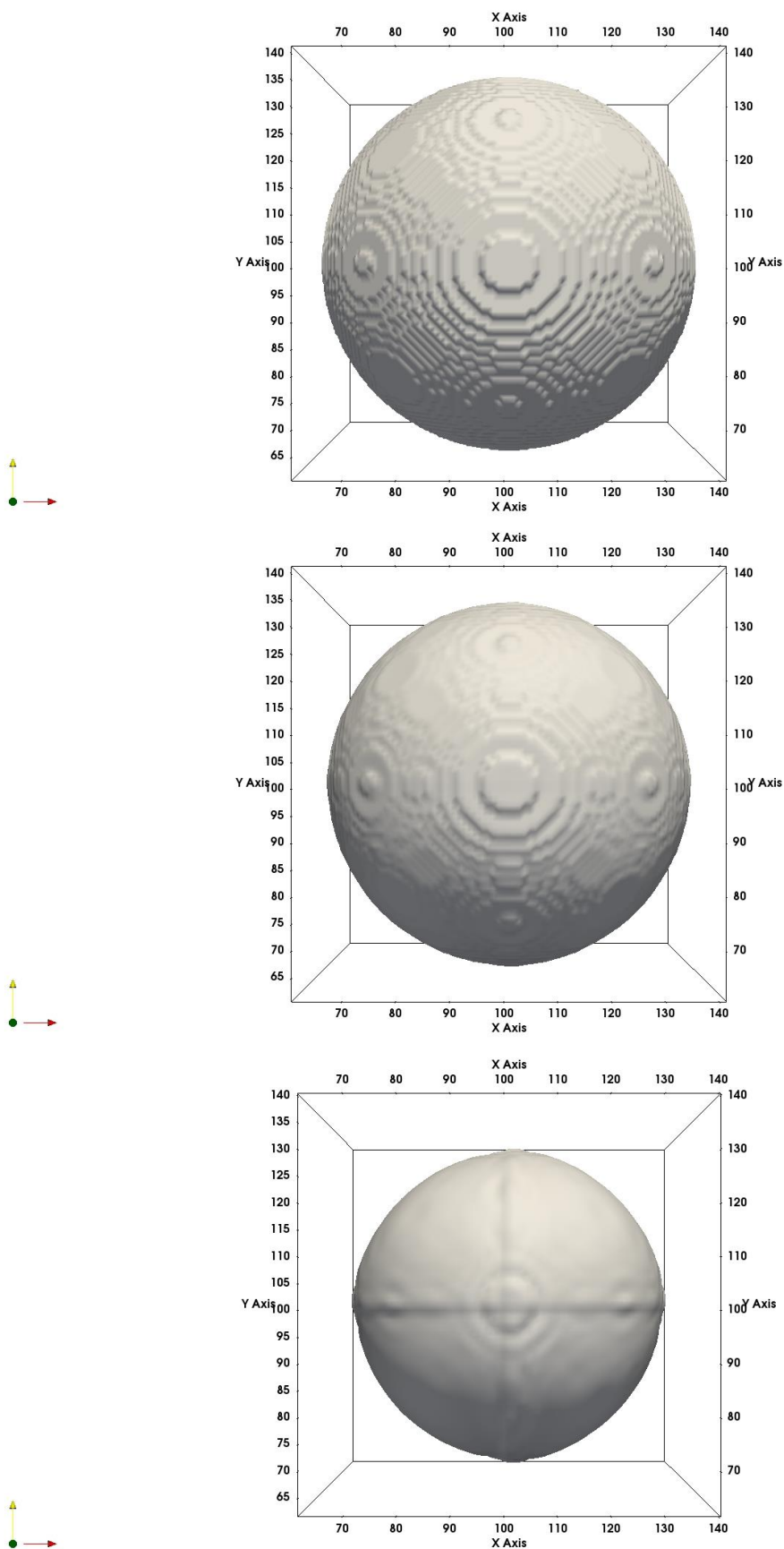


Рис. 4–6. Размеры пузырька в различные моменты времени

В начальный момент времени сферический пузырек пара покоится в окружении покоящейся жидкой фазы. Такой покой возможен только на линии насыщения. При $t=0$ внутри пузырька включается отток энергии (через правую часть). На границах расчетной области ставились «мягкие» граничные условия, которые в некотором приближении позволяют моделировать безграничность объема, заполненного жидкой фазой.

