



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 73 за 2012 г.



Головизнин В.М., [Зайцев Н.А.](#),
Кабанов В.В., [Лысов В.Г.](#),
[Рыков Ю.Г.](#)

Об одном подходе к
прямому моделированию
двухфазных потоков

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Об одном подходе к прямому моделированию двухфазных потоков / В.М.Головизнин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 73. 36 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-73>

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

В. М. Головизнин, Н. А. Зайцев, В. В. Кабанов,
В. Г. Лысов, Ю. Г. Рыков

ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ПРЯМОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ
ДВУХФАЗНЫХ ПОТОКОВ

Москва — 2012

В. М. Головизнин, Н. А. Зайцев, В. В. Кабанов, В. Г. Лысов, Ю. Г. Рыков.
Об одном подходе к прямому моделированию двухфазных потоков

Аннотация. В препринте описана методология расчета двухфазных течений на масштабах локального равновесия. Представленная схематика расчета базируется на методе прямого моделирования и предназначена для использования на высокопроизводительных вычислительных комплексах (в перспективе - порядка одного эксафлопса). Модель основана на концепции односкоростного континуума, где фазы идентифицируются с помощью величины плотности среды. Также модель включает в себя уравнение состояния, основанное на уравнении типа Ван-дер-Ваальса, с возможностью фазовых переходов. При этом термодинамическая составляющая позволяет проводить сквозной расчет, и ее структура позволяет включать в рассмотрение различные неравновесные процессы. Гидродинамической основой являются уравнения Эйлера с учетом процессов теплопроводности. Продемонстрирована способность предложенной методологии реалистично описывать процессы фазового перехода, достаточно четко следить за границей раздела фаз и описывать процессы типа слияния пузырей. Предложенная методология в своей основе не зависит от размерности задач.

Ключевые слова: двухфазные течения, прямое численное моделирование, термодинамическая модель

V. M. Goloviznin, N. A. Zaitsev, V. V. Kabanov, V. G. Lysov, Yu. G. Rykov.
On some approach to direct numerical simulation of two-phase flows

Abstract. In the preprint a calculation methodology for the modeling of two phase flows at the scale of local equilibrium is presented. The described schematics is based on the DNS approach and is intended for the usage with the supercomputers (with the prospects of achieving of exaflops performance). The model is based on the usual concept of single-velocity continuum, where the phases differ in the density level. Also the model includes the EOS of Van der Waals type with the possibility to have the phase transition. At this such EOS allows performing the uniform calculations and including into the consideration various non-equilibrium processes. The Euler equations with heat conduction effects form the hydrodynamic background. It is demonstrated the capacity of proposed methodology to describe phase transitions realistically, to monitor the boundaries of phases' separation clearly and to follow the processes like bubbles merging. Also such methodology in its basics does not depend on the dimensionality of problems.

Key words: two-phase flows, direct numerical simulation, thermodynamic model

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 11-01-12082-офи_м, № 12-01-00203, № 12-01-33050 и поддержке ИБРАЭ РАН.

1. Вводные замечания

Целью настоящего препринта является формулировка и проверка принципиальной работоспособности некоторой модели двухфазной среды на масштабах локального равновесия. Вообще говоря, течения двухфазных сред отличаются значительным многообразием и сложностью. В зависимости от комбинации различных управляющих параметров, таких как скорость, температура, композиция фаз и т.п. характер течения может существенно меняться вместе с его структурой (по типу перехода ламинарного течения в турбулентное). То есть, с общей точки зрения, течение двухфазной среды можно представить как нестационарное, переключающееся с одного режима на другой. Воспроизведение в модели такого сложного объекта представляет значительные трудности.

До недавнего времени инженерные коды для расчета двухфазных течений основывались в основном на концепции многоскоростного континуума, уравнения для которого получались при помощи различных процессов усреднения. Эти уравнения требовали набора замыкающих эмпирических соотношений, который существенно зависел от большого количества внешних и внутренних параметров. Можно даже сказать, что замыкающие соотношения подгонялись под каждый конкретный набор экспериментов.

Положение дел в двухжидкостных моделях усугубляется еще и тем, что в обширных практически значимых областях параметров течений эти модели теряют гипереболичность и, следовательно, эволюционность. Поэтому в основном приходится ограничиваться одномерными моделями и грубыми сетками.

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 относительно гладко меняющимся функциям, 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, учитывающие взаимодействие фаз и теплообмен со стенками. Здесь, как правило, и возникает понятие о *режимах течения*. Описание смены одного режима на другой 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 преобладающим фактором.

В последнее время в связи с появлением высокопроизводительной вычислительной техники (в ближайшей перспективе ожидается достижение производительности в один эксафлопс) наряду с дальнейшим развитием и совершенствованием ставших уже классическими многоскоростных моделей все большее развитие получают более ресурсоемкие, но и более универсальные модели, опирающиеся на небольшое количество относительно универсальных эмпирических соотношений. Здесь мы имеем в виду так называемый метод прямого моделирования (DNS). (Этот метод возник при попытках рассчитать течения, описываемые уравнениями Навье-Стокса, таким образом, чтобы не использовать модели турбулентности.)

В большинстве моделей прямого моделирования течений двухфазных жидкостей так или иначе явно отслеживается положение границ, отделяющих области с жидкой и газообразной фазой (the step-function approach, the Volume of Fluid (VOF) method, the Level Set method, the Lattice Boltzmann method, the Front Tracking method и др.). Эта задача достаточно сложна и нарушает однородность алгоритма, что сильно понижает эффективность использования многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью, которые и являются безусловными лидерами по производительности вычислений.

В настоящем препринте используется одножидкостный подход без явного выделения межфазных границ, при котором в каждой точке течения среда находится в определенном состоянии и имеет определенную скорость. Движение среды подчиняется универсальным законам сохранения массы импульса и энергии. Эта система уравнений замыкается подходящими "уравнениями состояния", описывающими свойства среды для всех её состояний (для всех фаз). Выражение *уравнения состояния* здесь взято в кавычки, потому что на практике под ними могут подразумеваться не уравнения, а правила вычисления зависимых термодинамических функций через независимые, которые могут иметь вид формул, алгоритмов и таблиц.

Если уравнения состояния (УРС) заданы, то расчет двухфазных течений осуществляется подходящим методом сквозного счета, позволяющим рассчитывать области с большими градиентами, такими как межфазные интерфейсы, волны разрежения, пограничные слои и т.д. Алгоритм в этом случае является однородным, что помогает производить эффективное распараллеливание.

Таким образом, одним из ключевых моментов является разработка подходящего УРС. Оно может быть весьма сложным, в том числе учитывать неравновесность протекающих процессов. Однако большое количество задач может быть решено на основе равновесной термодинамики.

В качестве независимых термодинамических функций приняты плотность и удельная внутренняя энергия. При таком подходе нужно построить $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$ для всех возможных значений аргументов.

Одним из возможных способов решения этой задачи (он подробно рассмотрен в разделе 3) является следующий. Если известны УРС для чистых фаз, то для многофазных течений можно построить УРС путем рассмотрения объема, занятого частично равновесной жидкостью, частично паром. При изменении доли объёма, занятого жидкостью, от нуля до 1 получатся искомые функции для всех значений плотности и энергии.

Но для большинства практических задач детальное отслеживание формы изолиний P и T не должно иметь первостепенного значения. В настоящем препринте предложен способ построения УРС, в котором изолинии P и T являются прямыми, что позволит сократить время расчета УРС. Одной из задач настоящего препринта является проверка работоспособности такой термодинамической модели.

Отметим, что здесь не рассматривается проблема специального описания межфазной поверхности, в наших расчетах она моделируется областью больших градиентов плотности. Для подхода DNS детальный учет процессов в области межфазного интерфейса возможен с помощью введения в уравнение состояния градиентов плотности — этот способ был, вообще говоря, отмечен еще Ван-дер-Ваальсом [4]. Учет градиентов плотности представляет собой достаточно сложную и утонченную технику, см., например, [5] – [7]. Здесь подобный подход не рассматривается и не комментируется.

В качестве конкретного примера в настоящем препринте термодинамические построения производятся на основе уравнения состояния Ван-дер-Ваальса. На модельных задачах продемонстрирована возможность при сквозном расчете и без применения специальных средств довольно уверенно отслеживать границу раздела сред и ее эволюцию, описывать процессы типа слияния пузырей и т.п. Здесь рассмотрена простейшая постановка, которая может обеспечить нетривиальное поведение двухфазного континуума: одномерные уравнения Эйлера с учетом эффектов теплопроводности и фазовых переходов.

Общая постановка задач без труда переносится на двумерный и трехмерный случай, но при этом существенно усложняются гидродинамические явления. Многомерную реализацию представленной методологии предполагается развить в последующих публикациях. В дальнейшем также предполагается и усложнение термодинамической модели с помощью учета неравновесных процессов.

2. Общая схема построения термодинамических функций

В этом разделе представлен простой и относительно универсальный способ построения термодинамических функций для однокомпонентных сред, необходимых для прямого численного моделирования двухфазных течений, без явного выделения межфазных интерфейсов, основанный на предположении, что для чистых фаз все термодинамические функции известны.

В качестве независимых термодинамических функций используются плотность ρ и удельная внутренняя энергия ε . Как правило, в этом случае для замыкания задачи необходимо знать функции давления и температуры от плотности и внутренней энергии (т.е. функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$) во всем доступном диапазоне изменения параметров. Континуум сплошной среды рассматривается как односкоростной, в каждой точке которого элементарный объем находится в состоянии, полностью определяемом плотностью и внутренней энергией. Это существенное предположение, так как, вообще говоря, для многокомпонентной среды модель должна учитывать концентрации компонент, для учета межфазных сил должен быть учтен градиент плотности и т.д. Однако здесь рассматривается простой случай, который, тем не менее, может иметь широкую область применимости.

Пусть имеется среда, допускающая наличие двух фаз, которые условно называются паром (фаза со сравнительно небольшой плотностью) и жидкостью (фаза со сравнительно большой плотностью). И пусть в плоскости (P, T) имеется кривая насыщения $P_{\text{насыщения}}(T)$, отделяющая область параметров, при которых среда находится в газовой фазе, от области, в которой среда находится в жидкой фазе (см. рис. 1). И пусть также выше и ниже кривой насыщения все необходимые термодинамические функции также известны, в том числе функции $\rho_1(P, T)$ и $\varepsilon_1(P, T)$ для жидкой фазы, функции $\rho_2(P, T)$ и $\varepsilon_2(P, T)$ для газовой фазы.

Однако нужны обратные функции: $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$.

На плоскости (ε, ρ) кривая насыщения представлена уже двумя линиями, соответствующими жидкой и газовой фазам, на Рис. 2 они показаны синей и красной линией соответственно. Параметрически эти линии задаются следующими формулами: $(\varepsilon_1(P_{\text{насыщения}}(T), T), \rho_1(P_{\text{насыщения}}(T), T))$ для жидкой фазы, $(\varepsilon_2(P_{\text{насыщения}}(T), T), \rho_2(P_{\text{насыщения}}(T), T))$ для газовой фазы. По предположению, выше синей линии и ниже красной линии все необходимые термодинамические функции, включая $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$, известны. Необходимо доопределить эти функции в области между красной и синей линиями, т.е. в области двухфазности течения.

