



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

Препринты ИПМ • Препринт № 26 за 2016 г.



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

Зайцев Н.А., Критский Б.В.

Двумерная односкоростная
модель для расчета
двухфазных течений
реальной воды с учетом
эффектов поверхностного
натяжения

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зайцев Н.А., Критский Б.В. Двумерная односкоростная модель для расчета двухфазных течений реальной воды с учетом эффектов поверхностного натяжения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 26. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2016-26](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-26)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-26>

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

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский

ДВУМЕРНАЯ ОДНОСКОРОСТНАЯ МОДЕЛЬ
ДЛЯ РАСЧЕТА ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ РЕАЛЬНОЙ ВОДЫ
С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ

Москва — 2016

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский. *Двумерная односкоростная модель для расчета двухфазных течений реальной воды с учетом эффектов поверхностного натяжения.*

Аннотация. В препринте представлено дальнейшее развитие предложенной в предыдущих публикациях модели двухфазной жидкости, ориентированной на проведение прямого численного моделирования (DNS) сложных двухфазных течений. Модель основана на концепции односкоростного континуума, где фазы идентифицируются с помощью величины плотности среды. Термодинамические функции двухфазной среды строятся на основе реальных уравнений состояния чистых фаз. В модель добавлен учет эффектов поверхностного натяжения, которые имеют место в окрестности зоны раздела фаз. Взаимодействие фаз описывается с помощью модели диффузного интерфейса. Термодинамическая составляющая позволяет проводить сквозной расчет. Гидродинамической основой являются уравнения Навье-Стокса. Проведено исследование эффективности параллельного MPI кода.

Ключевые слова: двумерные двухфазные течения, прямое численное моделирование, термодинамическая модель, диффузный интерфейс, поверхностное натяжение, параллельный MPI код

N. A. Zaitsev, B. V. Kritskii. *On a two-dimensional single-velocity model for computations of two-phase flows of real water taking into account the surface tension effects.*

Abstract. The preprint presents further development of proposed in previous publications two-phase liquid model, focused on holding direct numerical simulation (DNS) of complex two-phase flows. The model is based on a single-speed concept, where the phases are identified by the value of the medium density. Thermodynamic functions of a two-phase medium are based on the equations of state of real pure phases. The model is improved by taking into account the surface tension effects that take place in the vicinity of the phase separation zone. The phases' interaction is described by means of the diffuse interface model. The thermodynamic component supplies this opportunity. Hydrodynamic basis of the model is the Navier-Stokes equation system. The analysis of numerical effectiveness of the corresponding MPI code is presented.

Key words: 2D two-phase flows, direct numerical simulation, thermodynamic model, diffuse interface, surface tension, parallel MPI code

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

Вводные замечания

Настоящая работа является развитием предложенной в предыдущих публикациях [1 – 4] модели двухфазной жидкости, ориентированной на проведение прямого численного моделирования (DNS) сложных двухфазных течений. В отличие от большинства работ, которые описывают двухфазные течения как взаимодействие взаимопроникающих континуумов, представляющих каждую фазу по отдельности, в разрабатываемом авторами подходе предполагается, что в каждой точке расчетной области сплошная среда описывается одной плотностью, одной скоростью и одной внутренней энергией. Иными словами, в нашей модели, по терминологии [5], рассматриваются микропараметры и микродвижения, а не макропараметры, получаемые из микропараметров с помощью осреднения. Уравнения для микропараметров внешне похожи на уравнения для макропараметров, но отличаются от последних так же, как уравнения Навье-Стокса отличаются от RANS — осредненных по Рейнольдсу уравнений для вязкой жидкости: в первых используются молекулярные вязкость и теплопроводность, во вторых — турбулентные, зависящие от вида конкретного течения.

В [1] был предложен простейший вариант модели, основанный на уравнении Эйлера в качестве уравнения движения. Уравнение состояния для двухфазной среды было получено на основе уравнения состояния для чистых фаз типа Ван-дер-Ваальса. Для демонстрации работоспособности предложенной модели была рассчитана одномерная задача, в которой фазовый переход совершался за счет подведения в части расчетной области энергии через правую часть, теплопроводность не учитывалась. В [2] предложенная модель была изложена существенно более детально, был предложен более удачный способ построения уравнения состояния для двухфазной области, добавлена теплопроводность и приведены более содержательные численные расчеты: с помощью данного подхода сквозным методом была решена задача Стефана и показано совпадение результата с классическим решением этой задачи с явно выделенной границей раздела фаз, а также была решена одномерная задача о возникновении и слиянии двух пузырьков пара. В [3] предложенная в предыдущей работе модель, основанная на уравнении состояния типа Ван-дер-Ваальса, была обобщена на двумерный случай. В [4] для построения уравнения состояния для двухфазных областей использовались реальные уравнения состояния воды для чистых фаз и в качестве уравнения движения использовались уравнения Навье-Стокса для сжимаемой теплопроводной жидкости. Переход к реальным уравнениям состояния привел к необходимости изменить численный метод решения как гиперболической части задачи, так и параболической.

В настоящем препринте двумерная модель [3] обобщена на случай реальных уравнений состояний для жидкости и пара [6], проведены двумерные расчеты, показывающие работоспособность параллельного MPI кода, исследована его эффективность. Кроме того, в модель добавлен учет эффектов поверхностного натяжения, которые имеют место в окрестности зоны раздела фаз.

§1. Формулировка модели, учитывающая эффект поверхностного натяжения на границах фаз

Рассматривается движение сплошной среды, в каждой точке которой имеются определенные плотность, энергия и скорость. Предполагается, что остальные термодинамические функции, а также теплопроводность и вязкость полностью определяются величинами плотности и энергии, не обязательно локальными. Движение этого континуума подчиняется законам сохранения массы, импульса и энергии, которые для однокомпонентной среды в декартовой системе координат можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_b \frac{\partial \rho v_b}{\partial x_b} = R_\rho, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho v_a}{\partial t} + \sum_b \frac{\partial (\rho v_a v_b - p_{ab})}{\partial x_b} = R_a, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \sum_b \frac{\partial}{\partial x_b} \left(E v_b + q_b + \sum_c p_{cb} v_c \right) = R_E, \quad (3)$$

где v_a — компонента скорости среды вдоль оси x_a , $E = \rho e$ — полная энергия единицы объема, $e = \sum_b v_b^2 / 2 + \varepsilon$ — полная энергия единицы массы, ε — внутренняя энергия единицы массы, $q_a = \kappa \partial T / \partial x_a$ — компонента вектора потока тепла, p_{ab} — компоненты симметричного тензора напряжений, R_ρ , R_a , R_E — источники массы, импульса и энергии.

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

$$p_{ab} = \sigma_{ab} + \tau_{ab}. \quad (4)$$

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

$$\tau_{ab} = \left(\eta_v - \frac{2}{3} \eta_s \right) e_{cc} \delta_{ab} + 2\eta_s e_{ab}, \quad (5)$$

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

Тензор статических напряжений σ_{ab} в декартовой системе координат в однофазной классической жидкости имеет вид $\sigma_{ab} = -P\delta_{ab}$, где P — давление. Но такой тензор статических напряжений при диффузном описании межфазного интерфейса приводит к отсутствию эффектов поверхностного натяжения при взаимодействии фаз. На основе анализа возможных видов функционала энтропии в [7] предложено использовать тензор статических напряжений, зависящий также от градиента плотности. А именно:

$$\sigma_{ab} = T \left\{ \left[\frac{\mu\rho - P}{T} + \frac{\alpha(\rho)}{2} \left(\frac{\partial\rho}{\partial x_a} \right)^2 + \Theta_{\rho\rho} \right] \delta_{ab} - \alpha(\rho) \frac{\partial\rho}{\partial x_a} \frac{\partial\rho}{\partial x_b} \right\}, \quad (6)$$

где

$$\Theta_{\rho\rho} = \sum_a \left[-\frac{\mu}{T} - \frac{1}{2} \frac{\partial\alpha}{\partial\rho} \left(\frac{\partial\rho}{\partial x_a} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_a} \left(\alpha \frac{\partial\rho}{\partial x_a} \right) \right], \quad (7)$$

μ — химический потенциал, α — скалярный коэффициент.

Приведенные в [7] результаты расчетов показывают, что использование тензора статических напряжений (6) приводит к правильным углам смачивания и правильной форме капли, лежащей на поверхности в поле силы тяжести.

Скалярная функция α является настроечным параметром модели, который необходимо подбирать путем сравнения решения сферически симметричной задачи и данных экспериментов. Такие данные найти достаточно сложно, поэтому всюду ниже в этом препринте считается $\alpha = 0$. Определение функции $\alpha(\rho)$ требует дополнительных исследований.

§2. Уравнение состояния двухфазной среды, основанное на уравнениях состояния чистых фаз

Система законов сохранения, выписанная в предыдущем разделе, должна быть дополнена функциями $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$, которые зависят от рассматриваемой среды (а не от вида течения). Существенным для данной модели является умение вычислять функции $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ для всех значений плотности и внутренней энергии, которые могут появиться при сквозном расчете двухфазного течения. Обычно эти функции хорошо известны для чистых фаз. Ниже представлен простой и относительно универсальный способ построения термодинамических функций для однокомпонентных сред, основанный на уравнениях состояния для паровой и жидкой фаз.

Для построения необходимых термодинамических функций для воды мы использовали реальные уравнения состояния чистых фаз, предложенных в [6]. На Рис. 1 показано используемое в [6] разбиение плоскости (P, T) на области и используемые в них функции.

