



**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

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Возможная термодинамическая модель для использования в схеме прямого моделирования двухфазных потоков / Ю.Г.Рыков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 40. 18 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-40>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М. В. КЕЛДЫША

Ю. Г. РЫКОВ, Н. А. Зайцев, В. В. Кабанов,
В. Г. Лысов, Р. Ф. Хабибуллин

ВОЗМОЖНАЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ
ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В СХЕМЕ ПРЯМОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУХФАЗНЫХ ПОТОКОВ

Москва, 2012

Ю. Г. Рыков, Н. А. Зайцев, В. В. Кабанов, В. Г. Лысов,
Р. Ф. Хабибуллин. *Возможная термодинамическая модель для использования
в схеме прямого моделирования двухфазных потоков.*

Аннотация. В препринте формулируется специальная термодинамическая модель, описывающая фазовые переходы в двухфазных системах и позволяющая рассчитывать эти явления «сквозным способом». А именно, на примере уравнения состояния Ван-дер-Ваальса определяются зависимости давления и температуры от плотности и внутренней энергии; при этом в области энергий и плотностей, попадающих в зону фазового перехода, применяется специальная аппроксимация, которая может учитывать неравновесные процессы. Далее решаются одномерные уравнения Эйлера с правой частью и с уравнением состояния, описываемым упомянутой выше термодинамикой. Продемонстрирована работоспособность указанной модели. Дальнейшее развитие предполагает учет теплопроводности, многомерную реализацию и использование для прямого моделирования двухфазных смесей, включая фазовые переходы, на многопроцессорных вычислительных комплексах высокой производительности. Также предполагается уточнение термодинамической модели.

Yu. G. Rykov, N. A. Zaitsev, V. V. Kabanov, V. G. Lysov,
R. F. Khabibullin. *Possible thermodynamic model for the usage in the schematics of
DNS for two-phase flows.*

Abstract. In the preprint specific thermodynamic model is formulated which describes phase transitions in two-phase systems and allows the incorporation into gas dynamic numerical calculations. Namely, on the example of Van der Waals equation of state the dependencies of the pressure and the temperature on density and internal energy are defined. At this in the range of densities and energies where the phase transition occurs the special approximation is applied. This approximation can take into account non-equilibrium processes. Further one solves 1D Euler equations with RHS and with the equation of state which is described by the above thermodynamics. The feasibility of such model is demonstrated. Further development proposes taking into account the heat conduction, multidimensional realization and the usage of DNS method for two-phase systems, including phase transitions, at multiprocessor supercomputers. The refinement of thermodynamic model is also anticipated.

Вводные замечания

Течения двухфазных сред (не говоря уже о многофазных средах) отличаются значительным многообразием и сложностью. В зависимости от характеристик потока, например, скорости, температуры, содержания фаз, реализуются различные так называемые *режимы* течения. Для каждого такого режима возникают свои характеристики теплообмена между фазами, соотношения между скоростями фаз и т.д. До недавнего времени промышленное моделирование двухфазных течений ограничивалось в основном одномерными моделями, которые возникали при помощи различных процессов усреднения из многомерных уравнений с использованием также концепции *многоскоростного континуума*. С этой концепцией и с основами теории движения многофазных сред можно познакомиться по книге [1]. Разнообразные подходы к процессу усреднения в удобной и достаточно краткой форме изложены в [2]. Более современное изложение всех указанных вопросов дано, например, в обширной монографии [3].

Описанный в процитированной выше литературе подход к моделированию многофазной среды можно резюмировать следующим образом. Выписываются законы сохранения массы, импульса и энергии для каждой фазы. Затем используются разного рода процессы усреднения для сведения задачи к меньшей размерности, при этом делаются соответствующие предположения о характере течения, которые иногда упоминаются, а иногда и нет. Наконец, используя экспериментальные данные и теоретические соображения относительно характера течения, выписываются члены, характеризующие межфазный обмен и разного рода межфазные силы. Здесь, как правило, и возникает понятие о режимах течения. Переход от одного режима к другому требует новой порции экспериментальных результатов и теоретических разработок. Таким образом, моделирование оказывается достаточно сложным процессом, включающим в себя массу допущений (проверить которые по отдельности часто не представляется возможным) и использующим большие объемы эмпирических зависимостей, причем объем работ, выделяемый при таком подходе на «настройку» под конкретную ситуацию, становится превалирующим фактором.

Поэтому с конца прошлого века предпринимались попытки построить другую идеологию моделирования многофазных сред. Соответствующие работы пытались, например, учитывать строение межфазной поверхности с помощью представления их как линий уровня некоторой дополнительной функции, вводить искусственные фазы для описания характерных перестроек режимов течения и т.п. В итоге, по нашему мнению, такие приемы оказались частными, позволяющими описывать только очень ограниченные ситуации – но они показали возможность существования новых подходов к проблемам многофазного течения. Примерно в то же время сформировался еще один подход, который в перспективе может стать полноценной и достаточно общей именно методологией, – *метод прямого моделирования*. Этот метод возник

при попытках рассчитать течения, описываемые уравнениями Навье-Стокса, таким образом, чтобы не использовать модели турбулентности. Это возможно только при расчетах с очень высокой степенью разрешения (т.е. очень мелкой сеткой). С появлением и развитием многопроцессорных вычислительных комплексов эта задача становится все более и более доступной. Такой же подход можно применить и к многофазной среде: при очень мелкой сетке в каждой расчетной точке будет присутствовать лишь одна фаза, например, либо газ, либо жидкость. Течение будет подчиняться обычным уравнениям газовой динамики, однако уравнение состояния должно теперь учитывать возможность фазового перехода.

В предлагаемом препринте будет описано возможное уравнение состояния на основе уравнения типа Ван-дер-Ваальса, учитывающее наличие фазовых переходов, содержащее в себе потенциал для описания неравновесных процессов и позволяющее осуществлять сквозной расчет без специального выделения областей с большими градиентами. Отметим, что здесь мы не рассматриваем проблему специального описания межфазной поверхности, в наших расчетах она моделируется областью больших градиентов плотности. Для подхода прямого моделирования детальный учет поведения межфазной поверхности возможен с помощью введения в уравнение состояния градиентов плотности – этот способ был, вообще говоря, отмечен еще Ван-дер-Ваальсом [4]. Однако, эта теория является достаточно сложной, целью же предлагаемого препринта является продемонстрировать возможность качественного описания некоторых явлений, происходящих в двухфазной среде, на основе обычного односкоростного континуума. Мы сконцентрируемся в основном на уравнении состояния и модельных расчетах. Детальные описания гидродинамических явлений будут приведены в последующих публикациях.

