



ИБРАЭ

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

Труды ИБРАЭ

**МОДЕЛИ И МЕТОДЫ
ДЛЯ РАСЧЕТА МНОГОМЕРНЫХ
ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ
В ПРИСУТСТВИИ СИЛ
ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ**

**Институт проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук**

ТРУДЫ ИБРАЭ

Под общей редакцией члена-корреспондента РАН
Л. А. Большова

Выпуск 16

МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ДЛЯ РАСЧЕТА МНОГОМЕРНЫХ ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ В ПРИСУТСТВИИ СИЛ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ

Москва 2016

УДК 621.039
ББК 31.4
Т78

Рецензенты:

кандидат физико-математических наук *Н. П. Топчиев*,
доктор физико-математических наук *В. Н. Семенов*

Труды ИБРАЭ РАН / под общ. ред. чл.-кор. РАН Л. А. Большова ; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН). — М., 2007— .

Вып. 16 : Модели и методы для расчета многомерных двухфазных течений в присутствии сил поверхностного натяжения / А. Е. Аксенова, А. А. Леонов, А. А. Макаревич, В. В. Чуданов. — 2016. — 368 с. : ил. — ISBN 978-5-905823-76-3 (в пер.).

В сборнике сделан обзор современных тенденций в численном моделировании сжимаемых многофазных потоков для приложений атомной отрасли, а также представлена разрабатываемая согласованная вычислительная методика для моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения.

Методика позволяет моделировать явления кипения, испарения и конденсации с помощью метода дискретных уравнений с использованием HLLC солвера, обеспечивающего выравнивание по температуре и Гиббсу, с учетом особенностей решаемых двухфазных задач. Методика реализована в виде трехмерного параллельного кода, который может быть использован для проведения расчетов на кластерных ЭВМ, например «Ломоносов» (МГУ, Москва). Изложены особенности разработанной методики, обсуждаются преимущества ее использования по сравнению с другими подходами, представлены примеры ее применения для решения отдельных задач.

Для студентов, аспирантов и специалистов в области численных методов решения дифференциальных уравнений математической физики.

Proceedings of IBRAE RAS / Ed. by L. A. Bolshov ; Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (IBRAE RAN). — Moscow, 2007— .

Issue 16 : Models and methods for calculation of multidimensional two-phase flows in the presence of surface tension forces / A. E. Aksenova, A. A. Leonov, A. A. Makarevich, V. V. Chudanov. — 2016. — 368 с. : ил. — ISBN 978-5-905823-76-3 (bound).

An overview of current status numerical modeling of compressible multiphase flows for nuclear industry applications is reviewed. Also numerical methodology for modeling of complex shock-wave processes in two-phase media in the presence of surface tension forces is presented.

The methodology allows to model phenomena of boiling, evaporation and condensation by means of the method of discrete equations using the HLLC solver for aligning the temperature and Gibbs, taking into account peculiarities two-phase problems. The method is implemented in the form of a three-dimensional parallel code that can be used for calculations on clusters, for example "Lomonosov" (Moscow State University, Moscow). The features of the developed technique and its advantages in a comparison with others are discussed. Examples of its application to solve specific problems are demonstrated.

For students, postgraduates and specialists in the field of numerical methods for solving differential equations of mathematical physics.

ISBN 978-5-905823-76-3

- © Продолжающееся издание «Труды ИБРАЭ РАН», 2007 (год основания), 2016
- © Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2016
- © А. Е. Аксенова, А. А. Леонов, А. А. Макаревич, В. В. Чуданов, 2016

Содержание

Предисловие	6
Глава 1. Введение	9
1.1. Мотивация	9
1.2. Направление	12
Литература	18
Глава 2. Усредненные консервативные уравнения для сжимаемых многофазных, многокомпонентных и многоматериальных течений	19
2.1. Усреднение по ансамблю	21
2.2. Сохранение массы	25
2.3. Общие уравнения сохранения	26
2.4. Консервативность массы видов	29
2.5. Баланс импульса	30
2.6. Сохранение энергии	31
2.7. Неравенство энтропии	33
2.8. Уравнение распространения объемной доли	34
2.9. Гиперболическая модель двухфазных течений из семи уравнений с двумя давлениями и двумя скоростями	35
2.10. Редуцированное или ослабленное уравнение формы	45
Приложение 2А. Уравнение эволюции импульса	47
Литература	49
Глава 3. Простые и эффективные методы релаксации для поверхностей раздела, разделяющих сжимаемые жидкости, и для кавитирующих течений	53
3.1. Введение	54
3.2. Модель многофазных течений с равновесным давлением и одной неравновесной скоростью	59
3.3. Численный метод	68
3.4. Тесты и верификация	81
3.5. Метод расширения для ударных волн в многофазных смесях	94
3.6. Выводы	100
Приложение 3А. Асимптотический предел модели из шести уравнений в присутствии жесткой релаксации давления	102
Приложение 3В. Расширение второго порядка	105

Приложение 3С. Распространение на несколько измерений	108
Приложение 3D. Связь между моделью из шести уравнений и обычными баротропными моделями кавитирующих течений	110
Литература	114
Глава 4. Солвер для низкоскоростных потоков для моделей диффузионного интерфейса	119
4.1. Введение	119
4.2. Конечно-объемные методы (КОМ)	120
4.3. PCICE метод и его расширения для уравнений Эйлера	123
4.4. Однофазные результаты	129
4.5. Диффузионно-интерфейсный потоковый солвер	135
4.5.2. Модели диффузионного интерфейса	136
4.6. Заключительные замечания	146
Литература	146
Приложение 4А. Экспертиза PCICE метода в почти несжимаемых и строго несжимаемых средах, пределы	147
Глава 5. Математические модели для DNS сжимаемых течений в присутствии капиллярных эффектов и фазовых переходов	165
5.1. Введение	165
5.2. Вариационный принцип	166
5.3. Гиперболичность равновесной модели диффузионного интерфейса	175
5.4. Отношения скачка на разрыве	178
5.5. Механическая релаксация	184
5.6. Результаты расчетов	188
5.7. Заключение	195
Литература	196
Глава 6. Прямое численное моделирование кипящего пузырькового потока	198
6.1. Введение	198
6.2. Построение модели	201
6.3. Численный метод	210
6.4. Выводы	234
Приложение 6А. Вставка теплопроводности в уменьшенную модель	234

Приложение 6В. Солвер фазового перехода.....	236
Приложение 6С. HLLC Римановский солвер для производных	239
Приложение 6D. Производные теплового потока	243
Приложение 6Е. Производные поверхностных и объемных сил	245
Литература	246
Глава 7. Методика моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения	249
7.1. Описание базовой физической модели	249
7.2. Модель из семи уравнений	251
7.3. Модель из пяти уравнений.....	264
7.4. Модель из шести уравнений	283
7.5. Верификация методики и моделирование практических задач	337
Заключение	352
Литература	352
Приложение 7А. Фазовые переходы в модели из шести уравнений	354
7А.1. Релаксация температур	355
7А.2. Релаксация энергий Гиббса	359
7А.3. Расчеты	364
Литература	368

Предисловие

Эффективность и надежность оборудования реакторных установок определяются уровнем его тепло- и гидродинамического обоснования. В этом может помочь многомерное численное моделирование тепло- и гидродинамических процессов в проектных и аварийных режимах. При обосновании безопасности существующих и проектируемых реакторных установок одной из актуальных задач является изучение тепло- и массообмена в двухфазном потоке, состоящем из жидкости и газа или жидкости и пара.

При изучении тепло- и массообмена в двухфазном потоке представляют интерес явления, характеризующиеся большой степенью неопределенности, а именно: ударно-волновые явления, происходящие при разрывах трубопроводов с нагретым теплоносителем; критический тепловой поток в тепловыделяющих сборках (ТВС) с интенсификаторами теплообмена; кипение при пленочном режиме течения; развитие неустойчивости на межфазной границе пар-жидкость при их совместном течении; конденсация пара в сплошном объеме и распыленных струях жидкости и т. д.

Для лучшего понимания природы таких течений необходимы как экспериментальные исследования, так и аналитические модели течений. При разработке аналитических моделей, интерпретации экспериментальных данных и для понимания локальных физических явлений могут быть использованы результаты прямого численного моделирования. На это указывают и современные мировые тенденции.

В течение последних десяти лет в мире (во Франции в группе Saurel и в отдельных работах Abgral с соавторами, в Америке в Национальной лаборатории Айдахо — INL) активно разрабатываются вычислительные методики, основанные на использовании метода дискретных уравнений для моделирования двухфазных течений с учетом поверхностного натяжения. Эти методики позволяют моделировать ударно-волновые процессы, процессы

кипения, испарения и конденсации и используют модели, состоящие из пяти, шести и семи уравнений соответственно. Например, подобная методика моделирования двухфазных течений с помощью модели из семи уравнений успешно применяется в коммерческом коде RELAP-7 (лаборатория Айдахо).

В течение двух последних десятилетий мы занимаемся разработкой методики (методы, модели, схемы, солверы) для моделирования течений пар-жидкость с фазовыми превращениями. Исследования начинались с моделирования ударно-волновых процессов в двухфазных средах с применением нелинейных разностных схем с коррекцией потоков для расчета двухфазных сжимаемых газодинамических течений, а также моделирования двухкомпонентных и двухфазных сред с учетом микроинерции с использованием метода кусочно-параболической аппроксимации и точного солвера Римана и использованием равновесной модели по давлению.

Затем для расчета ударно-волновых процессов в двухфазных средах был задействован метод Годунова, основанный на использовании приближенного солвера Римана и неравновесной по давлению модели с последующей релаксацией давления. Были изучены возможности моделирования процессов испарения и конденсации в зависимости от интенсивности и скорости течения процессов в двухфазной среде с использованием реактивного солвера Римана или применением процедуры релаксации температуры и химических потенциалов компонентов в двухфазной среде.

В настоящее время в ИБРАЭ РАН разрабатывается согласованная вычислительная методика моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения. Методика реализована в виде трехмерного параллельного кода, который может быть использован для расчетов на кластерных ЭВМ, например «Ломоносов» (МГУ, Москва). Она позволяет моделировать явления кипения, испарения и конденсации. Моделирование осуществляется с помощью метода дискретных уравнений с использованием HLLC солвера, обеспечивающего выравнивание по температуре и Гиббсу, с учетом особенностей решаемых двухфазных задач. В монографии изложены особенности разработанного численного подхода и представлены примеры его применения для решения отдельных задач.

Материал в книге излагается следующим образом.

Глава 1 посвящена актуальности решаемой проблемы для атомной энергетики и обзору основных перспективных направлений моделирования двухфазных течений.

Глава 2 представляет собой краткое введение в методологию усреднения по ансамблю, чтобы показать, как усредненные по ансамблю уравнения балан-

са и неравенство для энтропии могут быть получены из микроскопических балансов. Затем объясняется потребность включения отдельного давления для каждой фазы наряду с дополнительной объемной фазовой фракцией в уравнение эволюции по меньшей мере первого или второго порядка по времени. Приводится модель из семи уравнений с двумя давлениями и двумя гиперболическими скоростями, мотивированная для решения многофазных потоков с помощью метода дискретных уравнений (DEM), которые далее обсуждаются более подробно.

В главе 3 представлены простые и эффективные методы релаксации для разделенных интерфейсом сжимаемых жидкостей и кавитирующих течений.

В главе 4 изложены особенности солвера для низкоскоростных потоков для моделей диффузионного интерфейса.

В главе 5 изложены математические модели для DNS сжимаемых течений в присутствии капиллярных эффектов и фазовых переходов.

Глава 6 посвящена вопросам численного моделирования зародышеобразующих кипящих потоков.

Глава 7 содержит описание разрабатываемой в ИБРАЭ РАН методики моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения. В главе изложены подробности методики, приведены результаты ее верификации, а также практические примеры применения развитого подхода и определены перспективы ее использования для атомной отрасли.

Глава 1. Введение

1.1. Мотивация

В сфере безопасности и оптимизации ядерных реакторов существуют ключевые положения, основанные на глубоком понимании основных явлений тепло- и массообмена в двухфазных течениях. Для ядерных реакторов в контексте многофазных течений технологически очень важны два явления динамики пузырьков: кипение (гетерогенное) и мгновенное испарение, или кавитация (гомогенное кипение), с коллапсом пузырьков. Основное отличие кипения от мгновенного испарения состоит в том, что рост пузырька (и коллапс) в кипении тормозится ограничениями на передачу тепла на интерфейсе, в то время как рост пузырька (и коллапс) при мгновенном испарении ограничивается в основном инерционными эффектами в окружающей жидкости.

Мгновенное испарение происходит в проточных жидких системах, когда в некоторой области течения давление падает достаточно низко, достигая метастабильного состояния, при котором температура выше температуры насыщения при пониженном давлении в этом расширенном состоянии. Тогда перегретая жидкость высвобождает свою метастабильную энергию (запасенную в виде внутренней энергии) очень быстро, взрывным образом, производя с высокой скоростью либо чистый пар (пузыри), либо смесь жидкость-пар. В случае истечения двухфазного теплоносителя (из перегретого жидкого состояния) схлопывание пузырька, как правило, не является важным, но мгновенное испарение перегретой жидкости сильно влияет на критические скорости потока. В других случаях, при кавитации в проточных системах, последующее схлопывание пузырька способно вызвать разрушение близлежащих твердых поверхностей.

Многие приложения для ядерных реакторов рассматривают конвективное пузырьковое кипение в качестве средства эффективного отвода высоких тепловых потоков от нагретых поверхностей. Пузырьковое кипение — весьма эффективный механизм передачи тепла, однако известно, что существует критическое значение теплового потока, при котором пузырьковое

кипение переходит в пленочное — отклонение от пузырькового кипения (англ. DNB) — и в кризис кипения. Это очень плохой механизм передачи тепла. В большинстве практических приложений крайне важно поддерживать рабочий тепловой поток ниже такого критического значения, которое называется критическим тепловым потоком (англ. CHF). В этом случае присутствие рядом твердой поверхности необходимо для быстрой подпитки скрытой теплоты, присущей фазовым изменениям. Наличие таких поверхностей, как известно, видоизменяет картину течения и другие характеристики многофазных течений, и, следовательно, анализ таких поверхностей должен производиться в сочетании с анализом самих явлений. Полагают, что DNB влияет на снижение производительности систем, а также на процесс осаждения продуктов коррозии.

Несмотря на интенсивное изучение в течение нескольких десятилетий физического механизма, вызывающего CHF, консенсус в его объяснении не достигнут даже для простой ситуации объемного кипения на плоской пластине, не говоря уже о кипении потока в геометрии пучка стержней, который представляет интерес в связи с процессами в ядерных реакторах. Сформулировано множество теорий, каждая из которых опирается на простые модели CHF, основанные на идеализированной геометрии интерфейса пар/жидкость [1]. Например, классическая теория гидродинамической неустойчивости CHF постулирует массив цилиндрических струй пара, поднимающийся от поверхности нагревателя, теория высыхания макрослоя рассматривает наличие гладкого слоя жидкости под пузырьем грибовидной формы, а теория пузырькового взаимодействия, как правило, предполагает, что зародыши пузырька имеют сферическую форму.

Иная картина с CHF выявлена в исследованиях [2; 3] с использованием сложной диагностики изображений. Короче говоря, при высоких тепловых потоках существуют многочисленные сухие участки на поверхности (с масштабом длины 2—3 мм в направлениях x и y), диспергированные в рамках взаимосвязанной сети жидких менисков¹ или между твердыми стенками (с масштабом длины менее 50 мкм в направлении z). Геометрия поверхности раздела жидкость/пар очень нерегулярна. У нее динамическая природа, т. е. процесс продвижения жидких менисков внутрь и отступления их от сухих областей является функцией времени различных эффектов: инерции жидкости (удары о стенки бака), капиллярных сил (поверхностное натяжение) и др. Нет возможности точно предсказать теплопередачу и теплообмен переходного режима (топологию потоков) в условиях двухфазного течения в режиме реальных ядерных реакторов и геометрии пучка ТВЭЛов. В результате приходится завышать запас прочности, что препятствует развитию новых топливных проектов.

¹ Мениск — искривленная поверхность жидкости внутри узкой трубки (капилляра).

Растущие возможности вычислительной техники и появление нового поколения расчетных кодов дают основания полагать, что значительный прогресс в оценке безопасности атомных реакторов будет достигнут с помощью расчетов в области вычислительной гидродинамики (CFD), что приведет к резкому снижению затрат на разработку реакторов. На семинаре SHF-2008 [4] «Моделирование двухфазного конвективного кипящего потока» была выдвинута идея расширения спектра улучшенного моделирования многофазного потока. После этого семинара во Франции организации CEA, EDF, AREVA и IRSN приступили к проекту NEPTUNE, нацеленному на получение инструментов, описывающих двухфазный поток и теплопередачу, которые проверяются в диапазоне параметров для промышленных приложений, охватывающих весь спектр пространственных и временных масштабов.

В США примерно в это же время также решили поощрять совместные исследования в области двухфазных течений в широких масштабах. Например, исследовать явления двухфазного потока, происходящие внутри топливной сборки BWR-реактора, которые включают фазовые изменения охладителя и несколько режимов течения и непосредственно влияют на взаимодействие охладителя с ТВС и в конечном счете на производительность реактора. Степень разрешения традиционных кодов поканального анализа слишком груба для подробного изучения межсборочных картин течения, таких как обтекание дистанционирующего элемента. В настоящее время общепризнанно, что основные подходы к моделированию в кодах поканального анализа и используемые ими вычислительные методы уже не соответствуют современному уровню развития в области численного моделирования. По мнению исследователей из США, должны быть разработаны новые коды для моделирования на очень подробных стеках явлений двухфазного потока в ТВС BWR-реакторов, учитывающие достигнутый в последнее время прогресс в вычислительной гидродинамике жидкости (CFD) и быстрый рост вычислительных мощностей массивных параллельных компьютеров. Аналогичны рассуждения относительно необходимости высокого разрешения при моделировании переохлажденного кипения и коллапса пузырьков в PWR-реакторах, чтобы предсказывать падение производительности, особенно в связи с проблемой влажного осаждения.

Поскольку современные численные методы / CFD коды с высоким разрешением делят пространство потока на множество подробных расчетных ячеек, крайне важно отказаться от использования традиционных «карт режимов потока», применяемых в поканальных термогидравлических кодах для оценки топологии интерфейса.

Традиционная модель двухфазной смеси из шести уравнений с одним давлением приводит к тому, что в некоторых областях квадрат скорости звука становится отрицательным, что является нефизическим и приводит к неги-

перболичности, дает неправильную динамику волны и некорректные решения. Такие уравнения использовались в прошлом, потому что первый порядок вычислений был применен на грубых сетках, которые вносили большую искусственную вязкость в решение. Сеточная сходимость в этом случае недостижима. Использование подобных систем уравнений сводит на нет возможность применения современных методов высокого порядка (второго и выше), например конечно-объемных, основанных на методах Годунова с приближенным солвером Римана.

Традиционно «карты режимов потока» используются в поканальных теплогидравлических кодах для оценки топологии интерфейса и основаны на поперечно-усредненных по интерфейсу параметрах течения. Межфазные взаимодействия в многофазных жидкостях зависят как от площади, так и от топологии интерфейса. Поскольку CFD коды представляют пространство потока на гораздо более подробных вычислительных сетках, они не должны полагаться на традиционные режимы подканальных потоков. Вместо этого требуется оценить локальную топологию поверхности раздела. Преимущество, предоставляемое этим подходом, состоит в том, что ансамбль из многих вычислительных ячеек с относительно простой топологией поверхности раздела (интерфейса) может обеспечить анализ сложных глобальных топологий, включающих в себя все традиционные режимы течения подканалов. С этой упрощенной топологической картой режимов потока, которая обязательно будет зависеть от размеров расчетной ячейки, только немногие параметры должны быть использованы для определения топологии поверхности раздела в каждой ячейке. Эти параметры будут основаны на экспериментальных данных и прямом численном моделировании (DNS), требующих высокого разрешения явлений в меньшем масштабе.

1.2. Направление

Под влиянием перечисленных выше аргументов возникло научное направление, нацеленное на разработку хорошо продуманных физико-математических моделей наряду с численными методами высокого разрешения для общих многофазных потоков.

В частности, исследования были направлены на создание унифицированной физико-математической и численной модели сжимаемых многофазных течений всех скоростей, охватывающей следующие области:

- общий уровень перемешивания (чисто многофазные) (1);
- разрешение интерфейсного уровня (DNS-подобные) (2);
- многомасштабные методы для автоматического разрешения задач (1) и (2) в зависимости от заданного разрешения сетки (3).

Концептуально хорошо продуманная модель двухфазной смеси из семи уравнений с двумя давлениями и двумя скоростями, как в (1), может быть сведена аналитическим образом к получению модели из пяти уравнений с одним давлением и одной скоростью, как в (2), способной к DNS-подобному разрешению интерфейса.

Если такое систематическое сведение будет выполнено численно на локальном сеточном уровне, то общий алгоритм, как в (1), должен быть сведен к модели разрешения интерфейса, как в (2), и, в свою очередь, фактически даст автоматическую многомасштабную трактовку, как в (3). Необходимы дальнейшие исследования, которые позволят заложить основы для получения методик, способных одновременно решать задачи жидкости с динамическим интерфейсом, а также многофазных смесей, вытекающие из кипения, кавитации перегретой жидкости и коллапса и т. д. в реакторе.

Эффективная нелинейная система дифференциальных уравнений первого порядка наряду с условиями их замыкания должна:

- быть гиперболической и корректной;
- иметь консервативную форму, если фазовыми взаимодействиями и диссипативными слагаемыми можно пренебречь;
- осуществлять коррекцию динамики.

Явления двухфазного течения внутри реакторов включают в себя переход из пузырькового кипения (DNB) и нестабильность пленочного кипения (кризис кипения), фазовые изменения в охладителе и множественные режимы течения, которые непосредственно влияют на взаимодействие охлаждающей жидкости с топливными элементами/узлами и в конечном счете на производительность реактора. Понимание этих явлений, а также переохлажденного кипения и схлопывания пузырька также является ключевым для формирования полного представления о влажном осаждении в этих системах. Цель исследования должна заключаться в получении модели, дающей весьма подробное решение там, где это необходимо, одновременно с крупномасштабным моделированием всего реактора и его компонентов путем использования корректной многомасштабной модели, разрешающей интерфейсы для крупных пузырьков (прямое численное моделирование DNS-типа) с одной скоростью и одним давлением; а также среднее (или гомогенное) поле двухфазного потока для мелких пузырьков с двумя скоростями и двумя давлениями.

На ежегодном собрании SIAM в 2008 г. [1] был представлен трехлетний проект LDRD, нацеленный на решение проблем интерфейса динамической среды, а также многофазных смесей, возникающих при кипении, кавитации, разрушении пузырька и т. д. в реакторных системах на легкой воде. Этот проект — результат совместных усилий команды исследователей. В нее

входили группа «Междисциплинарные методы и высокопроизводительные системы» из INL и профессор Richard Saurel и его команда SMASH из Polytech Marseille. Группа профессора Saurel уже давно работает в области многофазных потоков и моделирования интерфейса при экстремальных термодинамических состояниях, связанных с ударными волнами, взрывами и физикой детонации. Ключевым моментом здесь является то, что в этих областях распространение волны имеет принципиальное значение, и математические формулировки, а также численные методы должны быть совершенно ясными. При решении сжимаемых многофазных потоков даже для проблемы слабых волн необходима корректность, поэтому коррекция динамики волн (правильные собственные значения, собственные векторы, дисперсионные соотношения и т. д.) является обязательным условием.

Ввиду сложности поведения многофазных, многокомпонентных течений необходимо рассматривать их в усредненном смысле. Традиционно можно было начать с известных микроскопических отношений потока, которые справедливы при «малых» масштабах. Они включают в себя сохранение на уровне континуума массы, баланса массовых видов и импульса, сохранение энергии и выполнение второго закона термодинамики, часто в виде неравенства энтропии, например неравенства Клаузиуса — Дюгема. Усредненные уравнения макроскопического сохранения и неравенства энтропии затем получают из микроскопических уравнений через подходящие процедуры усреднения. На этом этапе сильная форма второго закона также может быть постулирована для смеси фаз или материалов. Эволюционный баланс потока материала есть уникальная система, определяющая уравнения и отношения фазовых или материальных взаимодействий, и она выводится из экспериментальных наблюдений или постулата на основе строгого соблюдения ограничений, вытекающих из усредненного неравенства энтропии. Эти усредненные уравнения образуют основную систему уравнений для динамической эволюции потока смеси.

Чаще всего метод усреднения использует объемное или временное усреднение либо сочетание этих подходов. Ограничения потока, необходимые для объемного и временного усреднения, действительно могут быть серьезными, и их нарушения часто встречаются. Более общий и менее ограничительный (гораздо менее широко используемый) тип усреднения, известный как усреднение по ансамблю, также можно использовать для получения основных систем уравнений. В действительности объемное и временное усреднение можно рассматривать как частные случаи усреднения по ансамблю. В главе 2 дается введение в методологию усреднения по ансамблю, чтобы показать, как усредненные по ансамблю уравнения баланса и неравенство для энтропии могут быть получены из микроскопических балансов. Затем объясняется потребность включения отдельного давления для каж-

дой фазы наряду с дополнительной объемной фазовой фракцией в уравнение эволюции, по меньшей мере первого или второго порядка по времени. Наконец, некоторая модель из семи уравнений с двумя давлениями и двумя гиперболическими скоростями есть хорошо поставленная модель сжимаемых двухфазных течений, мотивированная для альтернативного подхода к решению многофазных течений с помощью метода дискретных уравнений (DEM), которые ниже обсуждаются более подробно.

Наряду с численными методами высокого порядка разрешения для решения общей системы многомасштабных многофазных потоков для повышения численной эффективности целесообразно иметь аналитически уменьшенные модели общих уравнений смеси, которые могут быть использованы для решения DNS-подобным методом интерфейса для нескольких сжимаемых жидких фаз. Методы резкого интерфейса для моделирования DNS-типа имеют «врожденные слабости», в первую очередь неспособность создавать динамические интерфейсы и решать интерфейсы, отделяющие чистые вещества и смеси. Поэтому мы сосредоточились на методе диффузионного интерфейса (DIM), который лишен этих слабых сторон. В главе 3 описаны детали указанного подхода.

Метод DIM рассматривает интерфейсы как зоны, соответствующие искусственным смесям, созданным с помощью численной диффузии. Определение величин термодинамических потоков в этих зонах достигается на основе теории многофазных течений. Задача заключается в получении последовательно физических, математических и численных термодинамических соотношений для искусственной смеси. Один и тот же алгоритм внедрен повсеместно в обе чистые жидкости, а также в зону смеси. Для этого исследования была разработана односкоростная неконсервативная гиперболическая модель с двумя уравнениями энергии и условиями релаксации, которая отвечает уравнению сохранения состояния и энергии на обеих сторонах интерфейсов и гарантирует правильное прохождение через них волн давления. Эта формулировка значительно упрощает численное решение в контексте диффузных интерфейсов.

Были разработаны многофазные формулировки, дающие возможность решать проблемы, связанные как с гетерогенными смесями материалов и межфазными потоками, так и со сжимаемостью и фазовыми переходами. В частности, цель прямого численного моделирования межфазных потоков (являющегося задачей первостепенной важности для ядерной промышленности, для безопасности реактора и его оптимизации) состоит в том, чтобы вычислить критические условия теплового потока, которые включают конкуренцию между ростом пузыря, поверхностным натяжением, эффектами контактного угла и тепло- и массопередачи на интерфейсах.

В главе 4 детализированы усилия INL с частично неявным методом PCICE. В этом исследовании проверялось, могут ли все скоростные потоковые методы, частично неявные во времени, разработанные в INL (см. приложение 4.А) для однофазных течений, быть адаптированы для использования конечных объемов (как полагают в INL, больше подходящих для численной аппроксимации гиперболических моделей диффузных интерфейсов со сложной физикой). Это распространение было выполнено на основе смеси концепций типа Годунова и PCICE с отличными результатами: и низкая, и высокая скорости потока были вычислены точно. Была также начата работа с более сложной гиперболической моделью типа DIM, а также с комбинированным методом Годунова — PCICE. Новая вариация на этапе PCICE предиктор шага была реализована в 1D, чтобы исправить нехватку инвариантности в оригинальной схеме. Многофазная версия алгоритма по сравнению с однофазной включает релаксацию давления на полушаге.

Результат консервативной части многофазной модели из главы 5, используя принцип Гамильтона стационарного действия с последующим введением диссипативных слагаемых, которые совместимы с неравенством энтропии, обобщает капиллярные модели путем введения условия релаксации тепла и массопереноса, чтобы описать фазовые превращения.

Как правило, многофазное моделирование начинается с усреднения (или гомогенизации) системы дифференциальных уравнений в частных производных (традиционно некорректных) и дискретизации этой системы к виду численной схемы. Это создает проблемы, связанные с численной аппроксимацией неконсервативных слагаемых на разрывах (интерфейсы, ударные волны), а также с громоздкой трактовкой потоков из семи волн. Для решения проблемы интерфейса без ошибок сохранения и исключения этого сомнительного определения средних переменных и численной аппроксимации неконсервативных слагаемых в сочетании с двухскоростными течениями мы используем новый метод усреднения, известный как метод дискретных уравнений (DEM). В отличие от традиционных методов усредненные уравнения для смеси не используются, и этот метод непосредственно получает дискретную систему уравнений из однофазной системы для получения численной схемы, которая точно вычисляет потоки для произвольного количества фаз и решает неконсервативные произведения. Метод эффективно использует последовательность решений однофазных уравнений Римана. Римановские солверы решаются на каждой границе. Топология потока может меняться при изменении выражения для потоков. Неконсервативные слагаемые правильно аппроксимированы. Некоторые из замыкающих соотношений, пропадающие при традиционном подходе, здесь получаются автоматически. Наконец, в ряде случаев имеется воз-

возможность определить непрерывную систему, индуцированную дискретным уравнением. Это может быть очень полезно с теоретической точки зрения.

За исключением метода PCICE перечисленные выше методы используют явное интегрирование по времени. Чтобы облегчить ограничения временного шага из-за жесткости и достичь тесной связи уравнений, все методы должны развиваться с неявным интегрированием по времени. Поэтому значительные усилия были затрачены на развитие метода прямых (MOL) для интеграции системы уравнений. С MOL отдельно дискретизируются пространственные и временные области, они эффективно преобразуются в большую систему обыкновенных дифференциальных уравнений, которые могут быть интегрированы с помощью ранее развитого программного обеспечения специального назначения высокой степени разрешения.

Простые, эффективные и надежные алгоритмы необходимы для решения корректных моделей. Различные ингредиенты, используемые в разрабатываемых методах, должны быть достаточно общими, чтобы учесть на будущее расширение набора решаемых междисциплинарных задач. Использование обычно применяемого метода дробных шагов, как правило, является ошибочным для вычисления этих типов начально-краевых задач, которые состоят из различных видов физики с несколькими временными масштабами, некоторые из которых должны быть обработаны неявно, требуют мер предосторожности, чтобы избежать расщепления решения и накопления ошибки. Полностью неявная обработка может быть не только выгодна, но и необходима. Полностью неявный подход позволит интегрировать по быстрым временным масштабам для медленных скоростей потоков. Использование метода Ньютона — Крылова со свободным якобианом на основе предобуславливателя позволит тесно связать решения междисциплинарных явлений, присущих основным приложениям ядерного реактора.

Глава 6 посвящена вопросам численного моделирования зародышеобразующих кипящих потоков. Приводится термо- и механически равновесная потоковая модель, проверенная на точном решении 1D устойчивого резкого фронта испарения и в 2D случае статического пузыря, демонстрирующая согласие с законом Лапласа. Также рассмотрено двумерное моделирование зародышеобразующих кипящих потоков. Результаты показывают очень хорошее качественное поведение, а также способность метода работать с такими сложными потоками.

Глава 7 содержит описание разрабатываемой в ИБРАЭ РАН методики моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения. Методика позволяет моделировать явления кипения, испарения и конденсации. Моделирование осуществляется с помощью метода дискретных уравнений с использованием

HLLC солвера с учетом тензора поверхностного натяжения, обеспечивающего выравнивание по температуре и давлению, для учета особенностей решаемых двухфазных задач с уравнением состояния stiffened (сжатого газа). В главе изложены подробности методики и приведены результаты ее верификации, а также практические примеры применения развитого подхода.

Литература

1. *Berry R. A., Kadioglu S.* High-Resolution, Two-phase Flow Modeling Challenges for Light Water Nuclear Reactors // 2008 SIAM Annual Meeting. — San Diego, CA, July 2008.
2. *Nishio S., Tanaka H.* Visualization of Boiling Structures in High-Heat Flux Pool-Boiling // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2004. — 47. — P. 4559—4568.
3. *Theofanus T. G. et al.* The Boiling Crisis Phenomena. — Pt. II: Dryout Dynamics and Burnout // *Experimental Thermal and Fluid Science.* — 2002. — 26. — P. 793—810.
4. «Two-phase Convective Flow Boiling Flow Modelling» [Seminar], organized by the Societe Hydrotechnique de France (SHF) and the International Association of Hydraulic Engineering and Research (IAHR) under sponsorship of Société Française de Thermique (SFT), CEA, AREVA, EDF, and AFM. Workshop was held in Grenoble, France, Sept. 8—9, 2008.

Глава 2. Усредненные консервативные уравнения для сжимаемых многофазных, многокомпонентных и многоматериальных течений

Многие важные течения включают сочетание двух или более материалов, имеющих разные свойства. Многокомпонентные фазы или материалы часто демонстрируют относительное движение между фазами или классами материалов. Микроскопические движения отдельных компонентов сложны, и решение эволюционных уравнений на микроуровне затруднено. Характерной особенностью течений многокомпонентных материалов является неопределенность в точном местоположении конкретных составляющих в произвольный момент времени. Для большинства практических задач невозможно точно предсказать или измерить эволюцию деталей таких систем, и это даже не является необходимым или желательным. Обычно исследователи заинтересованы в более грубых особенностях движения или в «усредненном» поведении системы. Ниже представлены уравнения, которые позволяют прогнозировать эволюцию такого поведения в среднем. Из-за сложности интерфейсов и, вследствие этого, разрывов в свойствах жидкости, а также в связи с проблемами физического масштабирования важно работать с усредненными величинами и параметрами. Начнем с более строгого определения концепции усреднения. Среди опубликованных в литературе способов усреднения преимущественно доминируют два типа: объемное усреднение [8; 32] и усреднение по времени [15]. Иногда используется их комбинация. В этой главе рассматривается более общий подход, известный как усреднение по ансамблю.

Когда физическая система подвержена значительным изменениям, естественно толковать смысл получаемых результатов с точки зрения ожидаемых значений и отклонений. Если есть много различных событий или возможных реализаций, ожидаемое значение есть «среднее» по всем этим событиям или по ансамблю реализаций. Тогда ансамбль — множество всех экспериментов с теми же краевыми и начальными условиями, с некоторыми свойствами, которые мы хотели бы связать со средним, и распределения

компонентов и их скоростей. Реализация потока — возможное его движение, которое могло случиться. В этой концепции есть интуитивная идея о «более вероятной» и «менее вероятной» реализации в ансамбле. Поэтому, как показано ниже, ансамбль реализаций, соответствующих данной физической ситуации, имеет вероятностную меру на подмножестве реализаций. Усреднение по ансамблю является обобщением элементарной идеи добавления значения переменной для каждой реализации и деления на количество наблюдений. Тогда усреднение по ансамблю позволяет интерпретировать явления с точки зрения повторяемости многокомпонентных течений. Одной из приятных особенностей усреднения по ансамблю (в отличие от объемного усреднения) является то, что оно не требует, чтобы контрольный объем содержал большое количество определенного компонента в любой момент реализации.