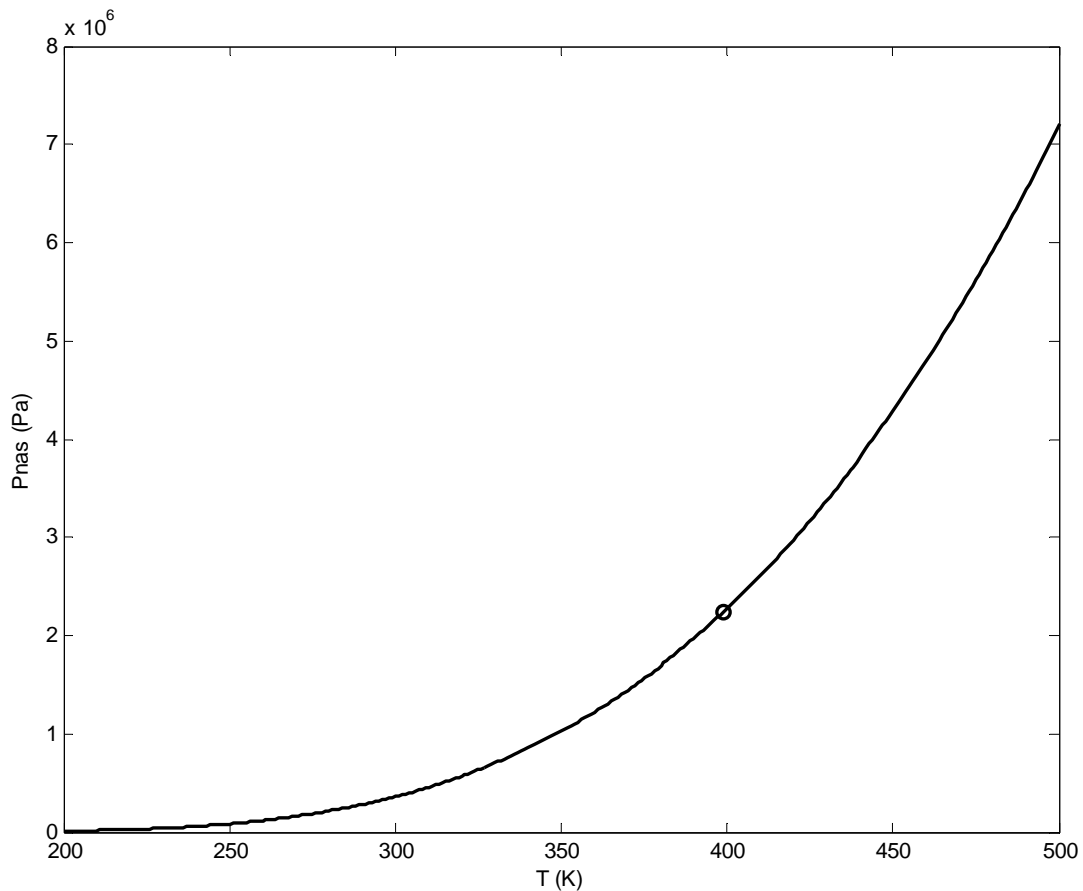


Рис. 1. Кривая насыщения в плоскости (P,T). Кружком на кривой насыщения помечена точка, соответствующая температуре $T=400$ К

Сделаем это следующим образом. Рассмотрим некоторую точку на кривой насыщения. На Рис. 1 она изображена черным кружком (в данном случае она соответствует значению температуры $T = 400$ К). На Рис. 2 этой точке соответствуют две точки, точки L и G. Давления и температуры в этих точках совпадают. Поэтому, как бы ни были определены функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$, точки L и G будут соединены некоторой изотермой и некоторой изобарой (варианты этих кривых показаны на Рис. 2 желтой и зеленой линиями соответственно). Конкретный вид этих изолиний, вообще говоря, определяется конкретной физической моделью (которая может учитывать и неравновесные процессы) и в настоящий момент несущественен. Причудливый вид изолиний на Рис. 2 призван лишь показать, что они могут определяться непростыми формулами или даже таблицами.

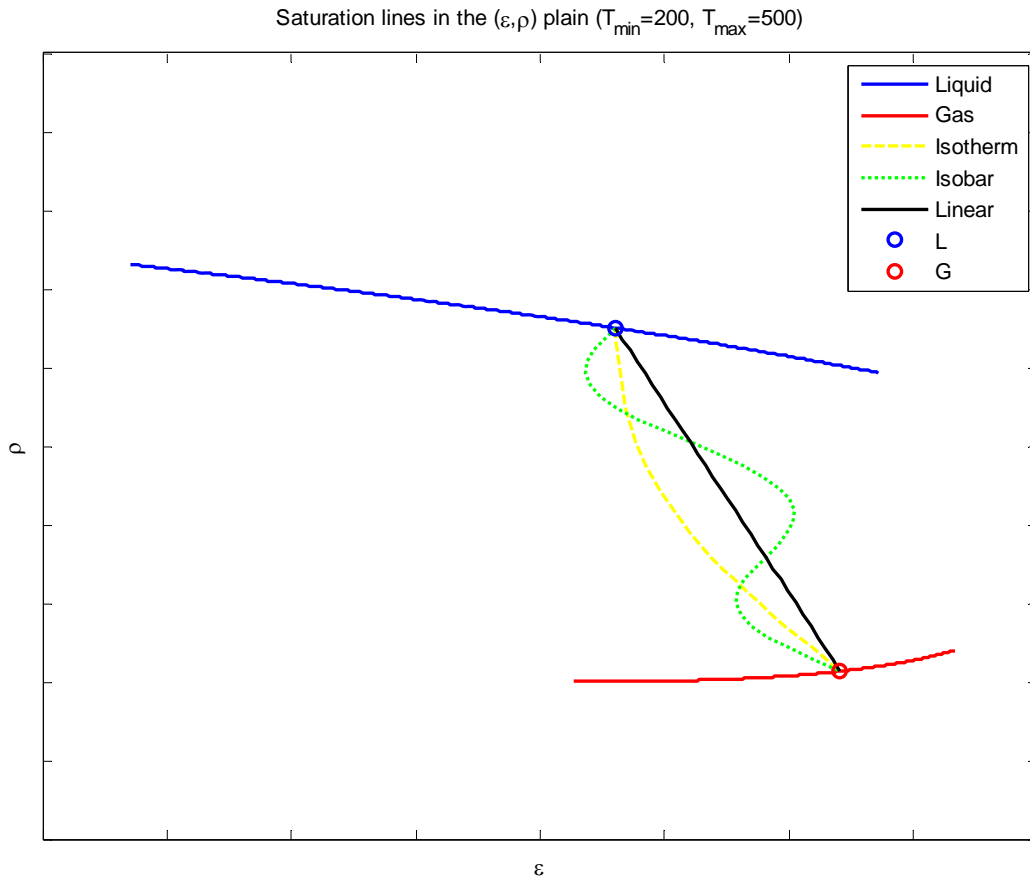


Рис. 2. Линии насыщения в плоскости (ε, ρ) , соответствующие жидкой (синяя линия) и газовой (красная линия) фазам, а также возможные изолинии: температуры (желтая), давления (зеленая) и прямолинейная (черная)

Функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$ в двухфазной области можно трактовать по-разному. Можно считать, что среда почти всюду находится в виде чистой фазы, а зона межфазного интерфейса исчезающе мала, и рассмотрение области между красной и синей линиями эквивалентно введению размазывания контактной поверхности в численных методах сквозного счета в газовой динамике. С другой стороны, можно считать, что на самом деле в каждом элементарном объеме, который в расчетах называется точкой, присутствуют обе фазы. В области "чистых" фаз содержание другой фазы исчезающе мало, а на интерфейсе, меняя концентрацию, скажем, жидкой фазы от 0 до 1 при заданных давлении и температуре, мы получим в плоскости (ε, ρ) изолинию, соединяющую точки L и G (при этом изотермы и изобары совпадут). Пример такого построения будет приведен в следующем разделе.

При любой трактовке функций $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$ в двухфазной области существенной для DNS является скорость вычисления этих функций. Кроме

того, для того чтобы эффективно использовать численные схемы высокого порядка аппроксимации, необходимо обеспечить некоторую гладкость термодинамических функций, как минимум непрерывность. Этим требованиям удовлетворяет гипотеза о линейности изотерм и изобар в области двухфазности. В этом случае изотермы и изобары совпадают в двухфазной области.

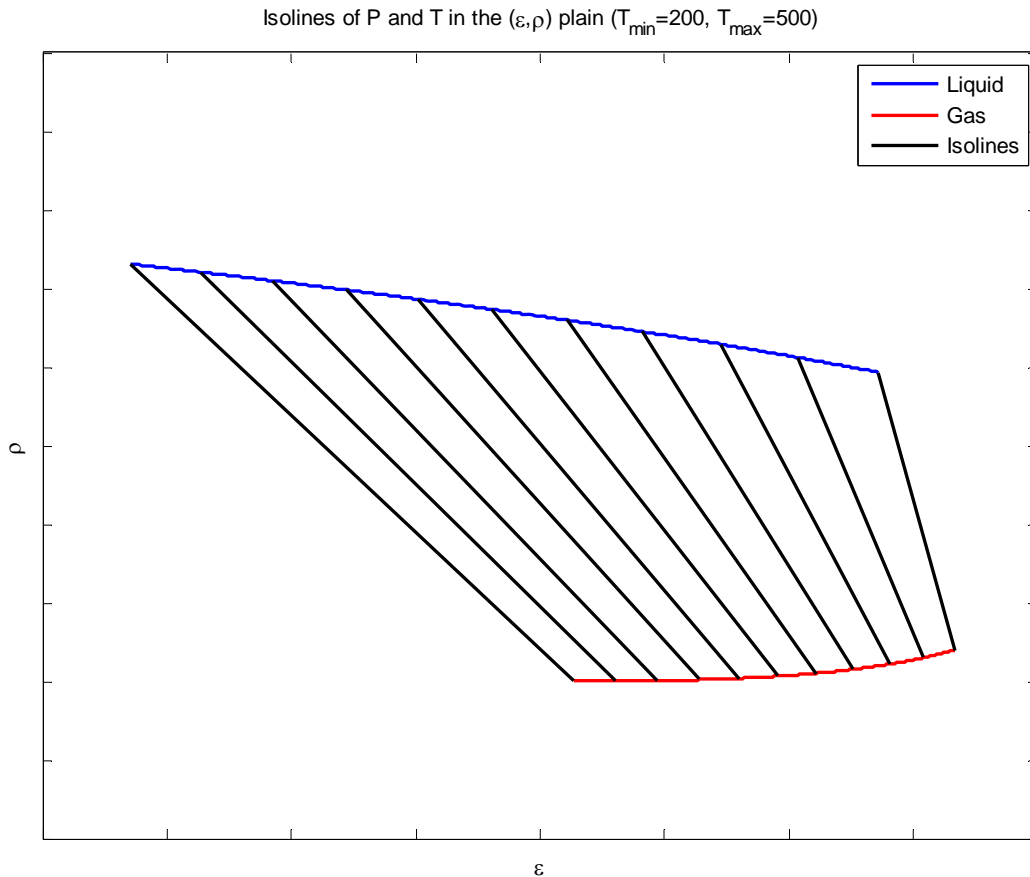


Рис. 3. Изолинии давления и температуры (черные) и линии насыщения в жидкости (синяя) и в газе (красная)

В модели, которая используется в расчетах в настоящем препринте (детально она будет описана в следующем разделе), предполагается, что на прямой, соединяющей точки насыщения в жидкости и газе, температура и давление постоянны. В этом случае изолинии P и T образуют однопараметрическое семейство прямых, зацветающих двухфазную область в плоскости (ε, ρ) между красной и синей линиями (см. Рис. 3), и чтобы определить давление и температуру в двухфазной области при заданных ρ и ε , нужно найти такую изолинию, которая проходит через точку (ε, ρ) .

Соответствующие ей температура и давление насыщения и будут искомыми величинами.

Такая модель обладает рядом достоинств: относительная простота вычисления функций $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$, непрерывность этих функций, естественная обобщаемость модели, в частности, нигде не использовалась равновесность рассматриваемых процессов.

К тому же, у реальных сред уравнения состояния для чистых фаз известны весьма приблизительно, поэтому закладывать в модель учет тонких эффектов просто не имеет смысла.