§1. Описание термодинамической модели

Займемся рассмотрением двухфазных смесей, то есть среды, допускающей наличие двух фаз, которые условно назовем газом (фаза со сравнительно небольшой плотностью) и жидкостью (фаза со сравнительно большой плотностью). При этом мы хотим рассматривать континуум сплошной среды как односкоростной, то есть в каждой точке, строго говоря, наблюдается только одна фаза: жидкость или газ. Пока остановимся на такой картине, чуть позднее она будет уточнена. Как известно, в описанной ситуации удобно применять кубические уравнения состояния, простейшим из которых является уравнение состояния Ван-дер-Ваальса

$$P = \frac{RT}{v - B} - \frac{A}{v^2}, \quad (0.1)$$

где здесь P – давление (Н/м^2), v – молярный объем ($\text{м}^3/\text{моль}$), T – температура (К), $R = 8,3144 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$ – универсальная газовая постоянная, A, B – некоторые размерные константы, характеризующие действие

межмолекулярных сил. Широко распространен следующий способ задания постоянных A и B через критические параметры вещества $P_{crit}, v_{crit}, T_{crit}$ (критическими параметрами являются такие величины давления, объема и температуры, при которых теряется различие между газом и жидкостью, и образуется так называемый флюид):

$$A = 3P_{crit} v_{crit}^2 = 27R^2 T_{crit}^2 / (64P_{crit}); B = v_{crit} / 3 = RT_{crit} / (8P_{crit}). \quad (0.2)$$

Таким образом, величины A и B в формуле (0.1) и соответственно их размерности берутся в соответствии с формулой (0.2) используя данные о критическом состоянии вещества. Сразу отметим, что уравнение Ван-дер-Ваальса (0.1) плохо отражает реальные термодинамические свойства веществ вдали от критической точки и взято здесь нами только как модельное уравнение из соображений простоты. Однако на качественном уровне это уравнение правильно отражает основные явления, происходящие в двухфазных смесях (на том уровне детализации, который нас сейчас интересует). Кроме того, гидродинамические расчеты мы будем демонстрировать именно в окрестности критической точки.

Запишем теперь уравнение состояния, включающее в себя удельный объем V (м³/кг), являющийся обратной величиной к плотности ρ , $V = 1/\rho$. Для этого перепишем (0.1) в следующем виде

$$P = \frac{\frac{R}{M} \cdot T}{\frac{v}{M} - \frac{B}{M}} - \frac{\frac{A}{M^2}}{\left(\frac{v}{M}\right)^2}, \quad (0.3)$$

где M (кг/моль) – молекулярный вес. Тогда отношение v/M и есть V , и формула (0.3) принимает вид

$$P = \frac{\bar{R}T}{V - b} - \frac{a}{V^2}, \quad (0.4)$$

где $\bar{R} = R/M$ Дж/(кг·К), $a = A/M^2$ и $b = B/M$ с соответствующими размерностями. При этом давление получается в паскалях (н/м²), для работы в более крупных единицах, связанных с величиной атмосферного давления, следует получившуюся величину разделить на нормировочный коэффициент порядка 10^5 .

При фиксированных величинах давления P и температуры T из (0.4) следует, что для величины V получается кубическое уравнение, которое, вообще говоря, может иметь либо один, либо три действительных корня. В той области параметров, где (0.4) имеет три действительных корня, возможен фазовый переход, то есть резкое изменение плотности субстанции (например, переход воды из жидкости в пар при атмосферном давлении и 100⁰С). Этот процесс фазового превращения необходимо учитывать при расчете двухфазного потока методом прямого моделирования. Поскольку такой расчет будет по существу сквозным, уравнение (0.4) должно быть модифицировано. Как мы увидим, такая модификация требует привлечения некоторого неравновесного механизма фазового перехода. В рамках

настоящей работы мы не будем глубоко вдаваться в этот вопрос (чтобы не привлекать обширнейшую область неравновесной термодинамики), а только отметим в соответствующем месте его важность и используем для его решения простейшие соображения.

Пусть ε обозначает удельную внутреннюю энергию вещества. Наша термодинамическая модель будет построена, если мы определим функции давления и температуры от плотности и внутренней энергии (т.е. функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$) во всем доступном диапазоне параметров. Имеет место

известное термодинамическое соотношение $T \frac{\partial P}{\partial T} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial V} + P$, отсюда,

используя (0.4), получим выражение для внутренней энергии $\varepsilon = \int C_V(T) dT - \frac{a}{V}$, где $C_V(T)$ – вообще говоря, переменная теплоемкость

при постоянном объеме. Значит, получаем следующие термодинамические формулы

$$\varepsilon = \int_{T(\rho, \varepsilon)} C_V(r) dr - a \cdot \rho; P(\rho, \varepsilon) = \frac{\bar{R} \cdot T(\rho, \varepsilon)}{1/\rho - b} - a \cdot \rho^2. \quad (0.5)$$

Однако формулы (0.5) справедливы не во всей физически допустимой области $0 < \rho < 1/b, \varepsilon > 0$. В области фазового перехода, к описанию которой мы сейчас перейдем, ситуация изменится.

Для определения фазового равновесия необходимо вычислить химический потенциал. Известно (см., например, [5]), что химический потенциал μ может быть получен по следующей формуле $\mu = \frac{\partial \varepsilon(S, V, N)}{\partial N}$,

где S – это энтропия, N – число частиц в системе. Для вычислений поступим следующим стандартным образом. Будем сначала считать, что число частиц в системе постоянно и найдем функцию $\varepsilon(S, V)$. А именно, в основное термодинамическое тождество $d\varepsilon = TdS - PdV$ подставим выражение для P

из (0.4) и выражение $\varepsilon = \int C_V(T) dT - \frac{a}{V}$. Тогда получим

$$C_V(T) dT = TdS - \frac{\bar{R}T}{V-b} dV, \quad \text{отсюда вытекает соотношение}$$

$$\int_{T(S, V)} \frac{C_V(r)}{r} dr = S - \bar{R} \ln(V-b).$$

Если считать $C_V(T)$ постоянной, то получим $T(S, V) = C_0 \cdot e^{S/C_V} \cdot (V-b)^{-\bar{R}/C_V}$, где C_0 – некоторая нормировочная константа. Зная $T(S, V)$, из основного термодинамического тождества получаем $\varepsilon(S, V) = C_0 \cdot C_V \cdot e^{S/C_V} \cdot (V-b)^{-\bar{R}/C_V} - a/V$. Далее, используя свойство

однородности, можно написать $\varepsilon(S, V, N) = N\varepsilon(S/N, V/N, 1)$ (см. опять [5]).

$$\text{Тогда } \mu\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}\right) = \frac{\partial \varepsilon(S, V, N)}{\partial N} = \varepsilon - \frac{\partial \varepsilon}{\partial S} \cdot \frac{S}{N} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial V} \cdot \frac{V}{N}$$