Рассмотрим пример из [10], где газовые турбины эродируют твердые частицы материала в газовый поток, проходящий через входное отверстие и воздействующий на различные части машины, например лопатки турбины. Траектории отдельных частиц, движущихся через газовую турбину, очень сложны и зависят от того, где и когда частицы вводились во входное отверстие устройства. Такие прогнозы, к счастью, требуются редко. Однако они важны для конструктора, которого интересует, что представляют собой средние или ожидаемые значения потока частиц (или их концентрации и скорости) вблизи тех частей устройства, которые восприимчивы к эрозии. Предположим, что локальная концентрация частиц пропорциональна вероятности того, что частицы будут находиться в различных точках в устройстве в разные моменты времени. У поля скоростей частиц будет средняя скорость, которую они будут иметь, если находятся в данном положении в устройстве. Тогда конструктор сможет использовать эту информацию для оценки места, где может возникнуть эрозия из-за воздействия частиц.

Следует иметь в виду, что время усреднения может и не быть тем временем, за которое множество частиц окажется в некотором репрезентативном контрольном объеме (или репрезентативном элементарном объеме, REV). Таким образом, выполнить объемное усреднение, которое зависит от концепции наличия множества видов частиц в усредняемом объеме, в любой момент не удастся. Очевидна целесообразность усреднению по ансамблю. Здесь ансамбль — набор движений одной частицы через устройство при условии, что она стартовала в произвольной точке на входе в случайное время в течение проходящего через устройство потока. Очевидно, что решение для средней концентрации и средней скорости дает мало информации о поведении отдельной частицы, однако оно подходит для оценки вероятности повреждения устройства. Можно привести и другие примеры, где усреднение по времени сделать не удастся, но снова оказывается умест-

ным усреднение по ансамблю. Усреднение по ансамблю имеет более фундаментальную основу, чем усреднение по времени и по объему. Усреднение как по времени, так и по объему можно рассматривать как приближение к усреднению по ансамблю, которое может быть справедливо соответственно для стационарного или гомогенного потока [11].

2.1. Усреднение по ансамблю

Представленный здесь общий метод основан на концепции усреднения по ансамблю [6; 11; 18; 21] для усредненных уравнений сохранения для нескольких материалов, каждый из которых может быть в точке \vec{x} в данный момент времени t .

С помощью этой процедуры состояние в точке (ожидаемое значение) определяется одновременно с тем, какой материал скорее всего можно найти в этой точке. Повторим эксперимент много раз и выберем данные по состоянию течения в каждой точке пространства \vec{x} и времени t : какой материал или фаза присутствует, плотность материала, скорость, давление, температура, концентрация и т. д. Исходя из этой информации, можно вычислить среднее по ансамблю.

Среднее по ансамблю обобщенного свойства Q_0 жидкости или материала в процессе есть усреднение по реализациям

$$\langle Q_0 \rangle(\vec{x}, t) = \frac{1}{N_R} \sum_{r=1}^{N_R} Q_{0,r}(\vec{x}, t), \quad (1)$$

где N_R — количество раз, которое процесс или эксперимент повторяют, и это большое количество.

Представим, что многие реализации имеют дубликаты, т. е. по сути они являются одними и теми же состояниями с N числом реализаций. Можно переписать сумму по реализациям в виде суммы по числу состояний N_Γ :

$$\begin{aligned} \langle Q_0 \rangle(\vec{x}, t) &= \frac{1}{N_R} \sum_{\Gamma=1}^{N_\Gamma} N(\vec{x}, t, \Gamma) Q_0(\Gamma) = \\ &= \sum_{\Gamma=1}^{N_\Gamma} \frac{N(\vec{x}, t, \Gamma)}{N_R} Q_0(\Gamma) = \int_{\text{all } \Gamma} Q_0(\Gamma) f(\vec{x}, t, \Gamma) d\Gamma, \end{aligned} \quad (2)$$

где $f(\vec{x}, t, \Gamma) = \frac{N(\vec{x}, t, \Gamma)}{N_R}$ — вероятность состояния Γ в ансамбле.

Отметим, что предел бесконечного числа повторений эксперимента с суммой по всем состояниям мы заменили суммированием в интегральной форме в определении среднего по ансамблю.

Нормировка плотности вероятности $f(\vec{x}, t, \Gamma)$ имеет вид

$$\int_{\text{all } \Gamma} f(\vec{x}, t, \Gamma) d\Gamma = 1, 0.$$

Состояние есть полное термодинамическое описание вещества в точке \vec{x} и времени t . Например, для

$$\Gamma = \left\{ \rho_0, \vec{u}_0, h_0, p_0, \underline{\tau}_0, \rho_0^1, \vec{u}_0^1, h_0^1, \rho_0^2, \vec{u}_0^2, h_0^2, \dots, X_1, X_2, \dots \right\}, \quad (3)$$

где $X_k(\vec{x}, t)$ — индикаторная функция фазы или материала:

$$X_k(\vec{x}, t) = \begin{cases} = 1, & \text{если материал } k \text{ присутствует,} \\ = 0 & \text{в прочих случаях;} \end{cases}$$

ρ_0 — плотность фазы или материала; \vec{u}_0 — скорость фазы или материала; h_0 — удельная энтальпия фазы или материала; p_0 — давление; $\underline{\tau}_0$ — девиаторные напряжения; ρ_0^s — виды парциальной смеси; \vec{u}_0^s — парциальная скорость; h_0^s — виды парциальной энтальпии с $\rho_0 = \sum_{\text{виды}} \rho_0^s$, $\rho_0 \vec{u}_0 = \sum_{\text{виды}} \rho_0^s \vec{u}_0^s$, $\rho_0 h_0 = \sum_{\text{виды}} \rho_0^s h_0^s$.

Другие свойства также могут появиться в приведенном выше термодинамическом состоянии, это температура фазы или материала θ_0 , удельная внутренняя энергия фазы или материала e_0 и удельная энтропия фазы или материала s_0 .

Объемная доля k -го материала $\alpha_k \equiv \langle X_k \rangle$.

Насыпная средняя плотность k -го материала $\hat{\rho}_k \equiv \langle X_k \rho_0 \rangle$.

Внутренняя средняя плотность k -го материала $\rho_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 \rangle}{\alpha_k}$.

Насыпная средняя плотность вида s в k -м материале $\hat{\rho}_k^s \equiv \langle X_k \rho_0^s \rangle$.

Внутренняя средняя плотность вида s в k -м материале $\rho_k^s \equiv \frac{\langle X_k \rho_0^s \rangle}{\alpha_k}$.

$$\text{Скорость } k\text{-го материала } \bar{u}_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 \bar{u}_0 \rangle}{\hat{\rho}_k} = \frac{\langle X_k \rho_0 \bar{u}_0 \rangle}{\alpha_k \hat{\rho}_k}.$$

$$\text{Полная энергия } k\text{-го материала } E_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 E_0 \rangle}{\hat{\rho}_k} = \frac{\langle X_k \rho_0 E_0 \rangle}{\alpha_k \hat{\rho}_k}.$$

$$\text{Энтропия } k\text{-го материала } s_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 s_0 \rangle}{\hat{\rho}_k} = \frac{\langle X_k \rho_0 s_0 \rangle}{\alpha_k \hat{\rho}_k}.$$

$$\text{Усредненные напряжения смеси } \underline{T} \equiv \left\langle \underline{T}_0 \right\rangle.$$

$$\text{Усредненные напряжения } k\text{-го материала } \underline{T}_k \equiv \frac{\left\langle X_k \underline{T}_0 \right\rangle}{\alpha_k}.$$

$$\text{Давление (модель одного давления) } p \equiv \langle p_0 \rangle.$$

$$\text{Давление в } k\text{-го материале } p_k \equiv \frac{\langle X_k p_0 \rangle}{\alpha_k}.$$

С физической точки зрения объемная средняя плотность представляет собой сумму всех значений плотности, которые реализовались для этой фазы, отнесенных к общему числу запусков эксперимента. Объемная средняя плотность интуитивно соответствует идее о массе фазы k на единицу объема смеси или наблюдаемой плотности материала. С другой стороны, внутренняя средняя плотность физически соответствует суммированию всех значений плотности, которые реализовались для этой фазы, поделенной на количество реализаций этой фазы в экспериментах.

Внутренняя средняя плотность интуитивно соответствует массе фазы k , отнесенной к единице объема смеси, или истинной плотности материала. Некоторые исследователи предпочитают работать с объемными средними плотностями [18], тогда как другие — с внутренними плотностями [11]. Это в основном вопрос удобства, поскольку одна может быть легко преобразована в другую. Здесь будем использовать внутренне осреднение. Отныне, когда речь пойдет об усреднении, будет иметься в виду внутреннее среднее, если не указано иное.

В достаточно широком диапазоне условий (с общими веществами) точные балансовые уравнения, действительные внутри каждого материала, имеют вид:

$$\dot{\rho}_0 = -\rho_0 \nabla \cdot \bar{u}_0 \text{ — сохранение массы материала,} \quad (4)$$

$$\dot{\rho}_0^s = -\rho_0^s \nabla \cdot \vec{u}_0 - \nabla \cdot \rho_0^s (\vec{u}_0^s - \vec{u}_0) + \dot{r}_0^s \text{ — сохранение массы вида,} \quad (5)$$

$$\rho_0 \dot{\vec{u}}_0 = \nabla \cdot \underline{T}_0 + \rho_0 \vec{g} \text{ — баланс импульса материала,} \quad (6)$$

$$\rho_0 \dot{E}_0 = \nabla \cdot \left(\underline{T}_0 \cdot \vec{u}_0 \right) + \nabla \cdot \vec{q}_0 + \rho_0 \vec{g} \cdot \vec{u}_0 + \rho_0 \varepsilon_0 \text{ —} \quad (7)$$

сохранение энергии материала,

$$\rho_0 \dot{s}_0 \geq \frac{\rho_0 \varepsilon_0}{\theta_0} - \nabla \cdot \left(\frac{\vec{q}_0}{\theta_0} \right) \text{ —} \quad (8)$$

неравенство энтропии материала.

Для этих законов микроскопического баланса была использована материальная производная, которая определяется так:

$$\dot{Q}_0 \equiv \frac{\partial Q_0}{\partial t} + \vec{u}_0 \cdot \nabla Q_0 \text{ — полная производная.} \quad (9)$$

Предположим, что полная вариация f в фазовом пространстве (\vec{x}, t, Γ) [18]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u}_0 \cdot \nabla f + \dot{\Gamma} \cdot \frac{\partial f}{\partial \Gamma} = \frac{df}{dt} = 0, \quad (10)$$

где мы полагаем, что, когда следуем за материальной точкой через фазовое пространство, вероятность ее появления остается постоянной.

Различные моменты этого уравнения могут быть образованы сначала умножением уравнения (10) на Q_0 , а затем усреднением этого результата. Можно показать [18], что в результате получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q_0 \rangle + \nabla \cdot \langle Q_0 \vec{u}_0 \rangle = \langle \dot{Q}_0 + Q_0 \nabla \cdot \vec{u}_0 \rangle. \quad (11)$$

Это уравнение эволюции импульса, и детали его получения приведены в приложении 2А. Усредненные уравнения сохранения записывают в общем виде для обобщенной величины Q_0 , которая потом заменяется на различные «значимые» функции, и, выполнив продуманные манипуляции, можно получить физически полезные формы уравнения.

2.2. Сохранение массы

Положив $Q_0 = X_k \rho_0$ в (11), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle X_k \rho_0 \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle X_k \rho_0 \vec{u}_0 \rangle &= \langle \dot{X}_k \rho_0 + X_k \dot{\rho}_0 + X_k \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}_0 \rangle = \\ &= \langle \dot{X}_k \rho_0 + X_k (\dot{\rho}_0 + \rho_0 \nabla \cdot \vec{u}_0) \rangle. \end{aligned}$$

Введем уравнение сохранения массы чистых материалов (микроскопический уровень) и определение усредненных результатов:

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \vec{u}_k = \langle \dot{X}_k \rho_0 \rangle. \quad (12)$$

Поскольку мы берем временные и пространственные производные функций, которые не являются гладкими, при усреднении уравнения сохранения массы их следует интерпретировать в смысле распределенных или обобщенных функций [12]. Рассмотрим правую часть этого уравнения более подробно. Из определения материальной производной следует, что

$$\dot{X}_k = \frac{\partial X_k}{\partial t} + \vec{u}_0 \cdot \nabla X_k$$

в смысле обобщенной функции. С другой стороны, пусть \vec{u}_{int} обозначает скорость интерфейса фазы или материала k , тогда в материальной производной X_k исчезают скорости интерфейса:

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \vec{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k = 0.$$

В этом легко убедиться, предварительно рассмотрев точки, где либо $X_k = 0$, либо $X_k = 1$ и обе частные производные обращаются в нуль. Следовательно, левые части этого уравнения обращаются в нуль одинаково. Для точек на границе раздела, которые тоже движутся со скоростью интерфейса, функция X_k является скачком, что остается неизменным, так что их следующие материальные производные интерфейса исчезают. Поэтому можно написать:

$$\begin{aligned} \langle \dot{X}_k \rho_0 \rangle &= \left\langle \rho_0 \left[\left(\frac{\partial X_k}{\partial t} + \vec{u}_0 \cdot \nabla X_k \right) - \underbrace{\left(\frac{\partial X_k}{\partial t} + \vec{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k \right)}_{=0} \right] \right\rangle = \\ &= \langle \rho_0 (\vec{u}_0 - \vec{u}_{\text{int}}) \cdot \nabla X_k \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

и усредненное уравнение сохранения массы примет вид

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \bar{u}_k = \langle \rho_0 (\bar{u}_0 - \bar{u}_{\text{int}}) \cdot \nabla X_k \rangle \equiv \Omega_k^{\text{mass}}. \quad (14)$$

Отметим, что ∇X_k имеет свойство фильтра дельта-функции Дирака. Таким образом, вклад в решение вносят только материальные интерфейсы. ∇X_k равняется произведению единичного вектора нормали к поверхности, указывающей на фазу k дельта-функции [9; 19].

$$\nabla X_k = \bar{n}_k \delta(\bar{x} - \bar{x}_{\text{int}}, t).$$

Итак, Ω_k^{mass} представляет собой поток массы в фазу k от других фаз через интерфейс. Необходимо требовать сохранения массы на границе раздела фаз:

$$\sum_{k=1}^{\text{no. of phases}} \Omega_k^{\text{mass}} = 0. \quad (15)$$

Удобно ввести для последующего использования понятие плотности площади интерфейса (поверхности раздела) для компоненты k :

$$A_k = -\langle \hat{n}_k \cdot \nabla X_k \rangle,$$

где \hat{n}_k — единичная внешняя нормаль к компоненте k , это ожидаемое значение соотношения площади поверхности раздела (в небольшом объеме) k (малому) объему, в пределе этот объем стремится к нулю.

2.3. Общие уравнения сохранения

Для получения другого уравнения сохранения выведем усредненное уравнение баланса из общего микроскопического уравнения баланса. Рассмотрим общее микроскопическое уравнение баланса

$$\frac{\partial \rho_0 \psi_0}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_0 \psi_0 \bar{u}_k = \nabla \cdot J_0 + \rho_0 g_0 \quad (16)$$

и

$$\frac{d(\rho_0 \psi_0)}{dt} + (\rho_0 \psi_0) \nabla \cdot \bar{u}_k = \rho_0 \dot{\psi}_0 = \nabla \cdot J_0 + \rho_0 g_0. \quad (17)$$

Уравнения (16) и (17) справедливы в каждой точке, где имеет место достаточная гладкость производных и выполняются следующие условия на скачке:

$$\left[\left[\rho_0 \Psi_0 (\vec{u}_0 - \vec{u}_{\text{int}}) + J_0 \right] \right] \cdot \hat{n} = m, \quad (18)$$

где Ψ_0 — консервативная величина; J_0 — молекулярный или диффузионный поток; g_0 — плотность источников; m — межфазный источник Ψ_0 ; символ $[[\]]$ обозначает скачок замыкающих отношений величин через интерфейс.

Очевидно, что эти величины должны быть добавлены к пространственному состоянию, например

$$\Gamma = \{ \rho_0, \vec{u}_0, \Psi_0, J_0, \dots, X_1, X_2, \dots \}. \quad (19)$$

Определим также средние значения этих величин:

$$\Psi_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 \Psi_0 \rangle}{\alpha_k \rho_k},$$

$$J_k \equiv \frac{\langle X_k J_0 \rangle}{\alpha_k},$$

$$g_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 g_0 \rangle}{\alpha_k \rho_k}.$$

Положив $Q_0 = X_k \rho_0 \Psi_0$ в уравнении (11), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle X_k \rho_0 \Psi_0 \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle X_k \rho_0 \Psi_0 \vec{u}_0 \rangle &= \left\langle \frac{d \langle X_k \rho_0 \Psi_0 \rangle}{dt} + X_k \rho_0 \Psi_0 \nabla \cdot \vec{u}_0 \right\rangle = \\ &= \left\langle \dot{X}_k \rho_0 \Psi_0 + X_k \frac{d \langle \rho_0 \Psi_0 \rangle}{dt} + X_k \rho_0 \Psi_0 \nabla \cdot \vec{u}_0 \right\rangle = \\ &= \left\langle \dot{X}_k \rho_0 \Psi_0 \right\rangle + \left\langle X_k \left(\frac{d \langle \rho_0 \Psi_0 \rangle}{dt} + X_k \rho_0 \Psi_0 \nabla \cdot \vec{u}_0 \right) \right\rangle = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle \dot{X}_k \rho_0 \Psi_0 + X_k \nabla \cdot J_0 + X_k \rho_0 g_0 \rangle = \\
 &= \langle \nabla \cdot X_k J_0 \rangle - \langle J_0 \cdot \nabla X_k \rangle + \langle \dot{X}_k \rho_0 \Psi_0 \rangle + \langle X_k \rho_0 g_0 \rangle = \\
 &= \langle \nabla \cdot X_k J_0 \rangle - \langle J_0 \cdot \nabla X_k \rangle + \langle \rho_0 \Psi_0 (\bar{u}_0 - \bar{u}_{\text{int}}) \cdot \nabla X_k \rangle + \langle X_k \rho_0 g_0 \rangle = \\
 &= \nabla \cdot \langle X_k J_0 \rangle + \langle X_k \rho_0 g_0 \rangle + \langle [\rho_0 \Psi_0 (\bar{u}_0 - \bar{u}_{\text{int}}) - J_0] \cdot \nabla X_k \rangle.
 \end{aligned}$$

Вводя скорость флуктуаций в виде $\bar{u}'_k = \bar{u}_0 - \bar{u}_k$ в это выражение, получим:

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial \alpha_k \rho_k \Psi_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \Psi_k \bar{u}'_k = \nabla \cdot \alpha_k J_k - \nabla \cdot \langle X_k \rho_0 \Psi_0 \bar{u}'_k \rangle + \\
 &+ \alpha_k \rho_k g_k + \langle [\rho_0 \Psi_0 (\bar{u}_0 - \bar{u}_{\text{int}}) - J_0] \cdot \nabla X_k \rangle = \quad (20) \\
 &= \nabla \cdot \alpha_k J_k - \nabla \cdot \langle X_k \rho_0 \Psi_0 \bar{u}'_k \rangle + \alpha_k \rho_k g_k + \langle \rho_0 \Psi_0 (\bar{u}_0 - \bar{u}_{\text{int}}) \cdot \nabla X_k \rangle - \\
 &- \langle J_0 \cdot \nabla X_k \rangle = \nabla \cdot \alpha_k J_k + \nabla \cdot \alpha_k J_k^{\text{Fluct}} + \alpha_k \rho_k g_k + \Omega_k^{\text{mass}} \Psi_k^{\text{int}} + \Omega_k^{\Psi},
 \end{aligned}$$

где $J_k^{\text{Fluct}} = -\frac{\nabla \cdot \langle X_k \rho_0 \Psi_0 \bar{u}'_k \rangle}{\alpha_k}$ — поток Ψ из-за колебаний фазовой скорости

k ; Ψ_k^{int} — эффективные значения Ψ , которые передаются фазе k от других фаз за счет массопередачи или изменения фазы; Ω_k^{Ψ} — поток Ψ к фазе k от других фаз, обусловленный другими механизмами переноса.

Это общее усредненное уравнение баланса. Для достижения баланса на интерфейсе общее уравнение скачка баланса требует выполнения следующего условия:

$$\sum_{k=1}^{\text{no. of phases}} \Omega_k^{\text{mass}} \Psi_k^{\text{int}} + \Omega_k^{\Psi} = M, \quad (21)$$

где $M = \langle m \rangle$ — ожидаемый чистый эффект всех интерфейсных слагаемых Ψ -источника.

2.4. Консервативность массы видов

Микроскопические уравнения баланса массы видов можно записать так:

$$\frac{\partial \rho_0^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_0^s \vec{u}_0^s = \dot{r}^s, \quad (22)$$

где ρ_0^s — частичная плотность вида; \vec{u}_0^s — удельная объемная скорость; \dot{r}^s — генерация или источник видов вследствие химических реакций.

Уравнения баланса массы видов в таком виде обычно не используются, потому что об отдельных видах скорости известно немного. Вместо этого они записываются в виде

$$\frac{\partial \rho_0^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_0^s \vec{u}_0^s = \nabla \cdot \rho_0^s (\vec{u}_0 - \vec{u}_0^s) + \dot{r}^s, \quad (23)$$

поскольку имеются эмпирические знания о поведении первого слагаемого в правой части уравнения, что показано ниже. Перепишем это уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_0 \frac{\rho_0^s}{\rho_0} \right) + \nabla \cdot \left(\rho_0 \frac{\rho_0^s}{\rho_0} \vec{u}_0 \right) = \nabla \cdot \left[\rho_0 \frac{\rho_0^s}{\rho_0} (\vec{u}_0 - \vec{u}_0^s) \right] + \rho_0 \frac{\dot{r}^s}{\rho_0}, \quad (24)$$

в форме общего усредненного уравнения баланса (20) используя обозначения

$$\Psi_0 = \frac{\rho_0^s}{\rho_0} \dots J_0 = \rho_0 \frac{\rho_0^s}{\rho_0} (\vec{u}_0 - \vec{u}_0^s) \dots g_0 = \frac{\dot{r}^s}{\rho_0}.$$

Таким образом, усредненный вид уравнения баланса массы таков:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_0^s \rangle + \nabla \cdot \langle X_k \rho_0^s \vec{u}_0 \rangle = \nabla \cdot \langle X_k \rho_0^s (\vec{u}_0 - \vec{u}_0^s) \rangle + \\ + \langle X_k \dot{r}^s \rangle + \langle [\rho_0^s (\vec{u}_0 - \vec{u}_{int}) - \rho_0^s (\vec{u}_0 - \vec{u}_0^s)] \cdot \nabla X_k \rangle. \end{aligned}$$

Вновь используя скорость флуктуаций и определения средних величин, получим следующую форму усредненного уравнения баланса массы видов:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k^s + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k^s \bar{u}_k &= \underbrace{\nabla \cdot \langle X_k \rho_0^s (\bar{u}_0 - \bar{u}_0^s) \rangle}_{\text{относительный поток вида}} - \\
 - \underbrace{\nabla \cdot \langle X_k \rho_0^s \bar{u}'_k \rangle}_{\text{осцилляции диффузии}} + \underbrace{\langle \rho_0^s (\bar{u}_0 - \bar{u}_{\text{int}}) \cdot \nabla X_k \rangle}_{\text{фазовые превращения}} - \\
 - \underbrace{\langle \rho_0^s (\bar{u}_0 - \bar{u}_0^s) \cdot \nabla X_k \rangle}_{\text{массобмен}} + \underbrace{\dot{R}_k^s}_{\text{химические реакции}},
 \end{aligned} \tag{25}$$

где усредненная скорость генерации в фазе k из-за химических реакций определяется так:

$$\dot{R}_k^s = \frac{\langle X_k \dot{r}^s \rangle}{\alpha_k}.$$

2.5. Баланс импульса

Усредненные уравнения баланса импульса получаются из общих уравнений путем усреднения уравнения баланса (20) с присвоением $\Psi_0 = \bar{u}_0 \dots J_0 = \underline{T}_0 \dots g_0 = \bar{g}_0$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_k \rho_k \bar{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \bar{u}_k \bar{u}_k &= \nabla \cdot \alpha_k \left(\underline{T}_k + \underline{T}_k^{\text{Fluct}} \right) + \\
 + \alpha_k \rho_k \bar{g}_k + \Omega_k^{\text{mom}} + \bar{u}_k^{\text{int}} \Omega_k^{\text{mass}},
 \end{aligned} \tag{26}$$

где термин напряжения флуктуаций $\underline{T}_k^{\text{Fluct}}$ и источник импульса на интерфейсе Ω_k^{mom} задаются в виде

$$\underline{T}_k^{\text{Fluct}} \equiv - \frac{\langle X_k \rho_0 \bar{u}'_k \bar{u}'_k \rangle}{\alpha_k}, \quad \Omega_k^{\text{mom}} \equiv - \left\langle \underline{T}_0 \cdot \nabla X_k \right\rangle.$$

Усредненное балансное ограничение поверхностного импульса (условие перехода):

$$\sum_{k=1}^{\text{no. of phases}} \Omega_k^{\text{mom}} + \bar{u}_k^{\text{int}} \Omega_k^{\text{mass}} = \bar{M}_{\text{surface tension}}, \tag{27}$$

где $\vec{M}_{\text{surface tension}}$ — поверхностный источник импульса, т. е. источник поверхностного натяжения.

2.6. Сохранение энергии

Применение соотношения вида

$$\psi_0 = E_0 = e_0 + \frac{1}{2} \vec{u}_0 \cdot \vec{u}_0 \dots J_0 = \vec{T}_0 \cdot \vec{u}_0 + \vec{q}_0 \dots g_0 = \vec{g}_0 \cdot \vec{u}_0 + \varepsilon_0$$

к переменным общего усредненного уравнения баланса (20) дает уравнение сохранения усредненной энергии

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k \left(e_k + \frac{1}{2} \vec{u}_k \cdot \vec{u}_k + e_k^{\text{Fluct}} \right) + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \vec{u}_k \left(e_k + \frac{1}{2} \vec{u}_k \cdot \vec{u}_k + e_k^{\text{Fluct}} \right) = \\ & = \nabla \cdot \left[\alpha_k \left(\vec{T}_k + \vec{T}_k^{\text{Fluct}} \right) \cdot \vec{u}_k \right] - \nabla \cdot \alpha_k \left(\vec{q}_k + \vec{q}_k^{\text{Fluct}} \right) + \alpha_k \rho_k \left(\varepsilon_k + \vec{g}_k \cdot \vec{u}_k \right) + \\ & + \Omega_k^{\text{energy}} + \Omega_k^{\text{mom}} \vec{u}_k^{\text{int}} + \Omega_k^{\text{mass}} \left(e_k^{\text{int}} + \frac{1}{2} \vec{u}_k^{\text{int}} \cdot \vec{u}_k^{\text{int}} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} e_k^{\text{Fluct}} & \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 \vec{u}'_k \vec{u}'_k \rangle}{\alpha_k \rho_k} \text{ — флуктуации кинетической энергии;} \\ \vec{q}_k^{\text{Fluct}} & \equiv \underbrace{\frac{\langle X_k \rho_0 \vec{u}'_k e'_k \rangle}{\alpha_k}}_{\text{флуктуации потока внутренней энергии}} + \underbrace{\frac{\langle X_k \vec{T}'_0 \cdot \vec{u}'_k \rangle}{\alpha_k}}_{\text{сдвиговые флуктуации}} + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\langle X_k \rho_0 \vec{u}'_k (\vec{u}'_k \cdot \vec{u}'_k) \rangle}{\alpha_k}}_{\text{флуктуации потока кинетической энергии}} \end{aligned}$$

— флуктуации потока энергии;

$$\varepsilon_k \equiv \frac{\langle X_k \rho_0 \varepsilon_0 \rangle}{\alpha_k \rho_k} \text{ — источник энергии;}$$

$\Omega_k^{\text{energy}} \equiv \langle \vec{q}_0 \cdot \nabla X_k \rangle$ — межфазный тепловой источник;

$\Omega_k^{\text{mom}} \cdot \vec{u}_k^{\text{int}} \equiv - \left\langle \underline{T}_0 \cdot \vec{u}_0 \cdot \nabla X_k \right\rangle$ — межфазная работа.

Усредненные ограничения баланса межфазной энергии (условие скачка) имеют вид

$$\sum_{k=1}^{\text{no. of phases}} \Omega_k^{\text{energy}} + \Omega_k^{\text{mom}} \cdot \vec{u}_k^{\text{int}} + \Omega_k^{\text{mass}} \left(e_k^{\text{int}} + \frac{1}{2} \vec{u}_k^{\text{int}} \cdot \vec{u}_k^{\text{int}} \right) = \xi, \quad (29)$$

где ξ — источник интерфейсной энергии.

Кинетическая энергия e_k^{Fluct} , связанная с колебаниями скорости, есть тип «турбулентной» кинетической энергии. Иногда сумма $e_k + e_k^{\text{Fluct}}$ интерпретируется как эффективная внутренняя энергия на единицу массы фазы k . Иногда полезно иметь выражение для баланса флуктуации кинетической энергии e_k^{Fluct} . Это выражение получено путем введения величины $\vec{u}'_k = \vec{u}_0 - \vec{u}_k$ в микроскопический баланс импульса чистой фазы. Принимая скалярное произведение этого уравнения за $X_k \vec{u}'_k$ и выполняя статистическое усреднение всех конфигураций (поскольку $\langle X_k \rho_0 \vec{u}'_k \rangle$ обращается в нуль), получаем выражение в окончательном виде (см., например, [23]):

$$\alpha_k \rho_k \frac{\partial e_k^{\text{Fluct}}}{\partial t} + \alpha_k \rho_k \vec{u}_k \cdot \nabla e_k^{\text{Fluct}} = \alpha_k \underline{T}_k^{\text{Fluct}} \cdot \nabla \vec{u}_k - \nabla \cdot \left\langle \frac{X_k \rho_0 (\vec{u}'_k \cdot \vec{u}'_k) \vec{u}'_k}{2} \right\rangle + \left\langle X_k \vec{u}'_k \cdot \left(\nabla \cdot \underline{T}_0 + \rho_0 \vec{g}_0 \right) \right\rangle.$$

Это уравнение обнаруживает некоторое сходство с уравнением эволюции флуктуаций кинетической энергии в однофазной турбулентной жидкости [34]. Первое слагаемое в правой части описывает влияние градиента \vec{u}_k на развитие e_k^{Fluct} , а второе, как ожидается, — диффузный e_k^{Fluct} , и последний член представляет собой мощность, развиваемую напряжениями и внешними силами [21].

Для большинства многофазных потоков, в том числе для некоторых очень (концептуально) простых течений, таких как прохождение газа через уплотненный слой или через галечный слой ядерного реактора, характер e_k^{Fluct} несколько отличается от такового в турбулентном однофазном пото-

ке. В отличие от однофазной жидкости, в которой колебания исчезают для медленных потоков, эти колебания для многофазного потока существуют, однако замедляют поток. По этой причине $\epsilon_k^{\text{Fluct}}$, вызывающую гидродинамические взаимодействия между фазами, иногда называют псевдотурбулентностью [21].

2.7. Неравенство энтропии

Локальная форма неравенства энтропии (8), которое иногда называют «вторым законом термодинамики», используется для ограничения на определяющие соотношения для описания уникальных фаз или поведения материалов. С использованием для общего усредненного соотношения баланса (20) следующих выражений:

$$\Psi_0 = s_0 \dots J_0 = -\frac{\bar{q}_0}{\theta_0} \dots g_0 = \frac{\epsilon_0}{\theta_0}$$

усредненное неравенство энтропии имеет вид

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k s_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k s_k \vec{u}_k \geq \nabla \cdot \alpha_k (\Phi_k + \Phi_k^{\text{Fluct}}) + \alpha_k \rho_k S_k + \Omega_k^{\text{entropy}} + \Omega_k^{\text{mass}} s_k^{\text{int}}, \quad (30)$$

где

$$\bar{\Phi}_k \equiv -\frac{\left\langle X_k \frac{\bar{q}_0}{\theta_0} \right\rangle}{\alpha_k} \quad \text{— поток энтропии;}$$

$$\bar{\Phi}_k^{\text{Fluct}} \equiv -\frac{\left\langle X_k \rho_0 s_k' \vec{u}_k' \right\rangle}{\alpha_k} \quad \text{— колебания потока энтропии;}$$

$$S_k \equiv \frac{\left\langle X_k \frac{\rho_0 \epsilon_0}{\theta_0} \right\rangle}{\alpha_k \rho_k} \quad \text{— источник энтропии;}$$

$$\Omega_k^{\text{entropy}} \equiv \left\langle \frac{\bar{q}_0}{\theta_0} \cdot \nabla X_k \right\rangle \quad \text{— источник межфазной энтропии.}$$

Это неравенство энтропии соответствует [11] и называется микроскопическим неравенством энтропии.

Макроскопическое неравенство энтропии может быть получено путем суммирования неравенства (30) по всем фазам или материалам, присутствующим в смеси [31]. Макроскопическое неравенство энтропии полезно для наложения ограничений на фазовые или материальные взаимодействия определяющих соотношений. В среднем поверхностное неравенство энтропии (условие перехода) имеет вид

$$\sum_{k=1}^{\text{no. of phases}} \Omega_k^{\text{entropy}} + \Omega_k^{\text{mass}} s_k^{\text{int}} \geq 0. \quad (31)$$

2.8. Уравнение распространения объемной доли

Остается получить динамические отношения, которые эффективно отражают граничные условия на микроуровне. Учтем тот факт, что объемные доли могут быть изменены без влияния на общее движение и, в некотором смысле, модели системы микроструктурных сил, действующих в многофазной смеси.

Начнем с предыдущего отношения для лагранжевой интерфейсной материальной производной X_k

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \bar{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k = 0,$$

которое при усреднении дает

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial X_k}{\partial t} + \bar{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial X_k}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \bar{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k \right\rangle = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rangle + \left\langle \bar{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k \right\rangle = \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \left\langle \bar{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k \right\rangle = 0. \end{aligned}$$

Вводя флуктуацию скорости интерфейса в виде

$$\bar{u}'_I = \bar{u}_{\text{int}} - \bar{u}_I,$$

где \bar{u}_l — средняя скорость интерфейса, в предыдущее уравнение, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \langle \bar{u}_{\text{int}} \cdot \nabla X_k \rangle &= \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \langle (\bar{u}_l + \bar{u}'_l) \cdot \nabla X_k \rangle = \\ &= \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \langle \bar{u}_l \cdot \nabla X_k \rangle + \langle \bar{u}'_l \cdot \nabla X_k \rangle = \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \bar{u}_l \cdot \langle \nabla X_k \rangle + \langle \bar{u}'_l \cdot \nabla X_k \rangle = \\ &= \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \bar{u}_l \cdot \nabla \alpha_k + \langle \bar{u}'_l \cdot \nabla X_k \rangle = \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \bar{u}_l \cdot \nabla \alpha_k - \Omega_k^{\text{vol}} = 0, \end{aligned}$$

где Ω_k^{vol} — движущая функция для изменения объемной доли α_k . Таким образом, это уравнение записывается в виде

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \bar{u}_l \cdot \nabla \alpha_k = \Omega_k^{\text{vol}}. \quad (32)$$

В связи с центральной ролью, которую это уравнение распространения объемной фракции играет в современных условиях, следующий раздел посвящен корректной модели двухфазного потока с правильной динамикой волн.

2.9. Гиперболическая модель двухфазных течений из семи уравнений с двумя давлениями и двумя скоростями

До 1981 г. предпринимались попытки удалить некорректную природу из полного уравнения двухфазного потока, например [5; 14; 25; 26; 29]. Авторы этих исследований пытались получить замыкание классической системы из шести уравнений с помощью алгебраических средств и достигли некоторого ограниченного успеха. Но при этом оказалось, что не хватает какой-то ключевой компоненты.