Ниже проверяются адекватность и работоспособность предложенной термодинамической модели на примере, в котором чистые фазы и фазовый переход описываются при помощи уравнения состояния Ван-дер-Ваальса.

3. Термодинамическая модель, основанная на уравнении состояния Ван-дер-Ваальса

В качестве примера применения предложенной методики рассмотрим среду, чистые фазы которой описываются уравнением состояния Ван-дер-Ваальса

$$P = \frac{RT}{v - B} - \frac{A}{v^2}, \quad (1)$$

где P – давление (Н/м²), v – молярный объем (м³/моль), T – температура (К), $R = 8,3144$ Дж/(моль·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):

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

Таким образом, величины A и B в формуле (1) и, соответственно, их размерности берутся в соответствии с формулой (2), используя данные о критическом состоянии вещества. Сразу отметим, что уравнение Ван-дер-Ваальса (1) плохо описывает 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 в настоящей работе проведены именно в окрестности критической точки.

Запишем теперь уравнение состояния, включающее в себя удельный объем V ($\text{м}^3/\text{кг}$), являющийся обратной величиной к плотности ρ , $V = 1/\rho$. Для этого перепишем (1) в следующем виде

$$P = \frac{\frac{R}{M} \cdot T}{\frac{v}{M} - \frac{B}{M}} - \frac{\frac{A}{M^2}}{\left(\frac{v}{M}\right)^2}, \quad (3)$$

где M (кг/моль) – молекулярный вес. Тогда отношение v/M и есть V , и формула (3) принимает вид

$$P = \frac{\bar{R}T}{V - b} - \frac{a}{V^2}, \quad (4)$$

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/м^2), 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 (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 (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 100°C). Этот процесс фазового превращения необходимо учитывать при расчете двухфазного потока методом прямого моделирования. Поскольку такой расчет будет по существу сквозным, уравнение (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 (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

$$\varepsilon = \int^{T(\rho, \varepsilon)} C_V(r) dr - a \cdot \rho; P(\rho, \varepsilon) = \frac{\bar{R} \cdot T(\rho, \varepsilon)}{1/\rho - b} - a \cdot \rho^2. \quad (5)$$

Однако формулы (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, [8]), 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 (4) и выражение $\varepsilon = \int C_V(T) dT - \frac{a}{V}$. Тогда получим $C_V(T) dT = TdS - \frac{\bar{R}T}{V-b} dV$.

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 имеем $T(S, V) = C_0 \cdot e^{S/C_V} \cdot (V - b)^{-\bar{R}/C_V}$, 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. снова [8]). 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 $V_2(P, T)$

$$\left(\bar{R}T \ln(V - b) + \frac{a}{V} - PV \right) \Big|_{V_1}^{V_2} = 0. \quad (6)$$

Заметим, что формула (6) представляет собой не что иное, как известное правило Максвелла для фазового перехода

$$\int_{V_1}^{V_2} P(V, T) dV = P \cdot (V_2 - V_1). \quad (7)$$

Формулу (7) можно получить и в общем случае непостоянной $C_V(T)$. Заметим, что химический потенциал был получен 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 (7).

Теперь можно 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 (4) при фиксированных P и T . Из уравнения (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 (для простоты предполагается, что в областях чистых фаз теплоёмкости постоянны, хотя и различны):

$$\left\{ \begin{array}{l} P, T \text{ задаются формулами (5) вне области,} \\ \text{ограниченной параметрически заданными кривыми} \\ \rho = \rho_1(T) \equiv \rho_1(P_{\text{насыщения}}(T), T), \varepsilon = \varepsilon_1(T) \equiv C_{V1}T - a\rho_1(T), \\ \rho = \rho_2(T) \equiv \rho_2(P_{\text{насыщения}}(T), T), \varepsilon = \varepsilon_2(T) \equiv C_{V2}T - a\rho_2(T); \\ \text{внутри указанной области } T \text{ и } P = P_{\text{насыщения}}(T) \\ \text{постоянны на прямых, соединяющих точки} \\ (\rho_1(T), \varepsilon_1(T)) \text{ и } (\rho_2(T), \varepsilon_2(T)). \end{array} \right. \quad (8)$$

Формулы (8) описывают термодинамические величины в зоне двухфазности (см. Рис. 4) наиболее простым и естественным способом с математической точки зрения.

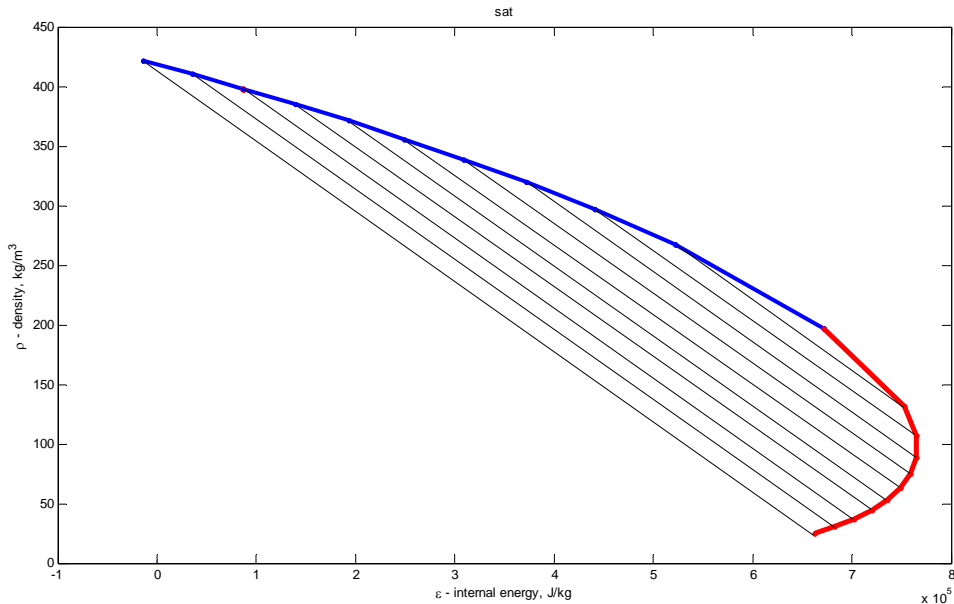


Рис. 4. Линии уровня $P(\varepsilon, \rho)$ и $T(\varepsilon, \rho)$ в двухфазной области в окрестности критической точки

При необходимости формулы (8) могут быть заменены на более сложные для учета существенных физических процессов, протекающих в зоне межфазного взаимодействия.

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:

$$M_1 = \alpha M; M_2 = (1 - \alpha)M; v_1 = M_1 V_1; v_2 = M_2 V_2; v = v_1 + v_2;$$

$$V = \frac{v}{M} = \frac{v_1 + v_2}{M_1 + M_2} = \frac{M_1 V_1 + M_2 V_2}{M_1 + M_2} = \alpha V_1 + (1 - \alpha) V_2. \quad (9)$$

Отметим, что для насыщенности жидкой фазы s 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 (9), получается и для удельной внутренней энергии ε

$$\varepsilon = \alpha \varepsilon_1 + (1 - \alpha) \varepsilon_2. \quad (10)$$

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 (9), (10).

Тогда в представлении (ρ, ε) правильно было бы заполнять область двухфазности не прямыми, а гиперболами. Однако это значительно усложнит вычислительный процесс, поэтому приведенное ниже общее тестирование модели опирается на формулы (8), поскольку цель тестирования — продемонстрировать принципиальную работоспособность модели.

В дальнейшем предполагается использовать различные неравновесные механизмы, например, известную модель Кана-Хилларда [9] 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_{V1} и C_{V2} . Также будем пользоваться более простыми формулами (8).

Покажем, однако, что, строго говоря, величину C_V надо рассматривать как зависящую от T . Вычислим энтропию 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)

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

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

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

Отсюда

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

Используя формулу (6) равенства химических потенциалов при термодинамическом равновесии, приходим к тождеству

$$(C_{V_2} - C_{V_1}) \ln T + (C_2 - C_1) - \frac{1}{T} \left(a + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\rho_1 - \rho_2} \right) (\rho_2 - \rho_1) = 0.$$

Учитывая формулы (5) для энергии ε , окончательно получим

$$(C_{V_2} - C_{V_1})(\ln T - 1) + (C_2 - C_1) = 0.$$

Отсюда ясно, что если предполагать теплоемкости C_{V_i} не зависящими от температуры T , то для непрерывности энтропии необходимо $C_{V_1} = C_{V_2}$. 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:

$$V^3 - \left(b + \frac{\bar{R}T}{P} \right) V^2 + \frac{a}{P} V - \frac{ab}{P} = 0. \quad (11)$$

Введём некоторые обозначения:

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

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

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

Если $\Delta > 0$, то уравнение (11) имеет три различных вещественных корня:

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

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

$$\begin{aligned}
V_1 &= -2\sqrt{q} \cos(\phi) - \frac{B_2}{3}, \\
V_2 &= -2\sqrt{q} \cos\left(\phi + \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{B_2}{3},
\end{aligned} \tag{12}$$

где B_2, q, ϕ определены выше. При подстановке (12) в (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 (8) находятся подстановкой точек кривой $P_{\text{насыщения}}(T)$ в формулы (12). Таким образом, можно интерполировать кривые из соотношения (8).

Интерполировав кривые насыщения в плоскости (ρ, ε) , можно определять, попала ли произвольная точка (ρ_0, ε_0) в область применимости формул (5). Если это не так, т.е. точка попала в область между кривыми из (8), то для нахождения давления необходимо провести через неё прямую, соединяющую точки кривых с равными давлением и температурой. Общий вид такой прямой:

$$\varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\rho_1 - \rho_2} \rho_0 = \frac{\varepsilon_2 \rho_1 - \varepsilon_1 \rho_2}{\rho_1 - \rho_2}. \tag{13}$$

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 (8). Таким образом, для фиксированных (ρ_0, ε_0) равенство (13) является нелинейным уравнением относительно температуры T . Уравнение (13) решается численно. По температуре и кривой насыщения восстанавливается давление.

Скорость звука c вычисляется исходя из следующего тождества:

$$c^2 = \frac{\partial P(\rho, \varepsilon)}{\partial \rho} + \frac{P}{\rho^2} \frac{\partial P(\rho, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial P(\rho, S)}{\partial \rho}. \tag{14}$$

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

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

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

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

$$P_{\text{насыщения}}(T)'_T = a_n.$$

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

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

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:

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

Таким образом можно найти скорость звука в области фазовых переходов.

4. Гидродинамическая модель и численный метод

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

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = G, \quad (15)$$

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

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

Система (15) допускает запись в другом виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial x} = G, \quad (16)$$

$$A = \frac{\partial f}{\partial U} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 + P'_\rho & 2u + P'_m & P'_E \\ -u \frac{E+P}{\rho} + uP'_\rho & uP'_m + \frac{E+P}{\rho} & u(1+P'_E) \end{pmatrix}. \quad (17)$$

(давление является функцией U , т.е. $P = P(\rho, m, E)$).

Система (16) является гиперболической т.е. у матрицы (17) существует полный набор независимых собственных векторов. Собственные числа матрицы (17) имеют вид:

$$\lambda_1 = u - c, \lambda_2 = u, \lambda_3 = u + c. \quad (18)$$

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

Собственные числа (18) 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 TVD схемы второго порядка аппроксимации (см., например, [10], [11]).

Область решения дифференциальной задачи покрывается регулярной сеткой. Значения всех переменных приписываются узлам сетки. Решение на новом временном слое вычисляется с помощью «дивергентного замыкания», соответствующего системе законов сохранения (15):

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\tau}{h} [F_{i+1/2} - F_{i-1/2}] + \tau G_i^n. \quad (19)$$

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, n — номер временного слоя.

