



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

Препринты ИПМ • Препринт № 243 за 2018 г.



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

Зайцев Н.А., Критский Б.В.

Расчет течений жидкости
Ван дер Ваальса в модели
диффузного интерфейса на
адаптивных сетках

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зайцев Н.А., Критский Б.В. Расчет течений жидкости Ван дер Ваальса в модели диффузного интерфейса на адаптивных сетках // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 243. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2018-243](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-243)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-243>

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

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский

**Расчет течений жидкости Ван-дер-Ваальса
в модели диффузного интерфейса
на адаптивных сетках**

Москва — 2018

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский. *Расчет течений жидкости Ван-дер-Ваальса в модели диффузного интерфейса на адаптивных сетках.*

Аннотация. В препринте описывается метод расчета двухфазных течений в рамках диффузного интерфейса на адаптивных сетках и приводятся численные примеры. Достигнуто семикратное увеличение скорости расчета при той же точности. При расчете течений с большим перепадом плотности и большей размерности выигрыш должен быть еще больше.

Ключевые слова: двухфазные течения, прямое численное моделирование, термодинамическая модель, диффузный интерфейс, адаптивные сетки.

N. A. Zaitsev, B. V. Kritskii. *Calculation of van der Waals fluid flows in the diffuse interface model on adaptive grids.*

Abstract. The preprint describes a method of diffuse interface for calculating two-phase flows on adaptive grids and provides numerical examples. A sevenfold increase in the speed of calculation was achieved with the same accuracy. The gain must be even higher in computations with a larger density difference and a higher dimension.

Key words: two-phase flows, direct numerical simulation, thermodynamic model, diffuse interface, adaptive grids

Оглавление

Введение	3
§1. Законы сохранения	5
§2. Жидкость Ван-дер-Ваальса	6
§3. LDG метод для решения уравнений Навье-Стокса-Кортевега.....	9
§4. Адаптация сетки к решению	12
§5. Результаты численных экспериментов	14
Выводы	19
Список литературы.....	19

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

Введение

Природные явления и техника дают огромное число примеров многофазных систем. Касаясь лишь технических устройств, укажем на генерацию и последующую конденсацию пара в установках тепловой и атомной энергетики, процессы дистилляции, ректификации, выпарки, используемые в химической технологии, холодильной и криогенной технике, пищевых производствах. Двухфазные течения возникают в задачах нефтедобычи как при фильтрации флюидов в пласте, так и при их течении внутри ствола скважины. В промышленности фазовые переходы происходят в парогенераторах, теплообменниках и различных трубопроводах. В повседневной жизни каждый сталкивается с двухфазным течением, вызванным изменением температуры при кипячении воды.

Фазовые переходы характеризуются резким изменением свойств среды при переходе через границу раздела фаз. При вращении корабельного винта, например, возникает явление кавитации, когда давление локально опускается ниже давления кипения жидкости и осуществляется фазовый переход. При переходе пузырька в зону нормального давления происходит его быстрое схлопывание, сопровождаемое образованием волн давления, приводящих к разрушению лопастей винта.

Для моделирования указанных выше процессов используются самые различные методы, которые можно разделить на две большие группы. Методы первой группы основывались на концепции многоскоростного континуума и определении взаимопроникающего движения фаз (см., например, [1]). Уравнения для этих моделей получаются при помощи различных процессов усреднения. При решении задач не производится рассмотрение каждого пузырька в отдельности, вместо этого производится усреднение, "размазывание" каждой фазы по всему объему. Многоскоростной континуум в случае двухфазных однокомпонентных сред представляет собой совокупность двух континуумов, каждый из которых относится к своей фазе и имеет свою плотность, свою скорость и т.д. Взаимодействие пара с жидкостью описывается с помощью относительных фазовых проницаемостей, считается, что в каждой точке двухфазная среда находится в термодинамическом равновесии.

Более подробные модели, образующие вторую группу методов, выделяют границу между различными фазами. В условиях стремительного роста производительности компьютеров все более привлекательными становятся расчеты сложных двухфазных течений без использования процедур осреднения на основе законов сохранения и физических свойств неосредненной сплошной среды, которые имеют наибольшую достоверность и универсальность. Подробность этого подхода ограничивается масштабами явлений, для которых справедлива модель сплошной среды.

Современная теория межфазных взаимодействий и капиллярных сил восходит своими корнями к работам начала XIX века. В 1804 г. Томас Юнг обосновал теорию капиллярных явлений на принципе поверхностного натяжения. Юнг, Лаплас и Гаусс рассматривали границу раздела между двумя жидкими фазами (интерфейс) как поверхность нулевой толщины, обладающую физическими свойствами, такими как поверхностное натяжение. В этих исследованиях, основанных на рассмотрении равновесных состояний, предполагалось, что физические параметры, такие как плотность, вообще говоря, терпят разрыв на интерфейсе. Физические процессы, такие как капиллярные явления на границе раздела фаз, описывались соответствующими граничными условиями. Позже Пуассон (1831), Максвелл (1876) и Гиббс (1876) на основе представлений о молекулярном строении вещества указали на то, что переход вещества из одной фазы в другую на самом деле занимает зону ненулевой толщины, в которой параметры среды меняются быстро, но гладко, от значений в одной фазе вне зоны перехода до значений в другой фазе. На самом деле, Юнг упоминал наличие градиента плотности в конечном по толщине слое, но отбросил этот эффект, посчитав его несущественным.

Идея о том, что интерфейс имеет ненулевую толщину (т.е. что он является диффузным) была детально разработана Лордом Рэлеем (1892) [2] и Ван-дер-Ваальсом (1893) [3], которые предложили градиентные теории интерфейса, основанные на термодинамических принципах. В частности, Ван-дер-Ваальс построил теорию интерфейса, основанную на его уравнении состояния и использовал ее для вычисления толщины интерфейса, и показал, что она стремится к бесконечности при приближении к критической точке. Но в связи с отсутствием в модели поверхности, которая могла бы быть носителем поверхностного натяжения, которое, в свою очередь, является источником капиллярных сил, в теории диффузного интерфейса возник вопрос об описании капиллярных явлений и сил межфазного взаимодействия. Кортевег (1981) предположил наличие в жидкости сил, возникающих вследствие неоднородности жидкости, и предложил зависимость тензора капиллярных сил от плотности и ее пространственных производных [4]. Градиентная теория неоднородных жидкостей, переоткрытая Каном и Хилардом в 1958 году [5], позволила понять механизм спинодального распада — расслоения однородного вещества на различные фазы во всем объеме, в котором вещество находится в термодинамически неустойчивых состояниях. Обширную литературу по различным способам обоснования градиентной теории межфазного взаимодействия, вопросам существования сильных и слабых решений этой системы уравнений, численным методам их решений и т.д. можно найти, например, в [6 – 10]. В данной работе рассмотрен метод, принадлежащий к группе методов, использующих диффузное описание межфазного интерфейса.