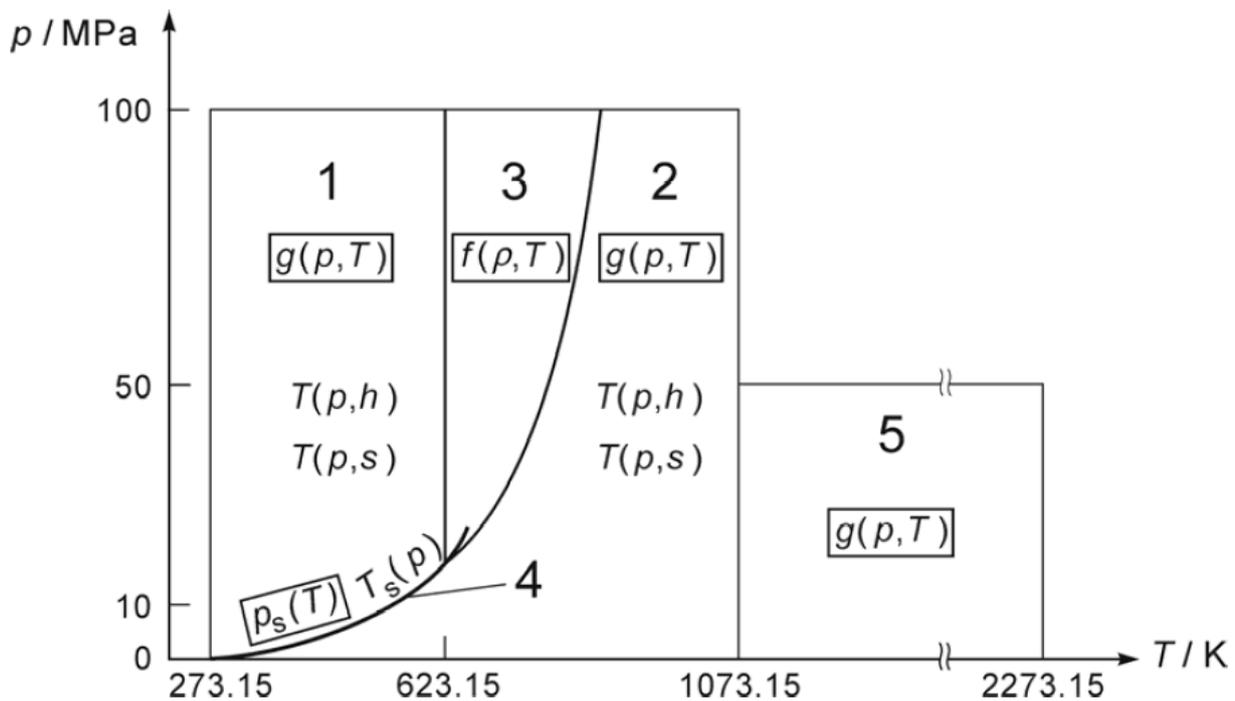


Рис. 1. Разбиение плоскости (P, T) на области и используемые в них функции

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

Для каждой из пяти областей используется своя функция. Например, в области 1 используется полиномиальная функция относительно давления и обратной температуры, состоящая из 34 слагаемых. Использование этих

функций непосредственно для вычисления функции $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ забирает слишком много компьютерного времени. Поэтому для областей 1, 2, 3 и 5 заранее насчитывались значения $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ на достаточно подробной сетке, чтобы в процессе расчета течений значения давления и температуры вычислять с помощью интерполяции невысокого порядка (от 1 до 3).

Линия насыщения 4, отделяющая в плоскости (P, T) газовую фазу от жидкой, в плоскости (ρ, ε) является целой областью. Эта область в плоскости $(1/\rho, \varepsilon)$ схематически изображена на рис. 2: красная линия соответствует линии насыщения в газе, синяя — в жидкости.

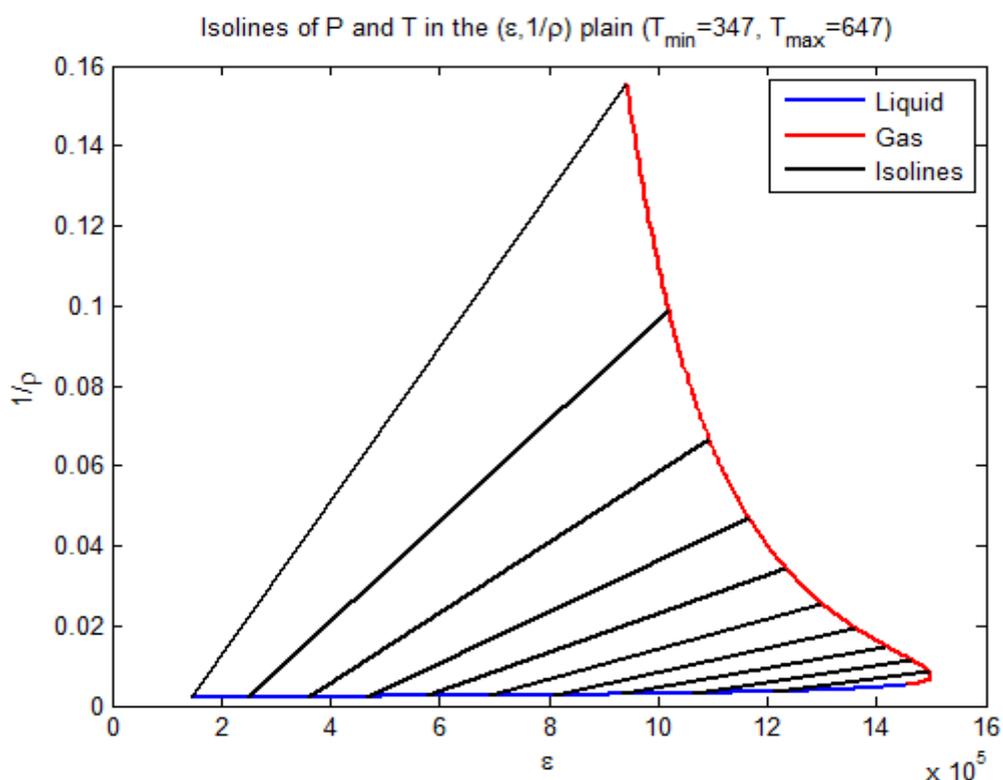


Рис. 2. Изолинии давления и температуры (черные) и линии насыщения в жидкости (синяя) и в газе (красная)

При сквозном расчете двухфазного течения пара значений $(1/\rho, \varepsilon)$ может попасть в область между красной и синей линиями, поэтому там тоже нужно уметь вычислять $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$. Мы используем для этого следующий метод.

Пусть в плоскости (P, T) известна линия насыщения $P_s(T)$. И пусть известны функции $\rho(P, T)$ и $\varepsilon(P, T)$, непрерывные всюду в рассматриваемой области изменения параметров, кроме линии насыщения, и допускающие построение обратных функций $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$ (тем самым перегретая жидкость и переохлажденный пар исключаются из рассмотрения). На линии насыщения плотность и внутренняя энергия как функции давления и

температуры терпят разрыв. Тогда $\rho_L(P, T)$ и $\varepsilon_L(P, T)$ — известные функции на линии насыщения в жидкости, $\rho_G(P, T)$ и $\varepsilon_G(P, T)$ — те же функции в газе. В пространстве $(V = 1/\rho, \varepsilon)$ линии насыщения соответствует область межфазового перехода, заключенная между линиями, которые в параметрическом виде задаются следующими формулами (красная и синяя линии на Рис. 2):

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

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

Прямые, соединяющие лежащие на границах области межфазового перехода точки $(V = 1/\rho_L(P_s(T), T), \varepsilon = \varepsilon_L(P_s(T), T))$ и $(V = 1/\rho_G(P_s(T), T), \varepsilon = \varepsilon_G(P_s(T), T))$ образуют однопараметрическое семейство прямых, зависящих от параметра T . Чтобы найти значения температуры T_0 и давления P_0 , соответствующие точке (ρ_0, ε_0) , лежащей в области межфазового перехода, ищется такое значение параметра T , при котором прямая в пространстве (V, ε) из описанного выше семейства пройдет через точку $(V_0 = 1/\rho_0, \varepsilon_0)$. После этого давление восстанавливается по формуле $P_0 = P_s(T_0)$.

§3. Общая схема расчета шага по времени

Изложенная выше система законов сохранения может быть в двумерном случае представлена в векторном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{F}^E + \mathbf{F}^{NS}) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{G}^E + \mathbf{G}^{NS}) = \mathbf{R}, \quad (8)$$

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

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

Задача расчета решения на новом слое по времени по данным на предыдущем слое вычисляется методом расщепления по физическим процессам.

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

$$\mathbf{Q}_{m,k}^{n+1} = \mathbf{Q}_{m,k}^n - \frac{\tau}{h_x} [\mathbf{F}_{m+1/2,k} - \mathbf{F}_{m-1/2,k}] - \frac{\tau}{h_y} [\mathbf{G}_{m,k+1/2} - \mathbf{G}_{m,k-1/2}] + \tau \mathbf{R}_{m,k}^n, \quad (9)$$

где m и k — номера точек сетки по x и по y , n — номер шага по времени, h_x и h_y — шаги сетки вдоль x и y , τ — величина шага по времени. Для свойств схемы (9) определяющую роль играет способ вычисления потоков.