Величины $F_{i\pm 1/2}$ находятся следующим образом. Из середины боковой грани расчетной ячейки на временной слой $t = t^n$ опускаются характеристики, в точку пересечения каждой характеристики с этим временным слоем линейно интерполируется или экстраполируется (в зависимости от результата работы

оператора minmod , см. ниже) соответствующий *инвариант* — здесь это проекция вектора потока f на соответствующий собственный вектор φ_k (k — номер характеристики), инварианты переносятся в середину боковой грани и из них вычисляются компоненты вектора потоков F . Этот алгоритм реализуется следующими формулами.

Составим матрицу Φ , строками которой являются левые собственные вектора матрицы (17) 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:

$$F_{i+1/2} = (\Phi^*)^{-1} \left[(\sigma^+)_{i+1/2} (\Phi F^+)_{i+1/2} + (\sigma^-)_{i+1/2} (\Phi F^-)_{i+1/2} \right], \quad (20)$$

$$(\Phi F^+)_{i+1/2} = \Phi^* f_i - \frac{1}{2} (q\Lambda^* - I) \text{min mod}(\Phi^* \Delta_{i+1/2} f, \Phi^* \Delta_{i-1/2} f) \quad (21)$$

$$(\Phi F^-)_{i+1/2} = \Phi^* f_{i+1} - \frac{1}{2} (q\Lambda^* + I) \text{min mod}(\Phi^* \Delta_{i+1/2} f, \Phi^* \Delta_{i+3/2} f) \quad (22)$$

$$\Phi^* = \frac{1}{2}(\Phi_i + \Phi_{i+1}), \quad \Lambda^* = \frac{1}{2}(\Lambda_i + \Lambda_{i+1}), \quad \Delta_{i+1/2} f = (f_{i+1} - f_i).$$

Оператор minmod определяется следующим образом:

$$\text{min mod}(x, y) = \text{sign}(x) \min(|x|, |y|) \max(0, \text{sign}(xy)).$$

Если в задаче учитывается теплопроводность, то в правой части уравнения появляется ненулевой источник:

$$G = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где κ — коэффициент теплопроводности.

Если $C_{V1} = C_{V2} = C_V$ (именно такой случай мы рассматриваем), то

$$\varepsilon = C_V T - a\rho,$$

где a — константа из (4), и задача сильно упрощается.

Сначала вычисляются потоки на боковых гранях расчетной ячейки $F_{i+1/2}$ и $F_{i-1/2}$ так же как и в случае отсутствия теплопроводности, но формулы (21) и (22) заменяются в связи с появлением ненулевой правой части на следующие:

$$(\Phi F^+)_{i+1/2} = \Phi^* f_i - \frac{1}{2} (q\Lambda^* - I) \text{min mod}(\Phi^* \Delta_{i+1/2} f, \Phi^* \Delta_{i-1/2} f) + \frac{\tau}{2} \Lambda^* \Phi^* G_i^n,$$

$$(\Phi F^-)_{i+1/2} = \Phi^* f_{i+1} - \frac{1}{2}(q\Lambda^* + I) \min \text{mod}(\Phi^* \Delta_{i+1/2} f, \Phi^* \Delta_{i+3/2} f) + \frac{\tau}{2} \Lambda^* \Phi^* G_{i+1}^n,$$

где

$$G_i^n = \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2}.$$

Затем для первых двух уравнений выполняется дивергентное замыкание (19), что дает плотность и скорость на новом временном слое:

$$\rho_i^{n+1} = (U_1)_i^{n+1}, \quad u_i^{n+1} = (U_2)_i^{n+1} / (U_1)_i^{n+1}.$$

Наконец, из третьих уравнений (19) для всех точек сетки получаем систему разностных уравнений линейную относительно температуры на верхнем слое:

$$\frac{\rho_i^{n+1} (u_i^{n+1})^2}{2} + \frac{(c_V \rho_i^{n+1}) T_i^{n+1} - a (\rho_i^{n+1})^2 - (U_3)_i^n}{\tau} + \frac{(F_3)_{i+1/2} - (F_3)_{i-1/2}}{h} = \kappa \frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{h^2},$$

которая решается обычной трехточечной прогонкой.

5. Результаты численных экспериментов

Приведем результаты расчетов для среды с уравнением состояния (8). Кроме того, 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 проверки способности модели описывать само явление фазового перехода.

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

$$P_{crit} = \frac{a}{27b^2}, \quad \rho_{crit} = \frac{1}{3b}, \quad T_{crit} = \frac{1}{R} \frac{8a}{27b},$$

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 $(P_{crit} / \rho_{crit})^{1/2}$.

Нагрев области с одним открытым концом

Рассмотрим случай, когда теплопроводность отсутствует. На отрезке $[0;1]$ в начальный момент времени зададим постоянное распределение плотности и энергии: $\rho = 1,3394$, $\varepsilon = 4,8355$. Эти значения соответствуют жидкости вблизи кривой насыщения. Начальную скорость полагаем равной нулю. На левом конце ставится условие непротекания, на правом конце — условие нулевого градиента.

В начальный момент времени к отрезку $[0; 0,2]$ начинает подводиться тепло по закону $Q(x, t) = 0,1 \cdot t \cdot (1 + \cos 5\pi x)$, при $t < 2$; (см. рис. 5) 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, расширению и выталкиванию вещества через открытый конец.

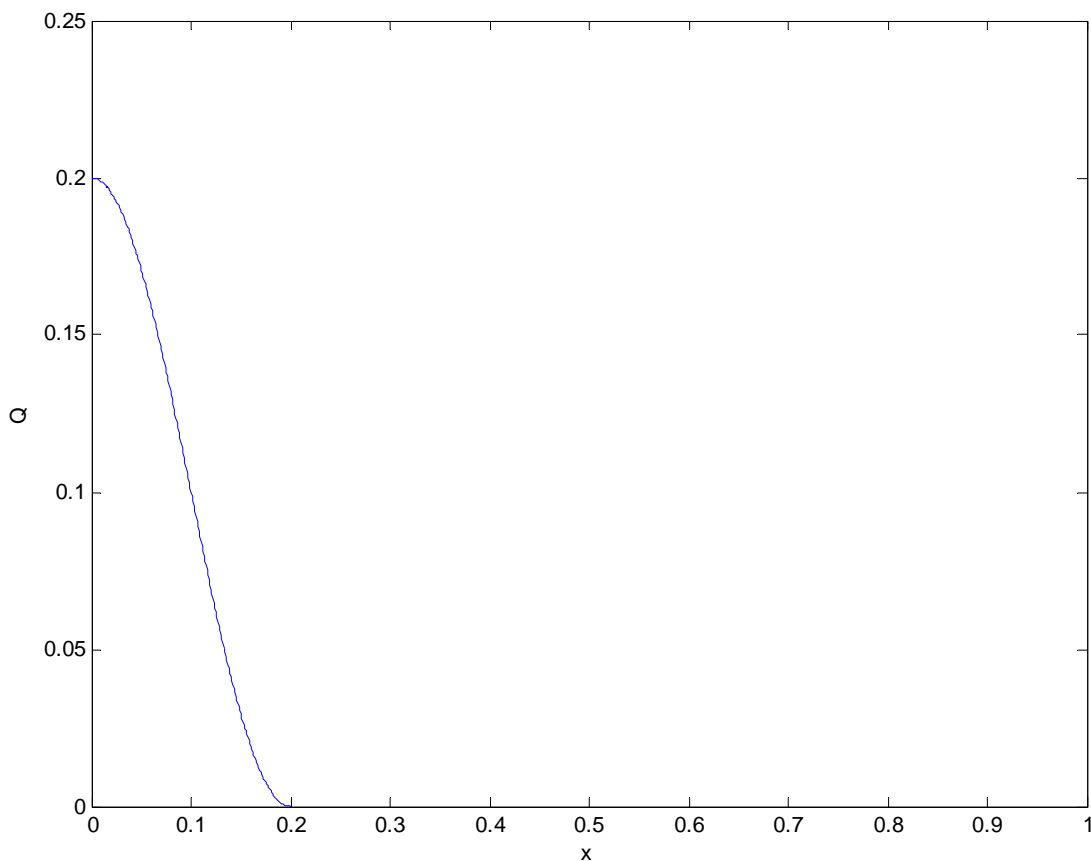


Рис. 5. Пространственное распределение плотности источника тепла

Расчёты проводились на сетке с числом узлов $M = 400$ и числом Куранта равным 0,9 до $t = 10$ по схеме первого порядка, которая получается из

описанной выше схемы второго порядка приравниванием нулю результатов действия оператора minmod .

На рис. 6 –10 представлены графики искомых 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 Рис. 11 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 очень близко к кривой насыщения.