При моделировании сложных двухфазных течений отслеживание поверхностей раздела фаз становится катастрофически сложной задачей. Поэтому в предлагаемой модели концепция межфазной поверхности не

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

В предыдущих работах авторов была предложена модель двухфазной однокомпонентной среды с диффузным интерфейсом и единым уравнением состояния для обеих сред, проверена работоспособность такого подхода для расчета течений реальной воды и разработано применение локального разрывного методам Галеркина для решения уравнений Навье-Стокса-Кортевега [11 – 15].

В настоящем препринте приводится описание метода расчета течений с диффузными интерфейсами на адаптивных сетках и приводятся результаты демонстрационных расчетов. Расчеты проводились для среды Ван-дер-Ваальса, т.к. многие вычислительные трудности, определяемые наличием так называемой области эллиптичности в пространстве определяющих термодинамических параметров и зон резкого изменения параметров среды, для реальных двухфазных сред и среды Ван-дер-Ваальса совпадают.

Прежде чем описывать методику расчета двухфазных течений на адаптивных сетках, приведем вкратце описание модели и численного метода, разработанные ранее [15].

§1. Законы сохранения

Уравнениями, выражающими законы сохранения массы, импульса и энергии для вязкой теплопроводной среды при наличии капиллярных сил в рамках модели диффузных интерфейсов, являются уравнения Навье-Стокса-Кортевега, которые в отсутствие источников импульса и энергии имеют вид (см., например, [6 – 7]):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + \mathbf{T}),$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (E \mathbf{u}) = \nabla \cdot ((\boldsymbol{\tau} + \mathbf{T}) \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{j}_E,$$

где ρ — плотность, \mathbf{u} — вектор скорости, тензор вязких напряжений

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T),$$

η и μ — коэффициенты вязкости, поток тепла

$$\mathbf{q} = -k\nabla T,$$

T — температура, k — коэффициент теплопроводности, поток энергии, связанный с капиллярными эффектами,

$$\mathbf{j}_E = K(\rho \nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \rho,$$

тензор статических напряжений

$$\mathbf{T} = \left(-P + \rho K \Delta \rho + \frac{1}{2} K |\nabla \rho|^2 \right) \mathbf{I} - K \nabla \rho \otimes \nabla \rho$$

является такой составляющей полного тензора напряжений, которая не зависит от скорости и не дает вклада в производство энтропии, состоит из тензора капиллярных сил, называемого также тензором Кортвега, и тензора напряжений, связанного с градиентом термодинамического давления P . Полная энергия единицы объема

$$E = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{2} K |\nabla \rho|^2,$$

где K — пропорциональный коэффициенту поверхностного натяжения коэффициент капиллярной (градиентной) энергии, ε — внутренняя энергия единицы массы.

Для замыкания системы законов сохранений необходимы функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$.

§2. Жидкость Ван-дер-Ваальса

Приведенные в предыдущем параграфе уравнения, выражающие законы сохранения массы, импульса и энергии сплошной среды, должны быть дополнены функциями $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$. Двухфазные жидкости (т.е. жидкости, допускающие наличие двух фаз) описываются уравнением состояния $P = P(\rho, T)$, у которых изотермы $P = P(\rho)$ являются немонотонными функциями, что и обеспечивает наличие нескольких фаз. Чтобы жидкость была именно двухфазной, а не многофазной, изотермы должны обладать одним локальным максимумом и одним локальным минимумом. Кроме того, у всех

реальных жидкостей немонотонность указанных изотерм имеет место не при всех T , а только при T меньше некоторой температуры T_{crit} , которая называется критической.

Всеми этими свойствами обладает аналитическое уравнение Ван-дер-Ваальса, которое и использовалось в настоящей работе, так как требует меньше вычислительных ресурсов, чем экспериментально полученные уравнения состояния, но создает те же вычислительные трудности.

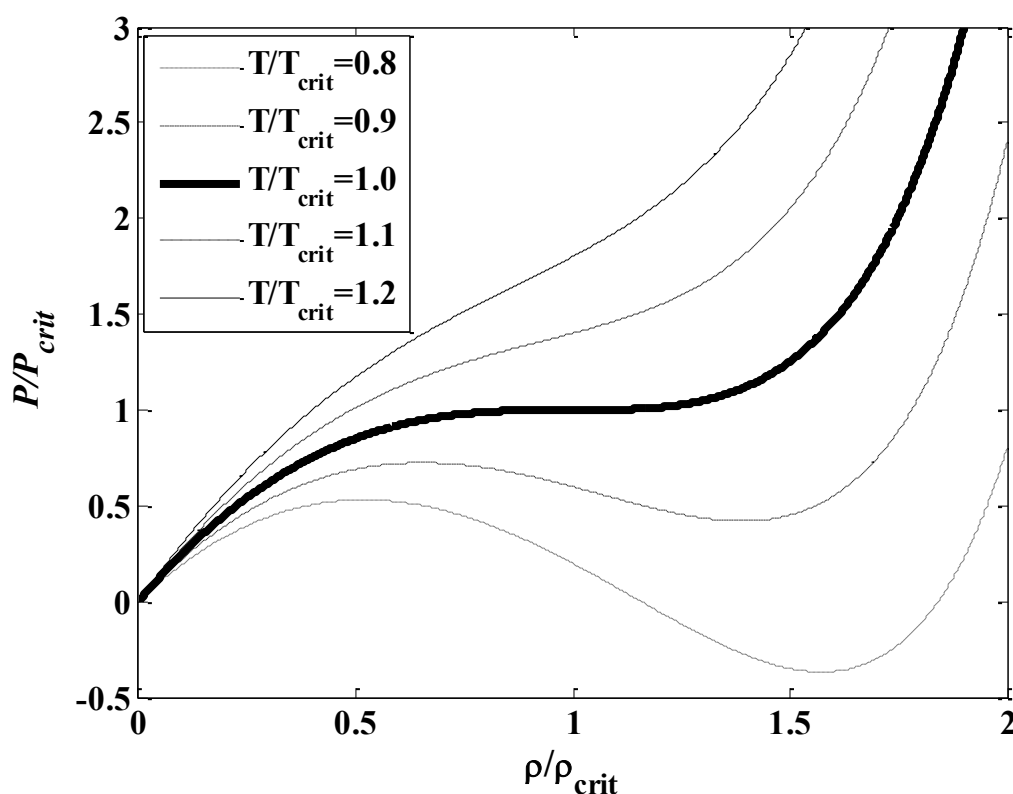


Рис. 1. Зависимость давления от плотности при различных значениях температуры T жидкости Ван-дер-Ваальса.