В 1981 г. была опубликована статья [22], определяющая недостающие компоненты в сжимаемых двухфазных потоках. Ее автор Nguyen использовал производство энтропии для каждой фазы, выполняя анализ (типа Onsager), и в результате была получена билинейная форма в термодинамических потоках и в их сопряженных силах. Из анализа он вывел так называемые феноменологические законы, один из которых в первом приближении выглядит так:

$$p_k - p_i = L_{\alpha k} \left(\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + w_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial z} \right), \quad (33)$$

где обозначения являются стандартными, w_k обозначает z-компоненту фазовой скорости k , $L_{\alpha k}$ обозначает феноменологический коэффициент, который, возможно, будет «получен из структуры потока».

Чтобы завершить набор замыкающих уравнений, Нгуен предложил определить интерфейсное давление p_i следующим образом:

$$p_i = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 [p_k - \alpha_k \rho_k \xi_k (w_1, w_2)], \quad (34)$$

где ξ_k должен быть определен согласованно с физической ситуацией.

Кроме того, Нгуен считал разумным предположение, что феноменологические коэффициенты равны:

$$L_{\alpha 1} = L_{\alpha 2} = L_{\alpha}.$$

При этих предположениях он получил модель из семи уравнений с реальными характеристиками, которая была гиперболической и сформулирована как хорошо поставленная задача с начальными условиями.

Однако Нгуен не проделал (по крайней мере в [22]) следующую полезную манипуляцию. Добавление ее в уравнения (49) и (50) для устранения p_i дает

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{w_1 + w_2}{2} \frac{\partial \alpha}{\partial z} = \frac{p_1 - p_2}{2L_{\alpha}}.$$

Перед тем как дальше развивать уравнения из [22], предположим, что феноменологические коэффициенты не равны, тогда легко получается следующее:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \left(\frac{L_1 w_1 + L_2 w_2}{L_1 + L_2} \right) \frac{\partial \alpha}{\partial z} = \frac{p_1 - p_2}{L_1 + L_2}. \quad (35)$$

Теперь, если $L_2 \gg L_1$ и w_1 имеет тот же порядок, что и w_2 , соотношение (35) аппроксимируется в виде

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + w_2 \frac{\partial \alpha}{\partial z} \approx \frac{P_1 - P_2}{L_2}.$$

Эти отношения привлекательны тем, что изменения объемной фракции регулируются динамическими отношениями, в которых разница давления между двумя фазами инициирует фазовые изменения. Если фазы имели одинаковое давление, то изменений в объемной доле не будет. Знаменатели в правой части уравнения, т. е. комбинации феноменологических коэффициентов для двух фаз, будут определяться тем, как было достигнуто равновесное «быстрое» давление. Уравнение фазовой адвекции или уравнение распространения объемной фракции может быть распространено на уравнение адвекции скорости, где фазовые скорости взвешиваются со своими феноменологическими коэффициентами.

В 1983 г. был опубликован доклад [24], который позднее стал приложением к классической работе по рациональной термодинамике [31]. В дополнение к традиционным аксиомам баланса в [24] постулируется дополнительная балансная аксиома, которая описывает изменения объемной фракции. Там использована идея неравенства энтропии для смеси, требующая ограничения, чтобы смесь была насыщенной. Это привело к уравнению распространения объемной фракции, названному балансом уравновешенной силы с учетом того обстоятельства, что составные объемные доли могут изменяться, не затрагивая общего движения. Это уравнение в некотором смысле является моделью системы микроструктурных сил, действующей в многофазных смесях.

Такой подход не нашел признания у исследователей, изучающих двухфазные течения жидкости, вероятно, потому, что вывод уравнения был аксиоматическим [31] (в отличие от используемых некоторых типов усреднения), а также из-за отсутствия знакомства с терминологией. Однако спустя несколько лет была опубликована монография [8], в которой использовалось строгое объемное усреднение наряду с базовым постулатом о деформации материала, чтобы получить дополнительные уравнения переноса для многофазных смесей, которое было очень похожим.

В декабре 1983 г. Вагг и Нузиато из SNL реализовали двухфазную теорию смеси для описания перехода от дефлаграции к детонации (DDT) в гранулированных реактивных материалах [3]. Позже это исследование было опубликовано [4]. Тем не менее (возможно, из-за контекста приложения в дополнение к его аксиоматическому выводу) данный метод не привлек внимания в сообществе двухфазной гидродинамики. В этой работе неравенство энтропии для двухфазной смеси было использовано непосредственно

для уравнения распространения объемной фракции, которое (в контексте его применения) называют уравнением уплотнения (с изменением фазы).

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial \alpha_s}{\partial z} = \frac{\alpha_s \alpha_g}{\mu_c} \left[p_s - (p_g + \beta_s) \right] + \frac{c_s^+}{\gamma_s}, \quad (36)$$

где β_s — «давление конфигурации», определяющееся изменениями в упаковке слоя или уплотнения; μ_c — вязкость уплотнения, контролирующая скорость, при которой достигается равновесное давление.

Это уравнение, полученное разными способами, можно рассматривать как более простой, частный случай упомянутого выше уравнения баланса равновесной силы [24]. Эта сжимаемая двухфазная модель из семи уравнений (Baer и Nunziato) была гиперболической и корректной. Эти авторы также успешно сконструировали численные алгоритмы решения для данной системы уравнений. В то время как мотивирующие положения для этой модели сильно отличаются от тех, что применяют в сообществе двухфазной гидродинамики, основополагающие принципы очень похожи. Уравнение Baer и Nunziato для изменения объемной доли может быть сформулировано в более общем виде:

$$\frac{\partial \alpha_\alpha}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial \alpha_\alpha}{\partial z} = \sum_j \frac{\alpha_\alpha \alpha_j}{\mu_{j,\alpha}} \left[p_\alpha - \beta_\alpha - (p_j - \beta_j) \right] + \frac{c_\alpha^+}{\gamma_\alpha}, \quad (37)$$

где β_α — давление конфигураций, а коэффициенты теплообмена $\mu_{j,\alpha}$ отражают взаимодействие между фазами.

Эти кинетические уравнения, обеспечивающие замыкание модели смеси, являются балансовыми уравнениями сил с участием давления конфигураций, давления фаз и вязких напряжений, связанных с зависящими от скорости изменениями объемной фракции. Коэффициенты релаксации $\mu_{j,\alpha}$ имеют размерность единицы вязкости. Более того, подобно разработке Nguyen (но в отличие от [24]) это определяющие уравнения, а не уравнения поля. Как отмечено в [2], они отражают граничные условия на микроуровне. В [27] было выполнено преобразование уравнения эволюции объемной фракции в эволюционное уравнение микроскопической плотности масс. В [17] было получено уравнение эволюции плотности массы, имеющее несколько иной характер.

Рассмотрим виртуальную ячейку физической модели смеси для двухфазного потока. В фиксированном объеме V присутствуют две несмешиваю-

щиеся компоненты, масса которых m_1 и m_2 соответственно. Компоненты занимают объемы V_1 и V_2 такие, что $V_1 + V_2 = V$.

Компоненты фазы имеют плотности материала ρ_1 и ρ_2 такие, что

$$V = V_1 + V_2 = \frac{m_1}{\rho_1} + \frac{m_2}{\rho_2},$$

или

$$1 = \frac{V_1}{V} + \frac{V_2}{V} = \alpha_1 + \alpha_2 = \frac{m_1}{V\rho_1} + \frac{m_2}{V\rho_2},$$

где $\alpha_1 = \frac{V_1}{V}$ и $\alpha_2 = \frac{V_2}{V}$ — объемные фракции каждой фазы.

Для каждой составляющей

$$\rho_1 = \frac{m_1}{V_1} \text{ и } \rho_2 = \frac{m_2}{V_2} \quad (38)$$

и

$$p_1 = f_1(\rho_1, I_1) = f_1\left(\frac{m_1}{V_1}, I_1\right), \quad (39)$$

$$p_2 = f_2(\rho_2, I_2) = f_2\left(\frac{m_2}{V_2}, I_2\right). \quad (40)$$

Теперь, если V_1 и V_2 скорректированы (в зависимости от ограничения $V_1 + V_2 = V$) до тех пор, пока давления фаз равны равновесному давлению p :

$$p = f_1\left(\frac{m_1}{V_1}, I_1\right) = f_2\left(\frac{m_2}{V_2}, I_2\right). \quad (41)$$

При этом равновесном давлении соответствующие фазовые объемы дают равновесную объемную долю:

$$\alpha_1^\varepsilon = \frac{V_1}{V},$$

$$\alpha_2^\varepsilon = \frac{V_2}{V}.$$

Это может быть достигнуто в целом динамически следующим образом. Во-первых, следует обратить внимание на то, что

$$p_1 = f_1(p_1, I_1) = f_1\left(\frac{m_1}{\alpha_1 V}, I_1\right),$$

$$p_2 = f_2(p_2, I_2) = f_2\left(\frac{m_2}{\alpha_2 V}, I_2\right),$$

а также на то, что

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = -\frac{d\alpha_2}{dt},$$

$$\frac{d^2\alpha_1}{dt^2} = -\frac{d^2\alpha_2}{dt^2}.$$

Теперь интуитивно рассмотрим динамическое уравнение

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \frac{p_1 - p_2}{\tau}. \quad (42)$$

Если α_1 сжимается слишком сильно ($p_1 > p_2$), то α_1 будет увеличиваться со временем, позволяя p_1 уменьшаться, пока α_2 уменьшается, позволяя p_2 расти. Этот процесс заканчивается, когда $p_1 = p_2 = p$ и, таким образом, $\frac{d\alpha_1}{dt} = 0$. Скорость релаксации τ определяет скорость, с которой фазы ста-

билизируются.

В целом можно написать:

$$\begin{aligned} & (\text{мирокинерция}) \cdot \frac{d^2\alpha_1}{dt^2} + (\text{вязкость уплотнения}) \cdot \frac{d\alpha_1}{dt} = \\ & = (\text{микроструктурные силы}) = F. \end{aligned} \quad (43)$$

Микроструктурная сила F является релаксационным слагаемым, которое предназначено для моделирования движущей силы или «резистенции»

смеси при изменении ее конфигурации. Будем сжимать слой газо-твердых частиц,

$$F = \begin{cases} \alpha_s \alpha_g (p_s - p_g - \beta_s) & \text{для } p_s - \beta_s > 0, \\ -\alpha_s \alpha_g p_g & \text{для } p_s - \beta_s \leq 0 \end{cases} \quad (44)$$

в соответствии с учетом уплотнения как необратимого процесса (β_s — «давление конфигурации» слоя).

Если полагать «микроинерцию» и «давление конфигурации» равными нулю, то имеем

$$\mu \frac{d\alpha_1}{dt} = \alpha_1 \alpha_2 (p_1 - p_2)$$

или

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 (p_1 - p_2)}{\mu}. \quad (45)$$

Мультипликативный коэффициент $\alpha_1 \alpha_2$ в вынуждающей силе F включен по следующим причинам: (1) его величина примерно пропорциональна площади поверхности на единицу объема A_i / V , (2) лучший результат достигается в однофазном пределе за счет исчезновения других фаз, т. е. $\alpha_1 \rightarrow 0 (\alpha_2 \rightarrow 1)$ или $\alpha_2 \rightarrow 0 (\alpha_1 \rightarrow 1)$.

В 1998 г. в [28] была опубликована сжимаемая модель потока из семи уравнений. Пренебрегая микроинерцией, поверхностным натяжением и ковариационными слагаемыми (при условии отсутствия переноса массы между фазами) авторы предложили следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial \bar{p}_k}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{p}_k \bar{u}_k = 0. \quad (46)$$

$$\frac{\partial \bar{p}_k \bar{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{p}_k \bar{u}_k \otimes \bar{u}_k) + \bar{p}_k = p_l \nabla \alpha_k + \lambda (\bar{u}_m - \bar{u}_k). \quad (47)$$

$$\frac{\partial \bar{p}_k E_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{p}_k E_k \bar{u}_k + \bar{p}_k \bar{u}_k) = p_l u_l \cdot \nabla \alpha_k + \lambda (\bar{u}_m - \bar{u}_k) u_l + \mu (p_k - p_m) p_l. \quad (48)$$

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + u_l \cdot \nabla \alpha_k = \mu (p_k - p_m), \quad (49)$$

где α_k , $\bar{\rho}_k = \alpha_k \rho_k$, \bar{u}_k , $\bar{p}_k = \alpha_k p_k$ и E_k представляют объемную фракцию, плотность массы, скорость, давление и полную энергию жидкой фазы k соответственно.

Неравновесная двухфазная модель потока, восходящая к работе Abgrall и Saurel [1], представляющая собой вариант оригинальной VN-модели [4], предпочтительна вследствие ее симметричной формулировки. В этих моделях предполагается, что каждая фаза сжимаема по своим собственным термодинамическим законам. Система включает семь уравнений с частными производными (объемная доля и масса, импульс и баланс энергии для каждой фазы) и является гиперболической. Эти уравнения, которые представляют собой баланс массы, импульса, полной энергии и эволюцию объемной фракции с конкретными условиями межфазного переноса, размещены в правой части уравнения. В этих уравнениях (для двухфазного потока) $k=1, 2$ и соответствует $m=1, 2$, p_l и u_l представляют собой поверхностное давление и скорость. В VN-модели эти переменные выбраны следующим образом: $p_1 = p_2$ и $u_l = \bar{u}_1$, в то время как в модели Saurel использованы следующие межфазные значения:

$$u_l = \frac{\sum_{k=1,2} \alpha_k \rho_k u_k}{\sum_{k=1,2} \alpha_k \rho_k}; \quad p_l = \sum_{k=1,2} \alpha_k p_k. \quad (50)$$

Эта модель содержит параметры релаксации λ и μ , определяющие расходы, при которых скорости и давления двух фаз достигают равновесия. Эти уравнения замыкаются с помощью двух уравнений состояния: уравнения ограничения насыщения для объемных долей и уравнения состояния stiffened (застывшего) газа.

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (51)$$

$$p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k (e_k - q_k) - \gamma_k \pi_k, \quad (52)$$

где e_k — внутренняя энергия; γ_k , q_k , π_k — константы, специфичные для каждой фазы k .

Модель является гиперболической и корректной, позволяет решать задачи в ситуациях, с которыми другие модели не справляются. В оригинальной модели Vaer и Nunziato, становящейся все более популярной в литературе и известной как БН-модель, скорость u_i принята равной скорости наименее сжимаемой фазы, а межфазное давление p_i — давлению в наиболее

сжимаемой фазе. Saurel и Abgrall, принимали p_i равным давлению смеси, а за u_i принимали скорость центра масс. В [20] представлены усовершенствованные процедуры релаксации давления для этого метода.

Новые варианты этой теории появились в литературе под названием «метод дискретных уравнений» (DEM) [1]. В традиционном подходе, который был представлен выше, сначала усреднялся микроскопический уровень одной фазы дифференциальными уравнениями в частных производных (PDE) в течение предполагаемого фазового распределения топологии, чтобы получить макроскопический уровень многофазных уравнений. Тогда же были сделаны соответствующие упрощающие предположения для макроскопического уровня PDE.

Макроскопические многофазные уравнения потока численно дискретизируются, а полученные уравнения решаются с использованием конечных разностей, конечных объемов или методом конечных элементов для получения «стандартных» численных решений.

В DEM подходе используется предположение об общей топологии распределения фаз. Тогда численное решение в расчетной ячейке получается с использованием римановских или приближенных римановских соотношений. Это частное решение усредняется по объему ячейки и по времени для получения значимого решения. DEM метод включает в себя давление и скорость для каждой фазы, он эффективно решает уравнения Эйлера только локально, этот метод гиперболический и дает корректное решение динамической волны. Он предоставляет еще и дополнительный бонус (например [7]) — использовать новый метод гомогенизации (DEM), чтобы получить не только модель из семи уравнений, приведенную выше, но и явные формулы замыкания для p_i и u_i , симметричные, совместимые со вторым законом термодинамики и ответственные за выполнение интерфейсных условий. При решении проблем контакта/интерфейса он также дает общую явную формулу для μ . В акустике, в непрерывном пределе, этот способ приводит к системе уравнений (для простоты без массообмена):

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \alpha_1 \cdot \bar{u}_1 = \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial (\alpha p)_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha p \bar{u})_1 = 0,$$

$$\frac{\partial (\alpha p \bar{u})_1}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha p \bar{u} \otimes \bar{u} + \alpha p L \right)_1 = p_1 \nabla \alpha_1 + \lambda (\bar{u}_2 - \bar{u}_1), \quad (53)$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho E)_1}{\partial t} + \nabla \cdot [\alpha(\rho E + p)\vec{u}]_1 = p_1\vec{u}'_1 \cdot \nabla\alpha_1 + \lambda\vec{u}'_1 \cdot (\vec{u}_2 - \vec{u}_1) - \mu p'_1(p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u})_2 = 0,$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho\vec{u})_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u} \otimes \vec{u} + \alpha\rho\vec{I})_2 = p_1\nabla\alpha_2 + \lambda(\vec{u}_2 - \vec{u}_1),$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho E)_2}{\partial t} + \nabla \cdot [\alpha(\rho E + p)\vec{u}]_2 = p_1\vec{u}'_1 \cdot \nabla\alpha_2 + \lambda\vec{u}'_1 \cdot (\vec{u}_2 - \vec{u}_1) - \mu p'_1(p_1 - p_2),$$

где α , ρ , \vec{u} , p , E ($E = e + \frac{1}{2}\vec{u} \cdot \vec{u}$) и e представляют собой объемную долю, плотность, скорость, давление, полную энергию и внутреннюю энергию соответственно.

Межфазные переменные были определены в [1], так что

$$\vec{u}'_1 = \frac{Z_1\vec{u}_1 + Z_2\vec{u}_2}{Z_1 + Z_2} + \frac{\nabla\alpha_1}{|\nabla\alpha_1|} \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2},$$

$$p'_1 = \frac{Z_2p_1 + Z_1p_2}{Z_1 + Z_2} + \frac{Z_1Z_2}{Z_1 + Z_2} \frac{\nabla\alpha_1}{|\nabla\alpha_1|} \cdot (\vec{u}_2 - \vec{u}_1).$$

Эти переменные соответствуют интерфейсной скорости и давлению, воздействию на поверхность двухфазного контрольного объема, т. е. в местах, где присутствует градиент объемной доли. Усредненная поверхностная скорость и давление, действующее внутри двухфазного контрольного объема, задаются в виде

$$\vec{u}'_1 = \frac{Z_1\vec{u}_1 + Z_2\vec{u}_2}{Z_1 + Z_2},$$

$$p'_1 = \frac{Z_2p_1 + Z_1p_2}{Z_1 + Z_2}.$$

Механическая неравновесность представлена процессом релаксации, скорость которого контролируется следующими параметрами:

$$\lambda = \frac{1}{2} \mu Z_1 Z_2 \quad (\text{параметр релаксации скорости}),$$

$$\mu = \frac{A_l}{Z_1 + Z_2} \quad (\text{параметр релаксации давления}),$$

где A_l представляет удельную межфазную площадь; Z_k — акустический импеданс фазы k , т. е. $Z_k = \rho_k c_k$.

2.10. Редуцированное или ослабленное уравнение формы

Единственная модель равновесного давления скорости соответствует одной из моделей [16]. Она получена как асимптотический предел модели [4] в пределе жесткой скорости и релаксации давления, включает пять дифференциальных уравнений, одно из которых неконсервативное. Его результирующая скорость звука соответствует работе [30] и обладает немонотонным изменением в зависимости от объемной доли. Неконсервативность и немонотонность представляют собой серьезные вычислительные задачи. Чтобы обойти их, построена неравновесная по давлению модель из шести уравнений (первая уменьшенная модель — в [16]), также неконсервативная, но ее проще решать методом релаксации. Она представлена в главе 3.

Модель [16] — нулевое приближение модели Baer и Nunziato с жесткой механической релаксацией. В одномерном случае (без переноса массы) с учетом только двух жидкостей модель имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\rho_1 c_1^2 + \rho_2 c_2^2} \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \tag{54}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} = 0,$$

где α , ρ , u , p , E ($E = e + \frac{1}{2}u^2$) и e представляют соответственно объемную долю, плотность смеси, скорость, давление смеси, полную энергию и внутреннюю энергию смеси.

Внутренняя энергия смеси определяется так:

$$e = Y_1 e_1(\rho_1, p) + Y_2 e_2(\rho_2, p), \quad (55)$$

а массовая доля определяется по формуле

$$Y_k = \frac{(\alpha \rho)_k}{\rho}.$$

Плотность смеси определяется из соотношения

$$\rho = (\alpha \rho)_1 + (\alpha \rho)_2.$$

Каждая жидкость определяется собственным выпуклым уравнением состояния (EOS) $e_k = e_k(\rho_k, p)$, которое позволяет определить скорость звука фазы $c_k = c_k(\rho_k, p)$.

Давление смеси p определяется из решения уравнения (55). В частном случае жидкости регулируются EOS застывшего газа

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k - \gamma_k p_{\infty k}. \quad (56).$$

Результирующее EOS смеси выглядит следующим образом:

$$p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}. \quad (57)$$

Несложно получить уравнения энтропии

$$\frac{ds_k}{dt} = 0, \quad k = 1, 2.$$

Эта модель требует конкретных замыкающих соотношений в присутствии ударных волн. В пределе слабых ударных волн соответствующие ударные отношения были определены в [30]:

$$\begin{aligned} Y_k &= Y_k^0, \\ \rho(u - \sigma) &= \rho^0(u^0 - \sigma) = m, \\ p - p^0 + m^2(v - v^0) &= 0, \\ e_k - e_k^0 + \frac{p + p^0}{2}(v_k^* - v_k^0) &= 0, \end{aligned} \tag{58}$$

где σ обозначает скорость ударной волны, а верхний индекс «0» — неударное состояние.

Ударные отношения были проверены на большом наборе экспериментов для слабых и сильных ударных волн [30].

В [13] использовался асимптотический анализ в пределе нулевого времени релаксации, чтобы свести двухфазную модель из семи уравнений (которая содержит релаксационные слагаемые, что приводит систему к равновесным давлению и скорости) к редуцированной гиперболической системе из пяти уравнений.

В главе 3 представлены новая система уравнений, полученная из модели семи уравнений, и численный метод для эффективного выполнения прямого численного моделирования (DNS) с помощью подхода диффузионного интерфейса (DIM).

В дальнейшем следует обратить внимание на получение правильного волнового поведения во время переходных процессов и на математические формулировки, а также на прозрачность численных методов. Рассмотренные выше методы удовлетворяют этим требованиям и являются корректными как для усредненных моделей многофазных течений, так и моделей типа DNS.

Приложение 2А. Уравнение эволюции импульса

При выводе уравнения эволюции импульса особое внимание уделено функциональным зависимостям. Определим среднее по ансамблю некоторого свойства Q_0 :

$$\langle Q_0 \rangle(\bar{x}, t) \equiv \int_{\Gamma_0} Q_0(\Gamma_0) f(\bar{x}, t, \Gamma_0) d\Gamma_0, \quad (\text{A.1})$$

где, например, $\Gamma_0 = \{\rho_0, \bar{u}_0, e_0, X_1, X_2, \dots\}$.

Заметим, что Q_0 явно зависит от состояния Γ_0 , его среднее значение $\langle Q_0 \rangle$ зависит от позиции \bar{x} и времени t , которое оно приобрело от функции вероятности $f(\bar{x}, t, \Gamma_0)$. В самом деле, $\langle Q_0 \rangle$ теряет явную зависимость от Γ_0 самим своим определением как интеграла по всем возможным состояниям Γ_0 .

Изменение вероятности есть

$$df = \frac{\partial f}{\partial t} dt + \frac{\partial f}{\partial \bar{x}} \cdot d\bar{x} + \frac{\partial f}{\partial \Gamma_0} \cdot d\Gamma_0,$$

тогда временные вариации вероятности можно записать в виде

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \bar{u}_0 \cdot \nabla f + \dot{\Gamma}_0 \cdot \frac{\partial f}{\partial \Gamma_0}. \quad (\text{A.2})$$

Если теперь умножить это уравнение на $Q_0(\Gamma_0)$ и проинтегрировать по Γ_0 -пространству, получим

$$\int_{Q_0} \frac{df}{dt} d\Gamma_0 = \int_{Q_0} \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma_0 + \int_{Q_0} \bar{u}_0 \cdot \nabla f d\Gamma_0 + \int_{Q_0} \dot{\Gamma}_0 \cdot \frac{\partial f}{\partial \Gamma_0} d\Gamma_0. \quad (\text{A.3})$$

Рассмотрим каждое слагаемое этого выражения. Поскольку Q_0 не зависит явно от времени t ,

$$\int_{Q_0}(\Gamma_0) \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma_0 = \int \frac{\partial(Q_0 f)}{\partial t} d\Gamma_0 = \frac{\partial}{\partial t} \int_{Q_0} f d\Gamma_0 = \frac{\partial}{\partial t} \langle Q_0 \rangle(\bar{x}, t).$$

Аналогично, поскольку Q_0 не зависит от \bar{x} , имеем

$$\begin{aligned} \int_{Q_0} \bar{u}_0 \cdot \nabla f d\Gamma_0 &= \int \nabla(Q_0 f) \cdot \bar{u}_0 d\Gamma_0 = \int \nabla \cdot (Q_0 \bar{u}_0 f) d\Gamma_0 - \int_{Q_0} f (\nabla \cdot \bar{u}_0) d\Gamma_0 = \\ &= \nabla \cdot \int_{Q_0} \bar{u}_0 f d\Gamma_0 - \int_{Q_0} (\nabla \cdot \bar{u}_0) f d\Gamma_0 = \\ &= \nabla \cdot \langle Q_0 \bar{u}_0 \rangle(\bar{x}, t) - \langle Q_0 \nabla \cdot \bar{u}_0 \rangle(\bar{x}, t). \end{aligned}$$

Также известно, что $\dot{\Gamma}_0$ не зависит от Γ_0 , таким образом,

$$\begin{aligned}
 \int Q_0 \dot{\Gamma}_0 \cdot \frac{\partial f}{\partial t} d\Gamma_0 &= \dot{\Gamma}_0 \cdot \int Q_0 \frac{\partial f}{\partial \Gamma_0} d\Gamma_0 = \dot{\Gamma}_0 \cdot \left[\int \frac{\partial(Q_0 f)}{\partial \Gamma_0} d\Gamma_0 - \int f \frac{\partial Q_0}{\partial \Gamma_0} d\Gamma_0 \right] = \\
 &= \dot{\Gamma}_0 \cdot Q_0 f \Big|_{\text{limit of } \Gamma_0} - \int \dot{\Gamma}_0 \cdot \frac{\partial Q_0}{\partial \Gamma_0} f d\Gamma_0 = \\
 &= 0 - \left\langle \dot{\Gamma}_0 \cdot \frac{\partial Q_0}{\partial \Gamma_0} \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial Q_0}{\partial \Gamma_0} \cdot \frac{d\Gamma_0}{dt} \right\rangle = - \frac{dQ_0}{dt} = - \langle \dot{Q}_0 \rangle(\bar{x}, t).
 \end{aligned}$$

До тех пор пока Q_0 является физически консервативной величиной, мы также имеем

$$\int Q_0 \frac{df}{dt} d\Gamma_0 = 0.$$

Подстановка всех этих выражений обратно в интегральное уравнение, приведенное выше, дает уравнение эволюции импульса (11)

$$\frac{\partial \langle Q_0 \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle Q_0 \bar{u}_0 \rangle = \langle \dot{Q}_0 + Q_0 \nabla \cdot \bar{u}_0 \rangle.$$

Примечание. Вместо уравнения [18]:

$$\frac{\partial \langle Q_0 \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle Q_0 \bar{u}_0 \rangle = \left\langle \dot{\Gamma}_0 \frac{\partial Q_0}{\partial \Gamma_0} \right\rangle + \int Q_0 \frac{Df}{Dt} d\Gamma_0,$$

чтобы быть корректным, следует использовать уравнение вида

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \langle Q_0 \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle Q_0 \bar{u}_0 \rangle &= \left\langle \dot{\Gamma}_0 \frac{\partial Q_0}{\partial \Gamma_0} \right\rangle + \langle Q_0 \nabla \cdot \bar{u}_0 \rangle + \int Q_0 \frac{Df}{Dt} d\Gamma_0 = \\
 &= \langle \dot{Q}_0 + Q_0 \nabla \cdot \bar{u}_0 \rangle + \int Q_0 \frac{Df}{Dt} d\Gamma_0.
 \end{aligned}$$

Литература

1. *Abgrall R., Saurel R.* Discrete Equations for Physical and Numerical Compressible Multiphase Mixtures // *J. of Computational Physics.* — 2003. — 186. — P. 361—396.
2. *Baer M. R.* Continuum Mixture Modeling of Reactive Porous Media // *High-Pressure Shock Compression of Solids IV: Response of Highly Porous*

Solids to Shock Loading. — Chap. 3 / Ed. by L. Davison, Y. Horie, M. Shahinpoor. — New York: Springer, 1997.

3. *Baer M. R., Nunziato J. W.* A Theory of Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Granular Explosives: Sandia National Laboratory report SAND82-0293. — Albuquerque, NM, Dec. 1983.

4. *Baer M. R., Nunziato J. W.* A Two-Phase Mixture Theory for the Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Reactive Granular Materials // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1986. — Vol. 12. — P. 861—889.

5. *Banerjee S., Chan A. M. C.* Separated Flow Models I, Analysis of the Averaged and Local Instantaneous Formulations // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1980. — Vol. 6. — P. 1—24.

6. *Brackbill J. U., Johnson N. L., Kashiwa B. A., Vanderheyden W. B.* Multiphase Flows and Particle Methods // *The Fifth Annual Conference of the Computational Fluid Dynamics Society of Canada*. — Victoria, British Columbia, May 1997.

7. *Chinnayya A., Daniel E., Saurel R.* Modelling Detonation Waves in Heterogeneous Energetic Materials // *J. of Computational Physics*. — 2004. — 196. — P. 490—538.

8. *Dobran F.* Theory of Structured Multiphase Mixtures. — Berlin: Springer-Verl., 1991.

9. *Drew D. A.* Mathematical Modeling of Two-Phase Flow // *Ann. Rev. Fluid Mech*. — 1983. — Vol. 15.

10. *Drew D. A., Lahey R. T.* Analytical Modeling of Multiphase Flow // *Particulate Two-Phase Flow* / Ed. M. C. Roco. — Boston: Butterworth-Heinemann, 1993.

11. *Drew D. A., Passman S. L.* Theory of Multicomponent Fluids. — New York: Springer-Verl., 1999.

12. *Gelfand I. M., Shilov G. E.* Generalized Functions. — Vol. 1. — New York: Academic, 1964.

13. *Guillard H., Murrone A.* A Five Equation Reduced Model for Compressible Two Phase Flow Problems // *J. of Computational Physics*. — 2005. — 202. — P. 664—698.

14. *Hancox W. T., Ferch R. L., Liu W. S., Niemann R. E.* One-Dimensional Models for Transient Gas-Liquid Flows in Ducts // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1980. — Vol. 6. — P. 25—40.

15. *Ishii M.* Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow. — Paris: Eyrolles, 1975.

16. *Kapila A.K., Menikoff R, Bdzil J. B. et al.* Two-Phase Modeling of Deflagration to Detonation Transition in Granular Materials: Reduced Equations // *Physics of Fluids*. — 2001. — 13. — 3002—3024 (<http://dx.doi.org/10.1063/1.1398042>).
17. *Kashiwa B. A., Gaffney E. S.* Design Basis for CFDLib: Los Alamos National Laboratory report No. LA-UR-03-1295. — [S. l.], 2003.
18. *Kashiwa B. A., Rauenzahn R. M.* A Multimaterial Formalism // *Numerical Methods in Multiphase Flows*, ASME FED. — 1994. — Vol. 185. — P. 149—157.
19. *Kataoka I., Serizawa A.* Interfacial Area Concentration and Its Roles in Local Instant Formulation of Two-Phase Flow // *Transient Phenomena in Multiphase Flow* / Ed. N. H. Afgan. — New York: Hemisphere, 1988.
20. *Lallemant M.-H., Saurel R.* Pressure Relaxation Procedures for Multiphase Compressible Flows: INRIA report No. 4038. — France, Oct. 2000.
21. *Lhuillier D.* The Macroscopic Modelling of Multi-Phase Mixtures // *Flow of Particles in Suspensions* / Ed. U. Schaflinger. — Wien; New York: Springer-Verl., 1996.
22. *Nguyen H.* One-Dimensional Models for Transient Two-Phase Separated Flow // *Third CSNI Specialist Meeting on Transient Two-Phase Flow* / California Inst. of Technology. — Pasadena, California, Mar. 23—25, 1981.
23. *Nigmatulin R. I.* Dynamics of Multiphase Media. — New York: Hemisphere, 1990.
24. *Passman S. L., Nunziato J. W., Walsh E. K.* A Theory of Multiphase Mixtures: Sandia National Laboratory report SAND82-2261. — Albuquerque, NM, Mar. 1983.
25. *Ransom V. H., Scofield M. P.* Two-Pressure Hydrodynamic Model for Two-Phase Separated Flow: Idaho National Engineering Laboratory Report SRD-50-76. — [S. l.], Jan. 1976 (Revised, February 1976).
26. *Rousseau J. C., Ferch R. L.* A Note on Two-Phase Separated Flow Models // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1979. — Vol. 5. — P. 489—494.
27. *Saurel R., Forestier A., Veyret D., Loraud J.-C.* A Finite Volume Scheme for Two-Phase Compressible Flows // *Int. J. Numerical Methods in Fluids*. — 1994. — 18. — P. 803—819.
28. *Saurel R., Abrgall R.* A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows // *J. of Computational Physics*. — 1999. — 150. — P. 425—467.

29. *Stuhmiller J. H.* The Influence of Interfacial Pressure Forces on the Character of Two-Phase Flow Model Equations // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1977. — Vol. 3. — P. 551—560.

30. *Saurel R., LeMetayer O., Massoni J., Gavriluk S.* Shock Jump Relations for Multiphase Mixtures with Stiff Mechanical Relaxation // *Shock Waves*. — 2007. — 16. — P. 209—232.

31. *Truesdell C.* Rational Thermodynamics. — 2nd ed. — New York: Springer-Verl., 1984.

32. *Whitaker S.* The Method of Volume Averaging. — Dordrecht: Kluwer Academic, 1999.

33. *Wood A. B.* A Textbook of Sound. — London: G. Bell Sons Ltd., 1930.

34. *Wilcox D. C.* Turbulence Modeling for CFD. — Second ed. — Hardcover, July 1998.

Глава 3. Простые и эффективные методы релаксации для поверхностей раздела, разделяющих сжимаемые жидкости, и для кавитирующих течений

Рассматривается численная аппроксимация модели из пяти уравнений для двухфазных течений из [18]. Эта модель отлично зарекомендовала себя при численном разрешении поверхностей раздела, разделяющих сжимаемые жидкости, а также при распространении волн в сжимаемых смесях [2; 29; 31]. Однако численная аппроксимация такой модели связана с серьезными трудностями. Среди прочего это немонотонное поведение скорости звука, вызванное многократными звуковыми переходами в зонах численной диффузии на интерфейсах. Кроме того, вариации объемной фракции при прохождении акустических волн приводят к трудностям при решении задачи Римана, в частности при получении приближенных солверов. Еще одна проблема — обеспечение положительности объемной доли при наличии ударных волн или сильных волн разрежения. Чтобы обойти эти трудности, разработана модель неравновесного давления, представляющая собой односкоростную неконсервативную гиперболическую модель с двумя уравнениями энергии, включающими термины релаксации. Модель содержит уравнение состояния и сохранения энергии по обеим сторонам интерфейсов и гарантирует правильную передачу через интерфейсы ударных волн. Эта формулировка значительно упрощает численное решение. В соответствии со стратегией, разработанной ранее для другой модели течения [33], гиперболическая часть сначала решается без релаксационных слагаемых простым, быстрым и надежным алгоритмом, пригодным для неструктурированных сеток. Затем слагаемые жесткой релаксации решаются с помощью метода Ньютона, который также гарантирует положительность и надежность. Алгоритм и модель сравниваются с точными решениями уравнений Эйлера, также как и с решениями модели из пяти уравнений при экстремальных условиях течения для расчета интерфейса и кавитирующих течений, включающих динамику появления интерфейсов. Чтобы обеспе-

чить правильную динамику ударных волн, распространяющихся через многофазные смеси, метод искусственного теплообмена [31] был адаптирован к рассматриваемой формулировке.