Процесс вычисления решения на новом слое заключается в том, что сначала решается уравнение Эйлера

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^E}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}^E}{\partial y} = \mathbf{R}^E$$

по схеме

$$\mathbf{Q}_{m,k}^E = \mathbf{Q}_{m,k}^n + \tau \left[\mathbf{R}_{m,k}^E - \frac{\mathbf{F}^E(\mathbf{Q}^n)_{m+1/2,k}^{n+1/2} - \mathbf{F}^E(\mathbf{Q}^n)_{m-1/2,k}^{n+1/2}}{h_x} - \frac{\mathbf{G}^E(\mathbf{Q}^n)_{m,k+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{G}^E(\mathbf{Q}^n)_{m,k-1/2}^{n+1/2}}{h_y} \right]$$

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

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^{NS}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}^{NS}}{\partial y} = \mathbf{R}^{NS}$$

по схеме

$$\mathbf{Q}_{m,k}^{n+1} = \mathbf{Q}_{m,k}^E + \tau \left[\mathbf{R}_{m,k}^{NS} - \frac{\mathbf{F}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m+1/2,k}^{n+1/2} - \mathbf{F}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m-1/2,k}^{n+1/2}}{h_x} - \frac{\mathbf{G}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m,k+1/2}^{n+1/2} - \mathbf{G}^{NS}(\mathbf{Q}^n)_{m,k-1/2}^{n+1/2}}{h_y} \right].$$

Способ разбиения правой части (8) на два слагаемых достаточно произволен и выбирается из удобства, важно лишь, чтобы

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

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

Для каждой подзадачи (гиперболической и параболической) потоки вычисляются с помощью явной схемы. Это обычно накладывает ограничение на шаг по времени $\tau \sim h^2$, но в рассмотренных задачах такое ограничение не было обременительным по сравнению с ограничением из-за требования точности (т.к. величина плотности и энергии при переходе из одной фазы в другую меняется очень сильно). Поэтому для расчета потоков, связанных с вязкостью и теплопроводностью, использовалась простейшая явная центральная схема.

§4. Вычисление потоков для гиперболической части системы

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

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = \mathbf{R}, \quad (10)$$

которое может быть также записано в недивергентном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{a}(\mathbf{Q}) \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = \mathbf{R}, \quad (11)$$

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

В силу гиперболичности системы (10) матрица \mathbf{a} представима в виде $\mathbf{a} = \mathbf{\Phi}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Phi}$, где матрица $\mathbf{\Phi}$ состоит из левых собственных векторов матрицы \mathbf{a} , а на диагонали диагональной матрицы $\mathbf{\Lambda}$ стоят соответствующие собственные числа.

Для расчета потоков на грани ячейки $\mathbf{F}_{m+1/2}$ используется уравнение (11) с "замороженной" матрицей $\mathbf{a}_{m+1/2}^* = \mathbf{a}(\mathbf{Q}^{hll})$:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{a}^* \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = \mathbf{R}. \quad (12)$$

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

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

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

Если умножить уравнение (12) слева на k -й собственный вектор φ_k^* (k -ю строку матрицы Φ^*), то получится уравнение для k -го инварианта системы (12):

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

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

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

$$(I_k)_{m+1/2} = (I_k)_m^n, \quad (13)$$

если $-1 < q_k^* < 0$, то

$$(I_k)_{m+1/2} = (I_k)_{m+1}^n. \quad (14)$$

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

$$\mathbf{Q}_{m+1/2} = (\Phi_{m+1/2}^*)^{-1} \mathbf{I}_{m+1/2}. \quad (15)$$

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

§5. Проверка эффективности параллельного кода

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

Вычислительная область разбивается на блоки, где каждый блок представляет собой структурированную сетку. Ориентация блоков

предполагается одинаковой, положение в пространстве может быть, вообще говоря, любым. Узлы сетки разделены на внутренние и внешние. Данные на внутренних узлах могут быть получены (вычислены) из данных во внутренних и внешних узлах данного блока, данные на внешних узлах должны быть заданы из граничных условий или значений на внутренних узлах другого блока; считается, что значения могут быть получены из данных только одного соседнего блока. Различные блоки могут принадлежать одному процессору. Обмены между блоками, принадлежащими различным процессорам, осуществляются с использованием MPI (Message Passing Interface).

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

На Рис. 3 показано ускорение в зависимости от числа процессоров. Эффективность распараллеливания составляет около 85%.

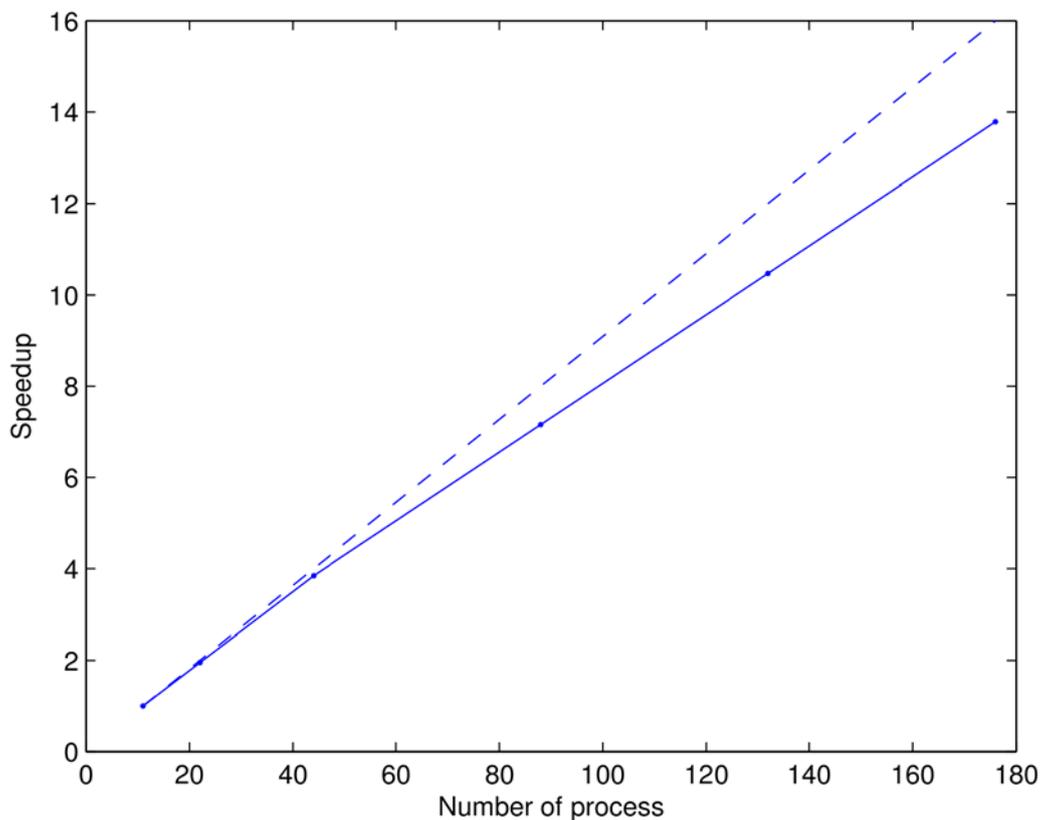


Рис. 3. Быстродействие в зависимости от числа используемых процессоров

Для повышения эффективности распараллеливания планируется перейти на использование общей памяти на одном узле (MPI/OpenMP). Для увеличения гибкости программы планируется перейти к интерполяции из нескольких разных блоков на внешние узлы, снять ограничение на ориентацию блоков.

§6. Проверка работоспособности численного метода и программы

Для чисто однофазного режима течения, когда вода находится в парообразном состоянии и хорошо описывается моделью совершенного газа, программа тестировалась на стандартных аналитических решениях типа ударной волны и распада произвольного разрыва (тест Лакса). Сложнее обстоит дело с тестированием программы в двухфазном режиме, когда в расчетной области присутствуют и пар и жидкость и происходит переход одного в другое. Найти двухфазный двумерный тест для воды с количественными характеристиками оказалось довольно сложной задачей. Поэтому тестирование двухфазного режима проводилось путем сравнения результатов расчета по одномерной программе, написанной в Matlab, с результатами расчетов по двумерной программе той же задачи, но повернутой на некоторый угол. Кроме того, правильность аппроксимации разностной схемой именно двумерных уравнений проверялась путем проверки сохранения осевой симметрии решения.

Тест 1. Одномерное решение, повернутое относительно оси x на 30 градусов

В качестве эталонного решения использовалось решение одномерной задачи, начальное распределение плотности и внутренней энергии в которой представлено на Рис. 4 и 5 (расчетная область заполнена водой в разных фазовых состояниях). Начальные скорости равны нулю, максимальное значение плотности равно 602 кг/м^3 , минимальное — 96.3 кг/м^3 , максимальное значение удельной внутренней энергии равно $9.39 \times 10^8 \text{ Дж/кг}$, минимальное — $2.37 \times 10^8 \text{ Дж/кг}$. Через эти значения проведена гауссова функция. При этом начальные распределения давления и температуры оказались не столь простыми, см. Рис. 6 и 7. При этих распределениях термодинамических функции в окрестности максимума плотности оказалась небольшая область жидкой фазы, окруженная с обеих сторон паром. На границах расчетной области ставились условия Дирихле, значения функций для которых брались из посчитанного заранее одномерного решения.

Было сделано 77 шагов по времени с шагом $\tau = 2.5 \times 10^{-6} \text{ сек}$ на сетке 200×200 точек в квадратной области 1×1 метр. Решение сохранило линейчатую структуру, что при условии задания на границах условия Дирихле из одномерной задачи (с учетом поворота на 30 градусов) доказывает правильность численного решения двумерной задачи. Финальные поля плотности, удельной внутренней энергии, давления и температуры показаны на Рис. 8 – 11.