Для жидкости Ван-дер-Ваальса давление, температура, плотность и внутренняя энергия связаны следующими соотношениями:

$$T(\varepsilon, \rho) = \frac{1}{c_v}(\varepsilon + a\rho),$$

$$P(\varepsilon, \rho) = \frac{\rho b R T(\varepsilon, \rho)}{b - \rho} - a\rho^2,$$

где c_v — теплоемкость при постоянном объеме, R — универсальная газовая постоянная, параметры a и b связаны с параметрами вещества в критической точке следующим образом:

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

На рис. 1 показаны графики зависимости давления от температуры при различных значениях температуры T . При $T > T_{crit}$ функции $P(\rho)$ являются монотонно возрастающими и нет двух различных фаз. При $T < T_{crit}$ функция $P(\rho)$ имеет два локальных экстремума и при некоторых значениях давления обратная функция является трехзначной. В области трехзначности функции $\rho(P)$ минимальное значение соответствует газообразной фазе вещества, максимальное — жидкой фазе.

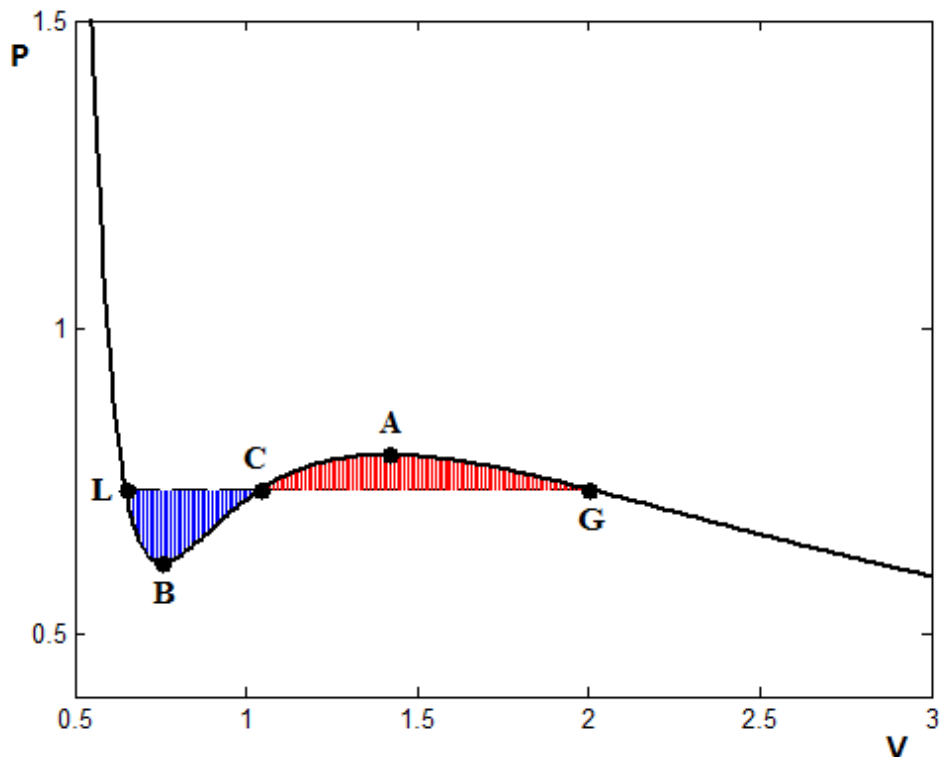


Рис. 2. Схематическое изображение зависимости давления от удельного объема при температуре $T < T_{crit}$.

Таким образом, при некоторых значениях температуры и давления жидкости Ван-дер-Ваальса могут сосуществовать две фазы. Для этого должны быть равны также химические потенциалы фаз. Это требование эквивалентно следующему правилу Максвелла.

Рассмотрим график зависимости давления в жидкости Ван-дер-Ваальса от удельного объема $V = 1/\rho$ при заданной температуре $T < T_{crit}$, схематически изображенной на рис. 2. Равновесие газообразной и жидкой фаз реализуется при таком положении горизонтальной линии LG, соответствующей давлению насыщения P_s , что площади заштрихованных фигур LBC и CAG равны. Давление насыщения $P_s(T)$ является функцией температуры, при котором фазы находятся в равновесии.

Точки L и G рис. 2 соответствуют состояниям Максвелла (точки равновесного сосуществования жидкой и газообразной фаз).

Обычно такая функция $P(\rho)$ интерпретируется как наличие двух фаз. Фаза, имеющая при том же давлении большую плотность, называется жидкой фазой, фаза, имеющая при том же давлении меньшую плотность, называется газовой фазой. Эти две фазы могут соседствовать, т.е. область, занятая жидкой фазой, может соприкасаться с областью, занятой газовой фазой, причем обе области будут иметь одинаковые плотность и температуру. На границе, отделяющей одну фазу от другой, происходит скачок плотности, т.е. нет точек, имеющих ту же плотность и температуру, в которых плотность имеет промежуточное значение. В модели диффузного интерфейса как таковых отдельных фаз нет, есть области с относительно медленно меняющейся плотностью, которые соответствуют областям, заполненным газовой и жидкой фазами, и области с резко, но непрерывно меняющейся плотностью, которые приближенно можно рассматривать как границу раздела фаз. С точки зрения молекулярного строения вещества модель диффузной границы более физична. В этой модели в зоне межфазного интерфейса плотность принимает все промежуточные значения от плотности газа ρ_G , соответствующей на диаграмме на рис. 2 точке G, до плотности жидкости ρ_L , соответствующей на диаграмме на рис. 2 точке L.

§3. LDG метод для решения уравнений Навье-Стокса-Кортевега

Система уравнений Навье-Стокса-Кортевега решалась локальным разрывным методом Галеркина (LDG) [16], суть которого авторы трактуют как обобщение разрывного метода Галеркина на случай системы уравнений со старшими производными. Для того чтобы сделать применимой технику разрывного метода Галеркина, авторы LDG преобразуют дифференциальные уравнения высших порядков к системе уравнений первого порядка. Это делается с помощью следующих преобразований.

Введем дополнительные переменные для учета производных порядка выше первого:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{pmatrix}, \quad (1)$$

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} \tilde{\rho} \\ \tilde{\rho} \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{K} \nabla \rho \\ \sqrt{K} \nabla \cdot \tilde{\rho} \\ -k \nabla T \end{pmatrix} \quad (2)$$

Тогда в новых переменных законы сохранения после подстановки в них (1) – (2) можно записать как

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I}) - \\ & \nabla \cdot \mu (\nabla \cdot \tilde{A} + \nabla \cdot \tilde{A}^T) - \nabla \cdot \eta (\text{tr}(\tilde{A}) \mathbf{I}) - \\ & \nabla \cdot \left(\left(\rho \tilde{\rho} + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{\rho} \right) \mathbf{I} \right) + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \otimes \tilde{\rho}) = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}) - \\ & \nabla \cdot \left(\eta (\text{tr}(\tilde{A})) \mathbf{I} \cdot \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot \left(\mu (\tilde{A} + \tilde{A}^T) \cdot \mathbf{u} \right) - \\ & \nabla \cdot \left(\left(\rho \tilde{\rho} + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{\rho} \right) \mathbf{I} \cdot \mathbf{u} \right) + \nabla \cdot ((\tilde{\rho} \otimes \tilde{\rho}) \cdot \mathbf{u}) - \\ & \nabla \cdot \sqrt{K} (\rho \text{tr}(\tilde{A})) \tilde{\rho} - \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$E = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{\rho}. \quad (6)$$