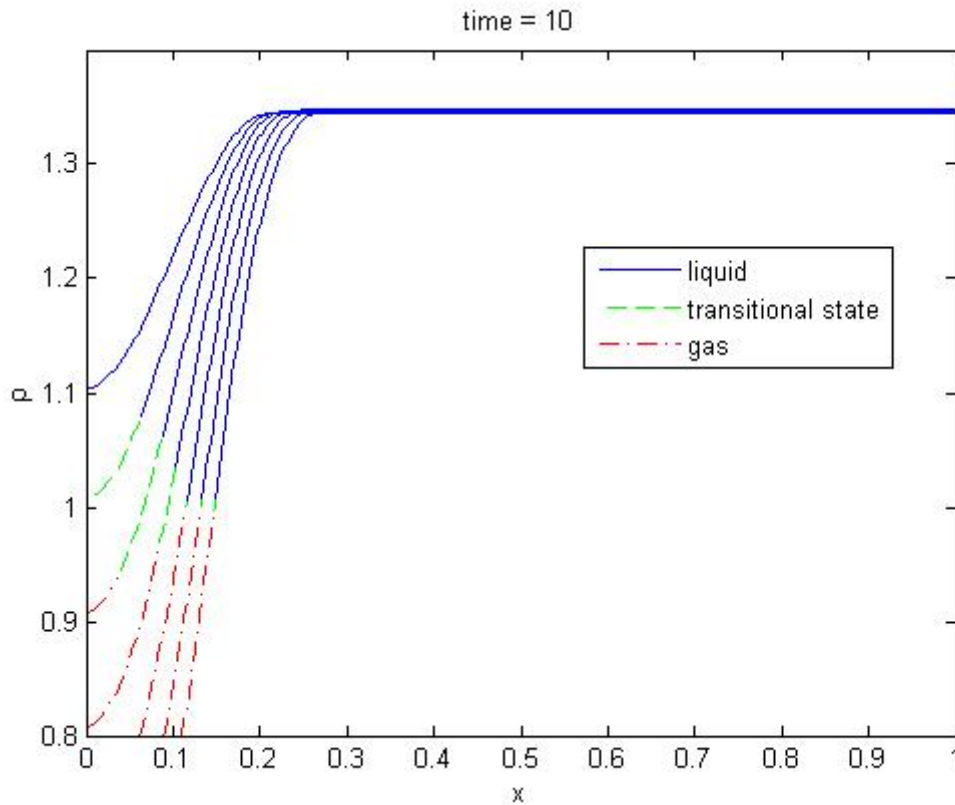
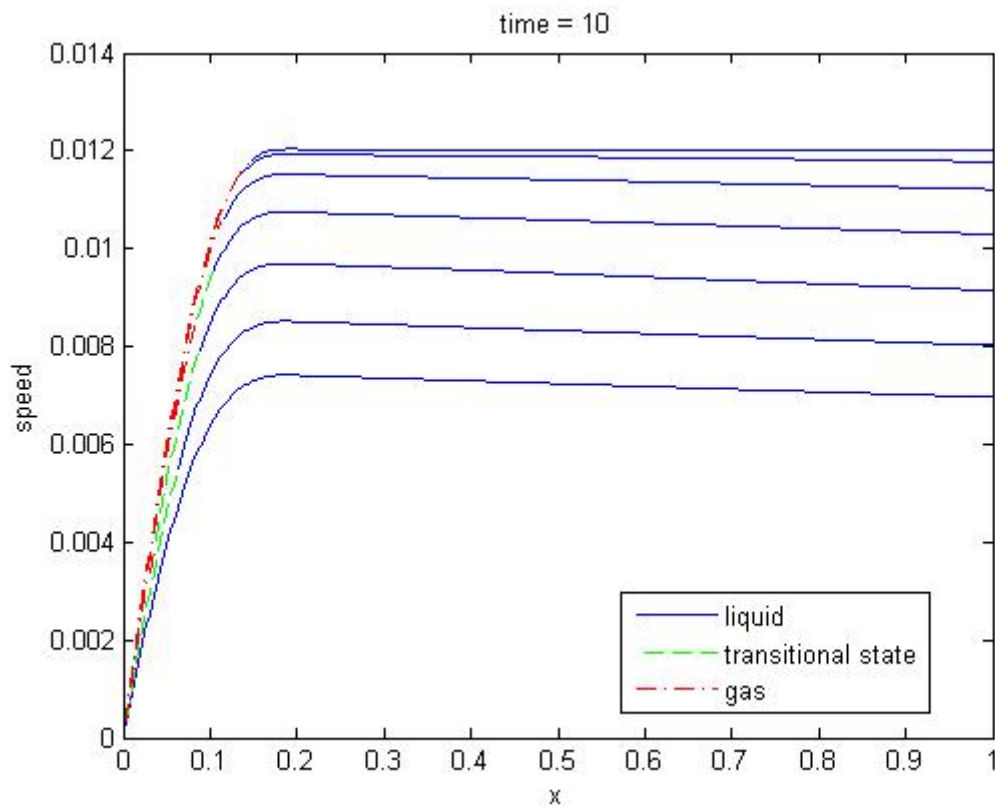
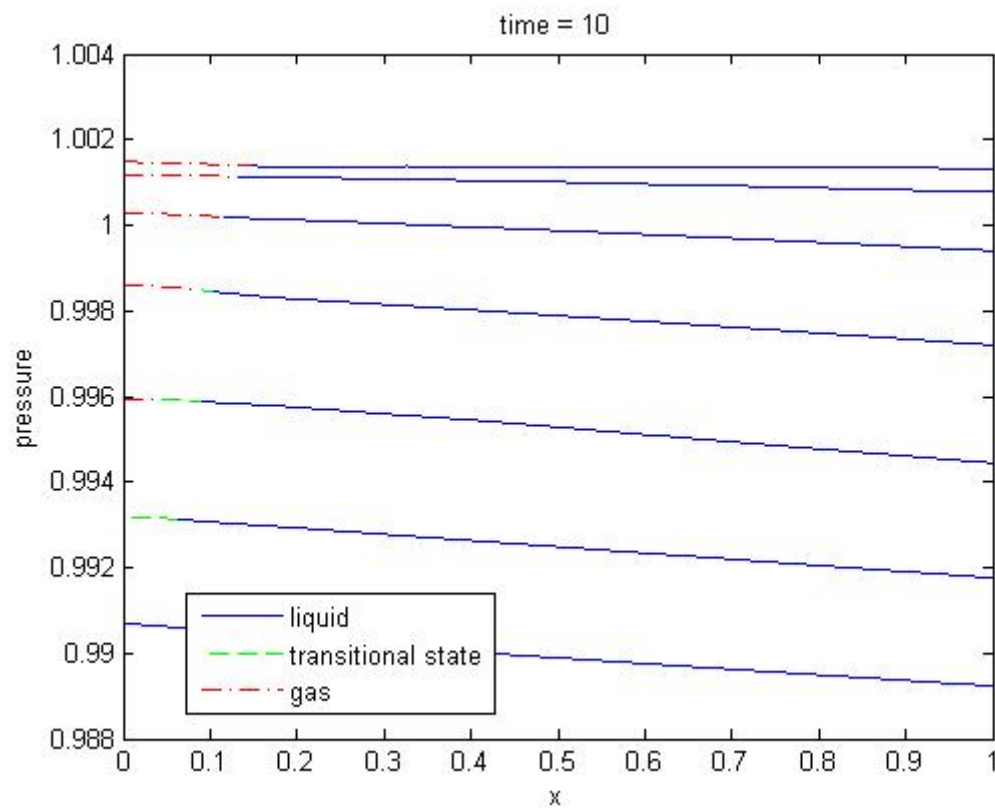
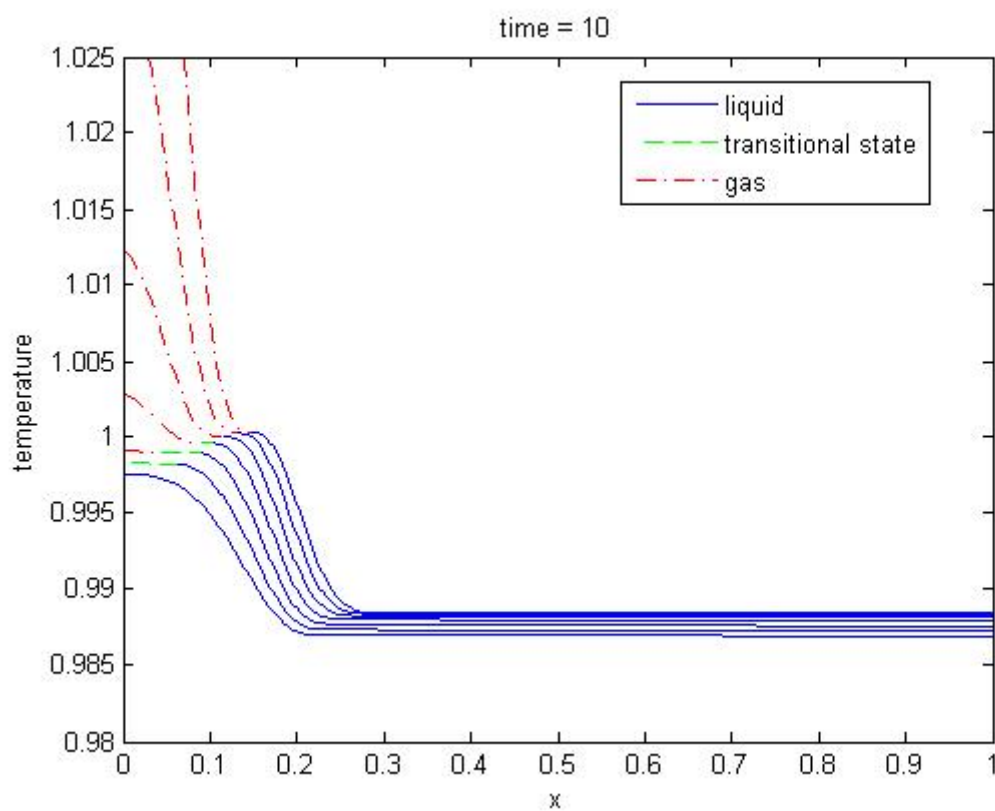
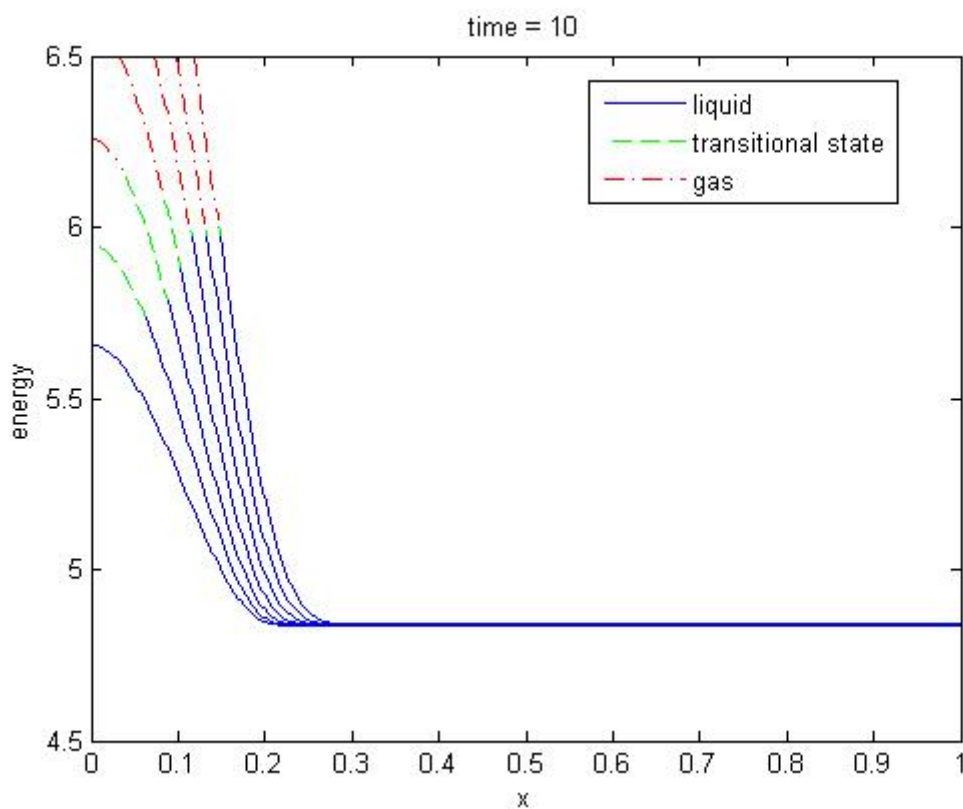


Рис. 6. Плотность при $t = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$

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

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

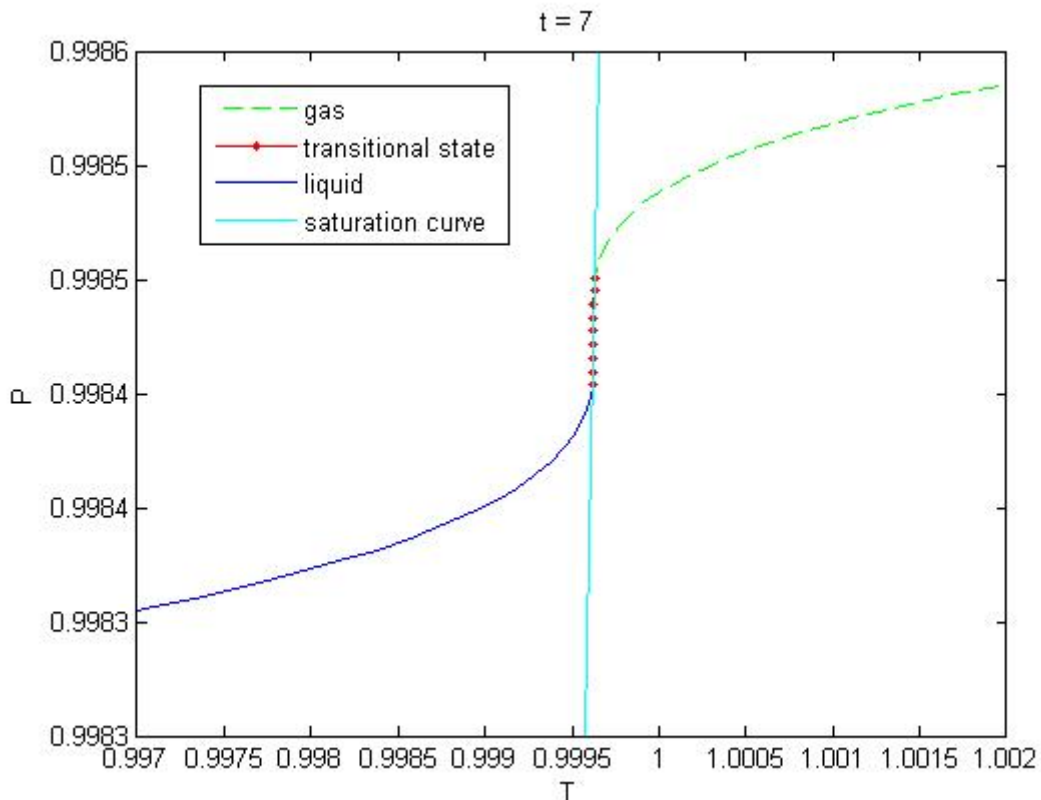


Рис. 11. Фазовая диаграмма решения при $t = 7$ и кривая насыщения

Задача Стефана

В этом численном эксперименте проводится сравнение расчетов, проведенных в соответствии с изложенной выше моделью сквозным счётом, с расчётами модельной задачи Стефана.