Тест 2. Осесимметричное решение

В качестве второй тестовой задачи решена осесимметричная задача, критерием качества в которой является сохранение осевой симметрии. Она

получается вращением начальных данных вокруг точки экстремума термодинамических величин. Начальные поля плотности и удельной внутренней энергии показаны на Рис. 12 – 13. Они соответствуют начальным профилям этих же величин в предыдущей задаче. На Рис. 14 показано пространственное распределение параметра α , который в докритической зоне равен нулю в жидкой фазе, единице – в газовой фазе, в двухфазной области между кривой насыщения жидкости (синяя линия) и кривой насыщения газа (красная линия) в плоскости $(\varepsilon, 1/\rho)$ (см. Рис. 2) равномерно меняется от нуля до единицы вдоль изотерм, которые совпадают с изобарами. В закритической области значение этого параметра условно, так как нет реальной границы между жидкостью и газом. В текущей реализации кода в закритической области используется условная граница, отделяющая газ от жидкости, которая имеет форму луча $\{P = P_c, T > T_c\}$. Фазовый портрет начальных данных в плоскости (P, T) показан на Рис. 15. Поскольку линия, изображающая фазовый портрет, нигде не пересекает линию насыщения (в докритической области), невозможно однозначно сказать, какую часть расчетной подобласти занимает жидкость, а какую — газ. Определенно можно только сказать, что в окрестности центра расчетной области располагается вода в жидком состоянии, в окрестности границы расчетной области — в газообразном состоянии. Условная граница на Рис. 14 проведена через точку, в которой в закритической области давление равно давлению в критической области.

В этом тесте на границах расчетной области ставились так называемые "мягкие" граничные условия: производные по нормали к границе от плотности, скорости и энергии равны нулю. Это граничное условие приводит к заметному отражению от границ и искажению осевой симметрии поля модуля скорости, но на рассматриваемых временах оно не доходит до центральной части расчетной области.

Было сделано 2900 шагов по времени с шагом $\tau = 10^{-6}$ sec на сетке 1000×1000 точек в квадратной области 10×10 метров. Финальные распределения плотности, модуля скорости, удельной внутренней энергии и параметра α показаны на Рис. 16 – 19. Фазовый портрет финальных данных в плоскости (P, T) показан на Рис. 20.

Из рисунков видно, что в численном решении, несмотря на использование декартовой сетки, с хорошей точностью сохраняется осевая симметрия. С учетом того, что правильность решения одномерных задач проверена в предыдущем тесте, можно сделать вывод о том, что и двумерные задачи MPI код решает правильно.