Введем обозначения:

$$\tilde{C} = (\rho, \rho \mathbf{u}, E), \quad \tilde{D} = (\tilde{A}, \tilde{B}). \quad (7)$$

Перепишем (1) – (2) в форме:

$$\tilde{\mathbf{D}} - \nabla \cdot \mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{D}}} = 0, \quad (8)$$

где

$$\mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{D}}} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & v & 0 & 0 & w & 0 & 0 & \sqrt{K}\rho & 0 & 0 & \sqrt{K}\tilde{\rho} & -kT & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & v & 0 & 0 & w & 0 & \sqrt{K}\rho & 0 & \sqrt{K}\tilde{\rho} & 0 & -kT & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 & v & 0 & 0 & w & 0 & \sqrt{K}\rho & \sqrt{K}\tilde{\rho} & 0 & 0 & -kT \end{pmatrix}^T,$$

которая вместе с системой

$$\tilde{\mathbf{C}}_t + \nabla \cdot \mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{C}}} = 0, \quad (9)$$

где $\mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{C}}}$ обозначает часть уравнений (3) – (5), дифференцируемую по пространству, и уравнениями состояния образует полную систему уравнений.

В слабой постановке в области Δ_E с границей $\partial\Delta_E$ система (8) – (9) запишется как

$$\int_{\Delta_E} \Psi_{\tilde{\mathbf{C}}} \tilde{\mathbf{C}}_t - \int_{\Delta_E} \nabla \Psi_{\tilde{\mathbf{C}}} \cdot \mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{C}}} + \int_{\partial\Delta_E} \Psi_{\tilde{\mathbf{C}}} \mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{C}}} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (10)$$

$$\int_{\Delta_E} \Psi_{\tilde{\mathbf{D}}} \tilde{\mathbf{D}} - \int_{\Delta_E} \nabla \Psi_{\tilde{\mathbf{D}}} \cdot \mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{D}}} + \int_{\partial\Delta_E} \Psi_{\tilde{\mathbf{D}}} \mathbf{F}_{\tilde{\mathbf{D}}} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (11)$$

где $\Psi_{\tilde{\mathbf{C}}}, \Psi_{\tilde{\mathbf{D}}}$ — элементы пространства пробных функций.

Система (10) – (11) решается с помощью разрывного метода Галеркина. Нормальные потоки на гранях, относящиеся к конвективной части, соответствующей задаче

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I}) = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}) = 0,$$

вычисляются по схеме Лакса-Фридрикса [9]:

$$g^{euler}(\tilde{C}^L, \tilde{C}^R, n) = \frac{1}{2} \left(F_{\tilde{C}}^{euler,L} + F_{\tilde{C}}^{euler,R} \right) \cdot n + \frac{1}{2} |\alpha| \left(\tilde{C}^L - \tilde{C}^R \right),$$

где за α обозначено максимальное по модулю собственное число матриц $\partial(F_{\tilde{C}}^L \cdot n) / \partial \tilde{C}^L$ и $\partial(F_{\tilde{C}}^R \cdot n) / \partial \tilde{C}^R$. Остальные граничные потоки берутся как полусумма потоков слева и справа от границы [6]:

$$g_{\tilde{C}}^{add}(\tilde{C}^L, \tilde{D}^L, \tilde{C}^R, \tilde{D}^L, n) = \frac{1}{2} \left(F_{\tilde{C}}^{add,L} + F_{\tilde{C}}^{add,R} \right) \cdot n,$$

$$g_{\tilde{D}}(\tilde{C}^L, \tilde{D}^L, \tilde{C}^R, \tilde{D}^L, n) = \frac{1}{2} \left(F_{\tilde{D}}^L + F_{\tilde{D}}^R \right) \cdot n.$$

После подстановки разложения по полиномиальным базисам искомым функций в (10) – (11) для коэффициентов разложения получается система обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений. Для интегрирования полученной системы уравнений по времени использовался диагонально неявный метод Рунге-Кутты различных порядков. Система линейных уравнений решалась методом GMRES с предобуславливателем ILU(0). Такая схема имеет теоретически произвольный порядок точности и обеспечивает строгую консервативность. Шаг по времени выбирался из соображений точности. Для схемы Рунге-Кутты второго порядка точности использовалась величина шага $\tau = 1.5h$, где h — минимальный размер расчетной ячейки. Для схемы третьего порядка точности использовался шаг $\tau = 0.8h$.

§4. Адаптация сетки к решению

Течения с диффузным интерфейсом характеризуются наличием областей с медленно меняющимися параметрами среды, в которых вещество находится в газовой либо жидкой фазе, и узких областей резкого изменения параметров (прежде всего, плотности), которые соответствуют межфазовым интерфейсам. В результате разные зоны расчетной области требуют существенно различных шагов расчетной сетки (размеров конечных элементов). К тому же межфазные интерфейсы, как правило, перемещаются внутри расчетной области, что накладывает еще более жесткие требования к построению сеток, так как в этом случае нужно не только сгущать сетку к особенностям течения, но и делать это достаточно быстро и устойчиво.

Для управления расчетной сеткой (сеткой расчетных элементов) мы используем следующий алгоритм. Вначале задается базовая сетка, которая может, например, учитывать геометрию задачи (расстояние до твердой стенки), но в нашем примере мы берем равномерную сетку. Кроме того, выбирается параметр решения, величина которого управляет измельчением сетки. Эти параметры можно выбирать различными способами. В задаче о слиянии двух капель мы в качестве такого параметра используем модуль градиента плотности. Необходимо задать также пороговое значение параметра Z , при превышении которого сетка будет измельчена. Более точно: если средняя величина параметра по расчетному элементу превышает пороговое значение Z , то расчетный элемент по каждому направлению делится на 2. Так на основе ячеек нулевого (базового) уровня получают ячейки первого уровня. Если в ячейках первого уровня среднее значение управляющего параметра снова превосходит пороговое значение Z , то эти ячейки снова дробятся и получают ячейки второго уровня (в случае выбора в качестве управляющего параметра модуля градиента плотности именно так оно и будет). И так далее. Чтобы избежать неограниченного измельчения расчетных ячеек, вводится ограничение на количество дополнительных уровней (в приведенных расчетах мы ограничиваемся двумя уровнями измельчения сетки). Кроме того, вводится еще одно правило: у соседних расчетных ячеек (включая соседей через вершину) уровень измельчения не может отличаться больше чем на единицу — это позволяет сгущать сетку с приемлемой скоростью.

Такой алгоритм построения сетки реализует следующую философию: у нас есть априорная информация о том, что в расчетной области есть зоны однофазного течения, где плотность меняется плавно, и область межфазных интерфейсов, где плотность на очень маленьком расстоянии может меняться на несколько порядков. В первом случае используется базовая расчетная сетка, в областях интерфейсов используется практически равномерная сетка с гораздо более мелким шагом. Поскольку зоны интерфейсов обычно занимают маленькую долю расчетной области, то такие сетки позволяют существенно (в десятки и сотни раз экономить расчетные ячейки без ухудшения качества расчетов).