3.1. Введение

Сжимаемые многофазные течения и смеси возникают во многих ситуациях природного и техногенного характера. К таким ситуациям можно отнести: динамику пузырька, взаимодействие ударной волны с разрывами материи, взрывы высокоэнергетических материалов, гиперскоростные соударения, кавитирующие потоки, системы горения и т. д. Актуальными являются точное и эффективное вычислительное решение проблем взаимодействия фаз при экстремальных условиях течения (высоком отношении давлений — примерно 10^7 , высоком отношении плотностей — примерно 10^3), а также вычисление динамики появляющихся интерфейсов, которые возникают в кавитирующих потоках и явлениях расщепления (ядерной реакции). Эти интерфейсы могут разделять чистые среды, а могут разделять и смеси материалов, в которых тоже важна динамика волн. Такие ситуации часто встречаются в физике взрывов, ядерной физике, порошковых инженерных и многих других приложениях. Цель настоящего раздела — демонстрация общей формулировки и алгоритма решения проблем интерфейса, разделяющего сжимаемые среды или смеси в экстремальных условиях.

Схемы типа Годунова и их варианты уже достигли такого уровня зрелости, при котором можно решать однофазные потоки в присутствии разрывов. Тем не менее наличие больших разрывов термодинамических переменных и уравнений состояния в материальных интерфейсах приводит к численной неустойчивости, осцилляциям и недостаточной точности вычислений [1; 48]. Чтобы обойти эти трудности, были разработаны два класса методов:

- рассматривающие интерфейс в виде резкого разрыва (методы острого интерфейса — SIM);
- рассматривающие интерфейс как диффузионную зону подобно контактному разрывам в газовой динамике (методы диффузионного интерфейса — DIM).

Класс лагранжевых SIM — самый естественный [10; 17]. В этом контексте вычислительные сетки движутся и искажаются вместе с материальным интерфейсом. Тем не менее при работе с потоками жидкости деформации неограниченны, и в результате искажения сетки могут сделать лагранжевый подход нерациональным [39]. Эйлеровы методы используют фиксированную сетку с дополнительным уравнением для отслеживания или реконструкции материального интерфейса. В методе VOF [16] предполагается,

что каждая вычислительная ячейка содержит смесь двух жидкостей, каждая из которых занимает свой объем и характеризуется своей объемной долей, которые переносятся в потоке. Этот метод широко используется для несжимаемых потоков, поскольку в нем нет никакой специальной термодинамики для вычисления ячеек смеси [15]. Для сжимаемых потоков используются дополнительные уравнения энергии, также как и процедуры релаксации давления [4; 26]. Эти методы выглядят эффективными в результате аккуратного управления различными уравнениями на дискретном уровне. В литературе не формализована четкая связь такого дискретного управления с данной системой непрерывных дифференциальных уравнений в частных производных.

Другой класс популярных эйлеровых методов основан на методе набора уровней Level Set [9; 28; 30; 40], чтобы локализовать и определить местоположение интерфейса. Для сжимаемых течений необходимо особое управление, чтобы гарантировать условия интерфейса. Соответствующая работа в этом направлении была проделана в [12] с помощью Ghost Fluid Method и в [49] с помощью упрощенной версии этого метода [19]. Данный метод привлекателен кажущейся простотой и универсальностью для разных проблем физики. Тем не менее его использование в любых условиях, с большими давлениями и отношениями плотностей не кажется оптимальным. Кроме того, он не является консервативным в отношении переменных смеси (импульса и энергии). Классу SIM соответствуют Front Tracking методы, в которых интерфейс явно отслеживаем течением фиксированной эйлеровой сетки. Были приложены значительные усилия, чтобы развивать вычислительные коды, использующие такой подход [14; 24]. Следует отметить, что ни один из этих методов не способен работать с динамически возникающими интерфейсами и решать интерфейсы, отделяющие чистые среды и смеси.

Второй тип методов (DIM) рассматривает интерфейсы как зоны численной диффузии подобно контактному разрыву в газовой динамике. Диффузные интерфейсы соответствуют искусственным смесям, созданным с помощью численной диффузии. В этом направлении была выполнена пионерская работа [1]. Определение величин термодинамических потоков в этих зонах достигается на основе теории многофазных потоков [2; 29; 31; 33; 35; 36; 50]. Задача состоит в том, чтобы получить физически, математически и численно соответствующие термодинамические законы для искусственной смеси. Ключевым вопросом является выполнение условия интерфейса в этой смеси. Данная категория имеет несколько преимуществ:

- один и тот же алгоритм реализуется в глобальном масштабе и в обеих чистых жидкостях, а также в зоне смеси; расширенная гиперболическая система используется для решения всех положений течения;

- эти модели и методы применимы для динамически создаваемых интерфейсов, не присутствующих изначально, например в кавитирующих течениях, где газовые пузыри динамически появляются в жидкости [23; 34; 38];
- эти методы также могут иметь дело с интерфейсами, разделяющими чистые жидкости и смеси жидкостей, например при расчете детонационных волн в конденсированных взрывчатых веществах, где химический распад производит многофазные смеси материалов [5; 34].

Методы второй категории на основе гиперболических моделей многофазных потоков состоят из двух основных классов:

- модели для неравновесных смесей (модель Baer и Nunziato [3] и ее варианты);
- модели для смесей в механическом равновесии [18; 42].

В этом разделе мы имеем дело с построением простой, надежной, быстрой и точной формулировки для многофазных течений с одной скоростью и одним давлением. Модель Karila [18] предназначена для вычисления интерфейсов, разделяющих сжимаемые жидкости, также как и баротропные и небаротропные кавитирующие течения. Специальные численные схемы для этой модели были получены в [2; 29; 31; 36].

Модель очень проста. В контексте двух жидкостей она состоит из двух уравнений массы, уравнения импульса и уравнения энергии смеси, записанных в консервативной формулировке. Замыкание системы уравнений достигается с помощью равновесного условия для давления, что приводит к дифференциальному уравнению переноса для объемной доли с неконсервативным слагаемым, включающим дивергенцию скорости и модули объемной фазы. Однако последнее уравнение создает серьезные вычислительные трудности:

- Вычисления ударных волн в контексте неконсервативной модели.
- Положительность объемной доли, когда речь идет об ударных волнах и сильных волнах расширения. Слагаемое с участием дивергенции скорости в уравнении эволюции объемной фракции трудно аппроксимировать [31]. Это особенно важно для появления динамических интерфейсов в кавитирующих потоках.
- Немонотонное поведение скорости звука [47], которое производит многократные звуковые точки в зонах численной диффузии на интерфейсах. В этом случае задачу сложно решить с помощью точного солвера Римана [31]. Поэтому для потоковых вычислений используют приближенный римановский солвер в результате ошибки выборки (с несколькими звуковыми точками), а также при вычислении эволюции неконсервативного уравнения. Эти трудности в решении задачи Римана объясняются колебаниями объемной доли при ударных волнах и волнах расширения.

Кроме того, чтобы рассмотреть будущие расширения подхода на другие классы задач и для достижения мультифизического моделирования сплошных сред, должна быть улучшена вычислительная эффективность существующих алгоритмов. Основными целями мультифизических задач, которые здесь рассматриваются, являются:

- сложные уравнения состояния (EOS): Ми — Грюнайзена для конденсированных материалов, JWL для взрывчатых веществ [22];
- сыпучие материалы, которые включают дополнительные EOS, отражающие контакт энергии гранул и контакт давления [51];
- моделирование капиллярных эффектов [32] вместе с фазовым переходом [38];
- интерфейсы, разделяющие сжимаемые жидкости и упругие твердые тела при экстремальных деформациях [11; 13; 27; 43]; этот случай особенно сложен, поскольку EOS для твердых веществ зависит от тензора деформации.

В данном разделе мы не будем рассматривать все эти задачи, однако очевидно, что существует потребность в простой и надежной многофазной формулировке. Здесь этот вопрос рассматривается в контексте простейшего варианта модели Karila [18].

Основная трудность этой модели связана с условием равновесного давления, что в результате приводит к неконсервативному уравнению для объемной доли. Консервативную формулировку можно получить с помощью уравнения энтропии. Данная формулировка несостоятельна в присутствии ударных волн. Чтобы обойти эти трудности, эффекты неравновесного давления будут восстановлены в модели Karila [18]. Это приводит к модели из шести уравнений с одной скоростью, но с двумя давлениями и соответствующими условиями релаксации. Данная расширенная модель уже была представлена в качестве первой уменьшенной копии модели Waer и Nunziato [3] в Karila [18], но никогда не рассматривалась для описания диффузионных интерфейсов. Седьмое уравнение добавлено для описания полной энергии смеси, чтобы гарантировать правильную трактовку ударных волн единственной предельной фазы. Это кажущаяся сложность с расширенной моделью на самом деле приводит к значительным упрощениям в отношении численного решения. В самом деле, модель остается гиперболической, только с тремя характерными скоростями распространения волн, положительность объемной доли легко сохраняется и множественные звуковые точки больше не появляются во время гиперболической эволюции.

Целью является конструирование простого и эффективного метода для численного приближения этой модели потока в контексте диффузных интерфейсов. Когда релаксационные слагаемые опущены, объемная доля

остаётся постоянной при прохождении через акустические волны, и задача Римана легко решается с применением приближенного римановского солвера (солверов типа HLLC и акустического солвера Торо [45]). С помощью модели неравновесного давления скорость звука ведет себя монотонно относительно объемной фракции, и многочисленные звуковые точки больше не появляются внутри зон численной диффузии на интерфейсах. Такая особенность обеспечивает робастность при рассмотрении кавитирующих потоков [20; 31; 41]. Это гиперболический шаг, затем следует этап релаксации, который состоит в определении асимптотического решения дифференциальной задачи в пределе бесконечно быстрой релаксации. Таков результат асимптотического решения в разрешении алгебраической системы. Сочетание этих двух этапов (гиперболического шага и релаксации) гарантирует сходимость метода к решениям уменьшенной модели Каріла [18].

Эта часть работы организована следующим образом. В разделе 3.2 речь идет о модели Каріла [18], представлена неравновесная модель из шести уравнений. Модель из шести уравнений может быть сведена к модели из пяти уравнений Каріла [18] в пределе жесткой релаксации по давлению. Представлены основные свойства этих моделей: неравенства энтропии и гиперболичность. В разделе 3.3 построен численный метод. Приближенные римановские солверы представлены для гиперболической части, и построена схема типа Годунова. Алгоритм релаксации давления также представлен в данном разделе. Особое внимание уделяется роли седьмого уравнения, используемого для коррекции вычислений неконсервативной энергии в пределе одной фазы по обе стороны от интерфейса. Различные тестовые случаи представлены в разделе 3.4 вместе с проверкой в отношении точных решений уравнений Эйлера и модели из пяти уравнений Каріла [18]. Некоторые примеры рассматривают интерфейсы, изначально присутствующие в потоке, в то время как другие включают интерфейсы динамического вида. Раздел 3.5 представляет расширение метода на случай распространения ударной волны в многофазных смесях. Это расширение не имеет значения для интерфейсов, разделяющих чистые (или почти чистые) жидкости. Но оно имеет значение, когда интерфейс отделяет чистые жидкости и смеси материалов. В разделе 3.6 приведено сравнение модели шести уравнений с существующими баротропными моделями кавитационных потоков [46]. Эти модели представляют собой предельные случаи настоящей модели из шести уравнений. Кроме того, предлагается простой алгоритм для решения кавитирующих баротропных потоков. Наконец, результаты и дальнейшие исследования обсуждаются в разделе 3.7.

3.2. Модель многофазных течений с равновесным давлением и одной неравновесной скоростью

Модель равновесного давления и одной скорости соответствует одной из моделей Karila [18]. Она была получена как асимптотический предел модели Baer и Nunziato [3] как в пределе жесткой скорости, так и в пределе релаксации давления. Модель включает пять уравнений в частных производных, одно из которых неконсервативное. Результирующая скорость звука в уравнении соответствует скорости из работы [47] и демонстрирует немонотонные вариации с объемной долей. Неконсервативность и немонотонность представляют серьезные вычислительные трудности. Чтобы обойти их, построена модель неравновесного давления из шести уравнений (первая уменьшенная модель в Karila [18]), которая также неконсервативна, но зато проще решается методом релаксации. Обе модели представлены ниже.

3.2.1. Модель из пяти уравнений

Модель Karila [18] является нулевым приближением модели Baer и Nunziato [3] с жесткой механической релаксацией. Она рассматривается в контексте двух жидкостей:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\alpha_1 \rho_1 c_1^2 + \alpha_2 \rho_2 c_2^2} \frac{\partial u}{\partial x},$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 u}{\partial x} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} = 0,$$

где α , ρ , u , p , E ($E = e + \frac{1}{2}u^2$) и e представляют соответственно объ-

емную долю, плотность смеси, скорость, давление смеси, полную энергию смеси и внутреннюю энергию смеси.

Внутренняя энергия смеси определяется так:

$$e = Y_1 e_1(\rho_1, p) + Y_2 e_2(\rho_2, p), \quad (2)$$

массовая доля определяется по формуле $Y_k = \frac{(\alpha\rho)_k}{\rho}$.

Плотность смеси определяется так: $\rho = (\alpha\rho)_1 + (\alpha\rho)_2$.

Каждая жидкость характеризуется собственным уравнением состояния $e_k = e_k(\rho_k, p)$, которое позволяет определить скорость звука фазы

$$c_k = c_k(\rho_k, p).$$

Давление смеси p определяется путем решения уравнения (2). В частном случае жидкость описывается EOS сгущенного газа

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k - \gamma_k p_{\infty k}. \quad (3)$$

Результирующее EOS смеси имеет вид

$$p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}. \quad (4)$$

Легко получить уравнения энтропии:

$$\frac{ds_k}{dt} = 0, \quad k = 1, 2.$$

При наличии ударных волн эта модель требует замыкающих соотношений в присутствии ударных волн. В пределе слабых ударных волн соответствующие ударные отношения были определены в [37]:

$$Y_k = Y_k^0,$$

$$\rho(u - \sigma) = \rho^0(u^0 - \sigma) = m,$$

$$p - p^0 + m^2(v - v^0) = 0, \quad (5)$$

$$e_k - e_k^0 + \frac{p + p^0}{2}(v_k^* - v_k^0) = 0,$$

где σ обозначает скорость ударной волны, а верхний индекс «0» представляет неударное состояние.

Эти отношения были протестированы относительно множества экспериментальных данных для слабых и сильных ударных волн в той же работе [37].

Несмотря на наличие приведенных выше соотношений, эта простая модель содержит много трудностей:

- С помощью соотношений (5) можно точно или приближенно решить задачу Римана [31]. Даже когда это решение является точным, как показано в той же работе, сходимость численной схемы к точному решению чрезвычайно трудна, так как система не является консервативной: усреднение по ячейке неконсервативных переменных не имеет физического смысла. Усреднение по ячейке было заменено процедурами релаксации в [36] и [31]. Для достижения сходимости для ударной волны, распространяющейся в многофазных смесях, необходим искусственный теплообмен в ударном слое [31].
- Другой вопрос связан с положительностью объемной доли в присутствии ударных волн и даже при наличии сильных волн разрежения. Например, при работе со смесью жидкость-газ сжимаемость жидкости настолько слаба, что давление, как правило, имеет тенденцию становиться отрицательным, в результате чего имеем отказ в вычислений скорости звука в газе. Такая ситуация часто встречается в тестовых задачах кавитации.

Дополнительная трудность связана со скоростью звука смеси, которая вычисляется по формуле [47]

$$\frac{1}{\rho c_{\text{eq}}^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}.$$

Скорость звука смеси имеет немонотонные изменения с объемной долей, как показано на рис. 1. Здесь c_{eq} представляет собой скорость звука смеси при механическом равновесии.

Это немонотонное поведение имеет серьезные последствия для вычисления интерфейсов, отделяющих сжимаемые жидкости. Рассмотрим, например, адвекцию границы раздела жидкость-газ, соответствующую в этой модели разрыву объемной доли. Во время численного решения разрыв станет

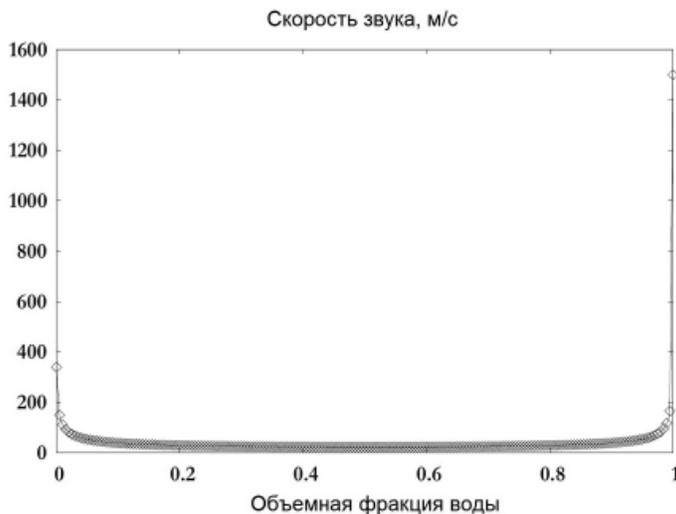


Рис. 1. Представление скорости звука смеси $1/\rho c_{\text{см}}^2 = (\alpha_1/\rho_1 c_1^2) + (\alpha_2/\rho_2 c_2^2)$ в модели из пяти уравнений для смеси жидкая вода — воздух при атмосферных условиях

зоной смеси. В этой зоне скорость звука имеет немонотонное поведение, которое может привести к наличию двух звуковых точек, даже если поток является дозвуковым в двух чистых жидкостях. Разрешение звуковых точек для этой модели создает трудности, когда инварианты Римана не могут быть интегрированы в явном виде [31]. Возможно использование приближенного солвера Римана, где левая и правая лицевые поверхности волн рассматриваются как разрывы. Когда используется эйлеров подход для вычисления потока, может возникнуть ошибка в решении, причем она дважды (для каждой звуковой точки) на поверхности раздела смеси на каждом шаге по времени.

Чтобы проиллюстрировать трудности, связанные с немонотонной скоростью звука в этой модели, численные результаты, полученные с помощью метода [31], представлены ниже. Этот метод рассматривает интерфейсы как зоны численной диффузии с помощью метода релаксации Лагранжа. Рассматривается ударная труба метровой длины, содержащая две камеры, разделенные интерфейсом в месте $x = 0,8$ м. Каждая камера содержит смесь воды и воздуха. Начальная плотность воды $\rho_{\text{воды}} = 1000 \text{ кг/м}^3$ и EOS параметры для воды $\gamma_{\text{воды}} = 4,4$ и $p_{\infty, \text{воды}} = 6 \cdot 10^8 \text{ Па}$. Начальная плотность воздуха $\rho_{\text{воздуха}} = 10 \text{ кг/м}^3$ и EOS параметры для воздуха $\gamma_{\text{воздуха}} = 1,4$ и $p_{\infty, \text{воздуха}} = 0 \text{ Па}$. Левая камера содержит очень небольшую объемную долю

воздуха $\alpha_{\text{воздуха}} = 10^{-6}$, и давление в ней равно 10^9 Па. Правая камера содержит те же жидкости, но объемные доли поменялись местами. Ее давление равно 10^5 Па. В обеих камерах начальная скорость равна нулю. Точное решение однофазного уравнения Эйлера и решение модели многофазных потоков с пятью уравнениями сравниваются на рис. 2 на момент $t = 200$ мкс.

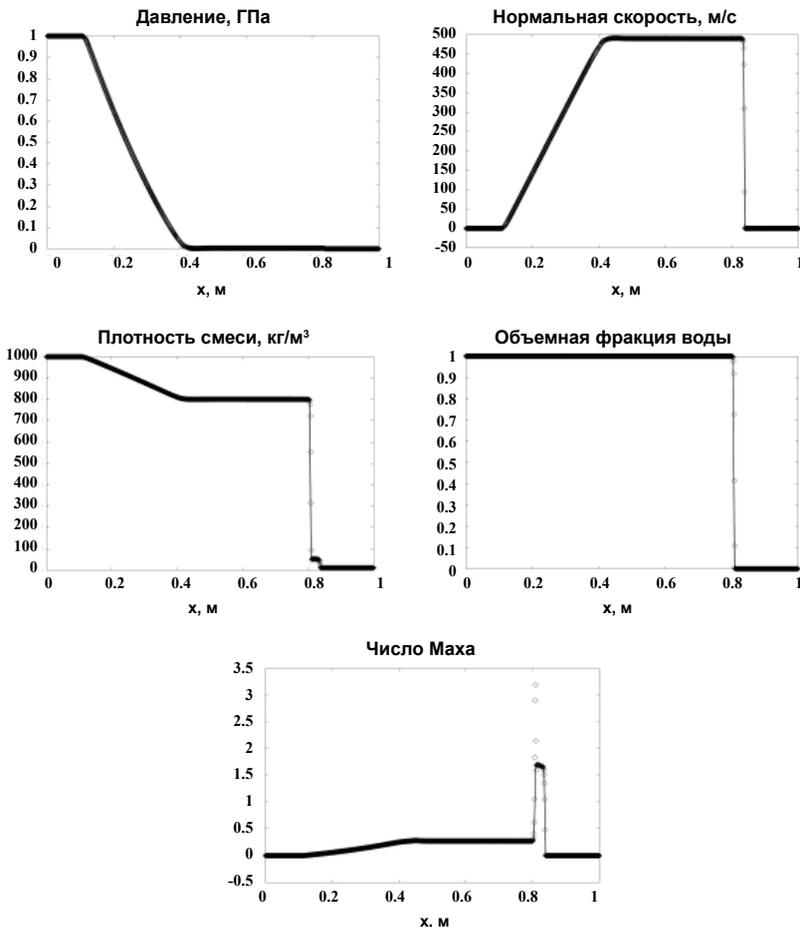


Рис. 2. Ударная труба жидкость-газ. Метод релаксации Лагранжа (символы) из [31] по сравнению с точным решением (сплошная линия). Сетка в 1000 ячеек. Отношение плотностей равно 100, отношение давлений — 10 000 на начальном разрыве. Колебания Маха появляются в зоне численной диффузии на интерфейсе и в связи с немонотонным поведением скорости звука этой модели

Метод, разработанный Petitpas и др. [31], в состоянии иметь дело с немонотонной скоростью звука и звуковыми переходами на границах, поскольку использует метод релаксации Лагранжа. С этим методом нет необходимости рассматривать звуковые точки. Он очень эффективен на прямоугольной сетке, но с трудом распространяется на неструктурированные сетки, которые исследованы в литературе применительно к баротропным потокам с одной немонотонной скоростью звука, например в кавитирующих потоках [20; 7; 41]. Указанные публикации сообщают о проблеме в контексте простой консервативной модели кавитации, которая рассмотрена в разделе 3.5.

Чтобы обойти эти трудности и разработать простой алгоритм, способный справиться с мультифизическим расширением, рассматривается модель неравновесного давления.

3.2.2. Модель из шести уравнений

Модель из шести уравнений также получается из модели семи уравнений Baer и Nunziato [3] в асимптотическом пределе только жесткой релаксации скорости (первая уменьшенная модель Karila [18]). Поддерживаются неравновесные эффекты давления. Модель из шести уравнений не следует рассматривать как физическую модель, а скорее как этапную для решения модели из пяти уравнений (вторая уменьшенная модель Karila [18]). Действительно, модель из шести уравнений имеет лучшие свойства для численной аппроксимации, чем модель механического равновесия:

- положительность объемной доли легко сохранить;
- скорость звука смеси имеет монотонное поведение.

Эти два свойства являются ключевыми для построения простого, робастного и аккуратного гиперболического солвера. Кроме того, при правильной трактовке релаксационных слагаемых решения модели из пяти уравнений будут восстановлены.

Уравнения течения. Модель из шести уравнений выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)}{\partial x} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial t} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} = -p_1 \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial t} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} = p_2 \mu (p_1 - p_2).$$

Межфазное давление p_I получено как асимптотический предел межфазного давления симметричной неравновесной модели из семи уравнений [35]. Эта оценка в пределе с одинаковыми скоростями дает

$$p_I = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2},$$

где $Z_k = \rho_k c_k$ представляет акустический импеданс фазы k .

Сочетание двух внутренних уравнений энергии с уравнениями массы и импульса приводит к дополнительным уравнениям энергии смеси:

$$\frac{\partial \rho \left(Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 \right)}{\partial t} + \frac{\partial u \left(\rho \left(Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 \right) + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) \right)}{\partial x} = 0. \quad (7)$$

Это дополнительное уравнение имеет значение при численном решении для исправления ошибок, вызванных численной аппроксимацией двух неконсервативных уравнений внутренней энергии в присутствии ударных волн.

Не составляет труда проверить, что в рамках этой модели второй закон термодинамики выполняется. Легко получить уравнения фазовой энтропии:

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} = \mu (p_1 - p_2)^2 \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2},$$

$$\alpha_2 \rho_2 T_2 \frac{ds_2}{dt} = \mu (p_1 - p_2)^2 \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2},$$

гарантируя, что энтропия смеси $s = (Y_1 s_1 + Y_2 s_2)$ всегда эволюционирует с положительными или нулевыми колебаниями.

Эта модель унаследовала хорошую особенность в отношении скорости звука смеси $c_f^2 = (Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2)$, которая имеет монотонное поведение относительно объема и массовой фракций и представляет собой скорость звука замороженной смеси.

Модель, таким образом, строго гиперболична с волновыми скоростями $u + c_f, u - c_f, u$. Более подробный анализ гиперболичности и скорости звука помещен в разделе 3.3 с приближенным акустическим солвером Римана.

Ударные соотношения. Как и предыдущая модель из пяти уравнений, новая модель также не является консервативной, и ударные соотношения должны быть предписаны. Тем не менее предыдущие замечания об ударных соотношениях для модели из пяти уравнений и численная аппроксимация ударных волн с неконсервативной системой уравнений приводят к следующему выводу: даже когда ударные соотношения известны или приняты для неконсервативной системы, очень трудно сделать так, чтобы численное решение сходилось естественным образом до конца решения ударного состояния.

«Природная сходимость» означает сходимост «без артефактов», таких как искусственный теплообмен [31]. Таким образом, нет необходимости определять точные ударные соотношения для модели из шести уравнений, в частности потому, что она предназначена только для аппроксимации модели из пяти уравнений, для которой ударные отношения известны.

Однако некоторые условия допустимости должны соблюдаться с учетом заданной аппроксимации условий Гюгонио, по крайней мере условия скачка [37]:

- сохранение энергии смеси;
- касание кривой Гюгонио смеси и изоэнтропы смеси;
- предел одной фазы, для которой условия скачка неоднозначны, известны;
- симметрия;
- производство энтропии.

Условия скачка для уравнения сохранения массы:

$$\alpha_1 \rho_1 (u - \sigma) = \alpha_1^0 \rho_1^0 (u^0 - \sigma) = m_1,$$

$$\alpha_2 \rho_2 (u - \sigma) = \alpha_2^0 \rho_2^0 (u^0 - \sigma) = m_2.$$

Обозначим давление смеси $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$ и ударный массовый расход $m = m_1 + m_2$. В этих обозначениях условия скачка импульса можно записать так:

$$p - p^0 + m(v - v^0) = 0.$$

Условия скачка энергии смеси имеют вид

$$e - e^0 + \frac{p + p^0}{2} (v - v^0) = 0,$$

где $e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2$ и $v = Y_1 v_1 + Y_2 v_2 \left(v_k = \frac{1}{\rho_k} \right)$.

При отсутствии релаксационных эффектов скачок объемной доли есть просто $\alpha_1 = \alpha_1^0$.

Неконсервативные уравнения внутренней энергии не приспособлены к определению условий скачка. В соответствии с предыдущими условиями приемлемости предложены следующие условия скачка:

$$e_k - e_k^0 + \frac{p_k + p_k^0}{2} (v_k - v_k^0) = 0. \quad (8)$$

Ниже приведены условия, которые должны быть выполнены.

Сохранение энергии.

Сумма уравнений скачка внутренней энергии дает

$$Y_1 (e_1 - e_1^0) + \frac{p_1 + p_1^0}{2} (Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) + Y_2 (e_2 - e_2^0) + \frac{p_2 + p_2^0}{2} (Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0) = 0.$$

Поскольку $Y_k = \frac{\alpha_k v}{v_k}$, имеем

$$e - e^0 + \frac{p_1 + p_1^0}{2} (\alpha_1 v - \alpha_1^0 v^0) + \frac{p_2 + p_2^0}{2} (\alpha_2 v - \alpha_2^0 v^0) = 0.$$

С учетом отношений скачка для объемной доли это уравнение принимает вид

$$e - e^0 + \frac{\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_1 p_1^0 + \alpha_2 p_2^0}{2} (v - v^0) = 0,$$

или, проще,

$$e - e^0 + \frac{p + p^0}{2} (v - v^0) = 0.$$

Данный результат гарантирует, что условия фазового скачка энергии совместимы с сохранением энергии смеси.

Касание кривой Гюгонио смеси и изоэнтропы. Это обязательное свойство для решения задачи Римана. Когда объемная доля остается постоянной для ударных волн и волн разрежения (в отсутствие релаксационных эффектов) и фазовая кривая Гюгонио касается фазовой изоэнтропы, кривая Гюгонио смеси обязательно касается изоэнтропы смеси.

Предел одной фазы. Когда одна из фаз исчезает, условия скачка энергии в оставшейся жидкости находятся в согласии со скачком энергии одной фазы.

Симметрия. Симметрия в композиции позволяет легко расширить задачу до произвольного количества жидкостей.

Производство энтропии. Поскольку каждая фаза развивается вдоль своей собственной кривой Гюгонио (8), нет сомнений, что энтропия смеси развивается позитивно.

Путем применения этих отношений задача Римана может быть решена. Численные вопросы, связанные с ее решением, рассматриваются в следующем разделе. Обращаем внимание, что условия скачка не являются ключом к вычислениям ударных волн в многофазных смесях. Было показано, что даже когда ударные отношения известны, обеспечить сходимость численной схемы к точному решению очень сложно. Это связано с отсутствием определения для усредненных по ячейке неконсервативных переменных [31].

Асимптотический предел. Поскольку метод позволит решать модель из шести уравнений с условиями жесткой релаксации, важно проверить, что в бесконечном пределе быстрой релаксации давления модель из пяти уравнений будет восстановлена. Доказательство приведено в приложении 3А.

3.3. Численный метод

В настоящем разделе представлено численное решение модели из шести уравнений в пределе жесткой релаксации давления. В регулярных зонах эта модель непротиворечива, но в присутствии ударных волн внутренние уравнения энергии становятся неуместными. Чтобы поправить термодинамическое состояние, предсказанное этими уравнениями в присутствии ударных волн, используется уравнение энергии общей смеси. Эта поправка будет действовать на обеих сторонах интерфейса, когда течение стремится к однофазному пределу. Детали коррекции рассмотрены ниже. Теперь система из шести уравнений дополняется избыточным уравнением полной

энергии смеси. Таким образом, рассматриваемая в ходе численного решения система включает в себя семь уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu (p_1 - p_2), \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial t} + \alpha_1 \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x} &= -p_1 \mu (p_1 - p_2), \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial t} + \alpha_2 \rho_2 \frac{\partial u}{\partial x} &= p_1 \mu (p_1 - p_2), \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho \left(Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 \right)}{\partial t} + \frac{\partial u \left(\rho \left(Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 \right) + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) \right)}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \tag{9}$$

где $p_t = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$,

и уравнение состояния $e_k = e_k(\rho_k, p_k)$.

Эта система снабжена приближенными ударными соотношениями из предыдущего раздела, в частности соотношением (8).

3.3.1. Приближенный римановский солвер

Рассматриваются два типа приближенных солверов Римана:

- акустический линеаризованный солвер Римана;
- HLLC солвер Римана.

Эти два солвера детализированы в контексте уравнений Эйлера в [45].

Акустический солвер. Этот приближенный солвер предполагает, что удары отсутствуют или достаточно слабы. Последнее уравнение системы (9), таким образом, можно исключить из рассмотрения. Действительно, оно используется только для того, чтобы исправить некоторые недостатки численного решения фазовых уравнений внутренней энергии в присутствии ударных волн. Система из шести уравнений свободна от релаксационных слагаемых и может быть записана со следующими переменными:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + A(W) \frac{\partial W}{\partial x} = 0,$$

$$W = (\alpha_1, s_1, s_2, u, p_1, p_2)^T,$$

$$A(W) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ \frac{p_1 - p_2}{\rho} & 0 & 0 & u & \frac{\alpha_1}{\rho} & \frac{\alpha_2}{\rho} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_1 c_1^2 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_2 c_2^2 & 0 & u \end{pmatrix}.$$

Собственные значения матрицы:

$$\lambda_0 = u \text{ (четыре раза)}, \lambda_1 = u - c, \lambda_2 = u + c$$

$$c^2 = (Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2). \quad (10)$$

Монотонная замороженная скорость звука, введенная в разделе 3.2, теперь определена. Акустический солвер основан на уравнении характеристик, которые легко получить:

- вдоль траектории, определяемой как $\frac{dx}{dt} = u$,

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = 0, \quad \frac{ds_1}{dt} = 0, \quad \frac{ds_2}{dt} = 0,$$

- вдоль траектории, определяемой как $\frac{dx}{dt} = u - c$,

$$\left. -\frac{p_1 - p_2}{\rho c} \frac{d\alpha_1}{dt} \right)_{u-c} + \left. \frac{du}{dt} \right)_{u-c} - \left. \frac{\alpha_1 dp_1}{\rho c} \right)_{u-c} - \left. \frac{\alpha_2 dp_2}{\rho c} \right)_{u-c} = 0,$$

- вдоль траектории, определяемой как $\frac{dx}{dt} = u + c$,

$$\left. \frac{p_1 - p_2}{\rho c} \frac{d\alpha_1}{dt} \right)_{u+c} + \left. \frac{du}{dt} \right)_{u+c} + \left. \frac{\alpha_1 dp_1}{\rho c} \right)_{u+c} + \left. \frac{\alpha_2 dp_2}{\rho c} \right)_{u+c} = 0.$$

Эти отношения используются для решения линеаризованной задачи Римана. В предположении слабых изменений по левой и правой сторонам волны акустический импеданс $Z = \rho c$ (c определяется в (10), ρ — плотность смеси) считается постоянным. Соответствующие отношения скачка:

- через волну с правой стороны:

$$\alpha_{1R}^* = \alpha_{1R}, \quad s_{1R}^* = s_{1R}, \quad s_{2R}^* = s_{2R},$$

$$(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)_R^* - Z_R u_R^* = (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)_R - Z_R u_R \quad \text{с} \quad Z_R = \rho_R c_R,$$

- через волну с левой стороны:

$$\alpha_{1L}^* = \alpha_{1L}, \quad s_{1L}^* = s_{1L}, \quad s_{2L}^* = s_{2L},$$

$$(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)_L^* + Z_L u_L^* = (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)_L + Z_L u_L \quad \text{с} \quad Z_L = \rho_L c_L.$$

Верхний индекс «*» означает возмущенное состояние.