Рассмотрим следующую задачу, поставленную для уравнений газовой динамики с теплопроводностью (уравнение (15) с правой частью (23)). На единичном отрезке задаются начальные условия: $\rho(x,0) = 1.4936$, $\varepsilon(x,0) = 3.997$ (жидкость вблизи кривой насыщения). Соответствующие температура и давление: $T(x,0) = 0.943$, $P(x,0) = 0.7875$. На правой границе ставится условие непротекания. В начальный момент времени температура на правой границе повышается до $T_R = 1$. На левой границе ставится условие нулевого градиента. Под действием теплопроводности начинается фазовый переход.

Расчёты проводились по разностной схеме первого порядка. Число узлов сетки $M = 100$, число Куранта $q = 0.1$. Расчёты проводились до момента времени $t = 30$.

На рис. 12 – 14 изображены графики плотности, скорости и температуры соответственно в моменты времени с равным шагом $t = 3$.

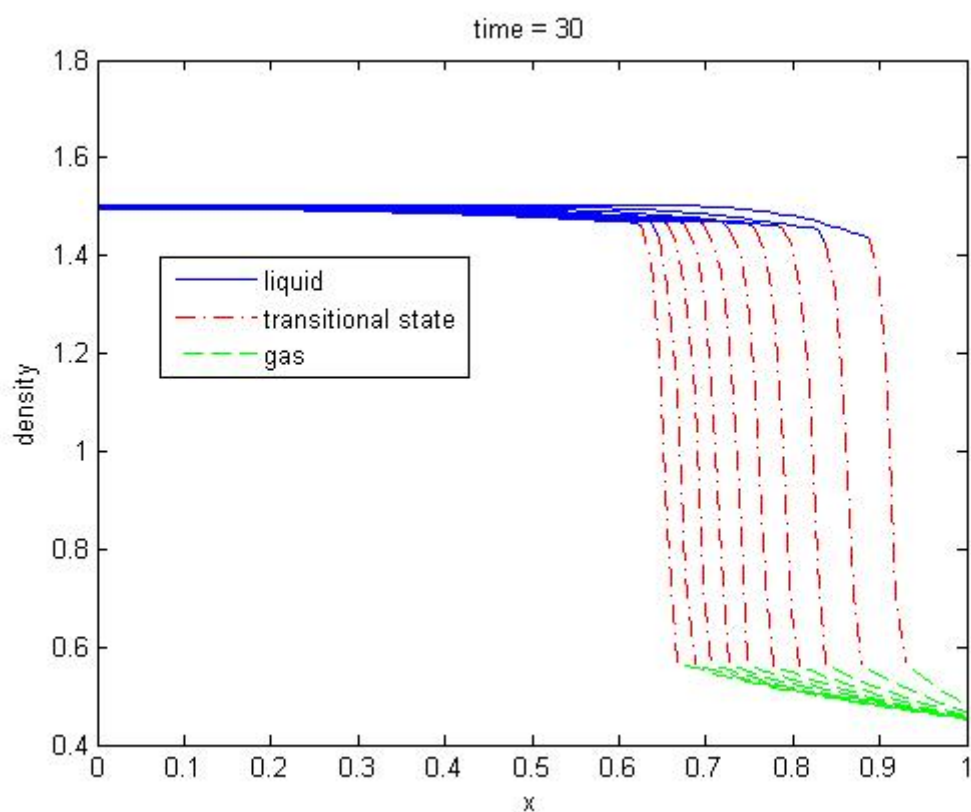


Рис. 12. Плотность

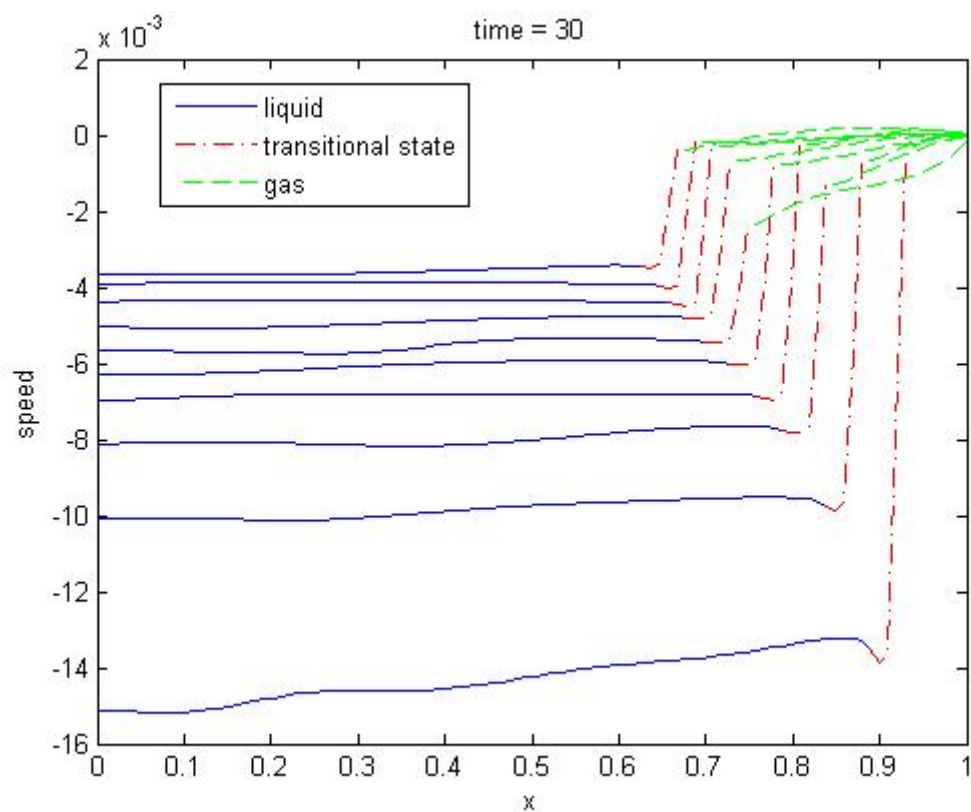


Рис. 13. Скорость

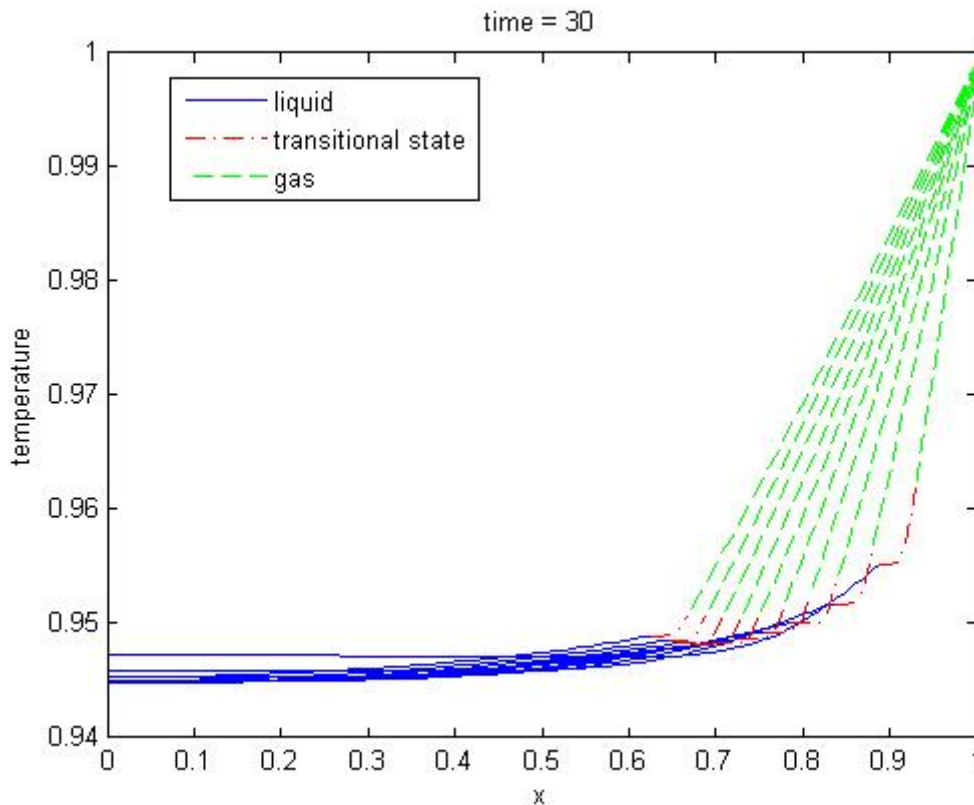


Рис. 14. Температура

Обозначения для фаз те же, что и в предыдущей задаче. На рис. 12 видно, что несмотря на то, что фазовый переход осуществляется за счет теплопроводности и расчет ведется сквозным счетом, тем не менее, область двухфазности (область фазового перехода) является весьма узкой и позволяет локализовать поверхность межфазного интерфейса. При этом в каждой из фаз плотность меняется слабо. В данной задаче граница под действием теплопроводности перемещается внутрь среды.

Результаты расчётов данной задачи сравнивались с решением соответствующей задачи Стефана. Задача Стефана – это модельная задача, описывающая фазовый переход, см. [12]. Будем считать, что температура перехода постоянна, а механизмами обмена энергией, кроме теплопередачи, пренебрежём. Тогда баланс энергии на межфазной границе будет связывать потоки тепла с движением самой границы (с фазовым переходом, сопровождающимся выделением скрытой теплоты). На межфазной границе должно быть выполнено условие:

$$k_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{\Gamma_{gl}} - k_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{\Gamma_{gl}} = \lambda \rho_l V_{gl},$$

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

движения. Слева и справа от границы эволюция системы описывается уравнением теплопроводности:

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

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

$$T_1|_{\Gamma_{gl}} = T_2|_{\Gamma_{gl}} = T_c.$$

Начальное распределение задаётся таким образом, чтобы точка перехода попала внутрь отрезка.

Предположим, что в нашей основной задаче в данном случае можно пренебречь переносом массы, импульса и энергии (скорость мала). Тогда обмен энергии будет осуществляться за счёт теплопередачи. Чтобы свести эту задачу к задаче Стефана, необходимо определить температуру фазового перехода и удельную теплоту фазового перехода. Температура фазового перехода T_c в классической постановке задачи Стефана является постоянной величиной. В нашем случае температура точек, находящихся в переходной области слабо меняется с течением времени. За температуру перехода можно принять температуру одной из этих точек. В данном случае положено $T_c = 0.949$.

Чтобы найти удельную теплоту фазового перехода обратимся ко второму началу термодинамики: $\delta Q = T dS$. Энтропия газа Ван-дер-Ваальса: $S = R \ln(V - b) + \ln T$. Во время фазового перехода температура остаётся постоянной: $\delta Q = dT_c R \ln(V - b)$. Окончательно: $\lambda = \delta Q|_l^g = T_c R \ln\left(\frac{V_g - b}{V_l - b}\right)$. В данном случае $\lambda = 3.7638$.

В качестве начального распределения температуры в задаче Стефана использовалось решение полной системы законов сохранения, представленное выше (рис. 12 – 14), в момент времени $t=12$.