Mid-section of field ρ , $t=0$ sec,
min=96.3, max=602 kg/m³

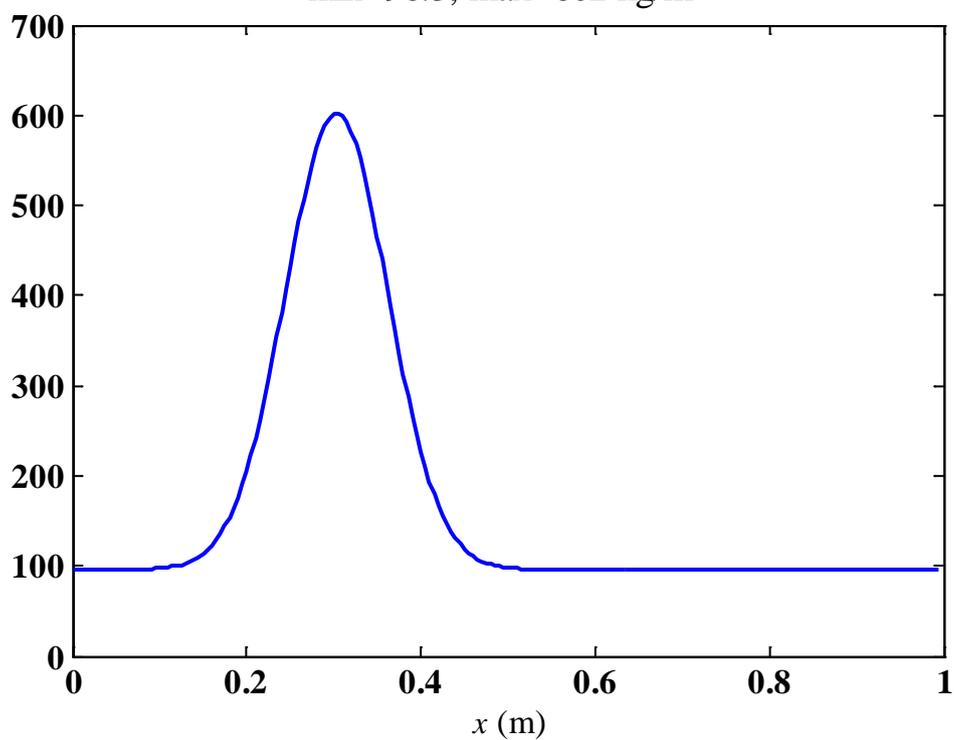


Рис. 4. Начальное распределение плотности

Mid-section of field ε , $t=0$ sec,
min=2.37e+08, max=9.39e+08 J/kg

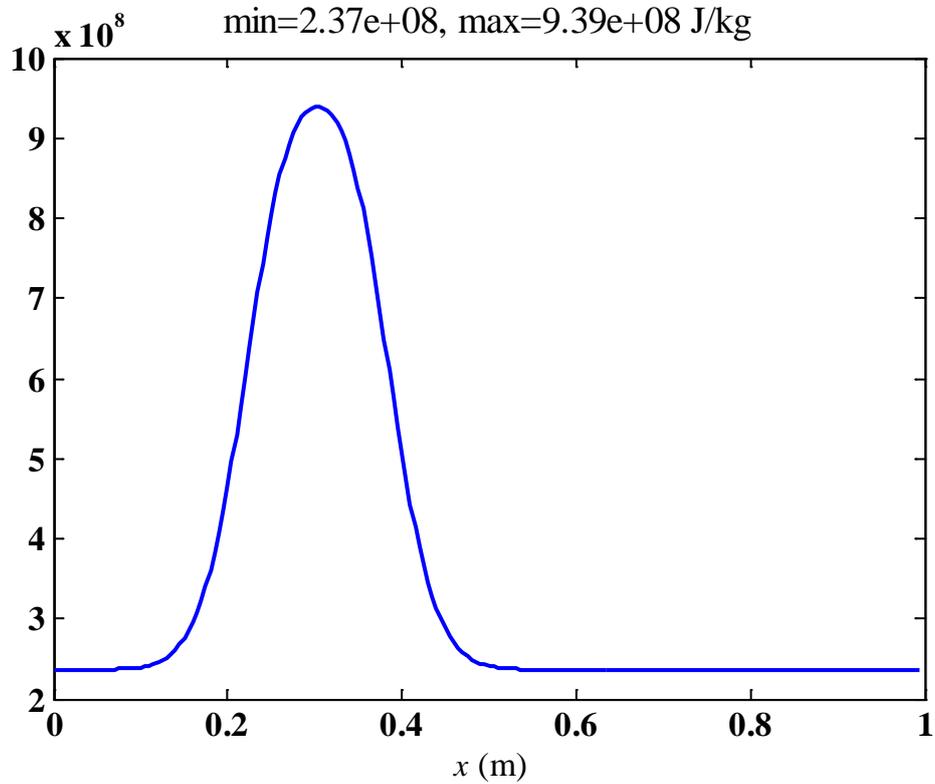


Рис. 5. Начальное распределение внутренней энергии

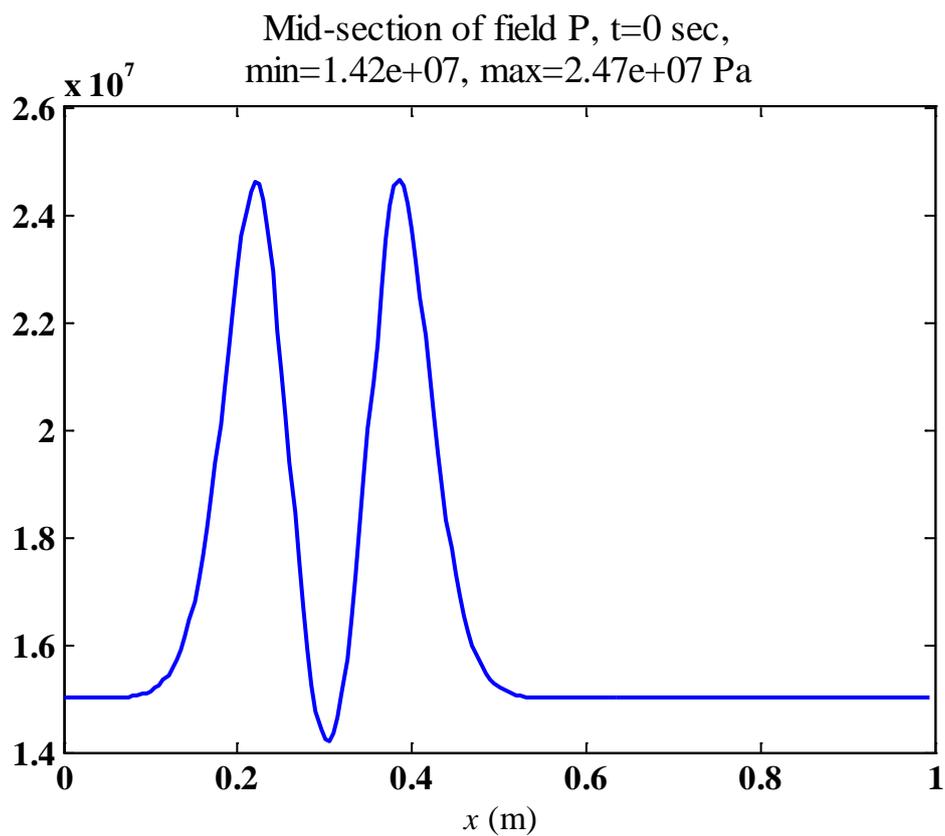


Рис. 6. Начальное распределение давления

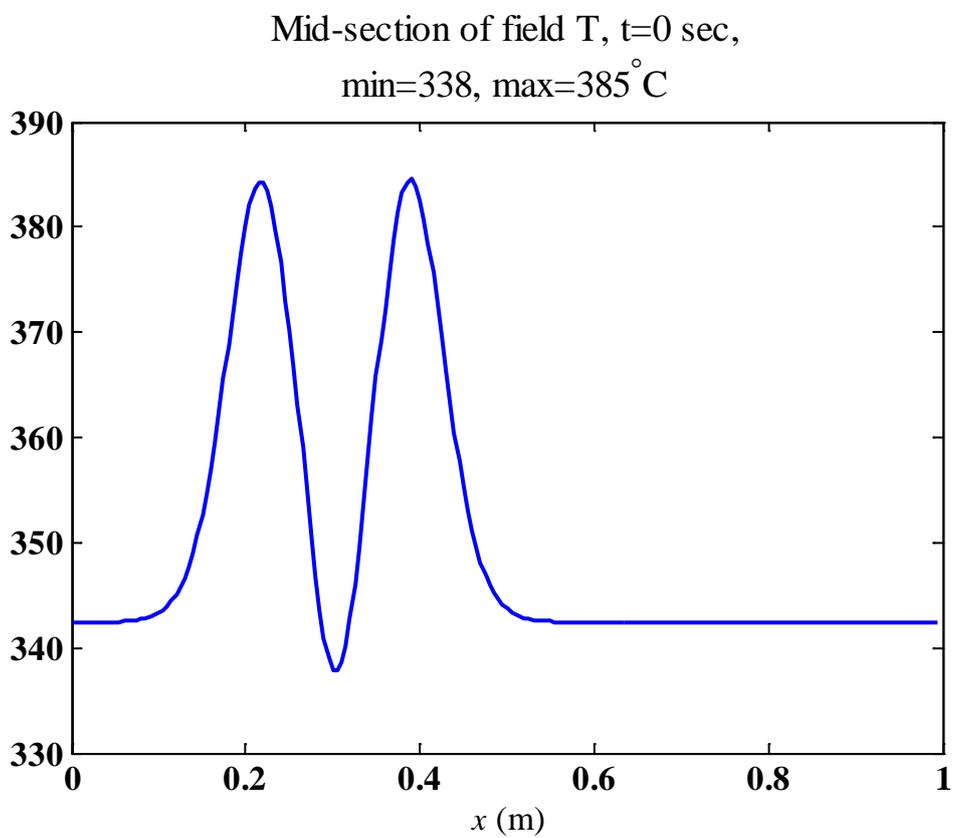