Решение скорости и давления задачи Римана, таким образом, легко получить из условий интерфейса:

$$(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)_L^* = (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)_R^* = (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)^* = p^*,$$

$$u_L^* = u_R^* = u^*.$$

Итак, решение скорости и давления в задаче Римана имеет вид

$$\begin{aligned} u^* &= \frac{Z_L u_L + Z_R u_R + p_L - p_R}{Z_L + Z_R}, \\ p^* &= \frac{Z_L p_R + Z_R p_L + Z_R Z_L (u_L - u_R)}{Z_L + Z_R}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$c \quad p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2, \quad Z = \rho c, \quad \rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2, \quad c^2 = (Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2).$$

Соотношения (11) одинаковы для модели из шести уравнений и уравнений Эйлера. Различия появляются через определения давления смеси, скорости звука смеси и плотности смеси.

После того как давление определено, плотности фаз в области «*» (возмущенное состояние) определяются с помощью скачков энтропии.

Этот солвер прост и эффективен для дозвуковых течений или течений в отсутствие сильных ударных волн. Но предпочтительнее использовать солвер, способный справляться с любыми ударными волнами и произвольными EOS, который является положительным (а следовательно, надежным). HLLC солвер [45] удовлетворяет всем этим требованиям.

Солвер типа HLLC. Рассмотрим границу ячейки, разделяющую левое (L) и правое (R) состояния. Левостороннюю и правостороннюю скорости волны легко получить, следуя [8], из оценки

$$S_R = \max(u_L + c_L, u_R + c_R), \quad S_L = \min(u_L - c_L, u_R - c_R),$$

где скорость звука подчиняется соотношению (10).

Скорость промежуточной волны (или контактного разрыва) оценивается с помощью HLL приближения:

$$S_M = \frac{(\rho u^2 + p)_L - (\rho u^2 + p)_R - S_L(\rho u)_L + S_R(\rho u)_R}{(\rho u)_L - (\rho u)_R - S_L \rho_L + S_R \rho_R}$$

с плотностью и давлением смеси, определенными выше.

Из этих волновых скоростей определяются следующие переменные состояния:

$$(\alpha_k \rho_k)_R^* = (\alpha_k \rho_k)_R \frac{S_R - u_R}{S_R - S_M},$$

$$(\alpha_k \rho_k)_L^* = (\alpha_k \rho_k)_L \frac{S_L - u_L}{S_L - S_M},$$

$$p^* = p_R + \rho_R u_R (u_R - S_R) - \rho_R^* S_M (S_M - S_R) \quad c \quad \rho_R^* = \sum_k (\alpha_k \rho_k)_R^*,$$

$$E_R^* = \frac{\rho_R E_R (u_R - S_R) + p_R u_R - p^* S_M}{\rho_R^* (S_M - S_R)},$$

$$E_L^* = \frac{\rho_L E_L (u_L - S_L) + p_L u_L - p^* S_M}{\rho_L^* (S_M - S_L)} \quad \text{с} \quad E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2.$$

Скачок объемной доли легко получить, так как в отсутствие релаксационных эффектов объемная доля постоянна вдоль траекторий жидкости:

$$\alpha_{k_R}^* = \alpha_{k_R}, \quad \alpha_{k_L}^* = \alpha_{k_L}.$$

Поскольку объемная доля постоянна с левой и правой сторон волн, плотность жидкости определяется из предыдущих соотношений:

$$\rho_{k_R}^* = \rho_{k_R}^0 \frac{u_R - S_R}{S_M - S_R}.$$

Скачки внутренней энергии определяются с помощью соотношения Гюгонио (8). Рассмотрим пример жидкостей, регулируемых EOS застывшего газа (3). С помощью EOS фазические давления ограничены по своим кривым Гюгонио только как функции, соответствующие фазовой плотности:

$$p_k^* (p_k^*) = (p_k^0 + p_{\infty k}) \frac{(\gamma_k - 1) \rho_k^0 - (\gamma_k + 1) \rho_k^*}{(\gamma_k - 1) \rho_k^* - (\gamma_k + 1) \rho_k^0} - p_{\infty k}.$$

Внутренние энергии фаз в данном случае определяются из EOS:

$$e_{k_R}^* = e_{k_R}^* (p_k^*, \rho_k^*).$$

Таким образом, имея приближенные солверы Римана, можно перейти к следующему шагу — созданию схемы Годунова.

3.3.2. Методы типа Годунова

Для простоты представим метод первого порядка. Расширение второго порядка подробно изложено в приложении 3В.

Метод первого порядка. В отсутствие релаксационных членов консервативная часть системы (9) обновляется традиционной схемой Годунова:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F^* (U_i^n, U_{i+1}^n) - F^* (U_{i-1}^n, U_i^n) \right),$$

где $U = [(\alpha\rho)_1, (\alpha\rho)_2, \rho u, \rho E]^T$; $F = [(\alpha\rho)_1 u, (\alpha\rho)_2 u, \rho u^2 + p, (\rho E + p)u]^T$;
 $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2$; $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$.

Уравнение объемной доли также обновляется с помощью метода Годунова для уравнений адвекции:

$$\alpha_{1i}^{n+1} = \alpha_{1i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((u\alpha_1)_{i+1/2}^* - (u\alpha_1)_{i-1/2}^* - \alpha_{1i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right)$$

Эта схема гарантирует положительность объемной доли на гиперболическом шаге. Возможны другие варианты, например методы типа VOF [26]. Использование алгоритма реконструкции может иметь хорошие характеристики, которые связаны только с интерфейсами. Эти интерфейсы присутствуют в начальный момент времени. Поскольку мы также имеем дело с динамически появляющимися интерфейсами, предпочтителен метод захвата. Это не единственное различие между [26] и описываемым здесь подходом. Давление смеси и скорость звука, используемые в настоящей формулировке, очень отличаются от однофазных оценок, используемых там.

Что касается неконсервативных уравнений энергии, то невозможно определить точное приближение в присутствии ударных волн [53]. Поэтому используем простейшее приближение соответствующих уравнений, предполагая, что произведение $(\alpha p)_{k_i}^n$ остается постоянным в ходе временного шага

$$(\alpha p e)_{k_i}^{n+1} = (\alpha p e)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\alpha p e u)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha p e u)_{k_{i-1/2}}^* + (\alpha p)_{k_i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right)$$

Отсутствие точности при вычислении внутренней энергии в этой схеме не так важно. Внутренние энергии будут использоваться только для оценки давления фаз в конце гиперболического шага, перед шагом релаксации. Шаг релаксации даст первую поправку к внутренней энергии в соответствии со вторым законом термодинамики. А вторая поправка будет вводиться с помощью полной энергии смеси. Подробная информация об этих двух шагах описана в следующих двух подразделах. Прежде чем перейти к этим деталям, рассмотрим базовую ситуацию, принципиально важную при работе с проблемами интерфейса, а именно условия равномерного потока.

Тест на равномерный поток. Основная трудность в решении проблем интерфейса как зоны численной диффузии заключается в конструировании модели течения и численной схемы, которые сохраняют условия интерфейса. Эта тестовая проблема была рассмотрена в [1] в контексте уравнений Эйлера. Рассмотрим одномерный поток в механическом равновесии. Скачок объемной доли распространяется при постоянной скорости u в поле потока с постоянным давлением $p_1 = p_2 = p$.

Эта потоковая система первоначально находится в механическом равновесии и, следовательно, должна оставаться в механическом равновесии в процессе временной эволюции.

Рассмотрим поведение настоящего метода Годунова для консервативной части этой модели в данном конкретном случае для однородных полей давления и скорости. Метод Годунова для уравнений массы записывается в виде

$$(\alpha\rho)_{k_i}^{n+1} = (\alpha\rho)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\alpha\rho u)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha\rho u)_{k_{i-1/2}}^* \right) \quad k = 1, 2.$$

Поскольку скорость однородна, имеем

$$(\alpha\rho)_{k_i}^{n+1} = (\alpha\rho)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left((\alpha\rho)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha\rho)_{k_{i-1/2}}^* \right).$$

Плотность смеси, таким образом, определяется из формулы

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left(\rho_{i+1/2}^* - \rho_{i-1/2}^* \right)$$

Дискретное уравнение импульса при тех же однородных условиях потока принимает вид

$$(\rho u)_i^{n+1} = (\rho u)_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^2 \left(\rho_{i+1/2}^* - \rho_{i-1/2}^* \right),$$

т. е. $(\rho u)_i^{n+1} = u (\rho)_i^{n+1}$.

Таким образом, поток обязательно будет сохранять равномерную скорость на следующем шаге по времени:

$$u_i^{n+1} = u.$$

Адаптированная численная схема для внутренних энергий становится в нынешней ситуации следующей:

$$(\alpha p e)_{k_i}^{n+1} = (\alpha p e)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left((\alpha p e)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha p e)_{k_{i-1/2}}^* \right).$$

Рассмотрим, например, EOS сгущенного газа (3):

$$\rho_k e_k = \frac{p_k + \gamma_k p_{\infty k}}{\gamma_k - 1}.$$

Дискретная аппроксимация внутренней энергии теперь такова:

$$\begin{aligned} \left(\alpha \frac{p + \gamma p_{\infty}}{\gamma - 1} \right)_{k_i}^{n+1} &= \left(\alpha \frac{p + \gamma p_{\infty}}{\gamma - 1} \right)_{k_i}^n - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left(\left(\alpha \frac{p + \gamma p_{\infty}}{\gamma - 1} \right)_{k_{i+1/2}}^* - \left(\alpha \frac{p + \gamma p_{\infty}}{\gamma - 1} \right)_{k_{i-1/2}}^* \right). \end{aligned}$$

Поскольку параметры EOS постоянны в каждой жидкости, это выражение упрощается к виду

$$\begin{aligned} \left[\alpha (p + \gamma p_{\infty}) \right]_{k_i}^{n+1} &= \left[\alpha (p + \gamma p_{\infty}) \right]_{k_i}^n - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left\{ \left[\alpha (p + \gamma p_{\infty}) \right]_{k_{i+1/2}}^* - \left[\alpha (p + \gamma p_{\infty}) \right]_{k_{i-1/2}}^* \right\}, \end{aligned}$$

который может быть переписан:

$$\begin{aligned} (\alpha p)_{k_i}^{n+1} + (\gamma p_{\infty})_k (\alpha)_i^{n+1} &= p \left\{ (\alpha)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left[(\alpha)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha)_{k_{i-1/2}}^* \right] \right\} + \\ &+ (\gamma p_{\infty})_k \left\{ (\alpha)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left[(\alpha)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha)_{k_{i-1/2}}^* \right] \right\}. \end{aligned}$$

Адаптированная численная схема эволюции объемной доли в условиях равномерной скорости потока становится следующей:

$$\alpha_{k_i}^{n+1} = \alpha_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u \left((\alpha_k)_{i+1/2}^* - (\alpha_k)_{i-1/2}^* \right).$$

Уравнение внутренней энергии сводится к

$$p_{k_i}^{n+1} = p.$$

Адаптированная численная аппроксимация, таким образом, сохраняет условия интерфейса в механически равновесных потоках.

Когда EOS являются более сложными, чем для случая сгущенного газа, как, например, EOS Ми — Грюнайзена, можно использовать выражение

$$p_k e_k = \frac{p_k + \gamma_k p_{\infty k}(p_k)}{\gamma_k - 1},$$

аналогичные свойства сохранения интерфейса наблюдаются экспериментально. Причина заключается в том, что методы типа Годунова, используемые для уравнений массы и объемной фракции, приводят к протяженному полю плотности при прохождении через интерфейс. На локальном уровне это более сложное EOS сводится к EOS сгущенного газа.

3.3.3. Шаг релаксации

Этот шаг важен для выполнения интерфейсных условий в течениях с *неоднородными* скоростью и давлением. Это также вынуждает решение модели из шести уравнений стремиться к тому же решению, что и в случае модели из пяти уравнений.

На шаге релаксации нужно решить систему:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} = -p_1 \mu (p_1 - p_2) \text{ и } \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} = p_1 \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} = 0 \text{ и } \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial pE}{\partial t} = 0$$

с

$$p_I = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$$

и в пределе $\mu \rightarrow \infty$.

После некоторых преобразований внутренние уравнения энергии принимают вид

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} + p_I \frac{\partial v_1}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial e_2}{\partial t} + p_I \frac{\partial v_2}{\partial t} = 0.$$

Эта система может быть записана в интегральной формулировке:

$$e_k - e_k^0 + \hat{p}_{Ik} (v_k - v_k^0) = 0,$$

где $\hat{p}_{Ik} = \frac{1}{v_k - v_k^0} \int_0^{\Delta t} p_I \frac{\partial v_k}{\partial t} dt$.

Определение усредненного давления \hat{p}_{Ik} должно быть сделано с учетом термодинамических соображений.

Суммируя внутренние уравнения энергии, имеем

$$Y_1 e_1 - Y_1 e_1^0 + Y_2 e_2 - Y_2 e_2^0 + \hat{p}_{I1} (Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) + \hat{p}_{I2} (Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0) = 0.$$

Уравнение массы смеси может быть записано в виде

$$(Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) + (Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0) = 0.$$

С использованием этих соотношений уравнение энергии смеси примет вид

$$e - e^0 + (\hat{p}_{I1} - \hat{p}_{I2})(Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) = 0.$$

Для выполнения условия сохранения энергии смеси необходимо, чтобы $\hat{p}_{11} = \hat{p}_{12} = \hat{p}_I$.

Возможные оценки $\hat{p}_1 = p_1^0$ или $\hat{p}_1 = p^*$ начального и релаксационного давления совместимы с неравенством энтропии [36]. Что касается выбора той или иной оценки при вычислении состояния релаксации, то результирующей разницей в практических расчетах можно пренебречь. Это незначительное влияние будет показано в разделе результатов. Таким образом, решаемая система состоит из уравнений

$$e_k(p^*, v_k^*) - e_k^0(p_k^0, v_k^0) + \hat{p}_I(v_k^* - v_k^0) = 0, \quad k = 1, 2,$$

и включает в себя три неизвестных: v_k^* ($k = 1, 2$) и p^* . Ее замыкание достигается с помощью ограничения насыщения

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad \text{или} \quad \sum_k (\alpha\rho)_k v_k = 1.$$

Здесь $(\alpha\rho)_k$ постоянно в процессе релаксации. Эта система может быть заменена на одно уравнение с одним неизвестным p^* . С помощью EOS (3) уравнения энергии принимают вид

$$v_k^*(p^*) = v_k^0 \frac{p^0 + \gamma_k p_{\infty k} + (\gamma_k - 1)\hat{p}_I}{p^* + \gamma_k p_{\infty k} + (\gamma_k - 1)\hat{p}_I},$$

и, таким образом, только для того, чтобы решить уравнение (для p^*), будем полагать

$$\sum_k (\alpha\rho)_k v_k(p^*) = 1. \tag{12}$$

После нахождения релаксационного давления удельные объемы фаз и объемная доля определены.

В методе [26] релаксационное давление используется для распространения решения на следующий шаг по времени. Однако нет гарантий, что EOS смеси или энергия смеси будут находиться в соответствии с этим релаксационным давлением. В целях сохранения полной энергии и правильной динамики ударных волн на обеих сторонах интерфейса используется следующая коррекция.

3.3.4. Шаг реинициализации

Так как объемная фракция была оценена ранее методом релаксации, давление смеси может быть определено из EOS смеси на основе энергии смеси, которая известна из решения уравнения полной энергии. Поскольку полная энергия смеси подчиняется закону сохранения, ее эволюция является точной во всем поле течения и в частности при ударных волнах.

Рассмотрим снова жидкость с EOS сгущенного газа. EOS смеси в этом случае связано с энергией смеси, плотностью и объемной фракцией (4):

$$p(p, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}.$$

Это EOS имеет место в чистой (или почти чистой) жидкости и в зоне диффузного интерфейса. Объемная фракция очень слабо изменяется в почти чистых жидкостях, так что вычисленное давление является почти точным на обеих сторонах интерфейса. Это гарантирует корректную и консервативную динамику волны по обе стороны границы. Численные эксперименты показывают, что внутри зоны численной диффузии на интерфейсе данный подход дает точные результаты, как и использование объемной доли в EOS смеси (4) дает точный результат в методе релаксации. После того как давление смеси определено из (4), внутренние энергии фаз являются реинициализированными с помощью своих EOS, прежде чем пройдут к следующему шагу по времени:

$$e_k = e_k(p, \alpha_k \rho_k, \alpha_k). \quad (13)$$

Выводы

Относительно численного метода можно сформулировать следующее резюме:

- На каждой границе ячейки решается задача Римана для системы (9) с помощью выбранного солвера. Рекомендуется использовать HLLC солвер из раздела 3.3.1.
- Все переменные течения можно оценить с помощью метода типа Годунова из раздела 3.3.2.

- Затем следует определить релаксационное давление и особенно объемную фракцию путем решения уравнения (12). Метод Ньютона подходит для этой задачи.
- Далее вычислить давление смеси с использованием уравнения (4).
- Произвести расчет внутренних энергий с расчетным давлением с помощью соответствующих EOS (13).
- Перейти к первому пункту для перехода к следующему шагу по времени.

3.4. Тесты и верификация

3.4.1. Адвекция интерфейса в потоке с однородными давлением и скоростью

Рассмотрим разрыв объемной доли (разрыв плотности смеси), движущейся при однородном давлении со скоростью потока 100 м/с. Первоначально разрыв находится в точке $x = 0,5$ м в трубе метровой длины.

Этот разрыв отделяет две почти чистые жидкости: жидкую воду слева с заданной плотностью $\rho_{\text{воды}} = 1000 \text{ кг/м}^3$ и параметрами EOS застывшего газа $\gamma_{\text{воды}} = 4,4$, $p_{\infty, \text{воды}} = 6 \cdot 10^8$ Па и воздух справа с заданными $\rho_{\text{воздуха}} = 10 \text{ кг/м}^3$ и с параметрами EOS идеального газа $\gamma_{\text{воздуха}} = 1,4$, $p_{\infty, \text{воздуха}} = 0$ Па. В левой камере объемная фракция воды $\alpha_{\text{воды}} = 1 - \varepsilon$, в правой камере ее значение $\alpha_{\text{воздуха}} = \varepsilon$ с $\varepsilon = 10^{-8}$. Равномерное давление устанавливается равным $p = 10^5$ Па.

Численное решение (рис. 3) соответствует моменту времени $t = 2,79$ мкс и сравнивается с точным решением. Используется сетка с 200 равномерными ячейками, применяется метод расширения второго порядка из раздела 3.3 (см. приложение 3В для деталей).

Численное и аналитическое решения прекрасно совпадают. Численное решение колеблется свободно за исключением чисел Маха, вычисленных с равновесной скоростью звука c_{eq} . Данный метод не создает трудностей с разрешением звукового перехода на интерфейсе, поскольку гиперболической шаг вычисляется с замороженной скоростью звука, где колебания отсутствуют.

Для этого тестового случая поток будет в механическом равновесии, а релаксационные слагаемые, присутствующие в объемной доле и уравнениях энергии, не важны, также как и шаг релаксации давления. Отношение интерфейсных условий является только следствием чистой численной аппроксимации с помощью метода Годунова консервативных и неконсервативных уравнений из раздела 3.3.2.

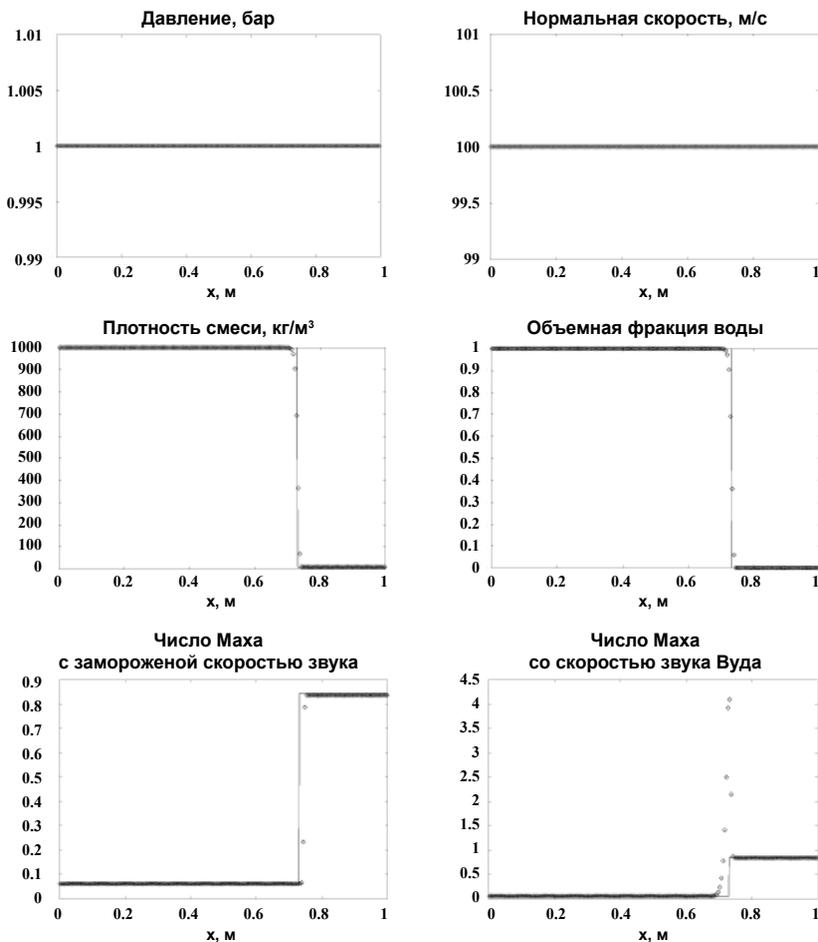


Рис. 3. Адвекция разрывной объемной доли при однородном давлении и скорости течения. Сравнение метода релаксации с лимитером (ограничителем) наклона Superbee (символы) и точное решение (сплошная линия). Сетка в 200 ячеек. Наблюдается хорошее совпадение

3.4.2. Ударная трубка с EOS типа Ми — Грюнайзена

Чтобы показать возможности метода, в частности когда речь идет о более общем уравнении состояния, рассматривается тест с участием EOS Cochran — Chan [6] (CC EOS). Эти EOS имеют тип Ми — Грюнайзена. Рассматривается та же проблема ударной трубки, которая представлена в работе [36]. В этом примере рассматривается одна жидкость, регулируемая CC EOS,

с разрывом плотности в ударной трубе. Поскольку имеем дело с единственной жидкостью, метод Годунова, как ожидается, остается в силе. Тем не менее, как было показано в этой работе, из-за нелинейности $p_\infty(\rho)$ в EOS метод Годунова продуцирует колебания давления и скорости. Средство для преодоления этих трудностей было предложено в той же работе. С помощью модели многофазного потока проблемы могут быть решены путем рассмотрения одной жидкости в виде двухфазной среды с первоначальным разрывом в ударной трубе, разделяющей два состояния.

Первоначально давление в камере высокого давления устанавливается равным 20 ГПа, в то время как давление в камере низкого давления — 0,2 МПа. Обе камеры заполнены жидким нитрометаном, регулируемым СС EOS, значения плотности установлены соответственно 1134 кг/м³ и 1200 кг/м³. В камере высокого давления объемная доля первой фазы $\alpha_1 = 1 - \varepsilon$, а в правой камере $\alpha_1 = \varepsilon$ ($\varepsilon = 10^{-8}$). Таким образом, модель используется в пределе одной фазы, т. е. одно и то же EOS используется для обеих жидкостей, но с разными начальными плотностями:

$$p(\rho, e) = \rho \Gamma (e - e_k(\rho)) + p_k(\rho),$$

$$e_k(\rho) = \frac{A_1}{\rho_{\text{ref}}(E_1 - 1)} \left(\frac{\rho}{\rho_{\text{ref}}} \right)^{E_1 - 1} - \frac{A_2}{\rho_{\text{ref}}(E_2 - 1)} \left(\frac{\rho}{\rho_{\text{ref}}} \right)^{E_2 - 1},$$

$$p_k(\rho) = A_1 \left(\frac{\rho}{\rho_{\text{ref}}} \right)^{E_1} - A_2 \left(\frac{\rho}{\rho_{\text{ref}}} \right)^{E_2}.$$

При численном моделировании использованы следующие данные:

$$\Gamma = 1,19, \quad \rho_{\text{ref}} = 1134 \text{ кг/м}^3, \quad A_1 = 0,819181 \cdot 10^9 \text{ Па},$$

$$A_2 = 1,50835 \cdot 10^9 \text{ Па}, \quad E_1 = 4,52969, \quad E_2 = 1,42144.$$

На рис. 4 показаны результаты на момент времени $t = 67$ мкс. Результаты, полученные методом релаксации, сравниваются с точным решением уравнений Эйлера и находятся в полном согласии между собой. Результаты аналогичны тому, что приведено в [36], но данный алгоритм проще реализовать. Крупные планы графиков давления и скорости вокруг контактного

разрыва показаны на рис. 5. Результаты представлены в полном согласии с точным решением, решение свободно от осцилляций.

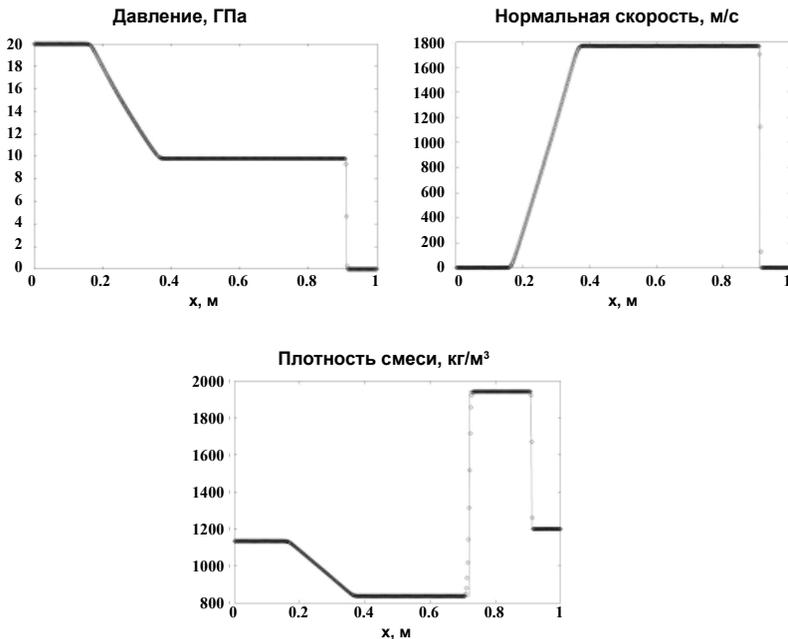


Рис. 4. Ударная труба с EOS типа Ми — Грюнайзена. Данный способ релаксации на основе модели из шести уравнений (символы) сравнивается с точным решением уравнений Эйлера (сплошная линия). Сетка в 500 ячеек

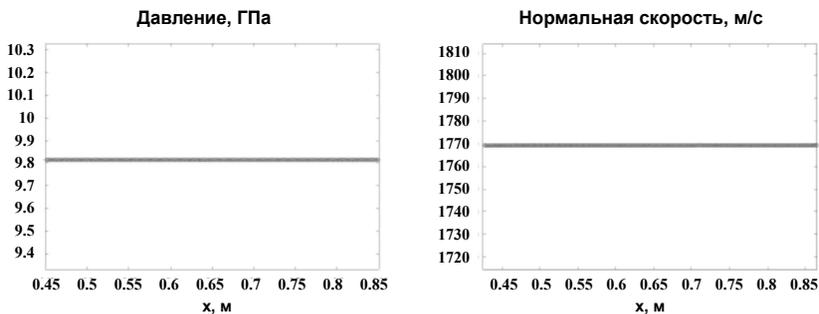


Рис. 5. Ударная труба с EOS типа Ми — Грюнайзена. Крупный план графика давления и нормальной скорости вокруг контактного разрыва

3.4.3. Ударные трубы вода-воздух

Ударная труба вода-воздух с умеренным отношением давлений и высоким отношением плотностей. Рассматривается метровая ударная труба, содержащая две камеры, разделенные интерфейсом, расположенным при $x = 0,75$. Каждая камера содержит почти чистую жидкость. Начальная плотность воды $\rho_{\text{воды}} = 1000 \text{ кг/м}^3$, параметры EOS сжатого газа $\gamma_{\text{воды}} = 4,4$, $p_{\infty, \text{воды}} = 6 \cdot 10^8 \text{ Па}$. Начальная плотность воздуха $\rho_{\text{воздуха}} = 1 \text{ кг/м}^3$, параметры EOS $\gamma_{\text{воздуха}} = 1,4$, $p_{\infty, \text{воздуха}} = 0 \text{ Па}$. Численное решение модели из шести уравнений сравнивается с точным решением уравнения Эйлера. Сетка с использованием 1000 равномерных ячеек показана на рис. 6, сетка со 100 ячейками — на рис. 7.

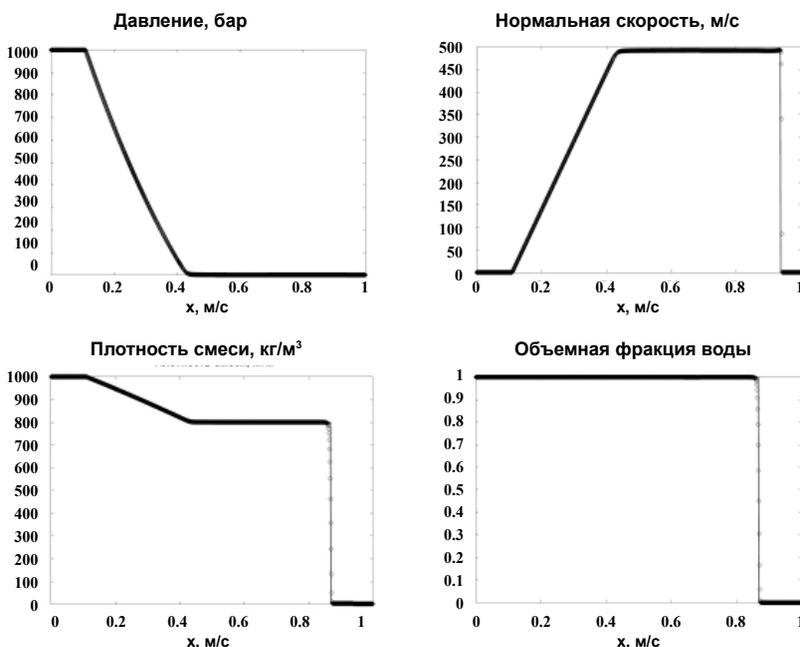


Рис. 6. Ударная труба жидкость-газ с сеткой в 1000 ячеек

Настоящий способ релаксации используется для того, чтобы разрешить модель из шести уравнений. Численные результаты показаны символами и сравниваются с точным решением (сплошная линия). При использовании сетки в 1000 ячеек отношение плотностей — 1000, соотношение давлений — 10 000 на начальном разрыве. Используется метод второго порядка расширения с ограничителем Ван Лири. Результаты хорошо согласуются.

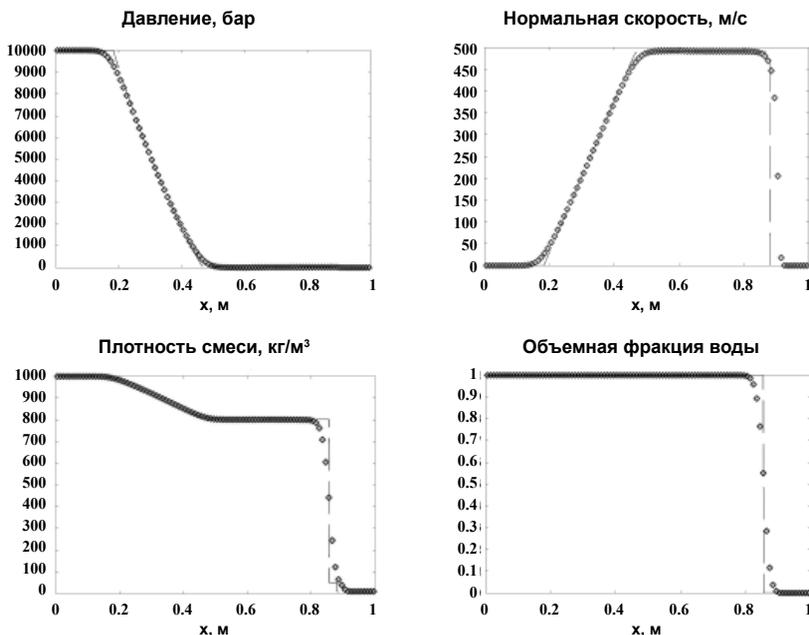


Рис. 7. Ударная труба жидкость-газ (как на рис. 6) с сеткой в 100 ячеек

Левая камера содержит очень небольшую объемную долю воздуха $\alpha_{\text{воздуха}} = 10^{-6}$, начальное давление устанавливают равным 1 ГПа. Правая камера содержит те же жидкости, но объемные доли меняются местами. Начальное давление устанавливают равным 0,1 МПа. В обеих камерах начальная скорость равна нулю.

Сравнение с точным решением показано на обоих чертежах на время $t = 240$ мкс. Это испытание также не представляет вычислительной сложности. Численные результаты показаны символами по сравнению с точным решением (сплошная линия). Используется метод второго порядка расширения с ограничителем Ван Лира. Результаты хорошо согласуются.

В тесте (рис. 7) и во всех последующих тестах распространяются сильные волны давления. Условия релаксации в объемной доле и уравнениях энергии становятся важными, также как и шаг релаксации давления. Устойчивость и сходимость алгоритма в нестационарных построениях решения улучшены путем релаксации давления.

Ударная труба вода-воздух при экстремальных условиях. Решается та же проблема ударной трубы, но первоначально в левой камере давление установлено в размере 1 ТПа (10 Мбар), а плотность воздуха — 10 кг/м³.

Точные решения одной фазы уравнения Эйлера и многофазной модели потока с шестью уравнениями показаны на рис. 8 в момент $t = 8,3$ мкс. Этот тест показывает надежность и сходимость алгоритма.

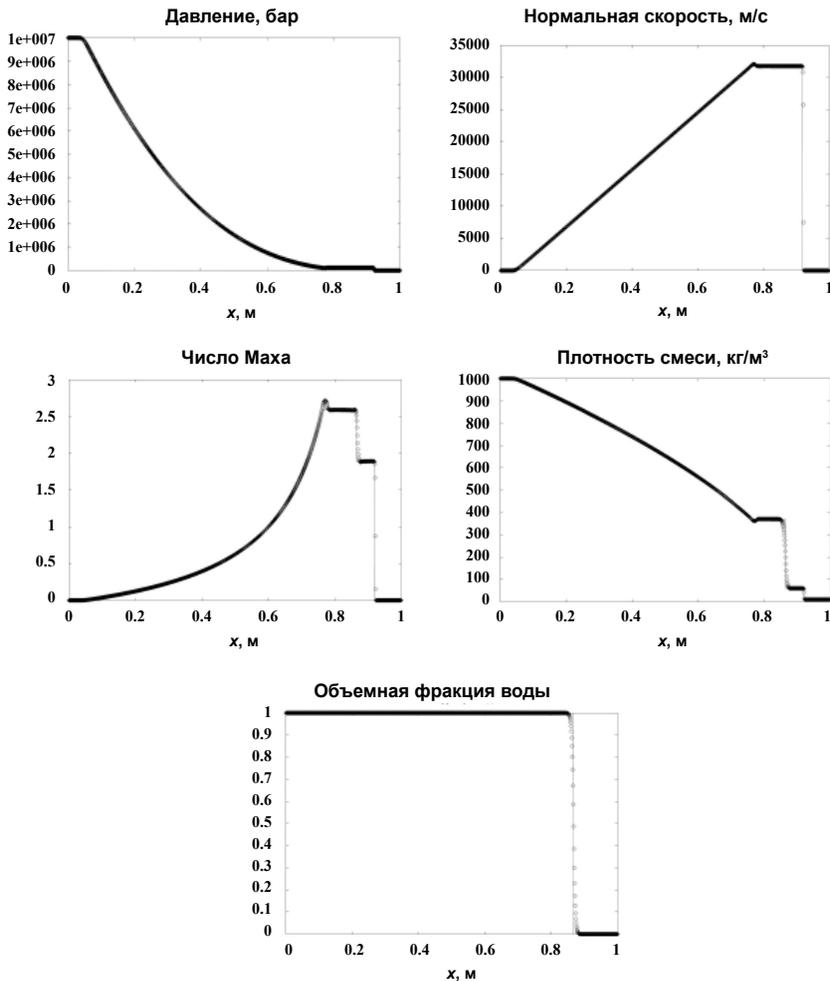


Рис. 8. Ударная труба жидкость-газ. Настоящий способ релаксации используется для решения модели из шести уравнений. Численные результаты показаны символами и сравниваются с точным решением (сплошная линия). Сетка в 1000 ячеек. Отношение начальных плотностей — 100, начальных давлений — 10^7 . Этот тест иллюстрирует устойчивость и сходимость алгоритма

3.4.4. Влияние \hat{p}_1 в методе релаксации

На этапе релаксации были выделены различные возможные оценки для усредненного давления \hat{p}_1 .