Этот алгоритм построения сетки дополняется еще правилом ее укрупнения: если в среднее значение управляющего параметра в ячейке предыдущего уровня меньше $0.75Z$, то происходит объединение входящих в нее расчетных ячеек. Если после осуществления шага по времени произошло перестроение сетки (вызванное изменением распределения плотности), то происходит переинтерполяция со старой сетки на новую с порядком аппроксимации, соответствующим порядку аппроксимации шага по времени.

§5. Результаты численных экспериментов

Работоспособность алгоритма расчета на адаптивных сетках и правильность кода были проверены на задаче о слиянии двух капель под воздействием капиллярных сил, которая была решена, в частности, авторами в работе [15]. С целью сокращения времени счета расчет проводился в двумерной постановке.

В начальный момент времени в области, заполненной паром, задаются две касающиеся друг друга капли жидкости с диффузным интерфейсом. Далее капли из-за наличия сил поверхностного натяжения начинают сливаться и затем совершают затухающие колебания в окрестности равновесного сферического состояния. Размер расчетной области 0.0004×0.0004 м. Начальная плотность внутри капли равна 587.514 кг/м^3 , окружающей среды 99.5394 кг/м^3 , что соответствует равновесным плотностям для уравнения Ван-дер-Ваальса при температуре $T=546 \text{ К}$. Параметры уравнения Ван-дер-Ваальса брались следующие: $a = 1.0435e+3$, $b = 0.0010345$, $C_v = 3046 \text{ Дж/кг К}$, $m_w = 0.018 \text{ кг/моль}$, где C_v — теплоемкость при постоянном объеме, m_w — масса моля. Внутренняя энергия рассчитывалась по формуле :

$$\varepsilon = c_v T - a\rho.$$

В начальном состоянии скорости брались равными нулю. Используемый метод решения требует задания гладких начальных условий, поэтому плотность задавалась по формуле:

$$\rho = \frac{587.514 - 99.5394}{2} \left\{ 1 + \tanh \left[\frac{(1.3e-5 - (x-0.0036)^2 - y^2)}{4.5e-6} \right] + \tanh \left[\frac{(1.3e-5 - (x+0.0036)^2 - y^2)}{4.5e-6} \right] \right\} + 99.5394$$

Вязкость бралась равной $3.0e-8 \text{ Па}\cdot\text{с}$, коэффициент поверхностного натяжения равен $5.6e-8 \text{ кг м}^7/\text{с}^2$.

Начальное распределение плотности показано на рис. 3а. Под действием сил поверхностного натяжения капли начинают сливаться и при $t=140e-8 \text{ сек}$ образуют каплю, близкую к кругу, которая показана на рис. 3б. С увеличением времени движение капли продолжается под действием сил инерции, поверхностного натяжения и вязкости, пока под действием диссипации не остановится в равновесной круглой форме.

Далее приведены результаты, полученные на базовой сетке 64×64 ячейки с двумя уровнями измельчения. Базовая сетка показана на рис. 4 (окрестность капель). На рис. 5 показана сетка в начальный момент времени при двух уровнях измельчения. На рис. 6 Показана расчетная сетка при двух уровнях измельчения при $t = 36 \times 10^{-8} \text{ сек}$. Видно, что в окрестности касания начальных капель плотность выполаживается (капли сливаются) и сетка перестраивается.

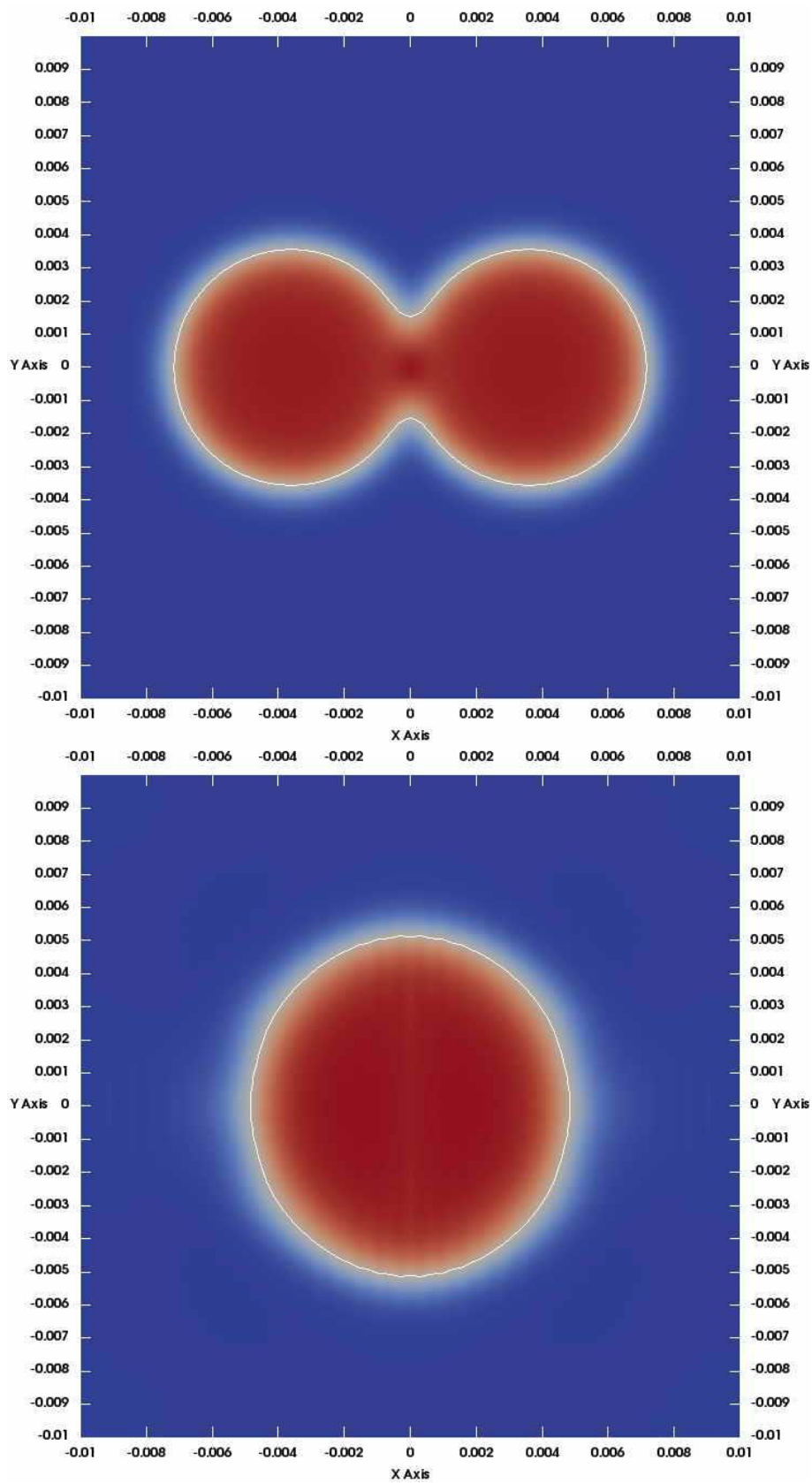


Рис. 3а и 3б. Слияние двух капель: распределение плотности при $t = 0$ и $t = 140 \times 10^{-8}$ сек.