В расчетах использовались следующие значения параметров: температура $T=342^{\circ}\text{C}$, давление $P=15$ МПа.

Расчеты показали, что в результате понижения температуры в пузырьке, как и ожидалось, радиус пузырька стал уменьшаться. На рис. 4 – 6 показаны размеры пузырька в начальный момент времени, средний и в конце времени моделирования (расчет проводился на декартовой сетке по 201 ячейке в каждом направлении). В качестве границы пузырька принята поверхность постоянной плотности (изохора).

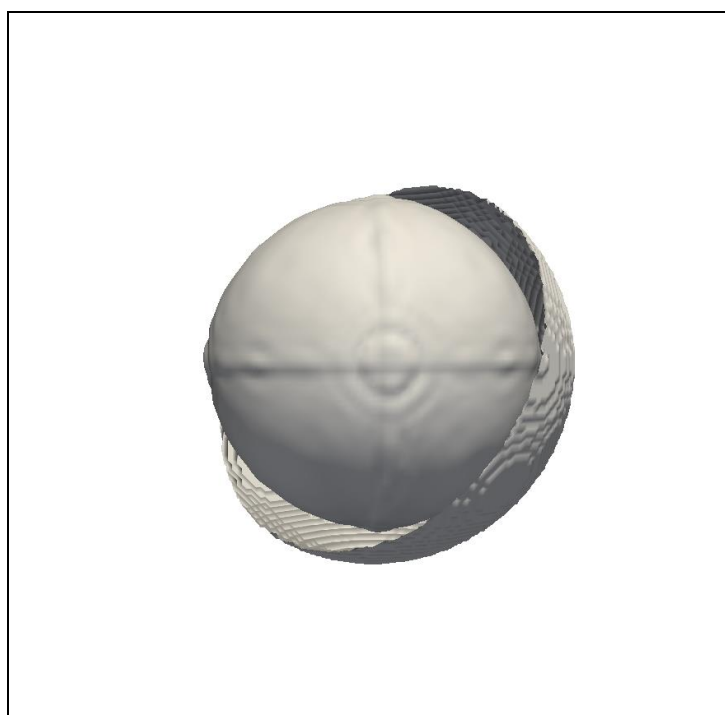


Рис. 7. Начальный и конечный размеры пузырька (поверхности изохоры)

На рис. 7 показаны начальный вид пузырька (половина сферы удалена) и конечный. Видимое перемещение внешней границы пузырька осуществляется, главным образом, за счет переноса этой поверхности потоком вещества (воды), устремившегося к центру пузырька в результате падения давления в охлаждаемом пузырьке.

На рис. 8 показаны поверхности постоянной плотности в средний момент времени, при этом половина внешней поверхности убрана (она соответствует

начальной границе пузырька). Видно, что в результате охлаждения в центре пузырька возникает и растет капелька сконденсировавшегося пара, то есть движение внутренней поверхности осуществляется навстречу двигающемуся к центру потоку вещества за счет фазового перехода.