Чтобы продемонстрировать слабое влияние оценки, тест для ударной трубки жидкость-газ, представленный на рис. 6, был запущен с различными величинами \hat{p}_1 . На рис. 9 показаны результаты и их сравнение с двумя возможными оценками: $\hat{p}_1 = p_1^0$ и $\hat{p}_1 = p^*$. Видимой разницы нет.

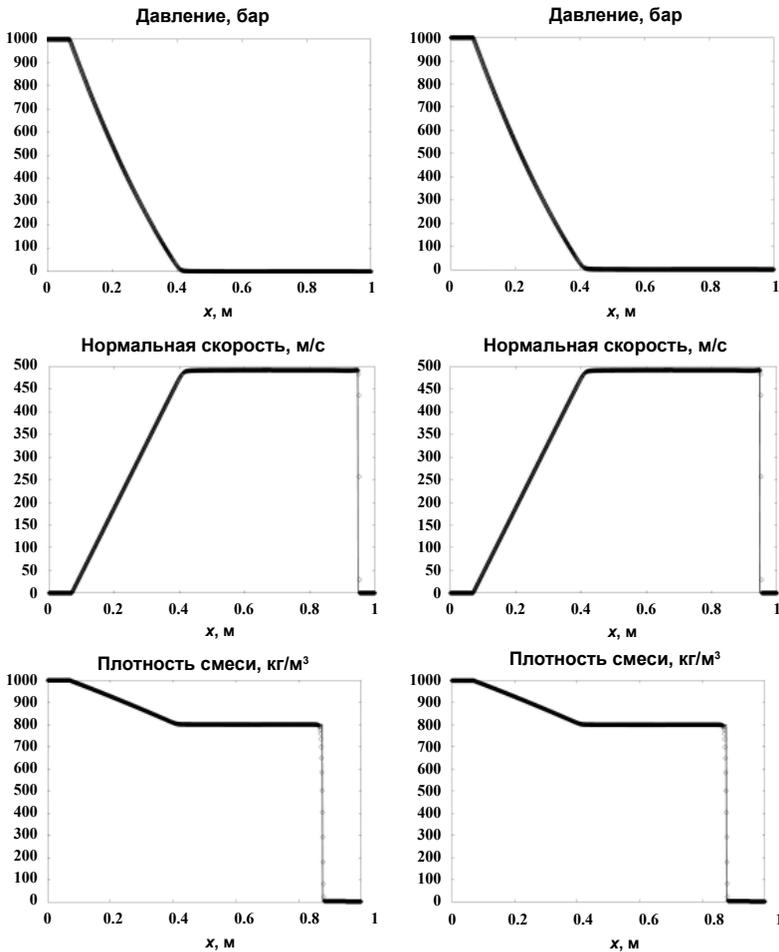


Рис. 9. Сравнение двух различных оценок усредненного давления. Тест на рис. 6 перезапущен с $\hat{p}_1 = p_1^0$ слева и $\hat{p}_1 = p^*$ справа. Сверху вниз, давление, скорость и плотность смеси остаются неизменными

3.4.5. Тест кавитации

Метровой длины труба заполнена жидкой водой при атмосферном давлении и плотности $\rho_{\text{воды}} = 1000 \text{ кг/м}^3$. Небольшая объемная доля воздуха ($\alpha_{\text{воздуха}} = 10^{-2}$) изначально присутствует везде. Начальный разрыв скорости находится при $x = 0,5 \text{ м}$. Слева установлена скорость $u = -100 \text{ м/с}$, справа — $u = 100 \text{ м/с}$. Решение показано на рис. 10 в момент $t = 1,85 \text{ мкс}$ при использовании сетки в 1000 ячеек. Сильные волны разрежения распространяются в трубе, и давление жидкости уменьшается. Поскольку газ присутствует, давление не может стать отрицательным. Для поддержания положительного давления объемная доля газа увеличивается и создает кавитационный карман. Это приводит к появлению двух динамических интерфейсов, которых не было на начальном этапе. Получено отличное совпадение с точным решением модели из пяти уравнений [31]. Возникновение интерфейса легко обрабатывается настоящим алгоритмом.

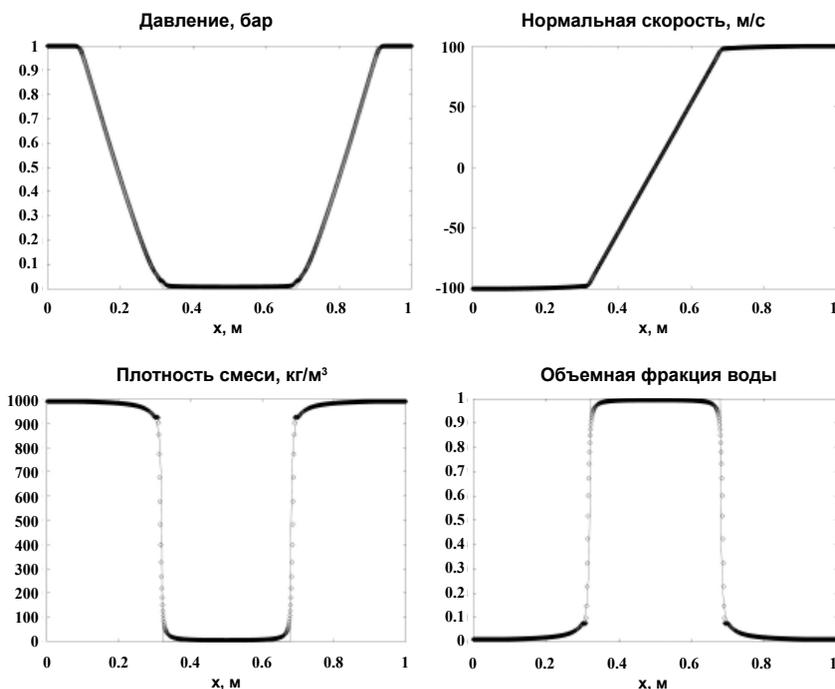


Рис. 10. Расширительная трубка с кавитационным карманом (внешний вид). Данный способ релаксации используется для решения модели из шести уравнений. Численные результаты показаны символами и сравнены с точным решением (сплошная линия) модели из пяти уравнений [31]. Сетка в 1000 ячеек

3.4.6. Многомерная валидация: взаимодействие ударной волны с пузырьком

Многомерное обобщение конечно объемного метода представлено в приложении 3С. Метод проверен на экспериментах в ударных трубах на взаимодействии ударной волны с пузырьком. Этот эксперимент — один из предложенных в [21], где представлено полное описание экспериментальной установки. Изучаемая конфигурация состоит в ударной волне, распространяющейся при числе Маха 1,5 в воздухе при атмосферных условиях и взаимодействующей с гелиевым пузырьком. Начальная плотность воздуха $\rho_{\text{воздуха}} = 1,29 \text{ кг/м}^3$, начальная плотность гелия $\rho_{\text{гелия}} = 0,167 \text{ кг/м}^3$. При моделировании обе жидкости рассматриваются как идеальные газы с политропическими коэффициентами $\gamma_{\text{воздуха}} = 1,4$ и $\gamma_{\text{гелия}} = 1,67$. Начальная конфигурация представлена на рис. 11. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными результатами на рис. 12.



Рис. 11. Начальная конфигурация взаимодействия ударной волны с пузырьком

3.4.7. Кавитирующая неустойчивость Рихтмайера — Мешкова (RMI)

Для иллюстрации возможностей метода был рассмотрен 2D тест с неустойчивостью Рихтмайера — Мешкова. Когда жидкость нечистая, новые интерфейсы появятся при развитии неустойчивости вследствие эффекта кавитации. Форма получаемого интерфейса и всей области потока демонстрирует нетрадиционное поведение, никогда не вычислявшееся ранее, в качестве модели и метода приходится иметь дело с интерфейсами

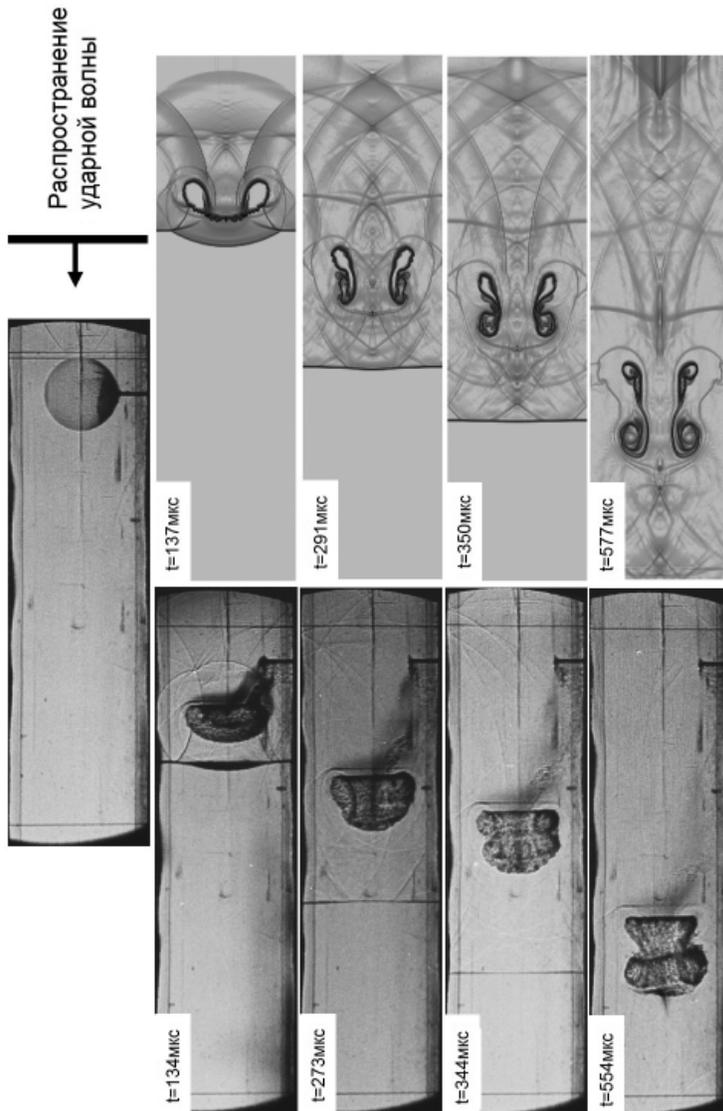


Рис. 12. Тест взаимодействия ударной волны с пузырьком. Экспериментальные результаты (слева) и результаты расчетов (справа) сравниваются в разные моменты времени. Из-за разницы в свойствах газа ударная волна передается быстрее, чем падающая в воздухе. Градиенты давления и плотности вызывают генерацию вихрей, которые развиваются на продолжительном временном масштабе

жидкость-газ и динамикой появляющихся газовых карманов в тяжелых условиях.

Левая часть расчетной области заполнена почти чистой водой, правая часть — почти чистым газом. Они первоначально разделены изогнутым интерфейсом. Это часть окружности радиусом 0,6 м с центром в точке $x = 1,2$ м, $y = 0,5$ м. Физическая область имеет 3 м в длину и 1 м в высоту. Сетка содержит 900 ячеек по направлению X и 400 ячеек по направлению Y . Вода и газ имеют начальную скорость -200 м/с. Верхняя, нижняя и левая границы рассматриваются как твердые стенки. Начальная плотность воды $\rho_{\text{воды}} = 1000$ кг/м³, параметры EOS застывшего газа $\gamma_{\text{воды}} = 4,4$ и $p_{\infty, \text{воды}} = 6 \cdot 10^8$ Па. Начальная плотность газа $\rho_{\text{газа}} = 100$ кг/м³, параметры EOS $\gamma_{\text{газа}} = 1,8$ и $p_{\infty, \text{газа}} = 0$ Па. Левая камера содержит очень небольшую объемную долю газа $\alpha_{\text{газа}} = 10^{-6}$, правая камера содержит очень небольшую объемную долю воды $\alpha_{\text{воды}} = 10^{-6}$. Начальная конфигурация представлена на рис. 13, результаты показаны на рис. 14.

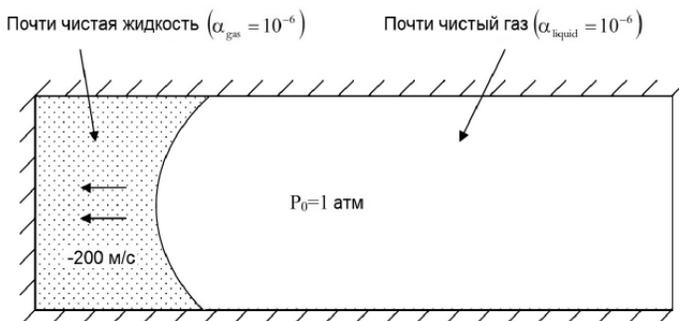


Рис. 13. Начальная конфигурация водно-газовой неустойчивости Рихтмайера — Мешкова. Жидкость и газ имеют начальную скорость -200 м/с

Когда поток воздействует на левую стенку, ударная волна распространяется вправо в области через разрыв вода-газ. Появляется неустойчивость Рихтмайера — Мешкова. Затем возникают распространяющиеся волны, которые вытягиваются, как струя. Это приводит к расширению зоны вблизи твердой стенки, где неоднородности газа растут, и возникают газовые карманы динамического вида. Поскольку давление в этих зонах очень низкое, динамика струи изменена по сравнению с обычной неустойчивостью Рихтмайера — Мешкова с чистыми жидкостями. Различные газовые карманы вблизи твердой границы и в ядре струи четко видны на рис. 15, где показана объемная доля газа. Слагаемые релаксации, присутствующие в урав-

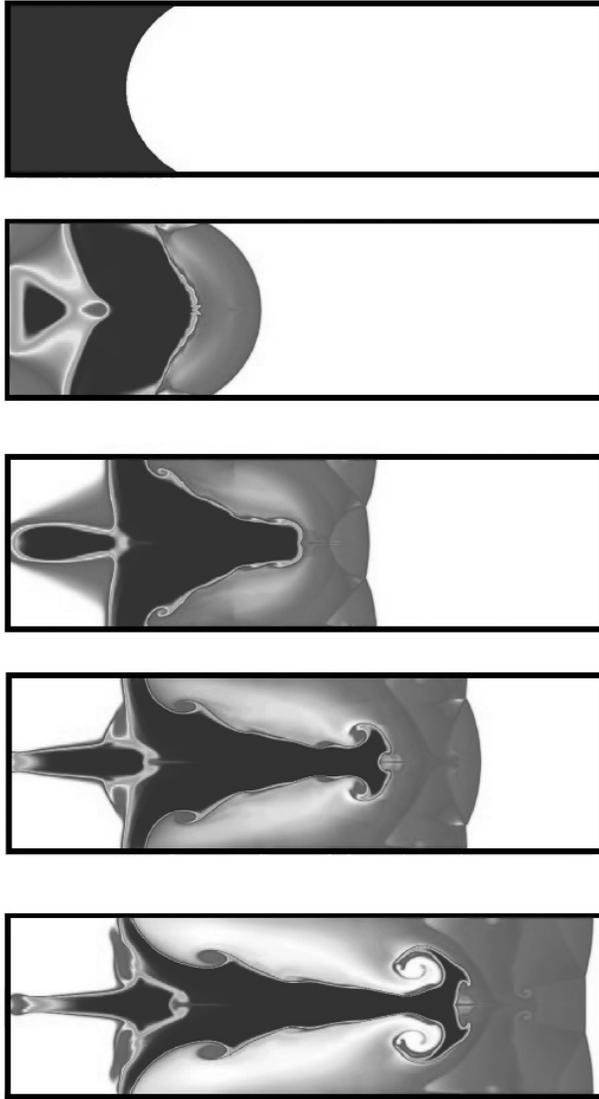


Рис. 14. Вода-газ с нестабильностью Рихтмайера — Мешкова. Контуры плотности смеси показаны в моменты времени $t_0 = 0$ мс, $t_1 = 1,9$ мс, $t_2 = 3,9$ мс, $t_3 = 5,8$ мс, $t_4 = 7,8$ мс. Темный оттенок — высокая плотность, белый — низкая плотность, другие оттенки — промежуточное положение. Новые интерфейсы появляются динамически вблизи твердой границы

нениях объемной доли и энергии, несут ответственность за динамическое появление этих газовых карманов.

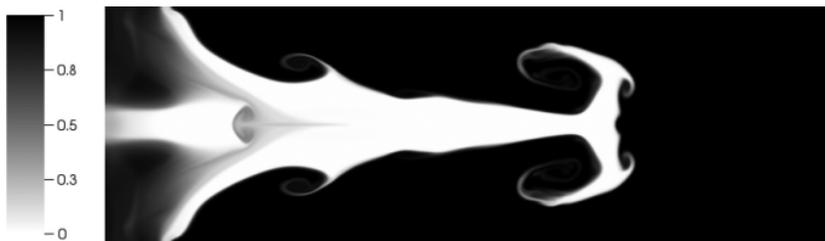


Рис. 15. Вода-газ, нестабильность Рихтмайера — Мешкова. Контуры объемной доли газа показаны на момент $t_5 = 8,6$ мс. Объемная фракция газа увеличивается внутри жидкой струи и вблизи твердой границы стенки

Связь между моделью из шести уравнений и моделями обычных кавитирующих баротропных течений, самыми популярными в моделировании кавитации, подробно описана в приложении 3D. Такие модели состоят из одного или двух уравнений сохранения массы и одного уравнения импульса и образуют гиперболическую систему в соответствии с законами сохранения. В моделях имеется серьезная трудность, связанная с немонотонным поведением скорости звука по сравнению с объемной долей [20; 7; 41]. Интересно рассмотреть, как различные ингредиенты, разработанные в контексте модели из шести уравнений, могут быть использованы в баротропных моделях для решения указанной проблемы.

3.5. Метод расширения для ударных волн в многофазных смесях

Настоящее уточнение алгоритма необходимо только тогда, когда изучается распространение ударной волны в режиме реального времени в многофазных смесях. В других ситуациях с интерфейсами, отделяющими чистые жидкости или кавитационные потоки, нет необходимости далее подробно учитывать искусственный теплообмен.

Искусственный теплообмен используется для корректировки части энергии в различных фазах в смеси и для распространения ударных волн в этих смесях с нужной скоростью с правильным ударным состоянием. Для решения численных проблем, связанных с многофазными ударными волнами, в первую очередь необходимо провести некоторые предварительные наблюдения численных схем в контексте однофазных потоков. Рассмотрим ударную

волну, распространяющуюся в чистом материале и подчиняющуюся уравнениям Эйлера.

Схемы захвата ударных волн смазывают разрывы, поэтому интересно сравнить термодинамическую траекторию, по которой следует жидкость в ударном слое, с теоретической кривой Гюгонио. Такое сравнение показано на рис. 16.

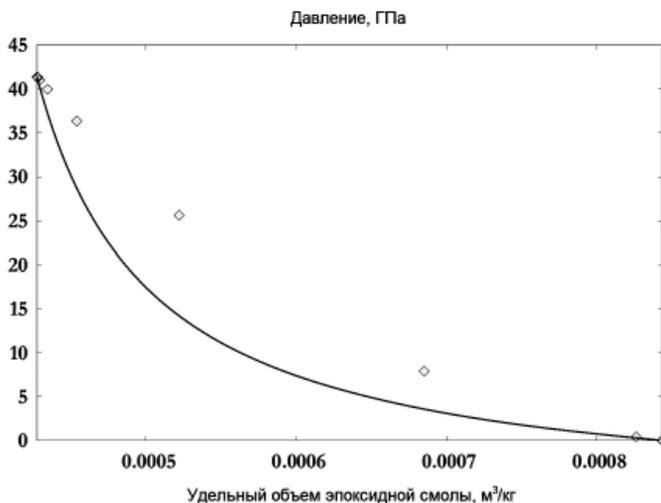


Рис. 16. Сравнение численной кривой Гюгонио (символы) и теоретической кривой (сплошная линия) в зоне численной диффузии для однофазных потоков. Термодинамические пути различны, но конечные состояния одинаковы

Похоже, что термодинамические пути очень разные. Это происходит из-за последовательности численных слабых ударных волн, которые распространяются в ячейке и не вызывают такого термодинамического преобразования, как от одиночной сильной ударной волны [52]. Последовательность усреднений по ячейке также производит преобразования, не согласующиеся с простой ударной волной Гюгонио. Тем не менее это численное явление не имеет последствий при вычислении состояния ударных волн для однофазных потоков. Как показано на рис. 16, в конце ударного слоя наблюдается слияние с теоретическим состоянием Гюгонио. Это следствие свойств сохранения уравнений Эйлера.

При работе с многофазными смесями также появляется отклонение от теоретической кривой Гюгонио, имеющее более серьезные последствия. Причина состоит в том, что для каждой слабой ударной волны, входящей в ячейку, уравнение состояния меняется. В самом деле, для многофазных

смесей существует дополнительная степень свободы, характеризующаяся объемной долей. В заданной точке вычисленной ударной волны, как показано на рис. 16, точка не принадлежит теоретической кривой Гюгонио смеси. Следовательно, соответствующая объемная доля ошибочна, и EOS смеси (4) также определено ошибочно. Такие ошибки накапливаются в ударном слое, и в отличие от того, что происходит в однофазном потоке, конечное состояние не относится к смеси Гюгонио. Чтобы проиллюстрировать эти трудности, рассмотрим следующие тестовые случаи.

3.5.1. Эпоксидно-шпинелевая смесь с умеренным отношением давлений

Трубка длиной в 1 м содержит две камеры, разделенные интерфейсом при $x = 0,6$ м. Обе камеры заполнены одной и той же смесью эпоксидной смолы и шпинели. Начальная плотность эпоксидной смолы $\rho_{\text{эпокс.}} = 1185 \text{ кг/м}^3$, параметры EOS застывшего газа $\gamma_{\text{эпокс.}} = 2,43$ и $p_{\infty, \text{эпокс.}} = 5,3 \cdot 10^9 \text{ Па}$. Начальная плотность шпинели $\rho_{\text{шпинели}} = 3622 \text{ кг/м}^3$, параметры EOS $\gamma_{\text{шпинели}} = 1,62$, $p_{\infty, \text{шпинели}} = 141 \cdot 10^9 \text{ Па}$. Начальный объем фракции в обеих камерах $\alpha_{\text{эпокс.}} = 0,5954$ ($\alpha_{\text{шпинели}} = 1 - \alpha_{\text{эпокс.}}$). Давление в левой части интерфейса равно $1 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, в то время как в камере справа атмосферное давление. Все материалы первоначально находятся в покое. На равномерной сетке в 500 ячеек решение модели многофазного потока из шести уравнений сравнивается с точным решением модели из пяти уравнений [31] на момент времени $t = 80 \text{ мкс}$ (рис. 17). Поскольку ударная волна имеет среднюю силу, данный способ сходится к точному решению без какого-либо искусственного теплообмена.

3.5.2. Эпоксидно-шпинелевая смесь при экстремальных условиях

Рассмотрим ту же задачу в ударной трубке, но при отношении начальных давлений $2 \cdot 10^6$. Результаты показаны на рис. 18.

Между решениями появляются важные различия, поскольку ударная волна в этом случае очень сильна. Численное решение не сходится к точному решению модели из пяти уравнений, оснащенной ударными отношениями, которые обобщены в системе (5). Это происходит из-за неправильного раздела внутренней энергии в ударном слое [31]. Чтобы сегментировать энергии правильно, вводится искусственный теплообмен.

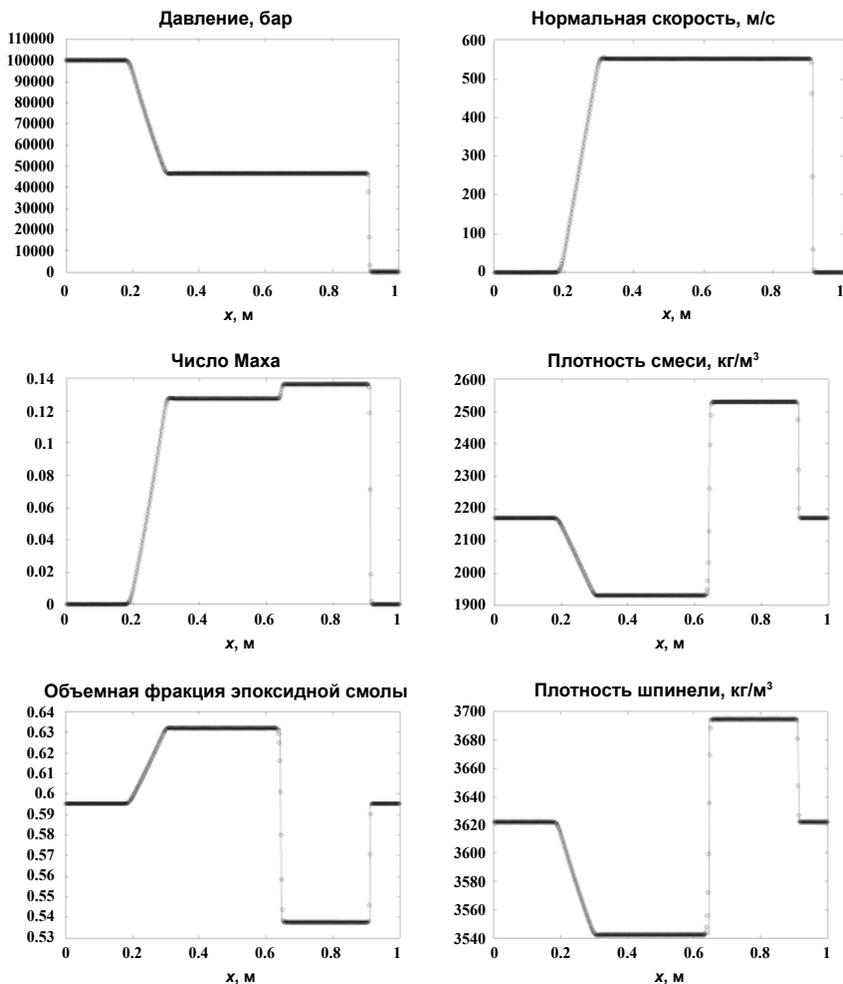


Рис. 17. Эпоксидная смола и шпинель в ударной трубке с умеренным соотношением давлений. Представленный релаксационный метод используется для решения модели из шести уравнений. Численные результаты показаны символами и сравниваются с точным решением модели из пяти уравнений (сплошная линия). Сетка в 500 ячеек. Отношение давлений — 100 000 на начальном разрыве

Искусственный теплообмен в модели из шести уравнений. Правильное разбиение ударной энергии между различными фазами может быть достигнуто методами отслеживания ударной волны, интенсивно изученными в [14; 24; 25]. Другой вариант — корректное разделение энергии в ударном слое

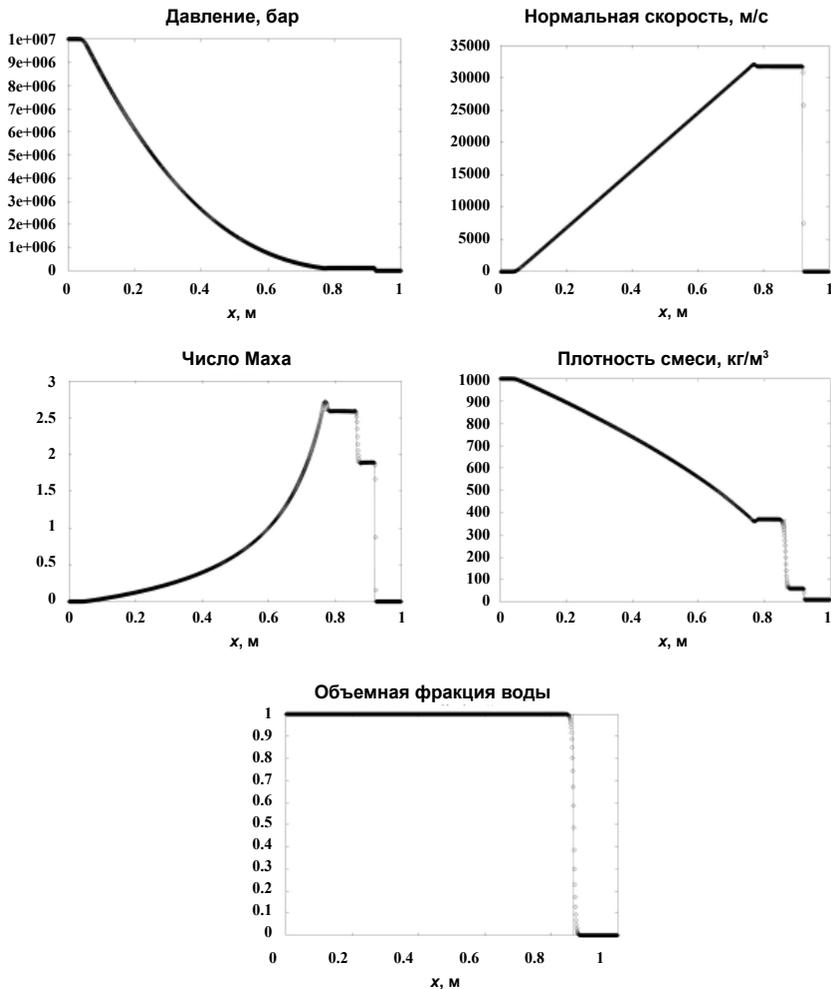


Рис. 18. Эпоксидно-шпинелевый тест в ударной трубке с сверхвысоким отношением давлений. Релаксационный метод используется для решения модели из шести уравнений. Численные результаты показаны символами и сравниваются с точным решением модели из пяти уравнений (сплошная линия). Сетка в 500 ячеек. Соотношение давлений на начальном разрыве — 2 000 000

путем введения искусственного теплообмена. Искусственный теплообмен был введен в [31] в контексте метода релаксации Лагранжа. В представленном здесь контексте эйлеровой формулировки они соответствуют экстрадавлению, которое появляется в уравнениях внутренней энергии:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + (\alpha_1 p_1 + q) \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + (\alpha_2 p_2 - q) \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Слагаемое искусственного теплообмена $\pm q \frac{\partial u}{\partial x}$ оказывает влияние на решение только в ударном слое и определяется так:

$$q = \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) v(v), \text{ где } \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = \begin{cases} 1, & \text{если } \frac{\partial u}{\partial x} < 0, \\ 0 & \text{в иных случаях,} \end{cases}$$

где $v(v)$ — функция теплообмена.

Более удобно, а также точно (относительно независимости результатов от сетки) переписать эти уравнения в виде

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \left(\alpha_1 \rho_1 e_1 + \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \mu(v) \right) u}{\partial x} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \left(\alpha_2 \rho_2 e_2 - \eta \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \mu(v) \right) u}{\partial x} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Функция $\mu(v)$ также выражает теплообмен и должна быть заранее определена для данной двухфазной смеси. Метод ее определения приведен в [31]. Влияние функции $\mu(v)$ показано в следующем примере.

3.5.3. Эпоксидно-шпинелевая смесь с искусственным теплообменом

Тестовая проблема (рис. 18) была повторно вычислена с искусственным теплообменом. Процедура разработана в [31] и используется для определения функции теплообмена. Эта функция зависит:

- от начального состояния смеси, в которой распространяются ударные волны;

- от численного размывания ударного фронта, которое присуще тому или иному способу.

Функция теплообмена для настоящего алгоритма показана на рис. 19.

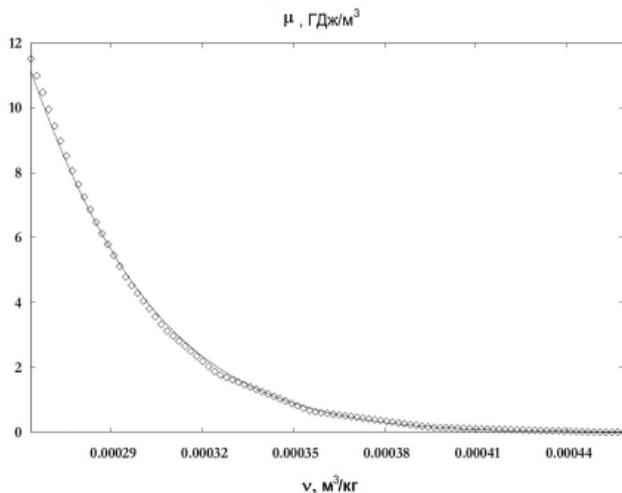


Рис. 19. Значения приближенной кусочно-линейной функции μ (символы) и сглаживающей кривой $\bar{\mu}(v) = \exp[-5,64 \cdot 10^7 v^2 + 5,34 \cdot 10^3 v + 25,6]$ в диапазоне удельного объема $2,65 \cdot 10^{-4} \text{—} 4,61 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{кг}$, соответствующего диапазону скоростей поршня от 0 до 4200 м/с и в диапазоне давления от 1 до 880 000 атм

Искусственные теплообмены используются только в ударном слое. С этой коррекцией алгоритм сходится к точному решению, как показано на рис. 20.

Важно, что функция теплообмена на рис. 19 обеспечивает конвергентные результаты для любой силы ударной силы в диапазоне давлений от 1 до 880 000 атм. Кроме того, гарантирована независимость решения от сетки.