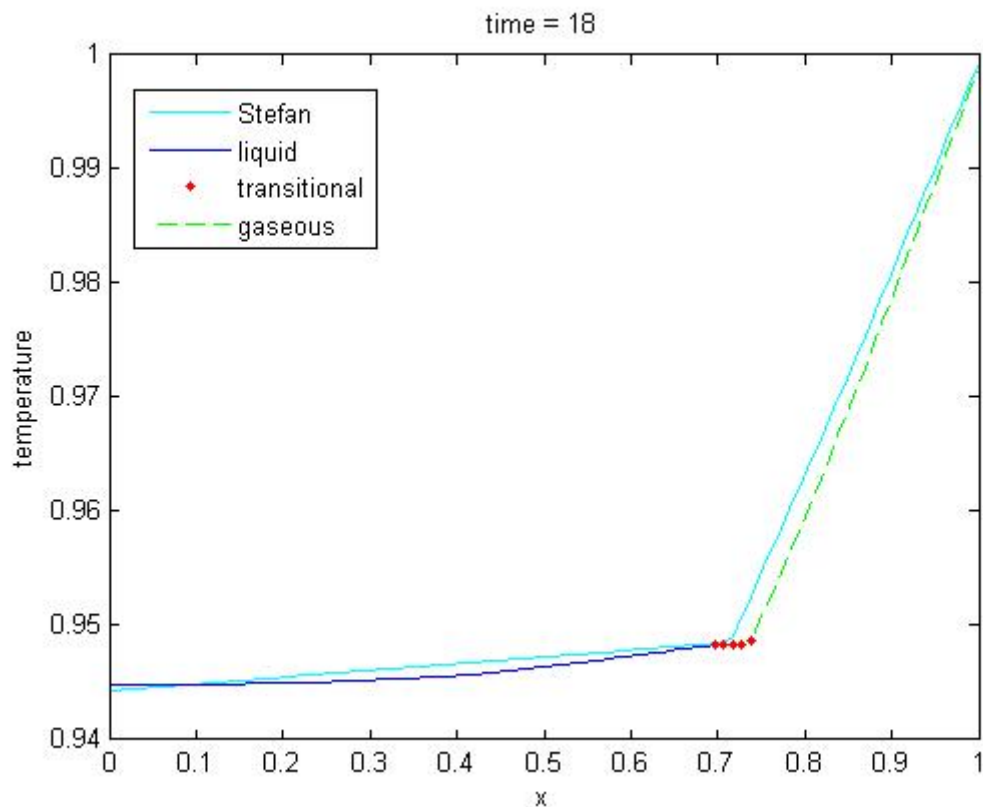


Рис. 15. Температура при $t=18$, полученная в задаче Стефана и из законов сохранения

На рис. 15 – 17 представлены графики температуры, полученные решением двух задач. Видно, что между решениями имеется хорошая корреляция. Фронт фазового перехода в задаче Стефана движется немного быстрее, чем в газодинамической задаче, но на этих временах все время остается внутри области двухфазности.

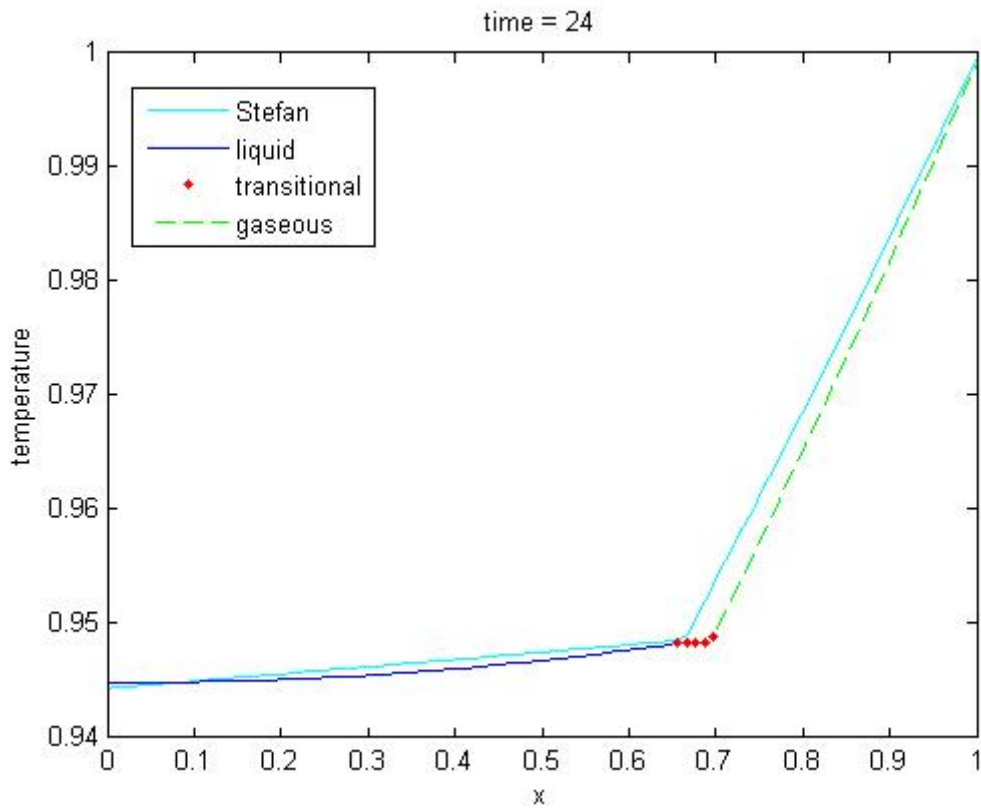


Рис. 16. Температура при $t = 24$, полученная в задаче Стефана и из законов сохранения

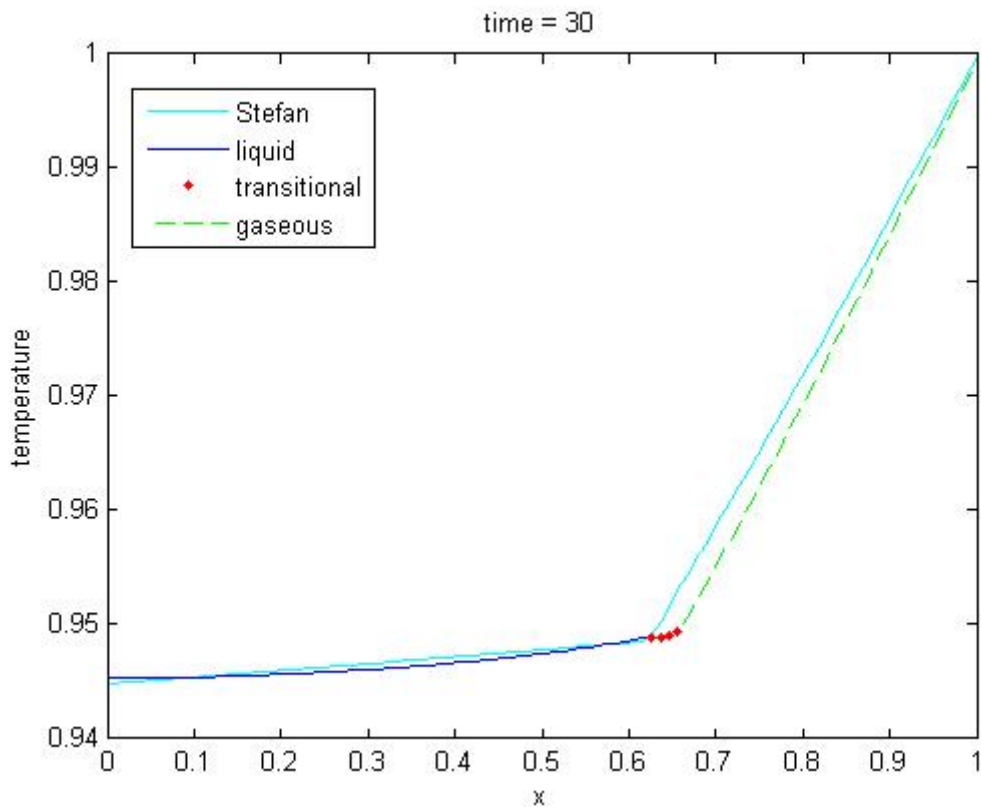


Рис. 17. Температура при $t = 30$, полученная в задаче Стефана и из законов сохранения

Кроме того, температура в газовой области в задаче Стефана больше, чем в газодинамической задаче. Это можно объяснить тем, что в данной постановке задачи Стефана приток тепла не расходуется на изменение плотности, за исключением самого фазового перехода.

Задача с возникновением и исчезновением пузырей и капель

Преимуществом метода сквозного счета является то, что он позволяет не отслеживать специально поведение межфазных границ. В систему уравнений в явном виде (достаточно знать плотность и внутреннюю энергию) заложена информация о том, где находятся межфазные границы, когда они возникают и когда исчезают. Другое преимущество в том, что на количество межфазных границ в расчётной области не накладывается никаких ограничений (кроме разумных условий на густоту сетки). Следующий пример демонстрирует эти свойства.

На отрезке $[0,1]$ в начальный момент времени задаются постоянные начальные условия: $\rho = 1.3263$, $\varepsilon = 4.7881$. Температура и давление: $T = 0.9752$, $P = 0.9049$. На границах ставятся условия нулевого градиента. К среде подводится тепло по закону $Q(x,t) = 10^{-2} \cdot (1 + \cos(10\pi x - \pi))t$, $x \in [0.35, 0.45] \cup [0.55, 0.65]$, $t \leq 8$ (см. рис. 18); $Q(x,t) = Q(x,8)$, $t > 8$.

Идея эксперимента заключается в том, что сначала вся область заполнена жидкостью. Потом образуются две переходные зоны, в глубине которых затем образуются два пузыря — области чистого газа, а переходных областей станет четыре. Затем под действием теплопроводности область между пузырями нагреется, и капля между пузырями испарится — пузыри сольются, а двухфазных областей снова, как и до образования пузырей, станет две, но теперь они будут разделены уже газовой фазой.

Для расчётов использовалась схема второго порядка точности. Число узлов сетки $M = 500$, число Куранта $q = 0.1$. Расчёты проводились до времени $t = 45$.

На рис. 19 – 21 изображены графики давления, плотности и температуры в моменты времени $t = 9, 18, 27, 36, 45$. Видно, что межфазные поверхности ведут себя так, как предполагалось.

Интересно отметить, что рост давления и температуры со временем становится интенсивнее. Это не связано с законом подвода тепла: после $t = 8$ он перестаёт зависеть от времени. Вероятно, дело в том, что с течением времени «переходных» точек становится всё меньше и меньше. Это и понятно: точки, которые находятся в переходной области, «съедают» подводимое тепло: оно расходуется на изменение энергии и плотности, но не температуры и давления.