Отсюда $\mu(S, V) = T(S, V) \cdot \left[C_V - S + \frac{\bar{R}V}{V-b} \right] - \frac{2a}{V}$. Далее, выражая S через T и V , можно получить химический потенциал в следующей форме

$$\mu = \chi(T) + V \left(\frac{\bar{R}T}{V-b} - \frac{a}{V^2} \right) - \bar{R}T \ln(V-b) - \frac{a}{V},$$

где χ – некоторая функция, зависящая только от температуры. При фазовом переходе химические потенциалы фаз должны быть равными. Учитывая, что при этом остаются постоянными температура и давление, а меняется только фазовый объем, получаем следующее условие равновесия при данных P и T и изменении объема от $V_1(P, T)$ до $V_2(P, T)$

$$\left(\bar{R}T \ln(V-b) + \frac{a}{V} - PV \right) \Big|_{V_1}^{V_2} = 0. \quad (0.6)$$

Заметим, что формула (0.6) представляет собой не что иное, как известное правило Максвелла для фазового перехода

$$\int_{V_1}^{V_2} P(V, T) dV = P \cdot (V_2 - V_1). \quad (0.7)$$

Формулу (0.7) можно получить и в общем случае не постоянной $C_V(T)$. Заметим, что химический потенциал мы получили в форме $\mu(S, V) = \varepsilon - \frac{\partial \varepsilon}{\partial S} \cdot S - \frac{\partial \varepsilon}{\partial V} \cdot V = \varepsilon - TS + PV$, принимая во внимание основное термодинамическое тождество. При фазовом переходе давление и температура остаются постоянными, т.е. $d(\varepsilon - TS) = -PdV$ и $(\varepsilon - TS) \Big|_{V_1}^{V_2} = - \int_{V_1}^{V_2} P dV$. Отсюда сразу следует формула (0.7).

Теперь мы можем записать термодинамические формулы, справедливые во всей физически допустимой области изменения независимых переменных. Определим функции $V_1(P, T)$ и $V_2(P, T)$ как наименьший и наибольший корень уравнения (0.4) при фиксированных P и T . Из уравнения (0.7), подставив туда $V_1(P, T)$ и $V_2(P, T)$, найдем линию насыщения $P_{\text{насыщения}}(T)$. Пусть $\rho_1(P, T) = 1/V_1(P, T)$ и $\rho_2(P, T) = 1/V_2(P, T)$. Тогда искомые функции $T(\varepsilon, \rho)$, $P(\varepsilon, \rho)$ задаются следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 P, T \text{ задаются формулами (1.5) вне области,} \\
 \text{ограниченной параметрически заданными кривыми} \\
 \rho = \rho_1(T) \equiv \rho_1(P_{\text{насыщения}}(T), T), \varepsilon = \varepsilon_1(T) \equiv C_{V1}T - a\rho_1(T), \\
 \rho = \rho_2(T) \equiv \rho_2(P_{\text{насыщения}}(T), T), \varepsilon = \varepsilon_2(T) \equiv C_{V2}T - a\rho_2(T); \\
 \text{внутри указанной области } T \text{ и } P = P_{\text{насыщения}}(T) \\
 \text{постоянны на прямых, соединяющих точки} \\
 (\rho_1(T), \varepsilon_1(T)) \text{ и } (\rho_2(T), \varepsilon_2(T)).
 \end{array} \right. \quad (0.8)$$

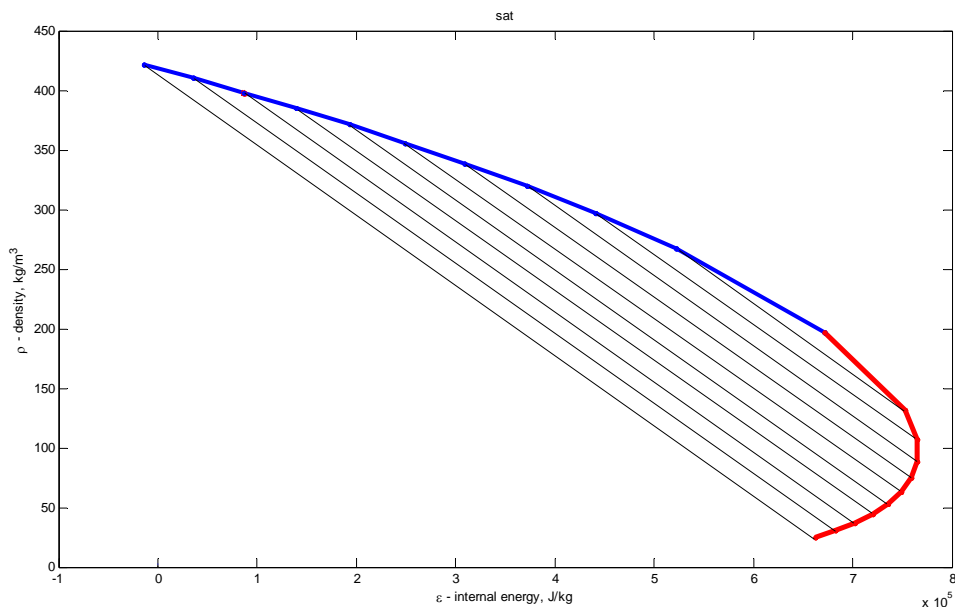


Рисунок 1. Линии уровня $P(\varepsilon, \rho)$ и $T(\varepsilon, \rho)$ в двухфазной области.

Формулы (0.8) описывают термодинамические величины в зоне двухфазности (см. Рисунок 1) наиболее простым и естественным способом с математической точки зрения. Поэтому приведенное ниже общее тестирование модели опирается на формулы (0.8), поскольку цель тестирования – продемонстрировать принципиальную работоспособность модели. На самом деле, фактически, в зоне двухфазности задается некоторый неравновесный механизм, который, вообще говоря, должен заключать в себе какую-нибудь физическую реальность.