3.6. Выводы

Представлена гиперболическая модель релаксации из шести уравнений для решения интерфейсных проблем, кавитирующих потоков и ударных волн в смесях. Эта модель значительно упрощает численную аппроксимацию модели из пяти уравнений [18]. Простой, эффективный и надежный алгоритм был получен для решения модели релаксации. Различные ингредиенты, используемые в методе, являются достаточно общими, чтобы их можно было

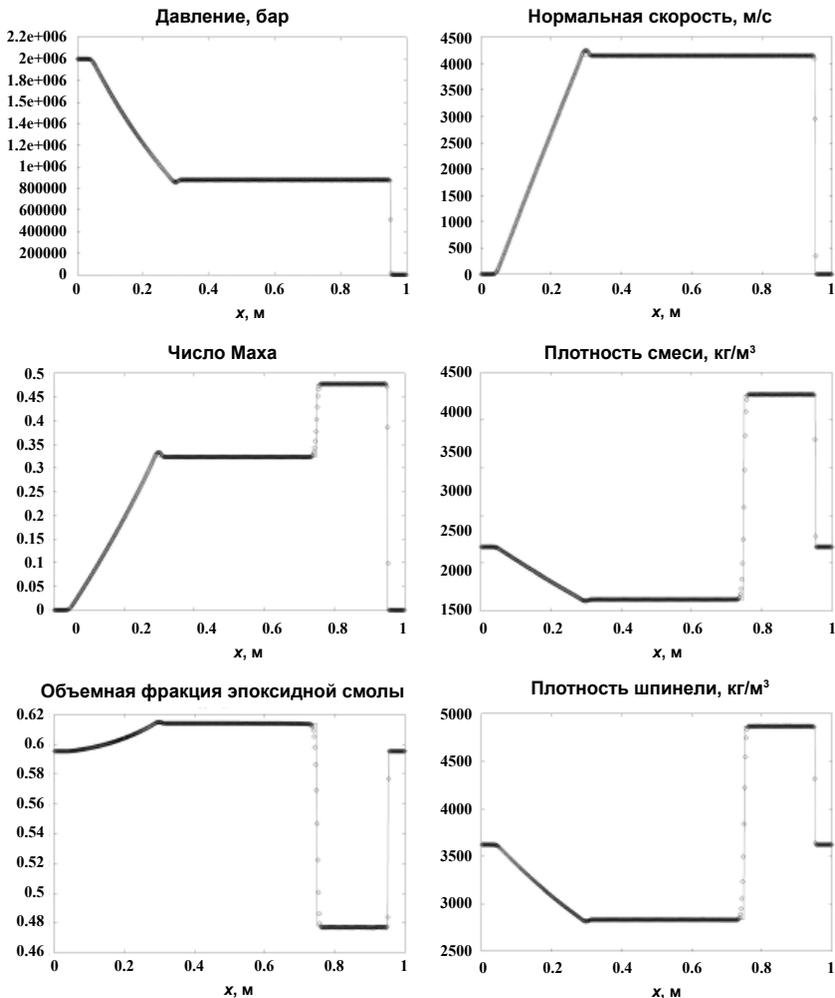


Рис. 20. Проблема ударной трубки с эпоксидно-шпинелевой смесью. Настоящий способ релаксации используется для решения модели из шести уравнений. Численные результаты показаны символами и сравниваются с точным решением модели из пяти уравнений (сплошная линия). Сетка в 500 ячеек. Соотношение давлений 2 000 000 на начальном разрыве. Искусственные теплообмены используются только в ударном слое. Получена хорошая сходимость результатов

распространить на более сложные физические задачи и решать большие гиперболические системы. В частности, соединение твердое/жидкость было рассмотрено в [13] с помощью представленного метода для моделирования диффузных интерфейсов в контексте упругой модели Гаврилюка и др.

Приложение 3А. Асимптотический предел модели из шести уравнений в присутствии жесткой релаксации давления

Для выполнения асимптотического анализа предполагается, что каждая переменная потока f удовлетворяет следующему асимптотическому разложению: $f = f^0 + \varepsilon f^1$, где f^0 представляет собой равновесное состояние, а f^1 — небольшое возмущение вокруг этого состояния. И, обратно возмущению, коэффициент релаксации давления $\mu = \frac{\mu_0}{\varepsilon}$ предполагается жестким при $\varepsilon \rightarrow 0^+$.

С этой трансформацией уравнения, которые не содержат каких-либо параметров релаксации, останутся без изменений. Таким образом, рассматриваются три уравнения: уравнения внутренней энергии и уравнение объемной доли. Они переписываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_1}{dt} &= \mu(p_1 - p_2), \\ \alpha_1 \rho_1 \frac{de_1}{dt} + \alpha_1 \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x} &= -p_1 \mu(p_1 - p_2), \\ \alpha_2 \rho_2 \frac{de_2}{dt} + \alpha_2 \rho_2 \frac{\partial u}{\partial x} &= p_1 \mu(p_1 - p_2), \end{aligned}$$

где $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}$ представляет производную Лагранжа.

Необходимы некоторые преобразования этих уравнений с соответствующими переменными, прежде чем делать асимптотический анализ. Рассмотрим уравнение внутренней энергии фазы 1. Оно может быть записано как уравнение эволюции давления в виде $e_1 = e_1(\rho_1, p_1)$:

$$\alpha_1 \rho_1 \left[\left(\frac{\partial e_1}{\partial \rho_1} \right)_{p_1} \frac{d\rho_1}{dt} + \left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{\rho_1} \frac{dp_1}{dt} + \frac{p_1}{\rho_1} \frac{\partial u}{\partial x} \right] = -p_1 \mu(p_1 - p_2).$$

С помощью уравнения массы фазы 1

$$\frac{d\alpha_1 \rho_1}{dt} + \alpha_1 \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

которое также читается так:

$$\frac{dp_1}{dt} = -\frac{\rho_1}{\alpha_1} \mu (p_1 - p_2) - \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x},$$

мы получим

$$\frac{dp_1}{dt} + \rho_1 \frac{\left(\frac{p_1}{\rho_1^2} - \frac{\partial e_1}{\partial \rho_1} \right)_{p_1}}{\left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{p_1}} \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\rho_1}{\alpha_1} \frac{\left(\frac{p_1}{\rho_1^2} - \frac{\partial e_1}{\partial \rho_1} \right)_{p_1}}{\left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{p_1}} \mu (p_1 - p_2).$$

С помощью определения скорости звука

$$c_1^2 = \frac{\left(\frac{p_1}{\rho_1^2} - \frac{\partial e_1}{\partial \rho_1} \right)_{p_1}}{\left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{p_1}},$$

$$c_{11}^2 = \frac{\left(\frac{p_1}{\rho_1^2} - \frac{\partial e_1}{\partial \rho_1} \right)_{p_1}}{\left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{p_1}}$$

получается эволюционное уравнение давление фазы 1

$$\frac{dp_1}{dt} + \rho_1 c_1^2 \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\rho_1 c_{11}^2}{\alpha_1} \mu (p_1 - p_2).$$

Что касается фазы 2, то получен аналогичный результат:

$$\frac{dp_2}{dt} + \rho_2 c_2^2 \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\rho_2 c_{12}^2}{\alpha_2} \mu (p_1 - p_2).$$

Асимптотический анализ в настоящее время осуществляется в следующей системе:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \mu(p_1 - p_2),$$

$$\frac{dp_1}{dt} + \rho_1 c_1^2 \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\rho_1 c_{11}^2}{\alpha_1} \mu(p_1 - p_2),$$

$$\frac{dp_2}{dt} + \rho_2 c_2^2 \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\rho_2 c_{12}^2}{\alpha_2} \mu(p_1 - p_2).$$

Расширяя каждую переменную потока как $f = f^0 + \varepsilon f^1$, получаем:

- по порядку $\frac{1}{\varepsilon}$:

$$p_1^0 = p_2^0 = p^0,$$

что означает, с одной стороны,

$$p_1^0 = p^0,$$

а с другой —

$$c_{11}^{0^2} = c_1^{0^2} \text{ и } c_{12}^{0^2} = c_2^{0^2};$$

- по нулевому порядку становятся два уравнения давления:

$$\frac{dp^0}{dt} + \rho_1^0 c_1^{0^2} \frac{\partial u^0}{\partial x} = -\frac{\rho_1^0 c_1^{0^2}}{\alpha_1^0} (p_1^1 - p_2^1),$$

$$\frac{dp^0}{dt} + \rho_2^0 c_2^{0^2} \frac{\partial u^0}{\partial x} = -\frac{\rho_2^0 c_2^{0^2}}{\alpha_2^0} (p_1^1 - p_2^1).$$

Вычитая из одного уравнение другое, легко получить соотношение для разности флуктуаций давлений

$$p_1^1 - p_2^1 = \frac{\rho_2^0 c_2^{0^2} - \rho_1^0 c_1^{0^2}}{\frac{\rho_1^0 c_1^{0^2}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{0^2}}{\alpha_2^0}} \frac{\partial u^0}{\partial x},$$

тогда уравнение объемной фракции имеет вид

$$\frac{d\alpha_1^0}{dt} = \frac{\rho_2^0 c_2^{0^2} - \rho_1^0 c_1^{0^2}}{\frac{\rho_1^0 c_1^{0^2}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{0^2}}{\alpha_2^0}} \frac{\partial u^0}{\partial x}.$$

Следовательно, модель из пяти уравнений с механическим равновесием извлекается в виде асимптотического предела из модели из шести уравнений в присутствии жесткой релаксации давления.

Приложение 3В. Расширение второго порядка

Численный метод первого порядка для гиперболического шага, представленный в разделе 3.3, распространяется на второй порядок. Метод состоит в решении модели из шести уравнений с двумя давлениями (В.1) методом типа MUSCL:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2))}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \tag{В.1}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

В методе MUSCL решение предполагается достаточно регулярным, так что может быть использована формулировка естественных переменных:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} + u \frac{\partial p_1}{\partial x} + p_1 \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial p_2}{\partial t} + u \frac{\partial p_2}{\partial x} + p_2 \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \text{ или}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{p_1 - p_2}{\rho} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \frac{\alpha_1}{\rho} \frac{\partial p_1}{\partial x} + \frac{(1 - \alpha_1)}{\rho} \frac{\partial p_2}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} + u \frac{\partial p_1}{\partial x} + \rho_1 c_1^2 \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial p_2}{\partial t} + u \frac{\partial p_2}{\partial x} + \rho_2 c_2^2 \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

В компактной форме эта система выглядит так:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + A(W) \frac{\partial W}{\partial x} = 0 \tag{B.2}$$

с $W = (\alpha_1, \rho_1, \rho_2, u, p_1, p_2)^T$ и

$$A(W) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & \rho_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & \rho_1 & 0 & 0 \\ \frac{p_1 - p_2}{\rho} & 0 & 0 & u & \frac{\alpha_1}{\rho} & \frac{1 - \alpha_2}{\rho} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_1 c_1^2 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_2 c_2^2 & 0 & u \end{pmatrix}.$$

Расширение второго порядка состоит в применении следующей последовательности операций.

Ограничение градиента. В ячейке i в момент времени t^n известны примитивные переменные W_i^n . Обозначим через Δ_i^- и Δ_i^+ векторы градиента соответственно на левой и правой границах ячейки i . Они определяются следующим образом:

$$\Delta_i^- = \frac{W_i^n - W_{i-1}^n}{\Delta x}, \quad \Delta_i^+ = \frac{W_{i+1}^n - W_i^n}{\Delta x}.$$

Функция-ограничитель наклона ξ используется для предотвращения локальных экстремумов. Могут быть использованы ограничители Minmod, Ван Лира или Superbee. Ограничитель наклона $\Delta_i = \xi(\Delta_i^-, \Delta_i^+)$.

Переменные экстраполяции. В заданной ячейке экстраполированные векторы естественных переменных $W_{i,L}$ и $W_{i,R}$, соответствующие левой и правой границам i -й ячейки, вычисляются так:

$$W_{i,L}^n = W_i^n - \frac{\Delta x}{2} \Delta_i, \quad W_{i,R}^n = W_i^n + \frac{\Delta x}{2} \Delta_i.$$

Эти переменные эволюционируют в течение половины временного шага по

$$W_{i,L,R}^{n+1/2} = W_{i,L,R}^n + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} A(W_i^n) [W_{i,L}^n - W_{i,R}^n].$$

Решение задачи Римана. Задача Римана вычисляется на каждой границе ячейки $i \pm 1/2$, позволяя векторам потока $F_{i \pm 1/2}^*$ быть вычисленными в консервативных переменных:

$$F_{i-1/2}^* = F_{i-1/2}^* (W_{i-1,R}^{n+1/2}; W_{i,L}^{n+1/2}) \quad \text{и} \quad F_{i+1/2}^* = F_{i+1/2}^* (W_{i,R}^{n+1/2}; W_{i+1,L}^{n+1/2}). \quad (\text{B.3})$$

Она также обеспечивает границы ячеек неконсервативными переменными

$$\alpha_{k,i\pm 1/2}^* (W_{i-1,R}^{n+1/2}, W_{i,L}^{n+1/2}), u_{i\pm 1/2}^* (W_{i-1,R}^{n+1/2}, W_{i,L}^{n+1/2})$$

$$\text{и } (\alpha pe)_{k,i\pm 1/2}^* (W_{i-1,R}^{n+1/2}, W_{i,L}^{n+1/2}). \quad (\text{B.4})$$

Эволюционный шаг. После того как межъячейстые потоки и неконсервативные переменные определены, решение выделяется на всем временном шаге:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^*),$$

$$\alpha_{1_i}^{n+1} = \alpha_{1_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((u\alpha_1)_{i+1/2}^* - (u\alpha_1)_{i-1/2}^* - \alpha_{1_i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right),$$

$$(\alpha pe)_{k_i}^{n+1} = (\alpha pe)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\alpha pe u)_{k_{i+1/2}}^* - (\alpha pe u)_{k_{i-1/2}}^* + (\alpha p)_{k_i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right).$$

Приложение 3С. Распространение на несколько измерений

Метод распространяется на несколько измерений с помощью метода конечных объемов, что дает ему возможность справиться со структурированными и неструктурированными сетками. Рассмотрим контрольный объем V_i , замкнутый граничной поверхностью A с вектором единичной нормали \vec{n} (рис. 3С.1). Консервативная часть системы (9) в интегральной форме выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_i} U + \int_A H \cdot \vec{n} dA = 0. \quad (\text{C.1})$$

$U = ((\alpha\rho)_1, (\alpha\rho)_2, \rho u, \rho v, \rho E)^T$ — вектор консервативных переменных;
 $H(F, G)$ — тензор потоков, где

$$F = ((\alpha\rho)_1 u, (\alpha\rho)_2 u, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u)^T;$$

$$G = \left((\alpha\rho)_1 v, (\alpha\rho)_2 v, \rho u v, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v \right)^T$$

$$\text{с } E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 + \frac{1}{2} v^2 \text{ и } p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2.$$

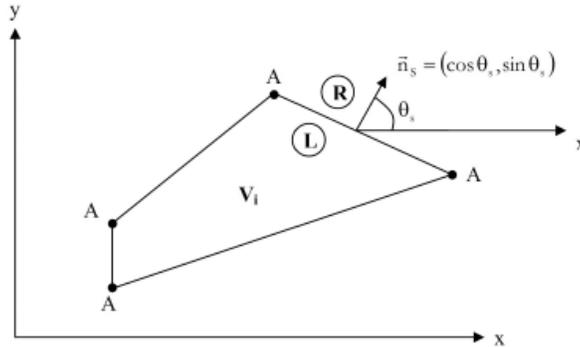


Рис. 3С.1. Постановка задачи

Граница A в V_i является объединением N прямолинейных отрезков $[A_s A_{s+1}]$, где $A_{N+1} = A_1$.

Первый член уравнения (С.1) интерпретируется просто как повременные изменения усредненного консервативного вектора \bar{U} внутри объема V :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_i} U = V_i \frac{\partial \bar{U}}{\partial t}.$$

Поскольку единичный вектор нормали выражается как $\bar{n}_s = (\cos \theta_s, \sin \theta_s)$, второе слагаемое в (С.1) принимает вид

$$\int_A H \cdot \bar{n} dA = \sum_{s=1}^N \int_{A_s}^{A_{s+1}} H \cdot \bar{n}_s dA = \sum_{s=1}^N \int_{A_s}^{A_{s+1}} (F \cdot \cos \theta_s + G \cdot \sin \theta_s) dA.$$

Если предположить, что потоки постоянны вдоль каждого сегмента, оно принимает вид

$$\int_A H \cdot \bar{n} dA = \sum_{s=1}^N L_s (F \cdot \cos \theta_s + G \cdot \sin \theta_s),$$

где L_s — длина сегмента $[A_s A_{s+1}]$.

После интегрирования по времени эволюция консервативной части системы (9) задается для i -й ячейки по схеме

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{s=1}^N L_s (F_s^* \cdot \cos \theta_s + G_s^* \cdot \sin \theta_s),$$

где F_s^* и G_s^* представляют потоки решения задачи Римана между состояниями L и R , отделенными друг от друга сегментом $[A_s A_{s+1}]$ по отношению к нормали \vec{n} .

Схема для неконсервативного уравнения объемной доли становится следующей:

$$\alpha_{k,i}^{n+1} = \alpha_{k,i}^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{s=1}^N L_s \left[(u\alpha_k)_s^* \cos \theta_s + (v\alpha_k)_s^* \sin \theta_s - \alpha_{k,i}^n (u_s^* \cos \theta_s + v_s^* \sin \theta_s) \right],$$

а для неконсервативных уравнений энергии:

$$\begin{aligned} (\alpha p e)_{k,i}^{n+1} &= (\alpha p e)_{k,i}^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{s=1}^N L_s \left[([\alpha p e]_k u)_s^* \cos \theta_s + \right. \\ &\left. + ([\alpha p e]_k v)_s^* \sin \theta_s + (\alpha p)_{k,i}^n (u_s^* \cos \theta_s + v_s^* \sin \theta_s) \right]. \end{aligned}$$

Приложение 3D. Связь между моделью из шести уравнений и обычными баротропными моделями кавитирующих течений

Модели баротропных течений очень популярны при моделировании кавитации и обычно состоят из одного или двух уравнений сохранения массы и одного уравнения импульса в гиперболической системе законов сохранения. В этих моделях имеется важная трудность, связанная с немонотонным поведением скорости звука по сравнению с объемной долей [20; 7; 41]. Интересно рассмотреть, как различные ингредиенты, разработанные в контексте модели из шести уравнений, могут быть использованы в этих баротропных моделях для решения данной проблемы.

Корректная модель баротропного течения для кавитирующих течений может быть получена за счет упрощения модели из пяти уравнений Karila [18]. Считается, что в кавитирующих потоках ударные волны отсутствуют или слабы, даже если нет очевидных доказательств такого предположения. Первое упрощение состоит в замене объемной доли и уравнений энергии уравнениями энтропии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial s_1}{\partial t} + u \frac{\partial s_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial s_2}{\partial t} + u \frac{\partial s_2}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \tag{D.1}$$

Система замыкается с помощью условий равенства давлений:

$$p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2) = p. \tag{D.2}$$

Решение этого уравнения дает объемную долю i , следовательно, давление p . Дополнительное допущение используется в обычных баротропных моделях кавитирующих потоков. Энтропия предполагается постоянной во всей области, а не только вдоль траекторий жидкости. Два уравнения энтропии сводятся к

$$s_k = s_k^0, \quad k = 1, 2.$$

Баротропная модель потока, таким образом, сводится к трем уравнениям сохранения:

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} = 0, \quad (D.3)$$

$$\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial\rho u^2 + p}{\partial x} = 0.$$

Для иллюстрации термодинамического замыкания этой модели предположим, что каждая фаза подчиняется EOS сгущенного газа (3). Выражения для изоэнтропы приводятся к виду

$$\frac{p_k + p_{\infty k}}{\rho_k^{\gamma_k}} = \frac{p_0 + p_{\infty k}}{\rho_{0k}^{\gamma_k}}$$

и соответствуют EOS Tait.

EOS изоэнтропического застывшего газа (иначе EOS Tait) может быть получено для любой чистой жидкости и любого идеального газа, причем это только функция плотности фаз:

$$p_k = p_k^S(\rho_k) = \left(\frac{\rho_k}{\rho_{0k}} \right)^{\gamma_k} (p_0 + p_{\infty k}) - p_{\infty k}. \quad (D.4)$$

Система (D.3), таким образом, замыкается соотношением

$$p_1^S(\rho_1) = p_2^S(\rho_2). \quad (D.5)$$

Другими словами, смесь вовлекается в механическое равновесие с изоэнтропической эволюцией для каждой фазы. Это предположение справедливо при условии, что граничные слои, тепло- и массообмен и ударные волны имеют незначительное влияние. С использованием EOS изоэнтропического застывшего газа условие равновесия (D.5) сводится только к функции объемной доли

$$f(\alpha_1) = \left(\frac{(\alpha\rho)_1}{\alpha_1 \rho_{01}} \right)^{\gamma_1} (p_0 + p_{\infty 1}) - p_{\infty 1} - \left(\frac{(\alpha\rho)_2}{(1-\alpha_1)\rho_{02}} \right)^{\gamma_2} (p_0 + p_{\infty 2}) + p_{\infty 2} = 0. \quad (D.6)$$

Его решение дает α_1 , тогда ρ_1 , а также давление находятся с помощью одного из EOS (D.4).

Эта модель предполагает, что кавитация не является результатом переноса массы. Кавитационные карманы появляются, когда объемная доля увеличивается при небольшом количестве газа, присутствующем изначально. Кавитация, таким образом, моделируется как механический процесс релаксации, возникающий на бесконечной скорости, а не как процесс массопереноса. Это соответствует упрощенному предельному положению по сравнению с реальностью. В нем также представлен дефицит, когда чистая жидкость присутствует. Тепло- и массообмен был введен в модель из пяти уравнений [38], чтобы иметь дело с более реалистичными кавитирующими ситуациями. Кроме того, модель баротропного потока в упрощенной форме (D.3) включает в себя те же численные трудности, что и модель из пяти уравнений. Скорость звука для данной модели еще подчиняется формулам Вуда.

Чтобы обойти эти трудности, особенно в связи с немонотонным поведением скорости звука, адаптируем стратегию, разработанную в рамках модели из шести уравнений, к такой упрощенной ситуации.

Модель релаксации для баротропной модели кавитирующего потока.

Немонотонное поведение скорости звука, которое вызывает вычислительные трудности, происходит из условия равновесия (D.5). В соответствии с анализом раздела 3.2 может быть построена модель релаксации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= (p_1^s - p_2^s), \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \tag{D.7}$$

Поскольку модель включает в себя неравновесные эффекты давления, уравнение импульса включает давление со стороны обеих фаз. Эта модель является изоэнтропическим аналогом модели из шести уравнений. В отличие от предыдущих моделей она имеет монотонную скорость звука, определяемую по формуле

$$c_f^2 = Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2.$$

Нетрудно показать, что в асимптотическом пределе $\mu \rightarrow \infty$ модель соответствует системе (D.3) с термодинамическим замыканием (D.5).

Численный метод для решения системы (D.7) является упрощением метода, развитого в разделе 3. Оно может быть суммировано следующим образом:

- На каждой границе ячейки решить задачу Римана для системы (D.7) без релаксационных членов с помощью любого солвера. Рекомендуется HLLC решатель из раздела 3.3.1.
- Выявить все переменные потока $W = (\alpha_1, (\alpha\rho)_1, (\alpha\rho)_2, \rho u)$ методом типа Годунова из раздела 3.2.
- Определить релаксационное давление и особенно объемные доли путем решения уравнения (D.6). Для этой задачи подходит метод Ньютона.
- Перейти к первому пункту для следующего шага по времени.

Литература

1. *Abgrall R.* How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach // *J. of Computational Physics*. — 1996. — Vol. 125. — P. 150—160.
2. *Abgrall R., Perrier V.* Asymptotic expansion of a multiscale numerical scheme for compressible multiphase flows // *SIAM J. Multiscale and Modeling and Simulation*. — 2006. — 5. — P. 84—115.
3. *Baer M. R., Nunziato J. W.* A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials // *Intern. J. of Multiphase Flow*. — 1986. — Vol. 12 (6). — P. 861.
4. *Benson D. J.* Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 1992. — Vol. 99. — P. 235—394.
5. *Chinnayya A., Daniel E., Saurel R.* Computation of detonation waves in heterogeneous energetic materials // *J. of Computational Physics*. — 2004. — Vol. 196. — P. 490—538.
6. *Cochran G., Chan J.* Shock initiation and detonation models in one and two dimensions: CID-18024 Lawrence National Laboratory Report. — [S. l.], 1979.
7. *Coutier-Delgosha O., Fortes-Patella R., Reboud J. L. et al.* Stability of preconditioned Navier-Stokes equations associated with a cavitation model // *Computer and Fluids*. — 2005. — 34. — P. 319—349.
8. *Davis S. F.* Simplified second order Godunov type methods // *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* — 1988. — 9. — P. 445—473.

9. *Dervieux A., Thomasset F.* A finite element method for the simulation of Rayleigh-Taylor instability // Approximation methods for Navier-Stokes problems: Proceedings of the Symposium, Paderborn, West Germany, September 9—15, 1979. — Berlin: Springer-Verl., 1980. — P. 145—158.
10. *Farhat C., Roux F. X.* A method for finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm // Intern. J. for Numerical Methods in Engineering. — 1991. — Vol. 32. — P. 1205—1227.
11. *Favrie N., Gavriluk S., Saurel R.* Diffuse solid-fluid interface model in cases of extreme deformations /// J. of Computational Physics. — 2008. — Submitted.
12. *Fedkiw R., Aslam T., Merriman B., Osher S.* A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method) // J. of Computational Physics. — 1999. — 152 (2). — P. 457—492.
13. *Gavrilyuk S., Favrie N., Saurel R.* Modelling wave dynamics of compressible elastic materials // J. of Computational Physics. — 2008. — 227(5). — P. 2941—2969.
14. *Glimm J., Grove J. W., Li X. L. et al.* Three dimensional front tracking // SIAM J. Scientific Computing. — 1998. — Vol. 19. — P. 703—727.
15. *Gueyffier D., Li L., Nadim A., Scardovelli R., Zaleski S.* Volume-Of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows // J. of Computational Physics. — 1999. — Vol. 152. — P. 423—456.
16. *Hirt C. W., Nichols B. D.* Volume Of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // J. of Computational Physics. — 1981. — Vol. 39. — P. 201—255.
17. *Hirt C. W., Amsden A. A., Cook J. L.* An Arbitrary Lagrangian Eulerian Computing Method for all flow Speeds // J. of Computational Physics. — 1974. — Vol. 135. — P. 203—216.
18. *Kapila A. K., Menikoff R., Bdzil J. B. et al.* Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations // Physics of Fluids. — 2001. — 13 (10). — P. 3002—3024.
19. *Khoo B. C., Liu T. G., Wang C. W.* The ghost fluid method for compressible gas-water simulations // J. of Computational Physics. — 2005. — 204. — P. 193.
20. *Koren B., Lewis M. R., van Brummelen E. H., van Leer B.* Riemann-problem and level-set approaches for homentropic two-fluid computations // J. of Computational Physics. — 2002. — 181. — P. 654—674.

21. *Layes G., Métayer O.* Quantitative numerical and experimental studies of the shock accelerated heterogeneous bubbles motion // *Physics of Fluids*. — 2007. — 19. — P. 042-105-1—042-105-13.
22. *Lee E. L., Horning H. C., Kury J. W.* Adiabatic expansion of high explosives detonation products / Lawrence Radiation Laboratory, Univ. of California. — Livermore, 1968. — (TID 4500-UCRL 50422).
23. *Le Métayer O., Massoni J., Saurel R.* Modeling evaporation fronts with reactive Riemann solvers // *J. of Computational Physics*. — 2005. — 205. — P. 567—610.
24. *LeVeque R. J., Keh-Ming Shyue.* Two-Dimensional Front Tracking Based on High Resolution Wave Propagation Methods // *J. of Computational Physics*. — 1996. — 123 (2). — P. 354—368.
25. *Massoni J., Saurel R., Baudin G., Demol G.* A mechanistic model for shock initiation of solid explosives // *Physics of Fluids*. — 1999. — 11 (3). — P. 710—736.
26. *Miller G. H., Puckett E. G.* A High-Order Godunov Method for Multiple Condensed Phases // *J. of Computational Physics*. — 1996. — 128 (1). — P. 134—164.
27. *Miller G. H., Colella P.* A high-order Eulerian Godunov method for elastic-plastic flows in solids // *J. Comp. Phys.* — 2001. — 167. — P. 131—176.
28. *Mulder W., Osher S., Sethian J. A.* Computing interface motion: The compressible Rayleigh-Taylor and Kelvin-Helmholtz instabilities // *J. of Computational Physics*. — 1992. — Vol. 100. — P. 209.
29. *Murrone A., Guillard H.* A five equation reduced model for compressible two phase flow problems // *J. of Comp. Physics*. — 2005. — 202 (2). — P. 664—698.
30. *Osher S., Fedkiw R.* Level Set Methods: An overview and some recent results // *J. of Computational Physics*. — 2001. — Vol. 169. — P. 463—502.
31. *Petitpas F., Franquet E., Saurel R., Le Métayer O.* A relaxation-projection method for compressible flows. — Pt. 2: The artificial heat exchange for multiphase shocks // *J. of Computational Physics*. — 2007. — 225 (2). — P. 2214—2248.
32. *Perigaud G., Saurel R.* A compressible flow model with capillary effects // *J. of Computational Physics*. — 2005. — Vol. 209. — P. 139—178.
33. *Saurel R., Abgrall R.* A multiphase Godunov method for multifluid and multiphase flows // *J. of Computational Physics*. — 1999. — 150. — P. 425—467.

34. Saurel R., Le Métayer O. A multiphase model for interfaces, shocks, detonation waves and cavitation // J. of Fluid Mechanics. — 2001. — Vol. 431. — P. 239—271.
35. Saurel R., Gavriluyuk S., Renaud F. A multiphase model with internal degrees of freedom: application to shock-bubble interaction // J. of Fluid Mechanics. — 2003. — Vol. 495. — P. 283—321.
36. Saurel R., Franquet E., Daniel E., Le Métayer O. A relaxation-projection method for compressible flows. — Pt. 1: The numerical equation of state for the Euler equations // J. of Computational Physics. — 2007. — Vol. 223 (2). — P. 822—845.
37. Saurel R., Le Métayer O., Massoni J., Gavriluyuk S. Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation // Shock Waves. — 2007. — Vol. 16 (3). — P. 209—232.
38. Saurel R., Petitpas F., Abgrall R. Modeling phase transition in metastable liquids. Application to cavitating and flashing flows // J. of Fluid Mechanics. — 2008. — 607. — P. 313—350.
39. Scheffler D. R., Zukas J. A. Practical aspects of numerical simulation of dynamic events: material interfaces // Intern. J. of Impact Engineering. — 2000. — Vol. 24, №5—6. — P. 821—842.
40. Sethian J. Evolution, Implementation and Application of Level Set and Fast Marching Methods for Advancing Fronts // J. of Computational Physics. — 2001. — Vol. 169. — P. 503—555.
41. Sinibaldi E. Implicit preconditioned numerical schemes for the simulation of threedimensional barotropic flows: PhD Thesis / Scuola Normale Superiore di Pisa. — [S. l.], 2006.
42. Stewart H. B., Wendroff B. Two-phase flow: Models and methods // J. of Computational Physics. — 1984. — 56 (3). — P. 363—409.
43. Titarev V. A., Romenski E., Toro E. F. MUSTA type upwind fluxes for nonlinear elasticity // Intern. J. Numerical Methods in Engineering. — 2007. — 73 (7). — P. 897—926.
44. Toro E. F., Spruce M., Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL Riemann solver // Shock Waves. — 1994. — 4. — P. 25—34.
45. Toro E. F. Riemann solvers and numerical methods for fluids dynamics. — Berlin: Springer-Verl., 1997.
46. van Brummelen E. H., Koren B. A pressure-invariant conservative Godunov-type method for barotropic two-fluid flows // J. of Computational Physics. — 2003. — Vol. 185. — P. 289—308.
47. Wood A. B. A textbook of sound. — [S. l.]: Bell Eds., 1930.

48. *Karni S.* Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm // *J. Comp. Phys.* — 1994. — 112. — P. 31—43.
49. *Abgrall R., Karni S.* Computations of compressible multifluids // *J. Comput. Phys.* — 2001. — 169 (2). — P. 594—623.
50. *Abgrall R., Saurel R.* Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures // *J. Comput. Phys.* — 2003. — 186 (2). — P. 361—396.
51. *Bdzil J. B., Menikoff R., Son S. F. et al.* Two-phase modeling of deflagration to detonation transition in granular materials: A critical examination of modeling issues // *Phys. Fluids.* — 1999. — 11 (2). — P. 378.
52. *Courant R., Friedrichs K. O.* *Supersonic Flow and Shock Waves.* — [S. l.]: Springer Science & Business Media, 1999. — 464 p.
53. *Hou T. Y., Le Floch P. G.* Why nonconservative schemes converge to wrong solutions: error analysis // *Mathematics of computation.* — 1994. — Vol. 62, № 206. — P. 497—530.

Глава 4. Солвер для низкоскоростных потоков для моделей диффузионного интерфейса

4.1. Введение

Интересные наработки в области многофазных течений, способные решать проблемы с участием гетерогенных смесей материалов, межфазных потоков с вовлечением ударных волн, взрывов, кавитации, фазовых переходов, горения и т. д., сделаны в компании RS2N. Эти наработки используются для прямого численного моделирования (DNS) межфазных потоков и представляют интерес в рамках безопасности ядерных реакторов. Их цель состоит в получении условий критического теплового потока, которые учитывают рост пузыря, поверхностное натяжение, эффекты контактного угла, тепло- и массообмен на интерфейсах.

INL также имеет большой опыт изучения потоков с низкими скоростями, а также применения метода конечных элементов (FEM), и накопленные ею знания о многофазных потоках хорошо дополняют знания, которыми располагает компания RS2N.

В этом контексте целью является объединение достижений обеих компаний для построения простой и точной численной схемы решения DNS моделей межфазных потоков при низких скоростях. При этом возникает вопрос численной аппроксимации моделей сжимаемых потоков в пределе несжимаемости.

В данном разделе представлен обзор результатов INL и RS2N. Основная идея заключается в проверке, могут ли методы, разработанные в INL для низкоскоростных течений [1], быть адаптированы в рамках конечно-объемного подхода (FV). Это последнее семейство методов больше подходит для численной аппроксимации гиперболических моделей диффузионных интерфейсов со сложной физикой.

Сначала представлены результаты исследования однофазного потока для проверки возможности распространения модели потока с низкой скоростью на методы FV. Расширение осуществляется на основе метода смешан-

ного типа, состоящего из метода Годунова и PCICE [1]. Получены вполне удовлетворительные результаты как для низкоскоростных, так и для высокоскоростных потоков.

Затем рассматривается гиперболическая модель диффузионного интерфейса и комбинированный метод Годунова — PCICE.

4.2. Конечно-объемные методы (КОМ)

4.2.1. Введение в КОМ

Метод PCICE, описываемый в [1], обладает очень привлекательными характеристиками, наиболее важной из которых является способность решать низкоскоростные потоки с полностью сжимаемыми моделями. Что касается формулировки диффузионного интерфейса двухфазных потоков, то конечно-объемная формулировка предпочтительнее оригинальной конечно-элементной формулировки, в которой был разработан метод PCICE. Действительно, с помощью FV метода, основанного на римановских солверах, может быть обеспечено простое управление численной диффузией, что особенно важно для диффузионных интерфейсов, когда каждая жидкость управляется своим уравнением состояния.

4.2.2. Основы КОМ

Предположим, что общая система уравнений, например уравнения Эйлера, может быть записана в консервативной форме:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0. \quad (1)$$

Решение вычисляется по области Ω в направлении x в диапазоне $[0, L]$ (рис. 1). Область Ω разделена на контрольные объемы, длина каждого объема равна Δx . U — вектор неизвестных, зависящих от пространственных координат x и времени t , F — вектор потока.

Решение ищется как результат интегрирования по области Ω во временном диапазоне $T = [t_1, t_2]$. Для любого (x_1, x_2) в Ω

$$\int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} dx dt = 0. \quad (2)$$

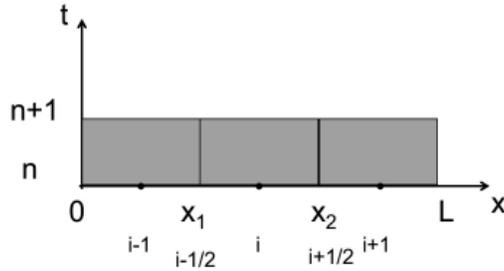


Рис. 1. Сетка и временной шаг, используемые в методе конечных объемов

Интеграл может быть вычислен следующим образом:

$$\int_{x_1}^{x_2} U(x, t_2) dx - \int_{x_1}^{x_2} U(x, t_1) dx + \int_{t_1}^{t_2} F(x_2, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} F(x_1, t) dt = 0. \quad (3)$$

Примем, что $\Delta x = |x_2 - x_1|$, и предположим, что в этом объеме количество U постоянно, тогда можно определить:

$$U_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_1}^{x_2} U(x, t_1) dx. \quad (4)$$

Интеграл (3) есть

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t_1}^{t_2} F(x_2, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} F(x_1, t) dt \right).$$

Таким же образом, как и для консервативных переменных, определим средний поток:

$$F_{i-1/2}^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} F(x_1, t) dt.$$

Получим явную конечно-объемную схему

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n). \quad (5)$$

$F_{i+1/2}^n$ — численный поток между ячейками, находящийся на индексе $i+1/2$. Значение этой величины получено с помощью точных или приближенных римановских солверов, которые зависят от системы уравнений.