Рис. 7. Начальное распределение температуры

Field ρ , $t=0.000193$ sec, $\min=96.3$, $\max=640$ kg/m³

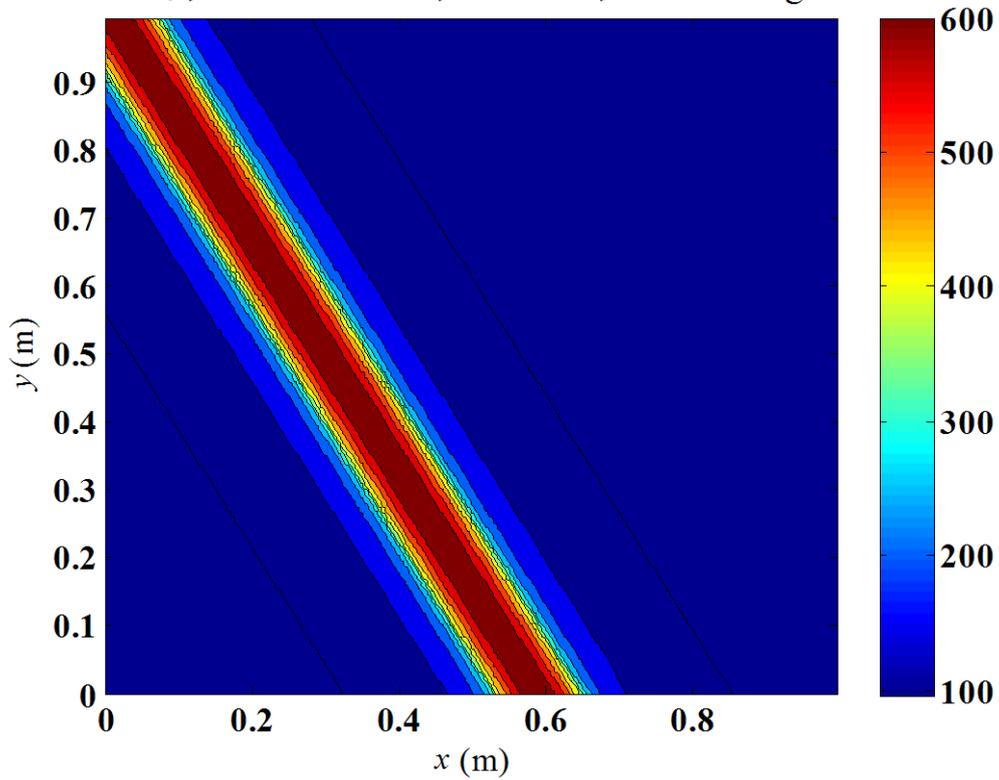


Рис 8. Финальное распределение плотности

Field ε , $t=0.000193$ sec, $\min=2.37e+08$, $\max=9.99e+08$ J/kg $\times 10^8$

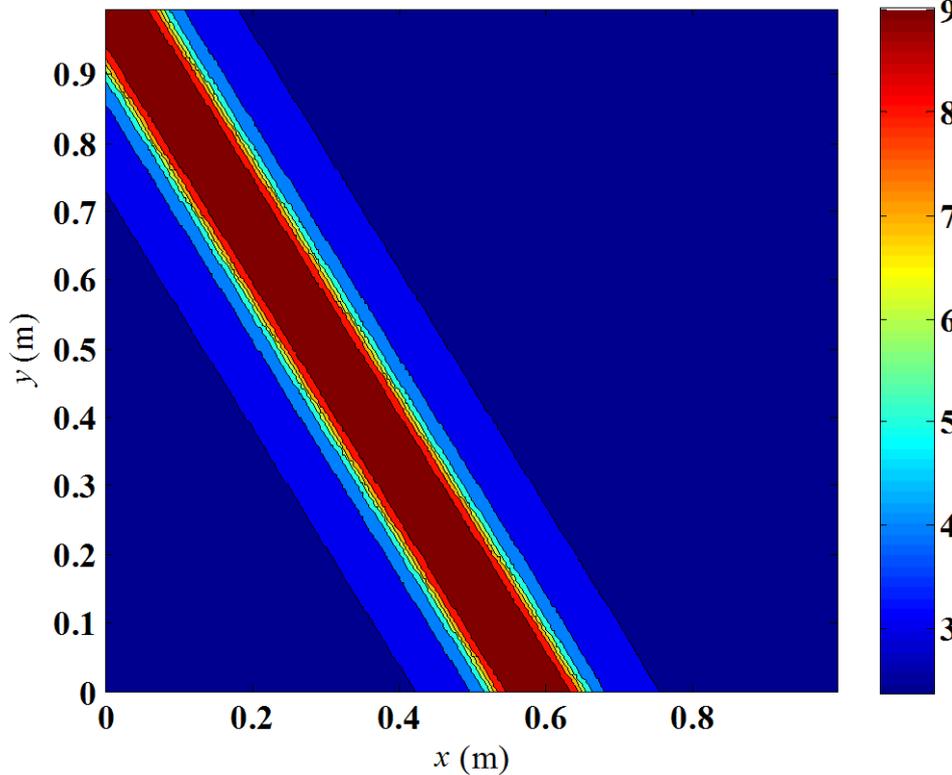


Рис. 9. Финальное распределение внутренней энергии

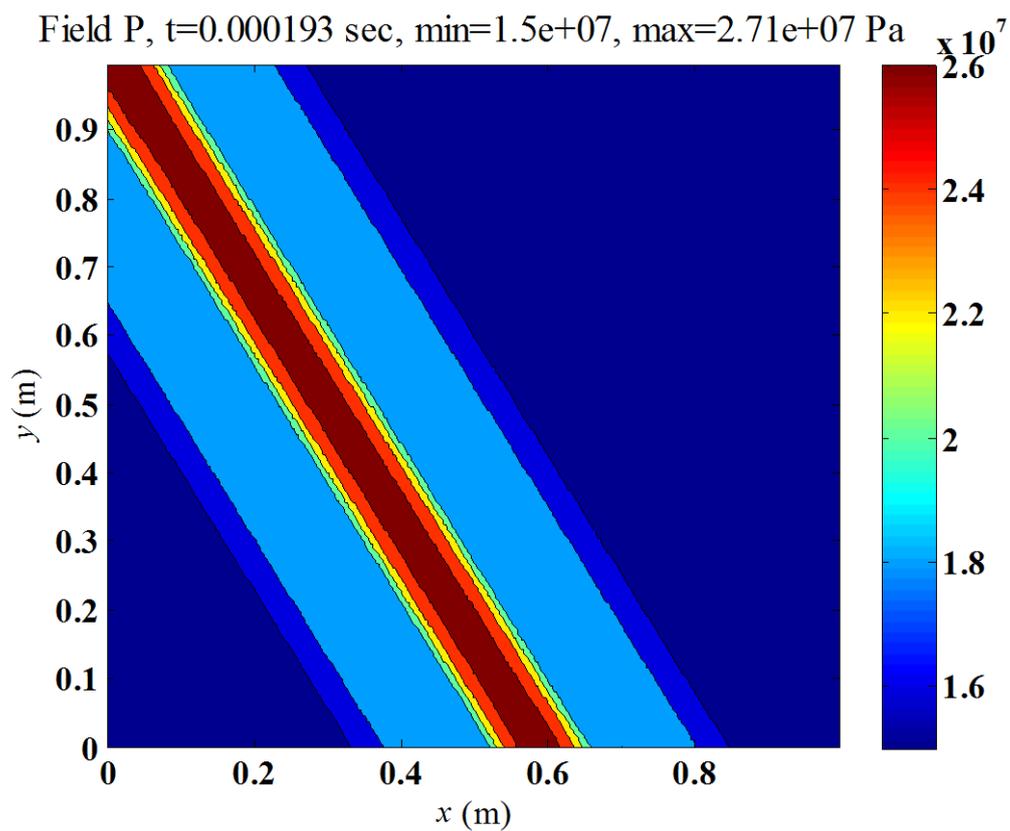


Рис. 10. Финальное распределение давления