Приведем пример такого физически оправданного механизма на основе концепции локального равновесия. Будем считать, что фазовый переход совершается путем достаточно быстрой (но все же медленной по сравнению со временем установления локального равновесия) смены последовательности равновесных состояний смеси жидкости и газа. А именно, фиксируем некоторые значения $P = P_0$, $T = T_0$ на кривой насыщения (т.е. кривой, на

которой происходит фазовый переход). Пусть M_1, V_1, v_1 и M_2, V_2, v_2 - массы, удельные объемы и фактические объемы для жидкости и газа соответственно, а M, V, v - такие же величины для суммарной смеси. Смешаем жидкость и газ в массовом соотношении $\alpha : 1 - \alpha$. Полученная смесь будет находиться в термодинамическом равновесии, поскольку химические потенциалы фаз равны (мы находимся на кривой насыщения). Тогда получим

$$\begin{aligned} M_1 &= \alpha M; M_2 = (1 - \alpha)M; v_1 = M_1 V_1; v_2 = M_2 V_2; v = v_1 + v_2; \\ V &= \frac{v}{M} = \frac{v_1 + v_2}{M_1 + M_2} = \frac{M_1 V_1 + M_2 V_2}{M_1 + M_2} = \alpha V_1 + (1 - \alpha) V_2 \end{aligned} \quad (0.9)$$

Отметим, что для насыщенности жидкой фазы s_1 получается следующая формула

$$s = \frac{v_1}{v} = \frac{v_1}{v_1 + v_2} = \frac{M_1 V_1}{M_1 V_1 + M_2 V_2} = \frac{\alpha V_1}{\alpha V_1 + (1 - \alpha) V_2}.$$

Формула, аналогичная формуле для V в (0.9), получается и для удельной внутренней энергии ε

$$\varepsilon = \alpha \varepsilon_1 + (1 - \alpha) \varepsilon_2. \quad (0.10)$$

То есть, физически более естественным было бы представлять термодинамические функции в координатах (V, ε) , а не в координатах (ρ, ε) . Тогда в координатах (V, ε) на прямых, соединяющих точки (V_1, ε_1) и (V_2, ε_2) , давление и температура были бы постоянными и равными P_0 и T_0 , это следует из формул (0.9), (0.10).

Тогда в представлении (ρ, ε) правильно было бы заполнять область двухфазности не прямыми, а гиперболами. Однако это значительно усложнит вычислительный процесс, поэтому на данном этапе мы будем пользоваться формулами (0.8).

В дальнейшем предполагается использовать различные неравновесные механизмы, например, известную модель Кана-Хилларда [6] развития зародышей. Конечно, такое многомасштабное моделирование потребует использования очень мелких сеток и расчетов на многопроцессорных системах, в том числе и гибридных.

Сделаем еще одно замечание. В приведенных ниже тестовых расчетах величину C_V будем считать постоянной, эта постоянная, вообще говоря, будет различной для жидкой и газовой фаз – C_{V_1} и C_{V_2} . Также будем пользоваться более простыми формулами (0.8). Нас будет интересовать вычисление энтропии S в области двухфазности. На границах этой области энтропия вычисляется по однофазным формулам $S(\rho, T) = C_{Vi} \ln T + \bar{R} \ln(1/\rho - b) + C_i$, где $i = 1, 2$ и C_i – некоторые константы. Рассчитаем изменение энтропии вдоль прямой, соединяющей точки $(\rho_1(T), \varepsilon_1(T))$ и $(\rho_2(T), \varepsilon_2(T))$. На этой прямой величины P и T постоянны. Тогда из основного термодинамического

тождества вдоль указанной прямой в области существования двухфазной смеси имеем (C – некоторая постоянная)

$$dS = \frac{1}{T}d\varepsilon + \frac{P}{T}dV = \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\rho_1 - \rho_2} - \frac{P}{\rho^2} \right) d\rho; S = \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\rho_1 - \rho_2} \rho + \frac{P}{\rho} \right) + C.$$

Выясним, при каких условиях может быть обеспечена непрерывность энтропии. В этом случае должны быть выполнены равенства (при $i = 1, 2$)

$$C_{Vi} \ln T + \bar{R} \ln(1/\rho_i - b) + C_i = \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\rho_1 - \rho_2} \rho_i + \frac{P}{\rho_i} \right) + C.$$

Отсюда

$$\left\{ C_{Vi} \ln T + \bar{R} \ln(1/\rho_i - b) + C_i - \frac{1}{T} \cdot \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\rho_1 - \rho_2} \rho_i + \frac{P}{\rho_i} \right) \right\}_{i=1}^{i=2} = 0.$$

Используя формулу (0.6) равенства химических потенциалов при термодинамическом равновесии, приходим к тождеству

$$(C_{V2} - C_{V1}) \ln T + (C_2 - C_1) - \frac{1}{T} \left(a + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\rho_1 - \rho_2} \right) (\rho_2 - \rho_1) = 0.$$

Учитывая формулы (0.5) для энергии ε , окончательно получим

$$(C_{V2} - C_{V1})(\ln T - 1) + (C_2 - C_1) = 0.$$

Отсюда ясно, что если предполагать теплоемкости C_{Vi} не зависящими от температуры T , то для непрерывности энтропии необходимо $C_{V1} = C_{V2}$. То есть в будущем следует рассматривать теплоемкость как зависящую от температуры.

Приведем здесь формулы для вычисления кривых насыщения, а также давления и скорости звука, как функций (ρ, ε) .

Удельные объемы фаз V_1 и V_2 находятся по точной формуле. Подробнее, кубическое уравнение относительно V имеет вид:

$$V^3 - \left(b + \frac{\bar{R}T}{P} \right) V^2 + \frac{a}{P} V - \frac{ab}{P} = 0. \quad (1.11)$$

Введём некоторые обозначения:

$$B_2 = - \left(b + \frac{\bar{R}T}{P} \right), \quad B_1 = \frac{a}{P}, \quad B_0 = \frac{-ab}{P};$$

$$q = \frac{(B_2^2 - 3B_1)}{9}, \quad r = \frac{(2B_2^3 - 9B_1B_2 + 27B_0)}{54}, \quad (1.12)$$

$$\Delta = q^3 - r^2; \quad \phi = \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{r}{\sqrt{q^3}} \right).$$

Если $\Delta > 0$, то уравнение (1.11) имеет три различных вещественных корня:

$$\begin{aligned}
y_1 &= -2\sqrt{q} \cos(\phi) - \frac{B_2}{3}, \\
y_2 &= -2\sqrt{q} \cos\left(\phi + \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{B_2}{3}, \\
y_3 &= -2\sqrt{q} \cos\left(\phi - \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{B_2}{3}.
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Численные расчёты показывают, что меньшему корню соответствует первая формула, большему – вторая. Таким образом, для V_1 и V_2 справедливы формулы:

$$\begin{aligned}
V_1 &= -2\sqrt{q} \cos(\phi) - \frac{B_2}{3}, \\
V_2 &= -2\sqrt{q} \cos\left(\phi + \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{B_2}{3},
\end{aligned} \tag{1.14}$$

где B_2, q, ϕ определены выше. При подстановке (1.14) в (1.7), при фиксированной температуре получается нелинейное уравнение относительно давления P . Численное решение этого уравнения позволяет находить точки кривой $P_{\text{насыщения}}(T)$, по которым кривую насыщения можно интерполировать. Точки параметрических кривых из соотношения (1.8) находятся подстановкой точек кривой $P_{\text{насыщения}}(T)$ в формулы (1.14). Таким образом, можно интерполировать кривые из соотношения (1.4).