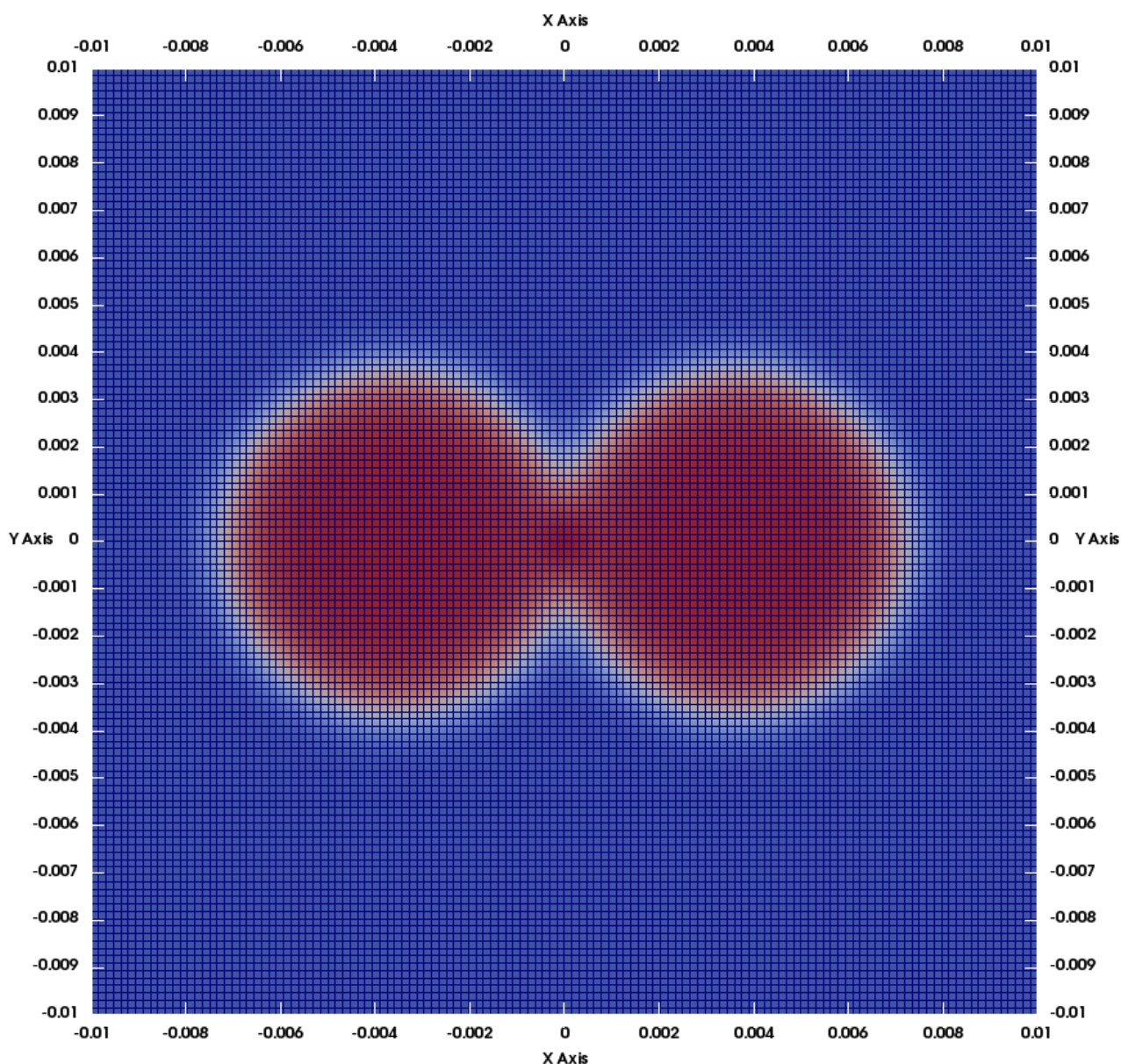


Рис. 4. Базовая расчетная сетка 64x64 ячейки в области 0.04 см x 0.04 см.

Объем базовой расчетной сетки составлял 4096 ячеек. Максимальное количество расчетных ячеек за все время расчета составило 9544 ячеек. Чтобы обеспечить такую точность расчета на сетке без сгущения, потребовалось бы 65536 ячеек, что почти в 7 раз больше использованного количества. Для явных схем процессорное время практически пропорционально количеству расчетных ячеек, т.е. в данном случае потребовалось почти в 7 раз меньше расчетного времени. Для неявных схем выигрыш сеток со сгущением нужно умножить еще как минимум на логарифм 7, так как размер обращаемой матрицы пропорционален количеству ячеек. Еще больше выигрыш будет в трехмерных задачах, так как если по одному направлению используется в k раз меньше ячеек, то в двумерном случае выигрыш составит k^2 раз, а в трехмерном — k^3 раз.