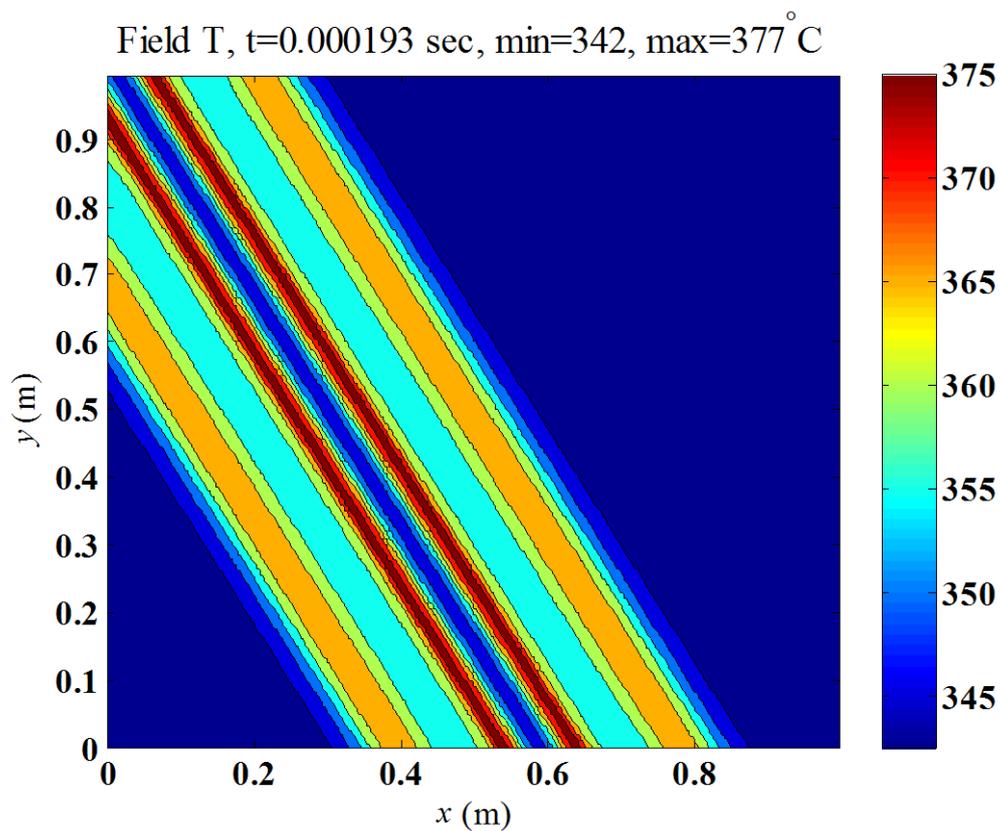


Рис. 11. Финальное распределение температуры

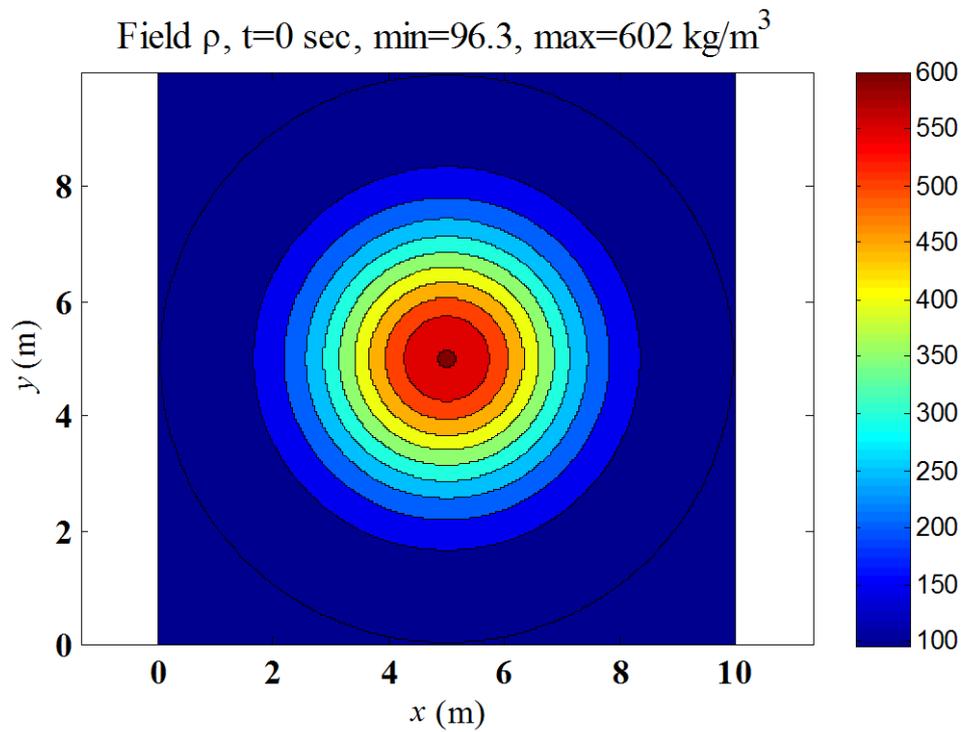


Рис. 12. Начальное распределение плотности

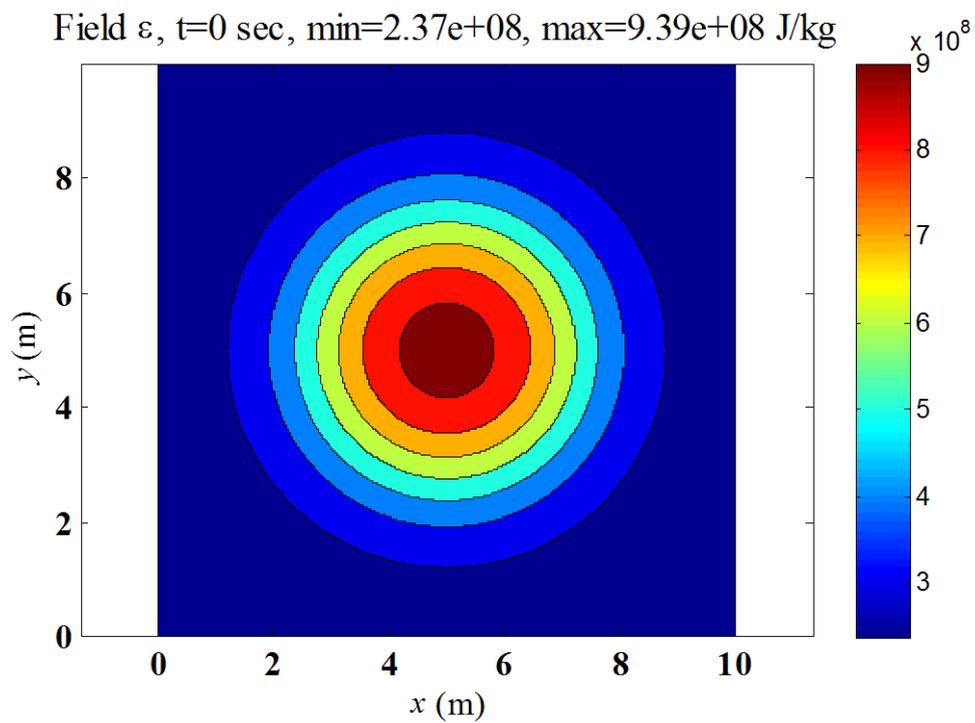


Рис. 13. Начальное распределение внутренней энергии

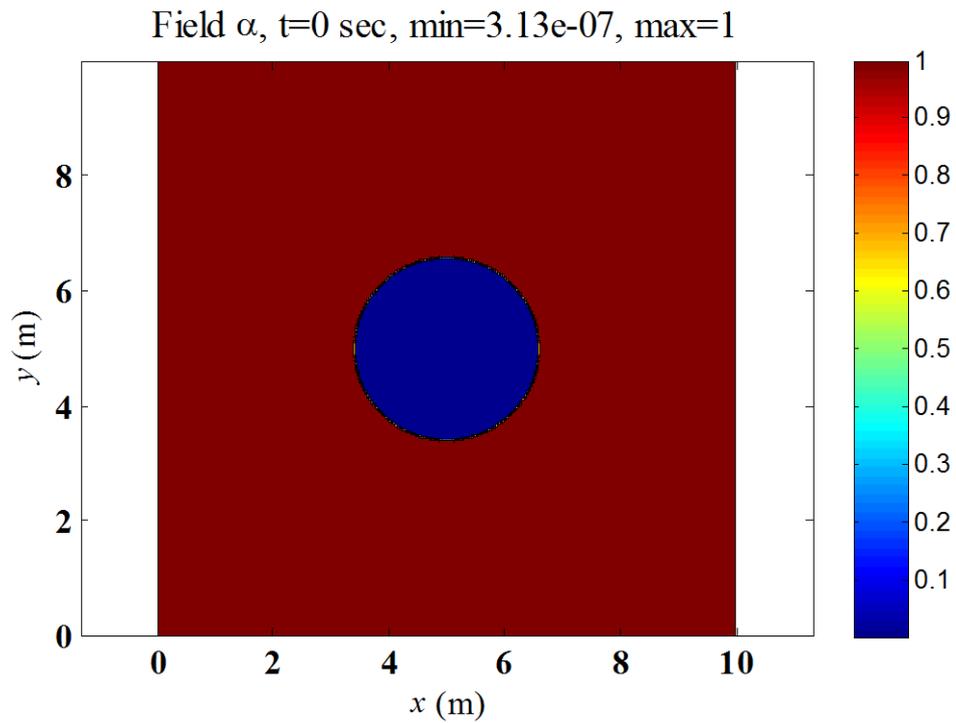


Рис. 14. Начальное распределение параметра α

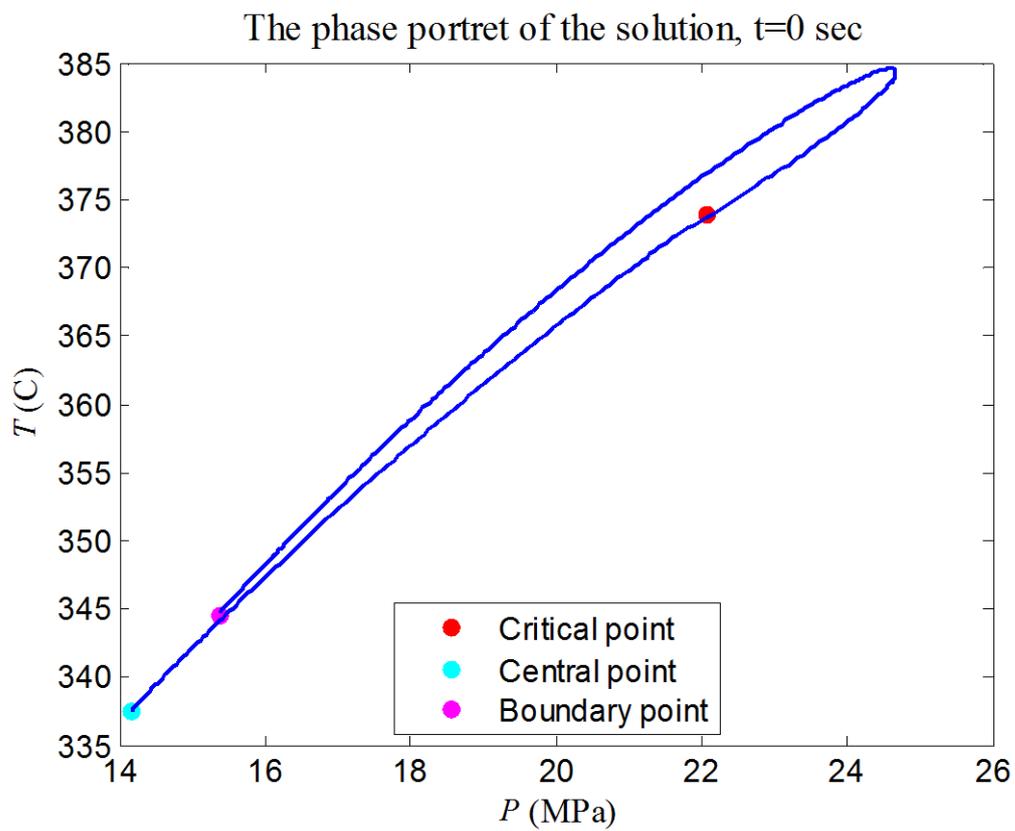


Рис. 15. Фазовый портрет начальных данных в плоскости (P,T)