Интерполировав кривые насыщения в плоскости (ρ, ε) , можно определять, попала ли произвольная точка (ρ_0, ε_0) в область применимости формул (1.5). Если это не так, т.е. точка попала в область между кривыми из (1.8), то для нахождения давления необходимо провести через неё прямую, соединяющую точки кривых с равными давлением и температурой. Общий вид такой прямой:

$$\varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\rho_1 - \rho_2} \rho_0 = \frac{\varepsilon_2 \rho_1 - \varepsilon_1 \rho_2}{\rho_1 - \rho_2}. \tag{1.15}$$

Напомним, что точка (ρ_0, ε_0) считается известной, а $\rho_{1,2} = \rho_{1,2}(T)$ и $\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_{1,2}(T)$ определены в соотношении (1.8). Таким образом, для фиксированных (ρ_0, ε_0) равенство (1.15) является нелинейным уравнением относительно температуры T . Уравнение (1.15) решается численно. По температуре и кривой насыщения восстанавливается давление.

Скорость звука c вычисляется исходя из следующего тождества:

$$c^2 = \frac{\partial P(\rho, \varepsilon)}{\partial \rho} + \frac{P}{\rho^2} \frac{\partial P(\rho, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial P(\rho, S)}{\partial \rho}. \tag{1.16}$$

В рассматриваемой области давление есть функция температуры, $P = P_{\text{насыщения}}(T)$:

$$c^2 = P'_T \frac{\partial T}{\partial \rho} + \frac{P}{\rho^2} P'_T \frac{\partial T}{\partial \varepsilon}. \quad (1.17)$$

Производную от давления найдём, исходя из предположения, что кривая насыщения интерполируется кусочно-линейной функцией:

$$P_{\text{насыщения}}(T) = a_n T + b_n, \quad (1.18)$$

$$P_{\text{насыщения}}(T)'_T = a_n.$$

Для нахождения производных от температуры воспользуемся тем, что точка (ρ, ε) лежит на прямой, соединяющей точки с равными давлением и температурой:

$$F \equiv \varepsilon + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\rho_1 - \rho_2} \rho - \frac{\varepsilon_2 \rho_1 - \varepsilon_1 \rho_2}{\rho_1 - \rho_2} = 0. \quad (1.19)$$

Здесь $\varepsilon_1 = \varepsilon(\rho_1, T)$, $\rho_1(P(T), T)$, $\varepsilon_2 = \varepsilon(\rho_2, T)$, $\rho_2(P(T), T)$. Согласно теореме о неявной функции:

$$T'_\varepsilon = -\frac{F'_\varepsilon}{F'_T}, \quad T'_\rho = -\frac{F'_\rho}{F'_T}. \quad (1.20)$$

Таким образом, можно найти скорость звука в области фазовых переходов.

§2. Описание гидродинамической модели

Рассматривается одномерное нестационарное движение невязкого газа, описываемого системой из трёх уравнений:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = G; \quad (2.1)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \rho \\ m \\ E \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u e + u p \end{pmatrix}.$$

Здесь используются следующие обозначения: u – скорость, p – давление, e – удельная полная энергия, ρ – плотность, G – вектор правых частей, x – координата, t – время.

Система (2.1) допускает запись в другом виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial x} = G, \quad (2.2)$$

$$A = \frac{\partial f}{\partial U} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 + P'_\rho & 2u + P'_m & P'_E \\ -u \frac{E + P}{\rho} + u P'_\rho & u P'_m + \frac{E + P}{\rho} & u(1 + P'_E) \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Система (2.2) является гиперболической т.е. у матрицы (2.3) существует полный набор независимых собственных векторов. Собственные числа матрицы (2.3) имеют вид:

$$\lambda_1 = u - c, \lambda_2 = u, \lambda_3 = u + c. \quad (2.4)$$

Здесь $c = \left(\frac{\partial P(\rho, s)}{\partial \rho} \right)^{1/2}$ – скорость звука.

Собственные числа (2.4) определяют скорость и направление распространения возмущений. Собственным числам соответствуют левые собственные векторы:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \left(u^2 + \frac{c(u+c)}{P'_E} - \frac{E+P}{\rho}, \quad -u - \frac{c}{P'_E}, \quad 1 \right), \\ \varphi_2 &= \left(u^2 - \frac{E+P}{\rho}, \quad -u, \quad 1 \right), \\ \varphi_3 &= \left(u^2 - \frac{c(u-c)}{P'_E} - \frac{E+P}{\rho}, \quad -u + \frac{c}{P'_E}, \quad 1 \right); \end{aligned}$$

Описанная выше система решалась численно с помощью консервативной схемы первого порядка аппроксимации. Решение на следующем временном слое вычислялось с помощью «дивергентного замыкания»:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{h} [F_{i+1/2} - F_{i-1/2}] + \tau G_i^n.$$

Здесь $F_{i\pm 1/2}$ - величина, которая аппроксимирует значение потока в точке $(h \cdot (i \pm 1/2), \tau \cdot (n + 1/2))$, где h и τ - шаги по пространству и по времени соответственно. Величины $F_{i\pm 1/2}$ находятся следующим образом. Составим матрицу Φ , строками которой являются левые собственные вектора матрицы (2.3) и матрицу $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$. Также нам понадобятся матрицы $\sigma^+ = \frac{1}{2}(\text{sign } \Lambda + |\text{sign } \Lambda|)$, $\sigma^- = I - \sigma^+$, где I - единичная матрица. Формулы для нахождения потоков выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} F_{i+1/2} &= (\Phi^*)^{-1} \left[(\sigma^+)_{i+1/2} (\Phi F^+)_{i+1/2} + (\sigma^-)_{i+1/2} (\Phi F^-)_{i+1/2} \right], \\ (\Phi F^+)_{i+1/2} &= \Phi^* f_i, \quad (\Phi F^-)_{i+1/2} = \Phi^* f_{i+1}, \\ \Phi^* &= \frac{1}{2}(\Phi_i + \Phi_{i+1}), \quad \Lambda^* = \frac{1}{2}(\Lambda_i + \Lambda_{i+1}). \end{aligned}$$

§3. Предварительные расчеты, демонстрирующие работоспособность модели

В данном параграфе приведем модельные расчеты, предполагая справедливыми формулы (0.8), а также постоянство теплоемкости. Кроме того, в этом расчете для упрощения вычислений будем считать одинаковыми величины теплоемкости для жидкой и газовой фаз. Подобные предположения могут описывать поведение среды в окрестности критической точки. Кроме того, они предоставляют наиболее простые условия для расчета и проверки способности модели описывать само явление фазового перехода.