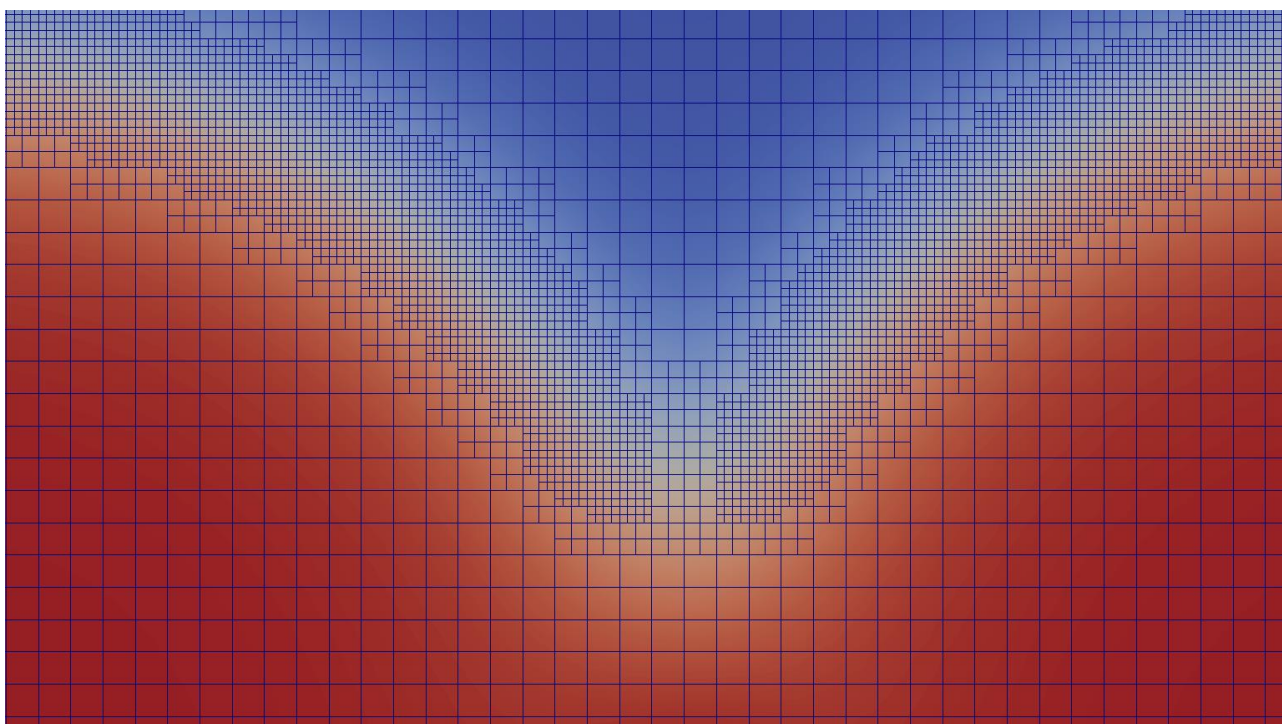
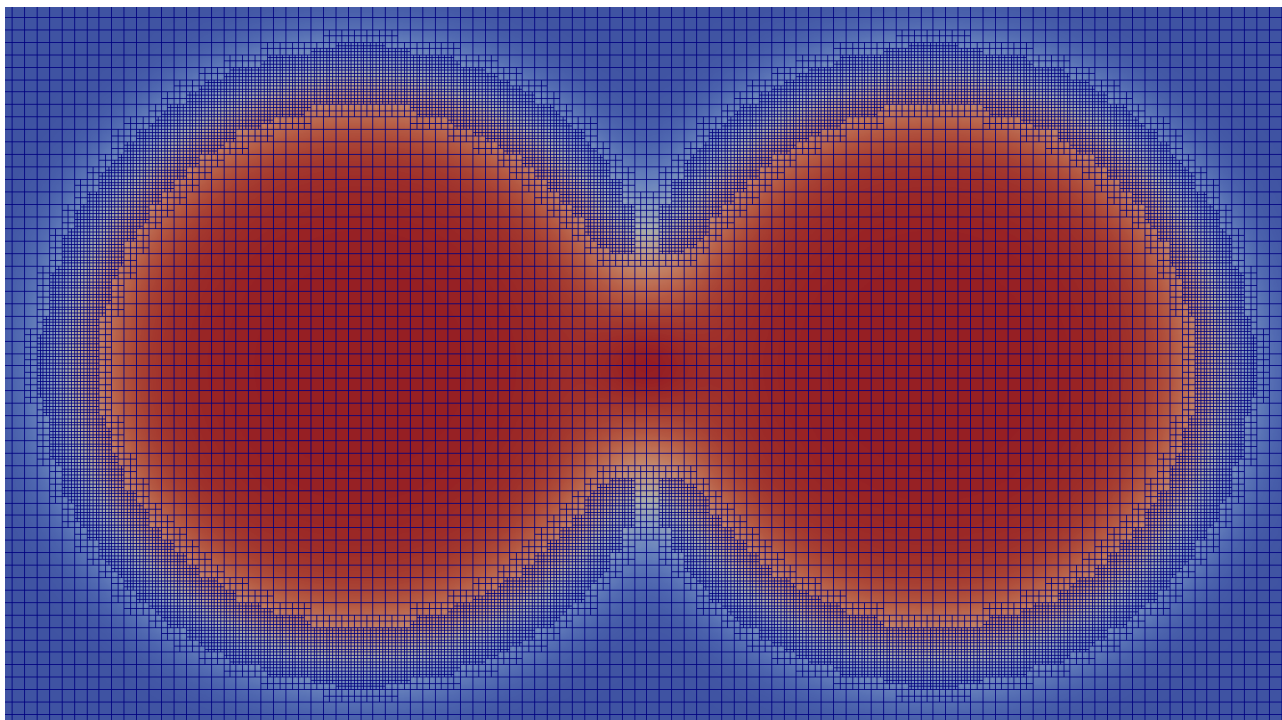


Рис. 5а и 5б. Расчетная сетка с двумя уровнями измельчения в начальный момент времени и фрагмент той же сетки в окрестности касания капель.