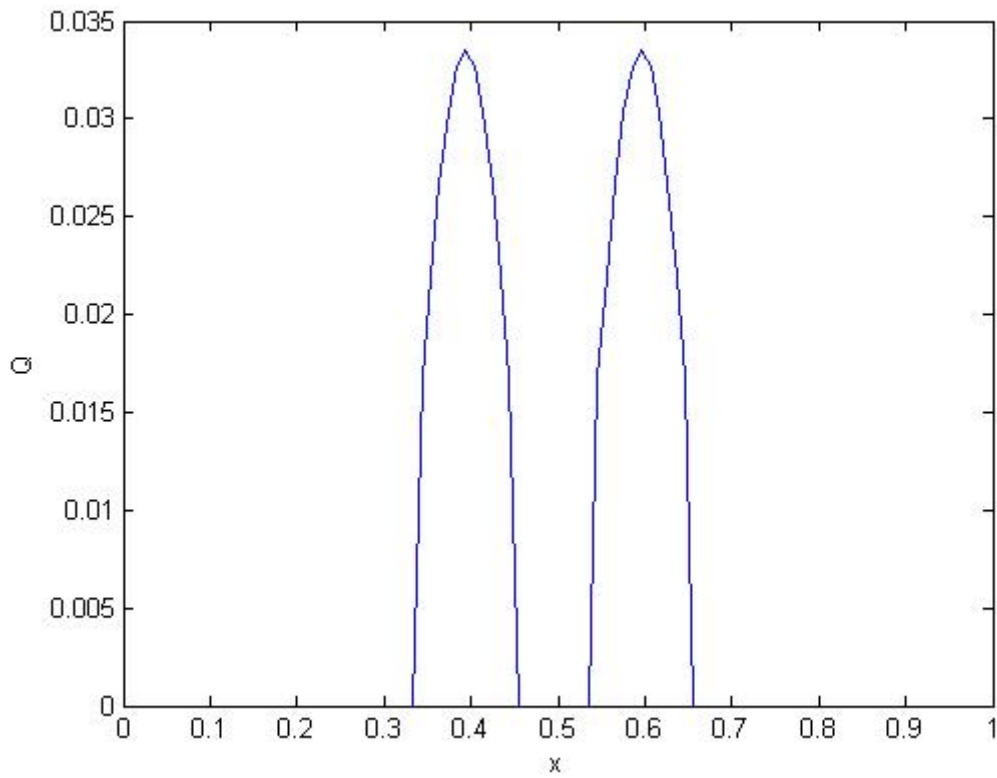


Рис. 18. Пространственное распределение плотности источника тепла

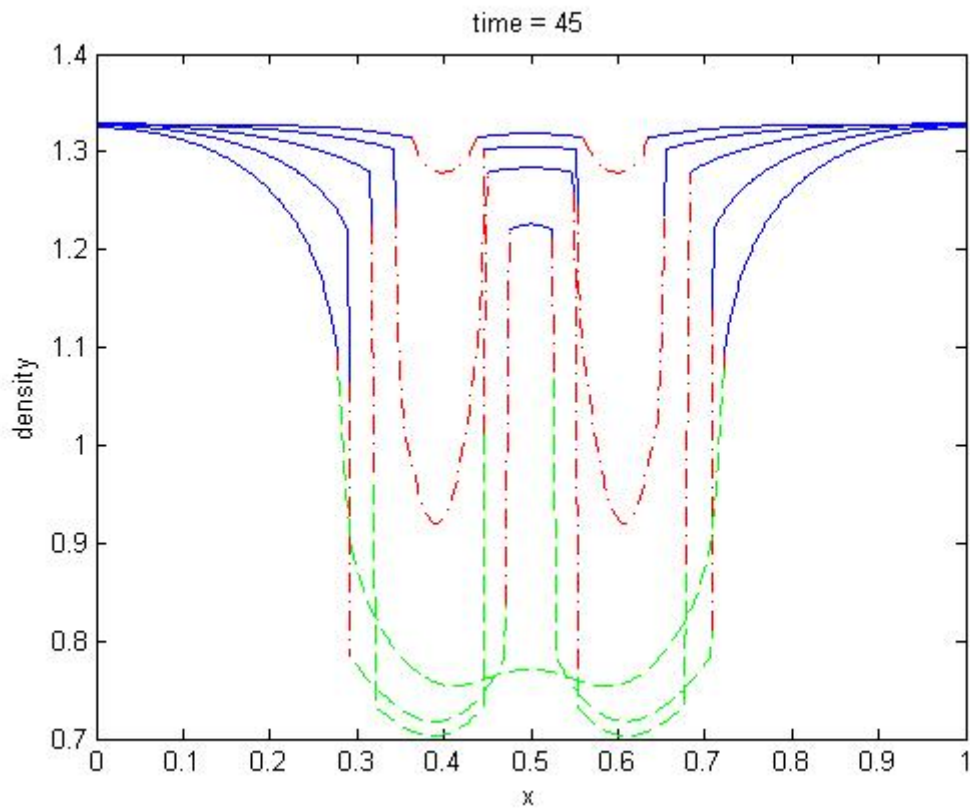


Рис. 19. Распределения плотности в разные моменты времени в жидкости (синий цвет), в газе (зеленый цвет) и в зоне двухфазного течения (красный цвет)

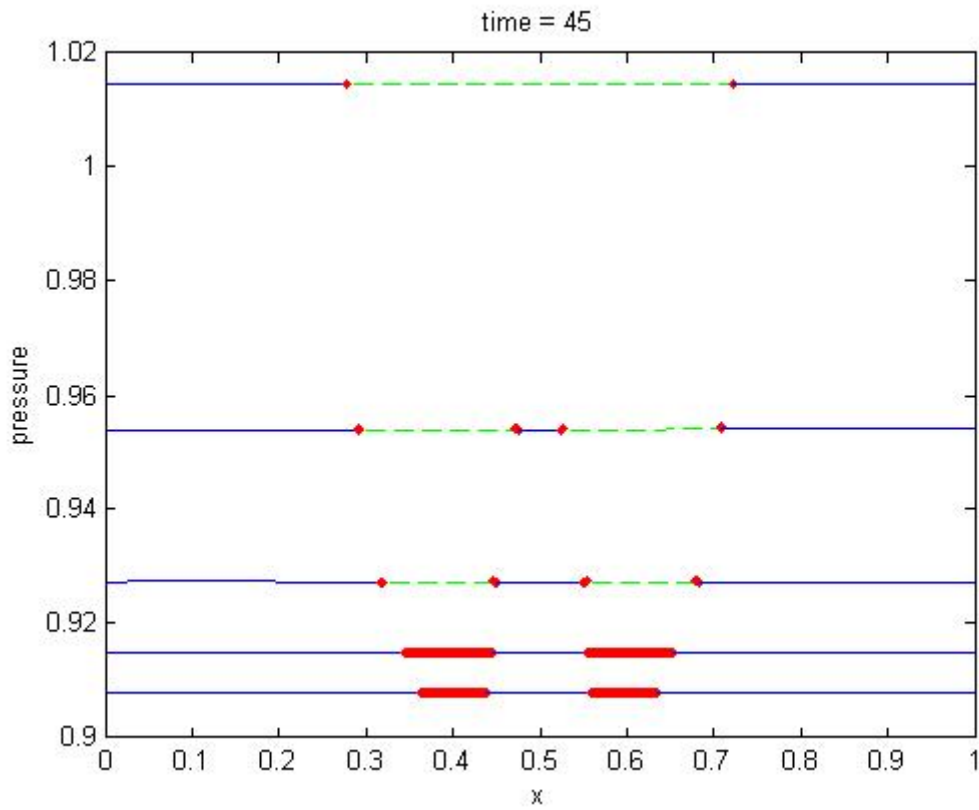


Рис. 20. Распределения давления в разные моменты времени (обозначения как на рис. 19)

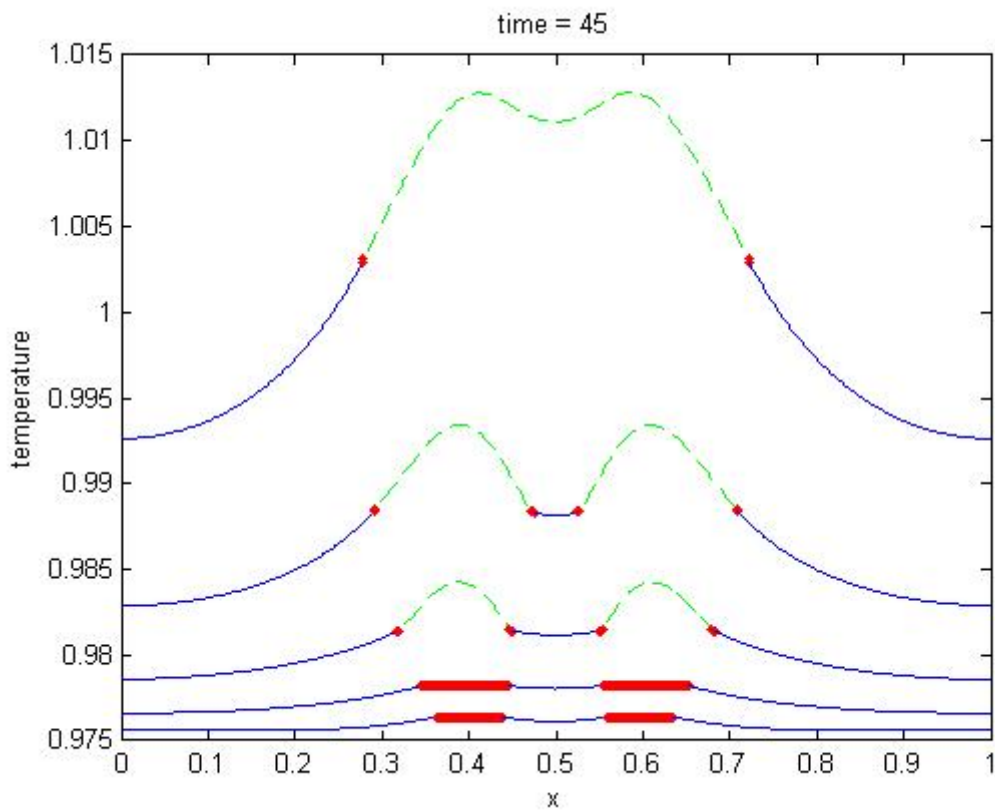


Рис. 21. Распределения температуры в разные моменты времени (обозначения как на рис. 19)

6. Заключение

В работе сформулирована специальная термодинамическая модель, описывающая фазовые переходы в двухфазных системах и позволяющая рассчитывать эти явления «сквозным способом». Проведены численные эксперименты, подтверждающие работоспособность метода. В частности, показано, что решение задачи о продвижении фронта испарения под воздействием внешнего нагрева, полученное данным методом, близко к решению задачи Стефана. Показано, что данный метод позволяет в режиме сквозного счёта отслеживать эволюцию межфазных границ (возникновение, передвижение, слияние, исчезновение пузырей и капель).

Список литературы

1. Р. И. Нигматулин, *Динамика многофазных сред*. Ч. I и II. М.: Наука, 1987, 464 с. и 360 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. Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N., Delhaye, J. M. (2001): The Second Gradient Method for the Direct Numerical Simulation of Liquid-Vapor Flows with Phase Change. J. Comput. Phys. 169, 624 – 651.
6. Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N., Delhaye, J. M. (2001a): The Second Gradient Theory: a Tool for Direct Numerical Simulation Of Liquid-Vapor Flows with Phase-Change. Nucl. Eng. Design 204, 155 – 166.
7. А. Ю. Демьянов, О. Ю. Динариев, Н. В. Евсеев, *Основы метода функционала плотности в гидродинамике*. М.: Физматлит, 2009, 311 с.
8. И. П. Базаров, *Термодинамика*. М.: Физматлит, 1961.
9. 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** (1959), 688-699.
10. Harten A. *High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*. Journal of Comp. Phys., 1983, 42, 357-393.
11. Radvogin, Yu. B. and Zaitsev, N. A. *A locally implicit second order accurate difference schemes for solving 2D time-dependent hyperbolic systems and Euler equations*. — Proc. of Intern. Conf. on Spectral and High Order Methods, Herzliya, 1998, in Appl. Num. Math., **33**, (2000), 525-532.
12. Тихонов А. Н., Самарский А. А. *Уравнения математической физики*. М.: Издательство Московского Университета, 1994, 799 с.

Оглавление

1. Вводные замечания	3
2. Общая схема построения термодинамических функций	6
3. Термодинамическая модель, основанная на уравнении состояния Ван-дер-Ваальса.....	10
4. Гидродинамическая модель и численный метод	18
5. Результаты численных экспериментов	21
Нагрев области с одним открытым концом	22
Задача Стефана	26
Задача с возникновением и исчезновением пузырей и капель	32
6. Заключение.....	35
Список литературы	35