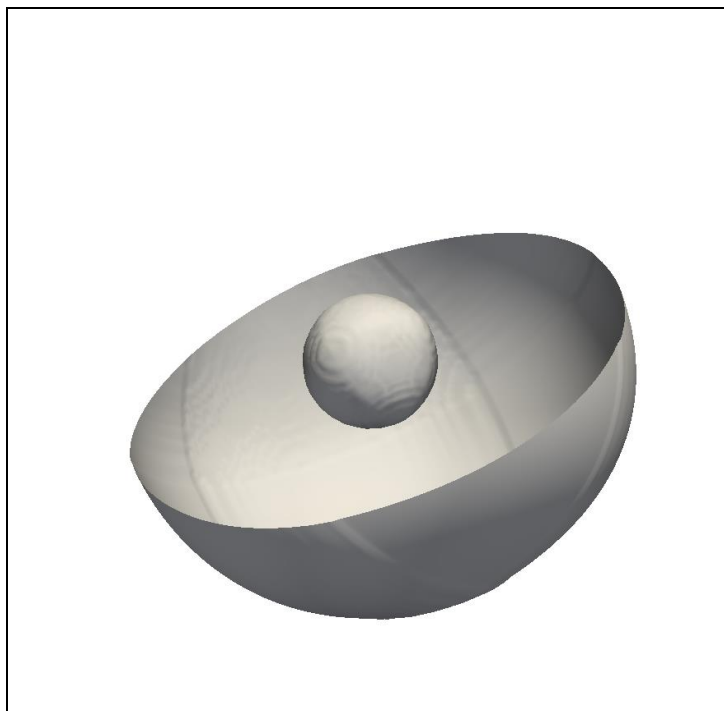


Рис. 8. Поверхности постоянной плотности в средний момент времени (половина внешней поверхности удалена)

Выводы

Численные эксперименты показывают, что представленное трехмерное обобщение разработанных ранее одномерных и двумерных моделей [6, 8 – 10] для описания двухфазных течений однокомпонентных жидкостей на основе единого для обеих фаз уравнения состояния и диффузного межфазного интерфейса позволяет качественно описывать трехмерные двухфазные течения воды. Математическая модель и разработанный код позволяют отслеживать перемещения интерфейсов, происходящих как за счет переноса вещества, так и за счет фазовых переходов. При этом расчетная сетка никак не связана с поверхностью (зоной) интерфейсов.

Разработанный параллельный код работает корректно и на исследованном количестве ядер показал практически линейный рост производительности расчетов с ростом числа используемых ядер. При этом наблюдается тенденция к выходу производительности одного ядра на константу.

Список литературы

1. Wendroff B. Two-fluid models: A critical survey.– REPORT of Los Alamos Scientific Laboratory, 1979.
2. Radvugin Yu. B. Non-hyperbolicity of the two-phase flow equations and Kelvin-Helmholtz instability. – Moscow: Keldysh Inst. Appl. Math., 1995, Preprint No. 125, 11 p.
3. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. I и II. – М.: Наука, 1987, 464 с. и 360 с.
4. Роулинсон Дж., Уидом Б. Молекулярная теория капиллярности: Пер. с англ.– М.: Мир, 1986.
5. Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. – М.: Физматлит, 2009, 312 с.
6. Зайцев Н.А., Критский Б.В., Рыков Ю.Г. Об одной двумерной модели расчета двухфазных потоков // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2014, № 86. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-86>.
7. Труды ИБРАЭ РАН. Вып. 14: Методы прямого численного моделирования в двухфазных средах. / Ред. Л. А. Большов. – М.: Наука, 2013, 197 с.
8. Рыков Ю.Г., Зайцев Н.А., Кабанов В.В., Лысов В.Г., Хабибуллин Р.Ф. *Возможная термодинамическая модель для использования в схеме прямого моделирования двухфазных потоков* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2012, № 40. 19 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-86>
9. Головизнин В.М., Зайцев Н. А., Кабанов В.В., Лысов В. Г., Рыков Ю. Г. *Об одном подходе к прямому моделированию двухфазных потоков* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2012, №73, 36 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-73>.
10. Зайцев Н. А., Критский Б.В. *Двумерная односкоростная модель для расчета двухфазных течений реальной воды с учетом эффектов поверхностного натяжения* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016, № 26. 24 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-26>.
11. IAPWS, Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for Thermodynamic Properties of Water and Steam (International Association for the Properties of Water and Steam, 2007), www.iapws.org.
12. Зайцев Н. А., Радвогин Ю.Б., Рыков Ю.Г. *Расчет нестационарного закрученного потока в соплах и трубах с использованием схем нового, 'явно-неявного', типа* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2004, № 52. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2004-52>
13. Harten A., Lax P., and van Leer B.. *On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws*. SIAM Review 25(1) (1983), 35–61.

Оглавление

Вводные замечания	3
§1. Уравнения движения.....	5
§2. Уравнение состояния	7
§3. Схема расчета шага по времени.....	9
§4. Решение гиперболической подзадачи	11
§5. Решение параболической подзадачи	12
§6. Проверка эффективности параллельного кода	13
§7. Численные эксперименты.....	15
Выводы	18
Список литературы.....	19