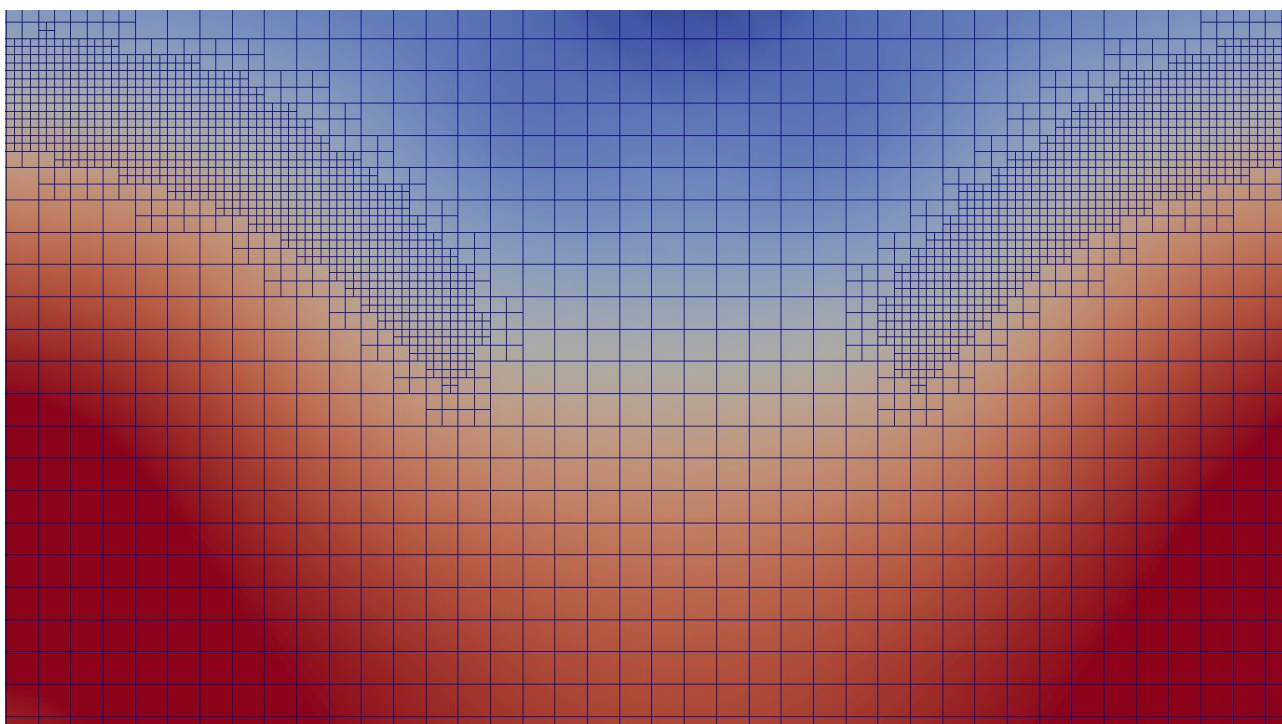
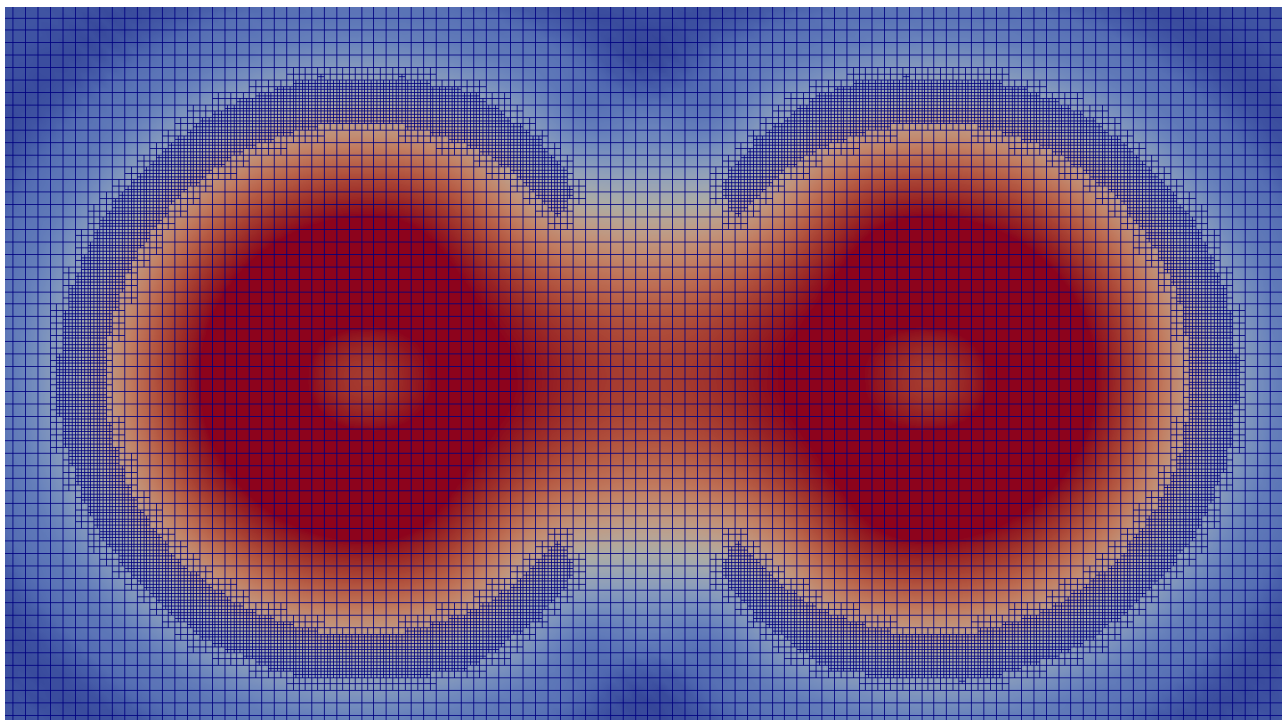


Рис. 6а и 6б. Расчетная сетка с двумя уровнями измельчения при $t = 36 \times 10^{-8}$ сек и фрагмент той же сетки в окрестности касания капель.

Выводы

В работе представлен метод расчета двухфазных течений в рамках модели диффузного интерфейса на адаптивных сетках и приведены результаты его использования. В приведенном примере экономия процессорного времени составила почти 7 раз при не очень большом перепаде плотностей. При удалении от критической точки, когда перепад плотностей фаз на интерфейсе будет больше, выигрыш тоже будет больше. Еще больше выигрыш от использования адаптивных сеток должен быть в трехмерных расчетах.

Список литературы

1. Нигматуллин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. - Главная редакция физико-математической литературы издательства "Наука", М., 1978, 336 стр.
2. Lord Rayleigh. 1892. On the theory of surface forces — II. Compressible fluids. *Philosophical Magazine*, XXXIII, pp. 209–220, 1892.
3. Van der Waals J.D. 1893. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous density variation. Transl. JS Rowlinson, 1979, in *J. Stat. Phys.* 20:197–244 (From Dutch, German, French).
4. Korteweg D.J. 1901. Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais continues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. *Arch. Néerl. Sci. Exactes Nat. Ser. II* 6:1–24.
5. Cahn J. W. and Hilliard J. E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *J. Chem. Phys.*, **28**, 258 (1958).
6. Tian L., Xu Ya., Kuerten J.G.M., van der Vegt J.J.W., “a Local Discontinuous Galerkin Method For the (Non)-Isothermal Navier-Stokes-Korteweg Equations”, *J. Comput. Phys.*, 295 (2015), 685–714.
7. Liu, Ju & Landis, Chad & Gomez, Hector & J.R. Hughes, Thomas. Liquid-Vapor Phase Transition: Thermomechanical Theory, Entropy Stable Numerical Formulation, and Boiling Simulations. ICES REPORT 15-14, May 2015.
8. Труды ИБРАЭ РАН. Вып. 14: Методы прямого численного моделирования в двухфазных средах / Ред. Л.А. Большов. – М.: Наука, 2013, 197 с.
9. Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30 (1998) 139–165.
10. Davis H. T. and Scriven L. E. Stress and Structure in Fluid Interfaces, in *Advances in Chemical Physics*, Volume 49, pp. 357–454 (eds I. Prigogine and S. A. Rice), 1982.

11. 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>.
12. 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).
13. Зайцев Н. А., Критский Б.В. Об одной трехмерной модели с диффузным интерфейсом для расчета двухфазных течений реальной воды // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016, № 117. 20 с. [doi:10.20948/prepr-2016-117](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-117).
14. Зайцев Н. А., Критский Б. В., Односкоростная модель двухфазных жидкостей для расчета течений из первых принципов // *Матем. моделирование*, **29**:2 (2017), 91–105; *Math. Models Comput. Simul.*, **10**:4 (2018), 387–397. URL: <http://http://www.mathnet.ru/links/5b80c3566d3d9a768d47515e8b20bf0b/mm3817.pdf>.
15. Зайцев Н. А., Критский Б. В. Расчет течений жидкости Ван дер Ваальса в модели диффузного интерфейса локальным разрывным методом Галеркина // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2018, № 165. 18 с. [doi:10.20948/prepr-2018-165](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-165).
16. Cockburn B. and Shu C.-W. The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems, *SIAM J. Numer. Anal.*, 35 (1998), pp. 2440–2463.