В расчетах использовались безразмерные величины. Давление, плотность и температура обезразмеривались по их значениям в критической

точке $P_{crit} = \frac{a}{27b^2}$, $\rho_{crit} = \frac{1}{3b}$, $T_{crit} = \frac{1}{R} \frac{8a}{27b}$, взятой для воды:

$a = 1706 \text{ Н} \cdot \text{м}^4 / \text{кг}^2$, $b = 0,0017 \text{ м}^3 / \text{кг}$, $\bar{R} = 461,5 \text{ Дж} / (\text{кг} \cdot \text{К})$. Уравнение Ван-дер-Ваальса для безразмерных величин выглядит так:

$$P = \frac{8T}{3V-1} - \frac{3}{V^2}$$

Внутренняя энергия обезразмеривается на величину P_{crit} / ρ_{crit} , тогда в безразмерных величинах

$$\varepsilon = \theta T - 3\rho,$$

где $\theta = 8,99$ - безразмерное значение теплоемкости для воды. Скорость обезразмеривается на $(P_{crit} / \rho_{crit})^{1/2}$.

Перейдем к демонстрации результатов численных экспериментов.

На отрезке $[0; 1]$ зададим начальные условия. Пусть распределение плотности и энергии постоянно: $\rho = 1,3394$, $\varepsilon = 4,8355$. Эти значения соответствуют жидкости вблизи кривой насыщения. Тогда $T(\rho, \varepsilon) = \frac{1}{\theta}(\varepsilon + 3\rho)$, $P(\rho, \varepsilon) = \frac{8T\rho}{3-\rho} - 3\rho^2$. Скорость полагаем равной нулю. На концах отрезка ставятся граничные условия: условие непротекания на левом конце и условие нулевого градиента на правом. В начальный момент времени к отрезку $[0; 1/5]$ начинает подводиться тепло по закону $Q(x, t) = 0,1 \cdot t \cdot (1 + \cos 5\pi x)$, при $t < 2$; и $Q(x, t) = Q(x, 2)$, при $t \geq 2$. Тогда $G = (0, 0, Q)^T$. Под действием правой части начнётся нагрев жидкости, который приводит к фазовому переходу.

Расчёты проводились на сетке с числом узлов $M = 400$ и числом Куранта равным 0,9. Расчёты велись до момента времени $t = 10$.

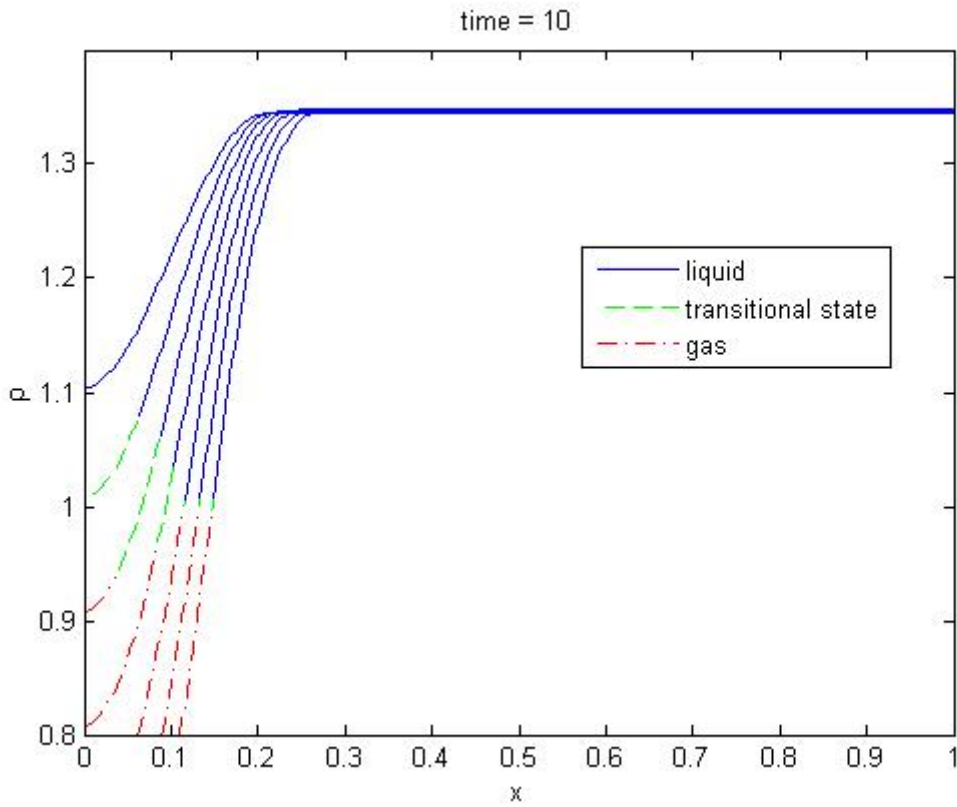


Рисунок 2. Плотность при $t=4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$.

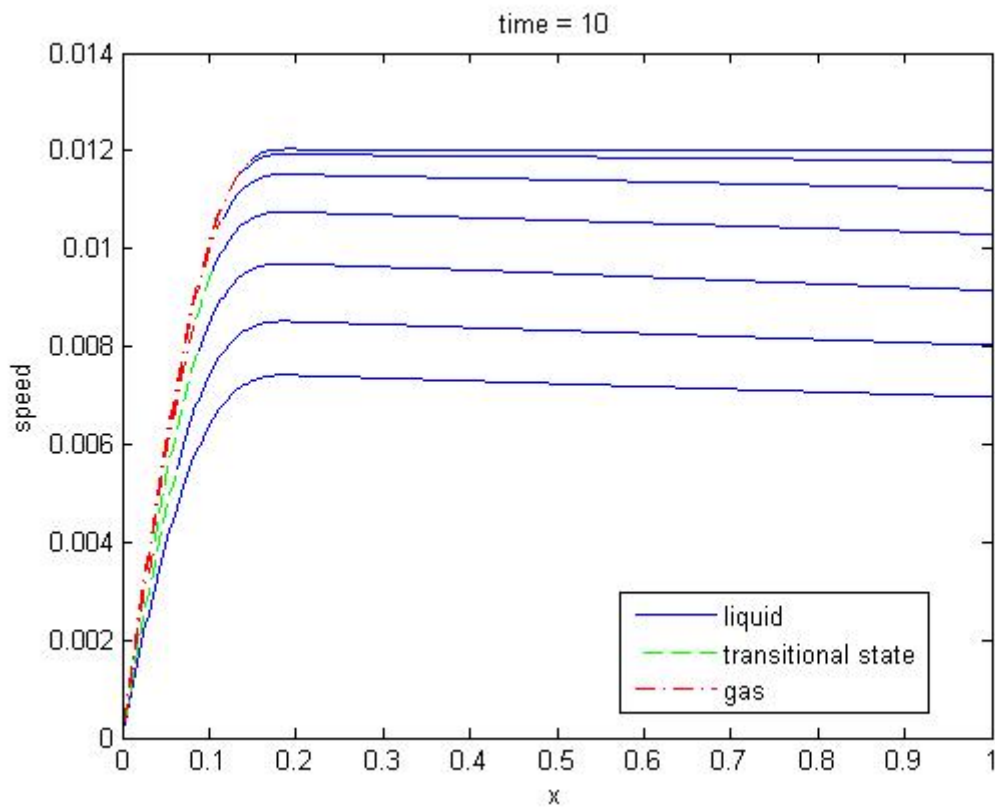


Рисунок 3. Скорость при $t=4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$.