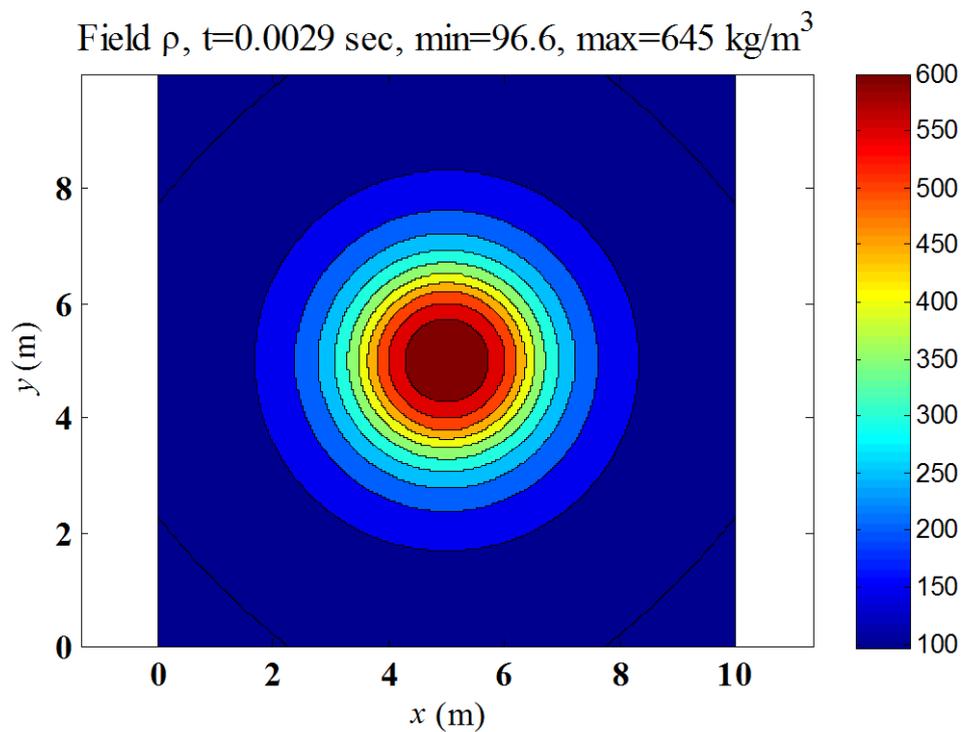


Рис. 16. Финальное распределение плотности

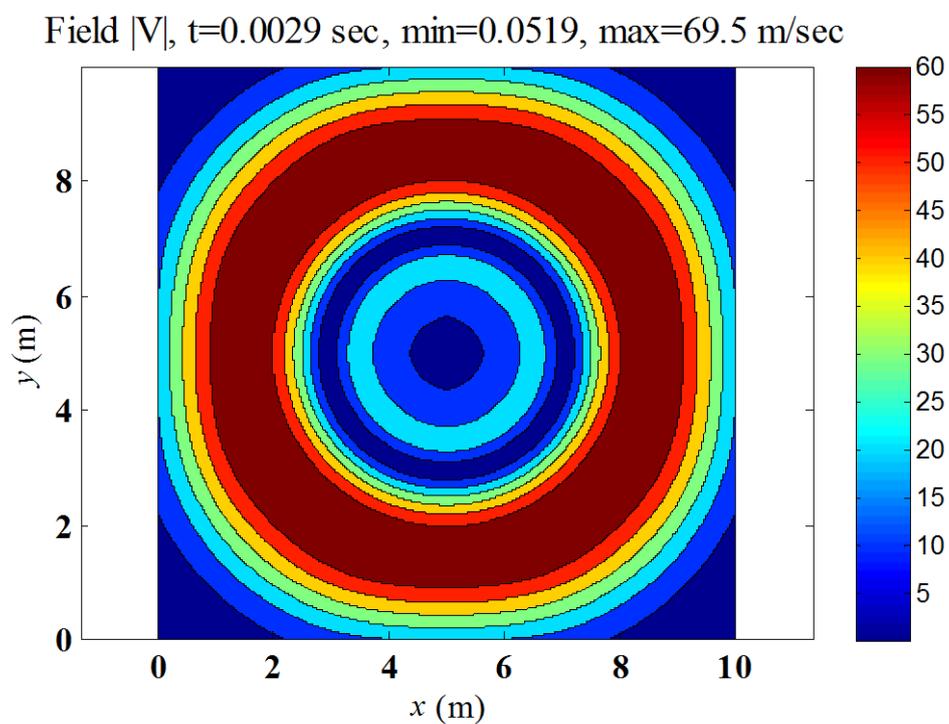


Рис. 17. Финальное распределение модуля скорости

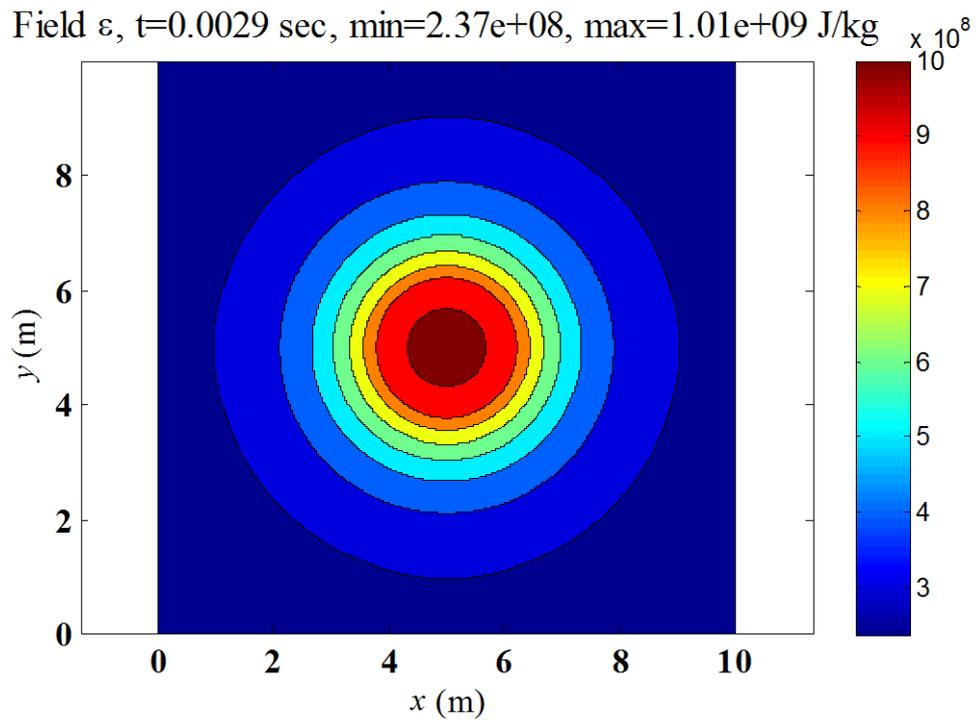
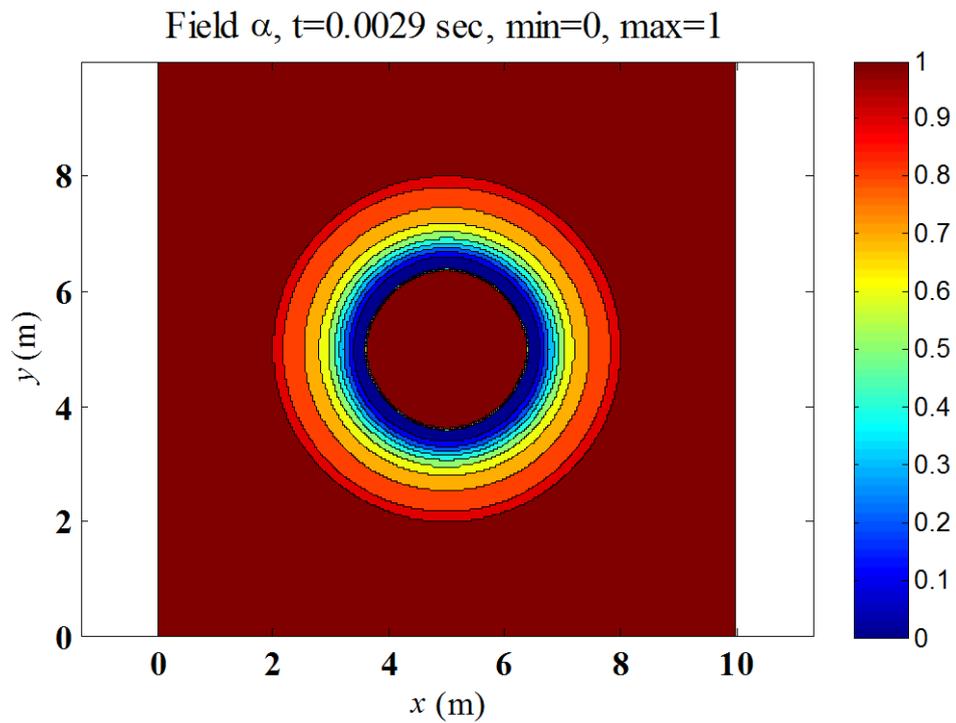


Рис. 18. Финальное распределение внутренней энергии

Рис 19. Финальное распределение параметра α

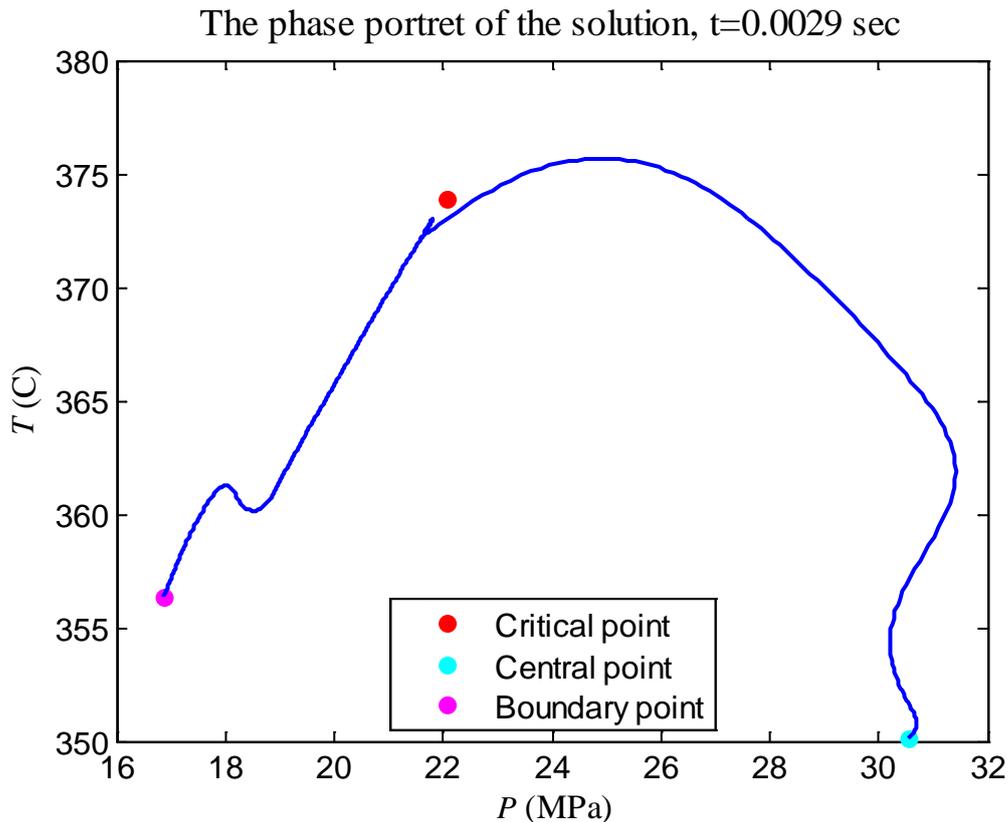


Рис. 20. Фазовый портрет финальных данных в плоскости (P,T)

Из особенностей полученного численного решения можно отметить тот факт, что к концу расчета в центре области образовалась область, заполненная "газом". Это соответствует характеру распределения начальных полей: в центре расчетной области была область пониженного давления, под воздействием перепада давления вещество устремилось к центру, давление в центре увеличилось, и состояние воды перешло в закритическую область. Поэтому противоречие, заключающееся в том, что при повышении давления вода перешла в газовую фазу, является кажущимся: выбор значения параметра α в закритической области является условным.

Выводы и планы

Численные эксперименты показывают, что параллельный код работает корректно. Тем не менее, есть возможность повысить его эффективность.

Уже имеющийся код позволяет приступить к калибровке модели, учитывающей поверхностное натяжение в окрестности области разграничения фаз.

Список литературы

1. Рыков Ю. Г., Зайцев Н. А., Кабанов В.В., Лысов В. Г., Хабибуллин Р.Ф. *Возможная термодинамическая модель для использования в схеме прямого моделирования двухфазных потоков* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2012, № 40. 19 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-40>
2. Головизнин В.М., Зайцев Н. А., Кабанов В.В., Лысов В. Г., Рыков Ю. Г. *Об одном подходе к прямому моделированию двухфазных потоков* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2012, № 73, 36 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-73>.
3. Зайцев Н.А., Критский Б.В., Рыков Ю. Г. *Об одной двумерной модели расчета двухфазных потоков* // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2014, № 86. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-86>.
4. Зайцев Н.А., Критский Б.В. *Односкоростная модель двухфазных жидкостей для расчета течений из первых принципов* (в печати).
5. Нигматулин Р.И. *Динамика многофазных сред*, ч. I — М.: «Наука», Гл. ред. физ-мат лит, 1987 — 464 с.
6. IAPWS, Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for Thermodynamic Properties of Water and Steam (International Association for the Properties of Water and Steam, 2007), www.iapws.org.
7. Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. *Основы метода функционала плотности в гидродинамике*, М.: Физматлит, 2009.
8. Harten A., Lax P., and van Leer B.. *On upstream differencing and Gudonov-type schemes for hyperbolic conservation laws*. SIAM Review 25(1) (1983), 35–61.

Оглавление

Вводные замечания	3
§1. Формулировка модели, учитывающая эффект поверхностного натяжения на границах фаз	4
§2. Уравнение состояния двухфазной среды, основанное на уравнениях состояния чистых фаз	6
§3. Общая схема расчета шага по времени.....	8
§4. Вычисление потоков для гиперболической части системы.....	10
§5. Проверка эффективности параллельного кода	11
§6. Проверка работоспособности численного метода и программы	13
Выводы и планы	23
Список литературы.....	24