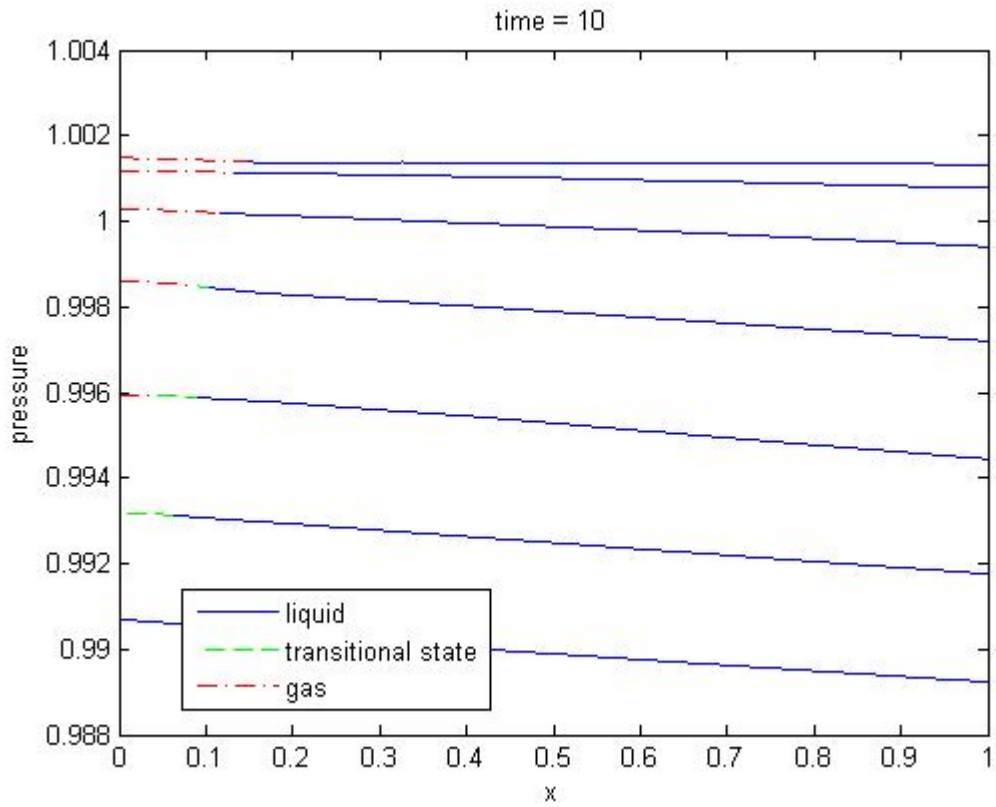


Рисунок 4. Давление при t=4, 5, 6, 7, 8, 9, 10.

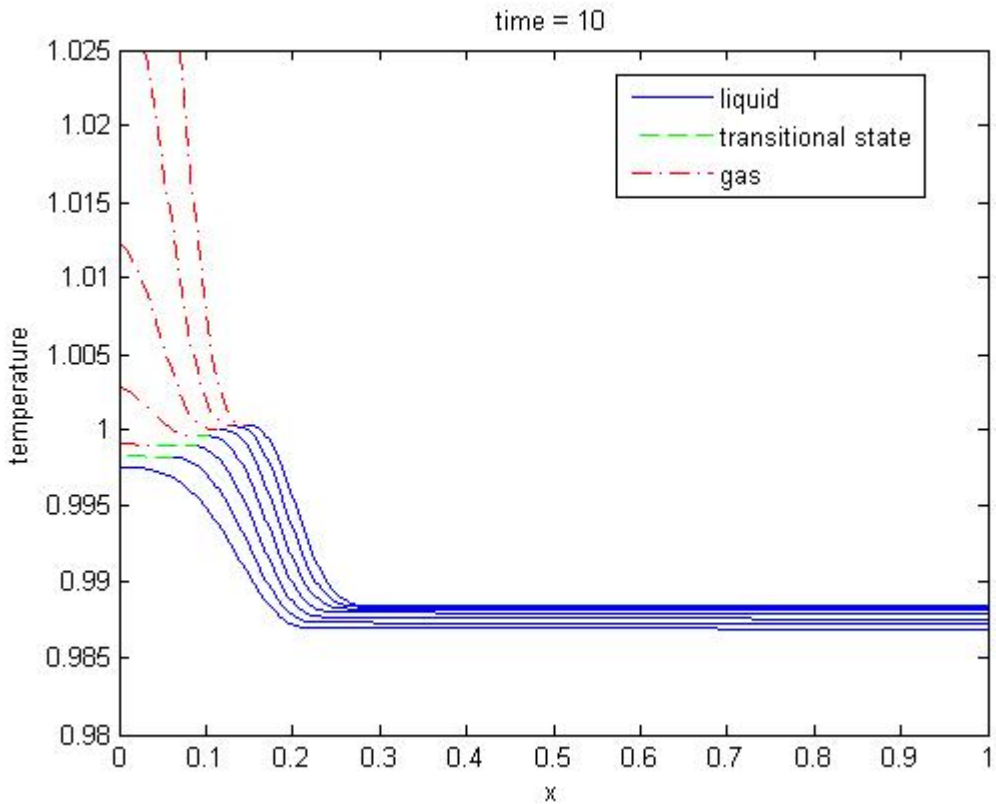


Рисунок 5. Температура при t=4, 5, 6, 7, 8, 9, 10.

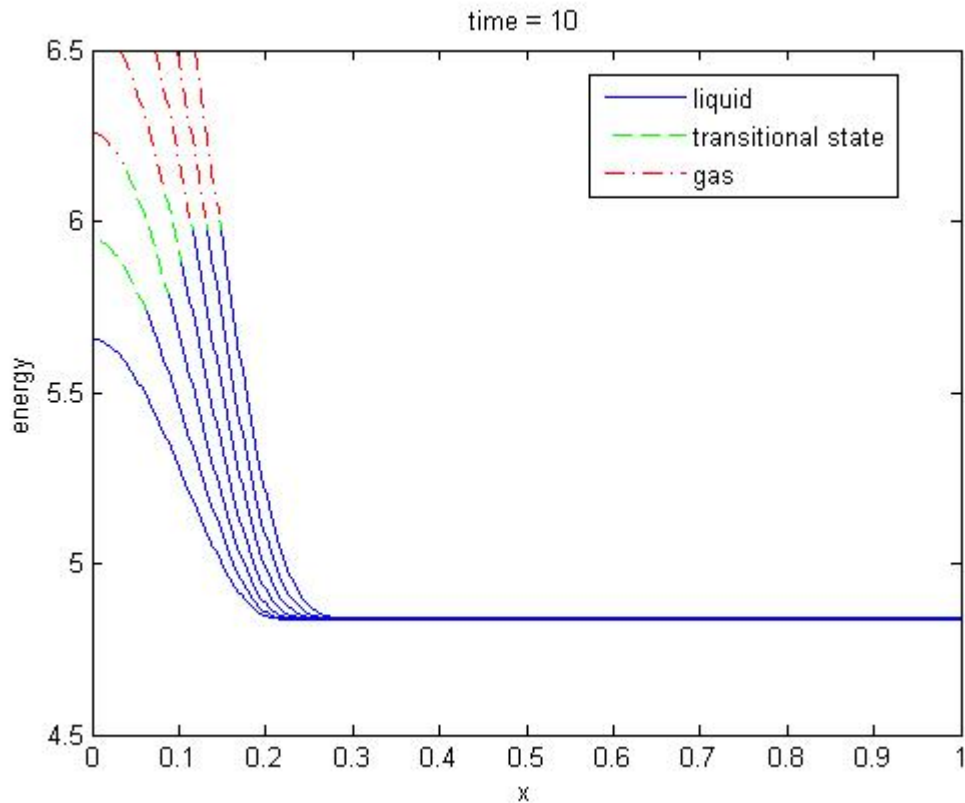


Рисунок 6. Внутренняя энергия при $t=4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$.

На рисунках Рисунок 2 – Рисунок 6 представлены графики искомым величин в моменты времени $t=4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$. Сплошная линия обозначает жидкую фазу, штрих-пунктирная – переходную и пунктирная – газовую. Интересно отметить, что температура точек, попавших в переходную область меняется слабо. Можно сказать, что это и означает, что идёт фазовый переход: приток тепла расходуется на изменение плотности и энергии. Эти слова можно проиллюстрировать графиком в переменных (T, P) . На рисунке 7 изображена фазовая диаграмма решения в момент времени $t=7$ в плоскости (T, P) и кривая насыщения. Кривая насыщения здесь проходит почти вертикально. Хорошо видно, что точки, попавшие в переходную область (изображены пунктиром) лежат строго на кривой насыщения.

Заклучение

В работе сформулирована специальная термодинамическая модель, описывающая фазовые переходы в двухфазных системах и позволяющая рассчитывать эти явления «сквозным способом». Продемонстрирована работоспособность предложенной модели.

Дальнейшее развитие предполагает учет теплопроводности, многомерную реализацию с целью использования для прямого моделирования двухфазных смесей, включая фазовые переходы, на многопроцессорных

вычислительных комплексах высокой производительности. Также предполагается уточнение термодинамической модели.

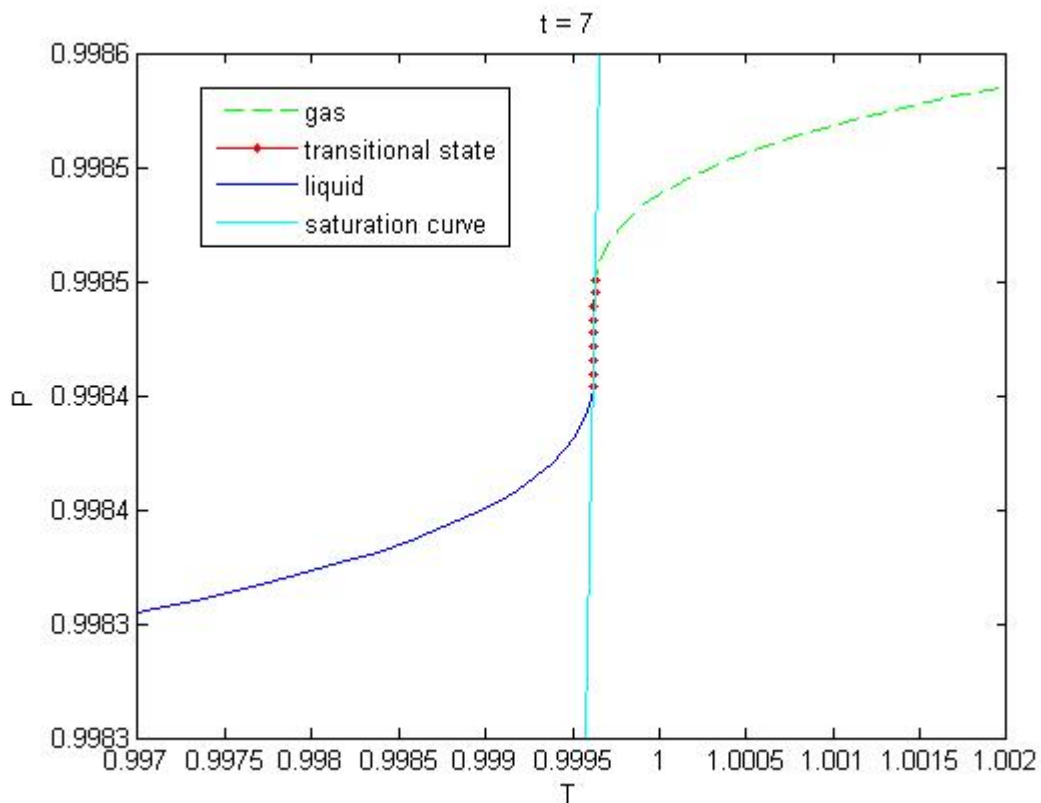


Рисунок 7. Фазовая диаграмма решения при $t=7$ и кривая насыщения.

Список литературы

- [1] Р.И. Нигматулин, *Динамика многофазных сред*, М.: Наука, 1987, 464 с.
- [2] H. B. Stewart, B. Wendroff, Two-phase flow: Models and methods, *J. Comp. Phys.*, **56**:3, 363-538 (1984).
- [3] N. Kolev, *Multiphase flow dynamics. Fundamentals*, Springer, 2005.
- [4] J. S. Rowlinson, Translation of J. D. van der Waals' "The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density", *J. Stat. Phys.*, **20**:2, 197-244 (1979).
- [5] И. П. Базаров, *Термодинамика*, М.: Физматлит, 1961.
- [6] J. W. Cahn, J. E. Hilliard, Free energy of a non-uniform system III: Nucleation in a two-component incompressible fluid, *J. Chemical Physics*, **31**, 688-699 (1959).