Существуют ограничения для значения временного шага Δt . Система уравнений (1) является гиперболической. Каждому собственному значению λ_k соответствует своя скорость волны. Например, хорошо известно, что уравнения Эйлера имеют три собственных значения: u , $u+c$ и $u-c$ со скоростью жидкости u и скоростью звука c . Консервативные переменные меняются только по волнам.

Рассмотрим численную ячейку с индексом i , отсекаемую ячейковыми линиями $i-1/2$ и $i+1/2$. Величина U_i^n внутри ячейки является постоянной. Рассмотрим волну, распространяющуюся с высокой и низкой скоростями λ_{\max} и λ_{\min} соответственно от границы ячейки, как показано на рис. 2. Обе эти волны определяют треугольник влияния невозмущенного состояния.

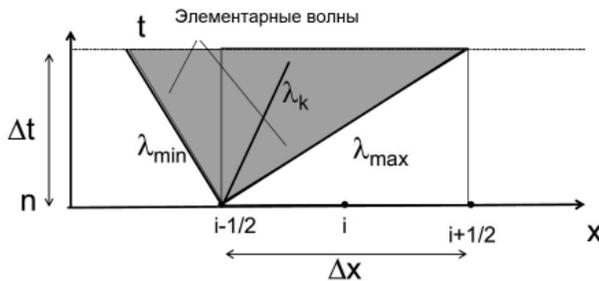


Рис. 2. Общая волновая картина для гиперболической системы

Можно продемонстрировать состояние стабильности для гиперболической системы; это означает, что волна от $i-1/2$ не должна идти дальше, чем от противоположной границы ячейки при $i+1/2$. Отсюда следует условие на шаг по времени:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{|\lambda_{\max}|}. \quad (6)$$

В случае уравнений Эйлера это хорошо известное условие Куранта — Фридрихса — Леви (КФЛ)

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{|u+c|}. \quad (7)$$

Из определения средних величин также следует, что величина потока, рассчитанного на момент времени t^* , остается постоянной во временном диапазоне $[t, t + \Delta t]$.

Когда рассматриваются сжимаемые течения, временной шаг должен подчиняться условию (7). Проблема сжимаемых течений с низкой скоростью состоит в том, что порядок величины скорости u может быть значительно ниже, чем скорость звука. Численное решение тогда управляется акустической волной $\Delta t \leq \Delta x / |u + c| \approx \Delta x / |c|$, а физическая проблема управляется материальной скоростью. Такая схема часто оказывается недостаточно точной.

Основным преимуществом метода является то, что шаг по времени PCICE ограничен конвективным условием Куранта

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{|u|}.$$

Целью дальнейших рассуждений является перевод формулировки PCICE в конечно-объемную формулировку, чтобы воспользоваться преимуществами обоих методов.

4.3. PCICE метод и его расширения для уравнений Эйлера

4.3.1. Введение в PCICE

Рассмотрим систему уравнения Эйлера:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} &= 0, \\ \frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \bar{u} + p \bar{I}_d) &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} \left(E + \frac{p}{\rho} \right) &= 0, \end{aligned} \tag{8}$$

где E — полная энергия:

$$E = \varepsilon + \frac{1}{2}u^2, \text{ где } \varepsilon = \varepsilon(p, \rho).$$

Метод PCICE для решения уравнения Эйлера состоит из трех этапов.

Первый этап состоит в решении модифицированной системы уравнений вида

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} \vec{u} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} \left(E + \frac{p}{\rho} \right) = 0.$$

Из дискретной постановки этой системы в сочетании с EOS можно получить уравнение Пуассона для давления. Сведения о давлении на заключительном этапе приводят к коррекции величин, которые были предсказаны на стадии предиктор. Основная цель данного исследования заключается в использовании конечно-разностных схем для решения шага предиктор с помощью методов типа Годунова. Соответствующий метод будет называться PCICE-VF.

4.3.2. Метод PCICE-VF

Базовая система уравнений выглядит следующим образом:

$$\rho^{n+1} = \rho^n - \frac{\Delta t}{2} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}^n + \rho \vec{u}^{n+1}),$$

$$\rho \vec{u}^{n+1} = \rho \vec{u}^n - \Delta t \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} \vec{u}^n - \Delta t \vec{\nabla} p^{n+1}, \quad (10)$$

$$\rho E^{n+1} = \rho E^n - \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} E^n - \Delta t \vec{\nabla} (p \vec{u})^{n+1}.$$

Этап предиктор — (транспортный этап). Первое существенное изменение на этапе предиктор: в целевой системе нет термина давления, и решения системы касаются только переноса консервативных переменных.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} \bar{u} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} E = 0.$$

Данная система уравнений является не строго гиперболической и имеет три одинаковых собственных значения \bar{u} . Полудискретное решение для (11) имеет вид

$$\rho^* = \rho^n - \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u}^n,$$

$$\rho \bar{u}^* = \rho \bar{u}^n - \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} \bar{u}^n, \quad (12)$$

$$\rho E^* = \rho E^n - \bar{\nabla} \cdot \rho \bar{u} E^n.$$

Система решается с помощью конечно-объемной схемы. Преимущество этой схемы состоит в том, что временной шаг ограничивается только конвективным критерием $\Delta t \leq \Delta x / |u|$.

Солвер Рунанова используется для вычисления вектора потока:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(F_i + F_{i+1}) - \frac{1}{2} S^+ (U_i + U_{i+1}) \text{ с } U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} \text{ и } F = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u^2 \\ \rho E u \end{pmatrix},$$

скорость волны вычисляется по формуле $S_{i+1/2}^+ = \max(|u_i|, |u_{i+1}|) + \varepsilon$.

Этап корректор (коррекция). На этапе корректор можно получить уравнение Пуассона. Из-за того, что уравнение сохранения массы является уравнением переноса, базовое уравнение может быть использовано непосредственно:

$$\rho^{n+1} = \rho^n - \frac{\Delta t}{2} \vec{\nabla} \cdot (\rho \bar{u}^n + \rho \bar{u}^{n+1}) \quad (13)$$

В этом уравнении используется предиктор величина ρ^* , чтобы получить

$$\rho^{n+1} = \rho^* - \frac{\Delta t}{2} \vec{\nabla} \cdot (\rho \bar{u}^{n+1} - \rho \bar{u}^n) \quad (14)$$

В последнем уравнении импульсы на момент времени $n+1$ должны быть удалены. Используется корректирующее уравнение для импульса. Отметим, что на этапе предиктора нет только слагаемых давления, поэтому, естественно, представляем:

$$\rho \bar{u}^{n+1} = \rho \bar{u}^* - \Delta t \vec{\nabla} \cdot p^{n+1}. \quad (15)$$

Такой же путь для уравнения энергии приводит к

$$\rho E^{n+1} = \rho E^* - \Delta t \vec{\nabla} \cdot (\rho \bar{u})^{n+1}. \quad (16)$$

Комбинируя (14) и (15), получаем:

$$\rho^{n+1} = \rho^* - \frac{\Delta t}{2} \vec{\nabla} \cdot (\rho \bar{u}^* - \rho \bar{u}^n) + \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1}. \quad (17)$$

Здесь вводится еще одно отличие между оригинальным методом PCICE и новой версией (PCICEVF):

$$\vec{\nabla} \cdot \rho \bar{u}^* = \vec{\nabla} \cdot \rho \bar{u}^n. \quad (18)$$

Это предположение оправдывается тем, что $\vec{\nabla} \cdot \rho \bar{u}^*$ во временном диапазоне $[t, t + \Delta t]$ постоянно при конвективном временном шаге.

Тогда в предположении, что давление на $n+1$ известно, этап коррекции выглядит так:

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1}, \quad (19)$$

$$\rho \bar{u}^{n+1} = \rho \bar{u}^* - \Delta t \vec{\nabla} \cdot p^{n+1}, \quad (20)$$

$$\rho E^{n+1} = \rho E^* - \Delta t \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u})^{n+1}. \quad (21)$$

Уравнение Пуассона для давления. Уравнение состояния используется здесь в общей дифференциальной формулировке. В системе уравнений (8) замыкающие отношения задаются как $\varepsilon = \varepsilon(p, \rho)$, которые можно переписать так же в виде $p = p(\varepsilon, \rho)$. Дифференцирование этого уравнения дает:

$$dp = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\varepsilon} d\rho + \left. \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right|_{\rho} d\varepsilon. \quad (22)$$

Эта дифференциальная форма аппроксимирует во времени вариации между временем t^* и временем t^{n+1} :

$$df = f^{n+1} - f^*.$$

Таким образом,

$$p^{n+1} - p^* = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\varepsilon} (\rho^{n+1} - \rho^*) + \left. \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right|_{\rho} (\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^*). \quad (23)$$

Коэффициенты этого уравнения зависят от уравнения состояния. Нужно оценить слагаемые $(\rho^{n+1} - \rho^*)$ и $(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^*)$. Используем соответствующее коррекционное уравнение (19):

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1}.$$

Уравнение (23) теперь выглядит следующим образом:

$$p^{n+1} - p^* = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\varepsilon} \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1} + \left. \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right|_{\rho} (\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^*).$$

Нет точного выражения для внутренней энергии в момент времени $n+1$. Внутренняя энергия подчиняется следующим уравнениям в частных производных:

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0. \quad (24)$$

На этапе предиктор все термины переноса были учтены, так что в этом уравнении конвективный член производной по времени уже был рассмотрен на этапе предиктора. Оставшаяся часть:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0.$$

Новое усовершенствование метода теперь делается благодаря этому уравнению. Его приближение между предсказанным состоянием и новым временем

$$\tilde{\varepsilon}^{n+1} \equiv \tilde{\varepsilon}^{n+1} = \varepsilon^* - \frac{\Delta t}{\bar{\rho}} p^n \nabla u^n. \quad (25)$$

Уравнение давления принимает вид

$$p^{n+1} - p^* = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\varepsilon} \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1} - \left. \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right|_{\rho} \frac{\Delta t}{\bar{\rho}} p^n \nabla u^n. \quad (26)$$

Величины с тильдой оцениваются как среднее арифметическое между временем * и n. Использование уравнения состояния идеального газа $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$ приводит к коэффициентам

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\varepsilon} = (\gamma - 1)\varepsilon \quad \text{и} \quad \left. \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right|_{\rho} = (\gamma - 1)\rho.$$

Уравнение Пуассона для давления:

$$p^{n+1} - p^* = (\gamma - 1)\tilde{\varepsilon} \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1} - (\gamma - 1)\Delta t p^n \nabla u^n$$

или

$$p^{n+1} - (\gamma - 1)\tilde{\varepsilon} \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1} = p^* - (\gamma - 1)\Delta t p^n \nabla u^n. \quad (27)$$

4.3.3. Сущность метода

Шаг предиктор:

$$\rho^* = \rho^n - \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u}^n,$$

$$\rho \vec{u}^{*} = \rho \vec{u}^n - \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} \vec{u}^n,$$

$$\rho E^{*} = \rho E^n - \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} E^n.$$

Уравнение Пуассона:

$$p^{n+1} - (\gamma - 1) \tilde{\epsilon} \frac{\Delta t^2}{2} \Delta p^{n+1} = p^* - (\gamma - 1) \Delta t p^n \nabla u^n.$$

Шаг корректор:

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{\Delta t^2}{2} \Delta \cdot p^{n+1},$$

$$\rho \vec{u}^{n+1} = \rho \vec{u}^{*} - \Delta t \vec{\nabla} \cdot p^{n+1},$$

$$\rho E^{n+1} = \rho E^{*} - \Delta t \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u})^{n+1}.$$

4.4. Однофазные результаты

4.4.1. Введение

Результаты, представленные в этом разделе, получены новым методом первого порядка точности по времени и пространству. В первом тестовом случае речь идет о распространении интерфейса, движущегося с постоянной скоростью в поле постоянного давления. Этот тест важен для оценки робастности кода в решении интерфейсных проблем, что очень существенно для многофазных потоков. Давление и скорость должны оставаться постоянным, пока распространяется профиль плотности.

В двух других тестовых случаях рассматриваются проблемы в ударной трубе. В этих случаях учитываются материальные интерфейсы, акустика, расширение и ударные волны. Численные результаты сравниваются с точными решениями. В первом тесте рассматривается сильная ударная волна, во втором — задача в трубе со слабой ударной волной, которая является простым способом получения низкоскоростного потока.

Жидкость должна подчиняться закону идеального газа с политропным коэффициентом $\gamma = 1,4$ и удельной теплоемкостью при постоянном объеме $C_v = 700$ Дж/кг/К.

4.4.2. Интерфейсные проблемы

Рассмотрим 1D область метровой длины. Она содержит газ, движущийся с постоянной скоростью $u = 10$ м/с при атмосферном давлении 101 325 Па. Разрыв плотности первоначально расположен на оси абсцисс ($x = 0,5$), он представляет собой поверхность раздела между газом при более высокой плотности ρ_L (слева) и тем же газом при низкой плотности ρ_R справа от первоначального интерфейса (рис. 3).

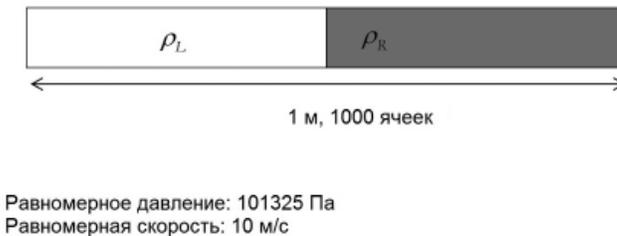


Рис. 3. Тест для адвекции

Сетка состоит из 1000 ячеек. В первом расчете рассматривается скачок плотности, равный 2: $\rho_L = 1$ кг/м³ и $\rho_R = 0,5$ кг/м³. Шаг по времени

$\Delta t = 16 \frac{\Delta x}{u + c}$, и это самый большой шаг, который можно использовать

при заданных условиях. На рис. 4 показан профиль плотности на время 55,44 мкс, что соответствует расчету 300 временных шагов. Показано плато в графике изменения плотности со временем, а также скорость интерфейса. Фронт размывается по большому числу ячеек, основной причиной является низкий порядок в пространстве и времени этого метода.

На рис. 5 показана разница между конечным давлением внутри трубы и начальным давлением, которое было установлено равным 101 325 Па. Порья-

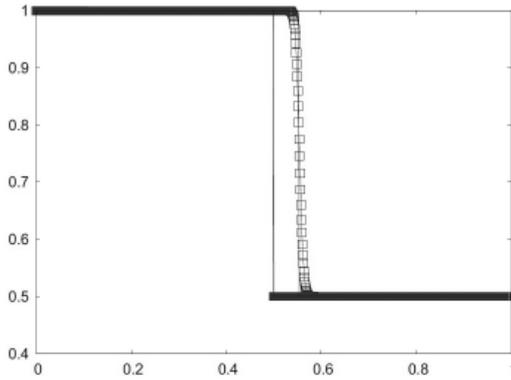


Рис. 4. Тест адвекция: скачок плотности равен 2, $\Delta t = 16$ КФЛ. Сравнение аналитики (прямая) и численных результатов (символы) Решение для плотности

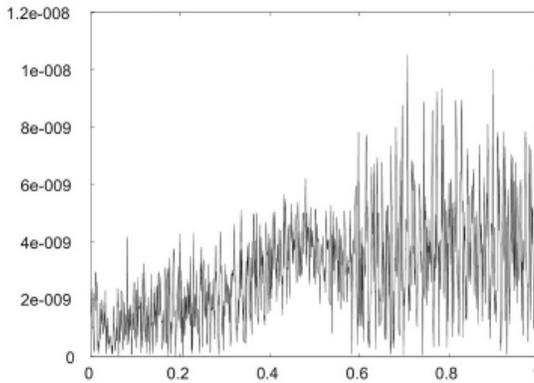


Рис. 5. Тест адвекция: скачок плотности равен 2, $\Delta t = 16$ КФЛ. Профили разности между начальным давлением и давлением на финальном шаге

док величины ошибки — 10^{-9} Па, что очень близко к численному нулю. Тот же график показывает разницу между окончательной и начальной скоростью и демонстрирует ошибку порядка 10^{-11} м/с.

Результаты удовлетворительные. Шаг по времени, равный 16 КФЛ, соответствует верхнему пределу схемы, как предложено в [2], т. е.

$$\Delta t = 16 \frac{\Delta x}{u + c} \approx 0,3 \frac{\Delta x}{u}.$$

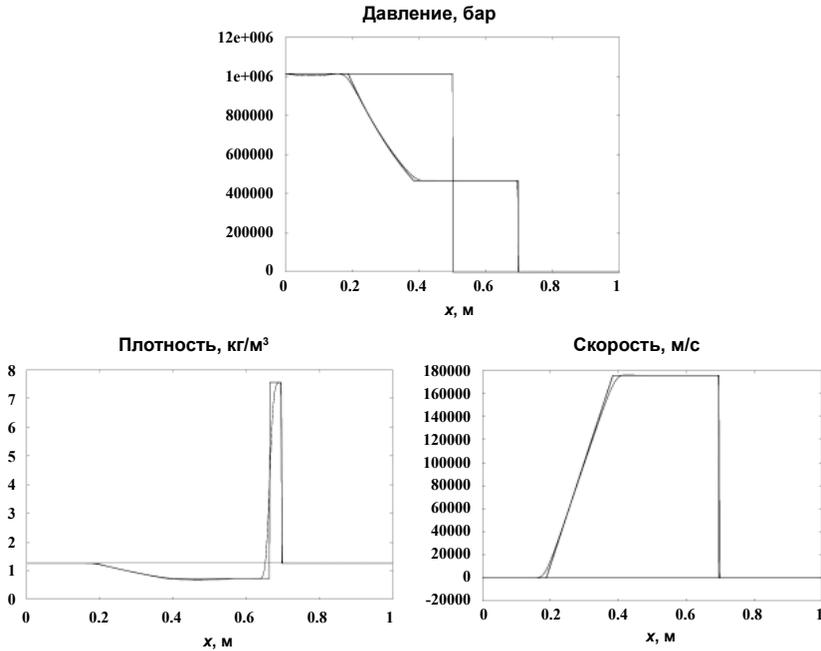


Рис. 7. Сравнение между аналитическими и численными результатами для сильной ударной волны в трубке $p_L = 10^6 p_R$

На рис. 7 давление, плотность и скорость профили сравниваются с точными решениями.

Потоковый солвер хорошо воспроизводит решение. Величина КФЛ ограничена значением 1,5. С этими начальными условиями, акустическая и конвективная волны имеют один порядок величин (около 180 000 м/с): так что акустические явления, по крайней мере, имеют такое же значение, что и явления переноса. Этот тест наглядно показывает надежность метода.

4.4.4. Слабая ударная волна в трубке

В этом разделе рассматривается проблема ударной волны в трубке, аналогичная предыдущему абзацу, но с очень низким скачком давления. В камере низкого давления $p_R = 101\,325$ Па, а в камере высокого давления $p_L = 1,05 p_R$. На рис. 8 численное решение сравнивается с аналитическим на момент времени 1 мс.

Конечная скорость довольно низкая, около 5 м/с. Шаг по времени, используемый в моделировании, равняется $\Delta t = 10$ КФЛ. Полное время расчета

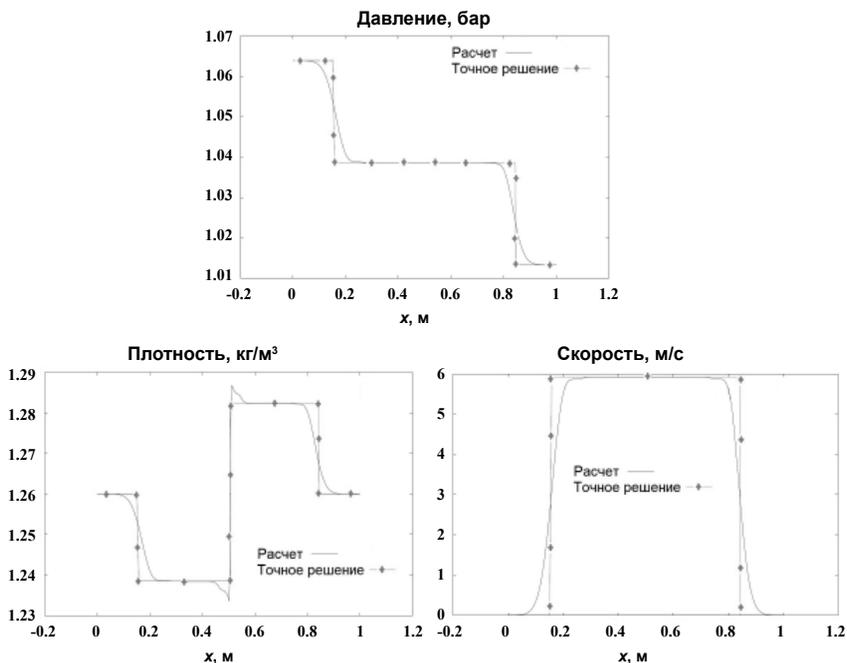


Рис. 8. Сравнение между аналитическими и численными результатами для сильной ударной волны в трубке $p_L = 1,05 p_R$. $\Delta t = 10$ КФЛ, количество просчитанных временных шагов равняется 40 для окончательного времени 1 мс

составляет 40 временных шагов. Решение для давления и скорости хорошо согласуется с аналитическим решением. Численное решение для плотности также хорошо согласуется с аналитическим решением за исключением интерфейса, где наблюдаются некоторые паразитные колебания.

На рис. 9 построено решение, полученное с КФЛ = 1, оно почти идеально совпадает для всех переменных, но уже можно наблюдать небольшое отклонение расчетной плотности от аналитического решения на интерфейсе.

4.4.5. Заключительные замечания для однофазного солвера

На основе метода PCICE мы разработали новый решатель для однофазных потоков. Построен солвер для низкоскоростных потоков позволяющий использовать больший временной шаг, чем обычные методы для сжимаемой жидкости.

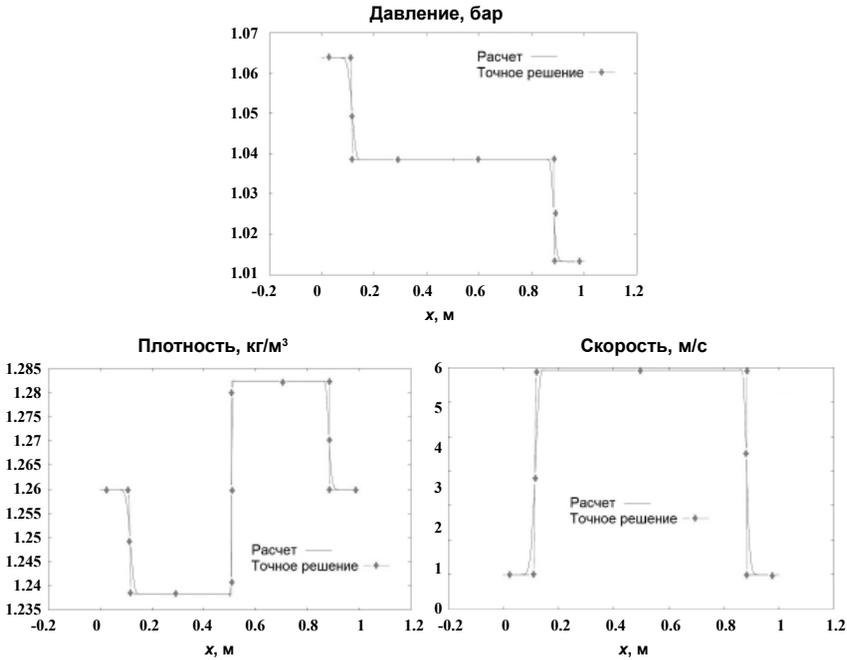


Рис. 9. Сравнение между аналитическими и численными результатами для сильной ударной трубки $p_L = 1,05 p_R$. $\Delta t = 1$ КФЛ, количество просчитанных временных шагов равняется 400 для окончательного времени 1 мс

Данный солвер может быть улучшен за счет повышения порядка точности и использования разных уравнениях состояния. В следующем разделе рассматривается попытка решения двухфазного потока.

4.5. Диффузионно-интерфейсный поточный солвер

4.5.1. Введение

Рассмотрим простую равновесную модель скорости и давления Каріла [3]. Она была получена как асимптотический предел модели Ваег и Nunziato [4] в пределе жесткой скорости и релаксации давления. Модель включает в себя пять дифференциальных уравнений, одно из которых неконсервативное. Его результирующая скорость звука соответствует той, что у Wood

[7], который выявил немонотонные вариации с объемной долей. Эти две трудности (несохранение и немонотонность) представляют собой серьезные вычислительные задачи. Чтобы обойти их, построена неравновесная по давлению модель из семи уравнений, также с неконсервативными уравнениями, но ее легче решать релаксационным методом [8]. Обе модели представлены ниже. Цель релаксационной модели — получить в конце каждого временного шага уникальные давления для каждой фазы: учитывая численный временной шаг, начиная с механического равновесия, есть время, в течение которого каждая фаза подчиняется собственным уравнениям состояния, ведущим к неравновесному состоянию, и тогда релаксация происходит при получении нового механического равновесия.

Сначала рассмотрены модели диффузионного интерфейса, а затем кратко изложен алгоритм, основанный на PCICE-VF методе, в котором сделаны необходимые изменения, чтобы учесть особенности модели многофазного потока.

4.5.2. Модели диффузионного интерфейса

5.2.1. Модель из пяти уравнений

Модель [3] — это модель нулевого приближения Ваер и Nunziato [4] в пределе жесткой механической релаксации. В контексте двух жидкостей она выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \alpha_1 \cdot \bar{u} = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\rho_1 c_1^2 + \rho_2 c_2^2} \nabla \cdot \bar{u},$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \bar{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 \bar{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) + pI] = 0, \quad (28)$$

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

где α , ρ , \vec{u} , p , $E \left(E = \varepsilon + \frac{1}{2} u^2 \right)$ и ε — соответственно объемная доля, плотность смеси, скорость, давление смеси, полная энергия смеси и внутренняя энергия смеси.

Внутренняя энергия смеси определяется так:

$$\varepsilon = Y_1 \varepsilon_1(p_1, \rho_1) + Y_2 \varepsilon_2(p_2, \rho_2), \quad (29)$$

а массовые доли задаются как $Y_k = \frac{(\alpha \rho)_k}{\rho}$. Плотность смеси определяется по формуле $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$.

Каждая жидкость определяется собственным выпуклым уравнением состояния (EOS) $e_k = e_k(\rho_k, p)$, которое позволяет определить скорость звука фазы $c_k = c_k(\rho_k, p)$.

В частном случае жидкости регулируются EOS усиленного газа:

$$p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k e_k - \gamma_k p_{\infty k}. \quad (30)$$

Резльтирующее EOS смеси

$$p(\rho, \varepsilon, \alpha_1, \alpha_2, Y_1, Y_2) = \frac{\rho \varepsilon - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} - \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}. \quad (31)$$

Эта модель обеспечивает механическое равновесие, она же справедлива для неравновесного теплового потока, что имеет место на поверхности раздела фаз.

5.2.2. Модель из семи уравнений

Модель из семи уравнений мы намерены решить следующим образом:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{\nabla} \alpha_1 \cdot \vec{u} = \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_1 \rho_1 \vec{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_2 \rho_2 \vec{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) I] = 0, \quad (32)$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \varepsilon_1}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_1 \rho_1 \varepsilon_1 \vec{u}) + \alpha_1 p_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -p_1 \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \varepsilon_2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_2 \rho_2 \varepsilon_2 \vec{u}) + \alpha_2 p_2 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = p_1 \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \rho \left(Y_1 \varepsilon_1 + Y_2 \varepsilon_2 + \frac{1}{2} \vec{u}^2 \right)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left[\rho \left(Y_1 \varepsilon_1 + Y_2 \varepsilon_2 + \frac{1}{2} \vec{u}^2 \right) + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 \right] \vec{u} = 0$$

с

$$p_1 = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 Z_2}.$$

Если в модели из семи уравнений давление релаксирует ($\mu \rightarrow \infty$), давления фаз становятся равными друг другу ($p_1 = p_2 = p$), и система уравнений асимптотически стремится к системе из пяти уравнений. Задача заключается в разработке PCICE-VF численной схемы для решения модели из семи уравнений, так как она предоставляет лучшие свойства для конструирования численной схемы [8].

4.5.3. PCICE-VF многофазный солвер

Этап предиктор. Новинкой по сравнению с однофазным потоковым солвером является новый второй подэтап. Запишем решаемые уравнения в следующем виде:

$$\alpha_i^* = \alpha_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((u\alpha_1)_{i+1/2}^n - (u\alpha_1)_{i-1/2}^n - \alpha_i^n (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \right)$$

$$Y_{k_i}^* = Y_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((uY_k)_{i+1/2}^n - (uY_k)_{i-1/2}^n - Y_{k_i}^n (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \right)$$

$$\rho_i^* = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho u)_{i+1/2}^n - (\rho u)_{i-1/2}^n \right), \quad (33)$$

$$(\rho u)_i^* = (\rho u)_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho u^2)_{i+1/2}^n - (\rho u^2)_{i-1/2}^n \right)$$

$$(\alpha \rho e)_{k_i}^* = (\alpha \rho e)_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\alpha \rho e u)_{k_{i+1/2}}^n - (\alpha \rho e u)_{k_{i-1/2}}^n + (\alpha \rho)_{k_i}^n (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \right),$$

$$(\rho E)^* = (\rho E)^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho E u)_{k_{i+1/2}}^n - (\rho E u)_{k_{i-1/2}}^n \right).$$

Уравнения массы для каждой фазы были заменены эволюционными уравнениями для массовых фракций. Важность такой формулировки станет очевидной при построении уравнения Пуассона.

Этап релаксации. Подшаг релаксации даст поправку к внутренней энергии в соответствии со вторым законом термодинамики. Вторая коррекция будет сделана с помощью полной энергии смеси. До этого момента следующая система была следующей:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \bar{\nabla} \alpha_1 \cdot \bar{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_1 \rho_1 \bar{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_2 \rho_2 \bar{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) = 0, \quad (34)$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \varepsilon_1}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_1 \rho_1 \varepsilon_1 \vec{u}) + \alpha_1 p_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \varepsilon_2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_2 \rho_2 \varepsilon_2 \vec{u}) + \alpha_2 p_2 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E \vec{u}) = 0.$$

Из-за дивергенции скоростей в уравнениях массы и энергии происходит нарушение равновесия давления. Релаксации давления, таким образом, необходима и будет определять релаксационное или равновесное давление с соответствующими фазовыми объемными долями и плотностями. Именно это и есть подэтап релаксации давления, к которому мы сейчас переходим. Этот шаг имеет значение для выполнения условий интерфейса в потоке с неоднородными скоростью и давлением. Это также вынуждает решение модели из шести уравнений сходиться к тому, что следует из модели из пяти уравнений.

На шаге релаксации нужно решить:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \varepsilon_1}{\partial t} = -p_1 \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \varepsilon_2}{\partial t} = p_1 \mu (p_1 - p_2),$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} = 0, \tag{35}$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial p E}{\partial t} = 0$$

с $p_1 = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 Z_2}$ в пределе $\mu \rightarrow \infty$.

После некоторых манипуляций внутренние уравнения энергии принимают вид

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} + p_1 \frac{\partial v_1}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial e_2}{\partial t} + p_1 \frac{\partial v_2}{\partial t} = 0,$$

где v_k — фазовые удельные объемы.

Эта система может быть записана в интегральной формулировке:

$$e_k - e_k^0 + \hat{p}_{1k} (v_k - v_k^0) = 0, \text{ где } \hat{p}_{1k} = \frac{1}{v_k - v_k^0} \int_0^{\Delta t} p_1 \frac{\partial v_k}{\partial t} dt.$$

Чтобы определить средние давления \hat{p}_{1k} , начинаем суммирование уравнений внутренней энергии:

$$Y_1 e_1 - Y_1 e_1^0 + Y_2 e_2 - Y_2 e_2^0 + \hat{p}_{11} (Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) + \hat{p}_{12} (Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0) = 0.$$

Уравнение массы смеси может быть записано в виде

$$(Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) + (Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0) = 0.$$

С использованием этих соотношений уравнение энергии смеси принимает вид

$$e - e^0 + (\hat{p}_{11} - \hat{p}_{12})(Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) = 0.$$

Для сохранения энергии смеси необходимо, чтобы $\hat{p}_{11} = \hat{p}_{12} = \hat{p}_l$. Имеют место оценки начального давления $\hat{p}_l = \hat{p}_l^*$ и релаксационного давления $\hat{p}_l = p^R$. Эти оценки совместимы с неравенством энтропии. Что касается выбора той или иной оценки, при вычислении в релаксационном состоянии результирующей разницей в практических расчетах можно пренебречь.

Решаемая система, таким образом, состоит из уравнений

$$e_k(p^R, v_k^R) - e_k^0(p_k^0, v_k^0) + \hat{p}_l (v_{k(k=1,2)}^R - v_k^0) = 0, \quad k = 1, 2,$$

которые включают три неизвестных, v_k^R и p^R .

Его замыкание достигается с помощью ограничения насыщения

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad \text{или} \quad \sum_k (\alpha\rho)_k v_k = 1.$$

Здесь $(\alpha\rho)_k$ являются постоянными в процессе релаксации. Эта система может быть заменена на одно уравнение с одной неизвестной p^R . С помощью EOS энергетические уравнения принимают вид

$$\sum_k (\alpha\rho)_k v_k^R(p^R) = 1. \quad (36)$$

После того как релаксационное давление найдено, определяются удельные фазовые объемы $v_k^R(p^R)$ и объемные доли $\alpha_k^R = (\alpha\rho)_k v_k^R(p^R)$, соответствующие этому релаксационному состоянию давления.

В конце стадии релаксации решаются:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \alpha_1 \cdot \bar{u} &= \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2} \nabla \cdot \bar{u}, \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \bar{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_2 \rho_2 \bar{u}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho \bar{u} \otimes \bar{u})] &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \text{div}(\rho E \bar{u}) &= 0. \end{aligned} \quad (37)$$

И теперь $p_1 = p_2 = p$.

Уравнение Пуассона. Уравнение Пуассона может быть получено аналогично процедуре в случае системы уравнений Эйлера, при этом уравнение состояния смеси изменяется, и мы имеем $p(\rho, \varepsilon, \alpha_1, \alpha_2, Y_1, Y_2)$.

Дифференциальная форма давления:

$$\begin{aligned} dp = & \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right) d\rho + \left(\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon + \left(\frac{\partial p}{\partial \alpha_1} \right) d\alpha_1 + \\ & + \left(\frac{\partial p}{\partial \alpha_2} \right) d\alpha_2 + \left(\frac{\partial p}{\partial Y_1} \right) dY_1 + \left(\frac{\partial p}{\partial Y_2} \right) dY_2. \end{aligned} \quad (38)$$

Массовая доля Y_k будет оставаться постоянной в процессе акустической релаксации. Мы также предполагаем, что на первом этапе объемная доля была перенесена и не требует коррекции, это подразумевает, что правой частью объемной доли можно пренебречь. Соответствующая подмодель может быть также применима для решения интерфейсных проблем [6].

Таким образом, имеем на этом этапе

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right) d\rho + \left(\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (39)$$

В этом случае уравнение Пуассона такое же, что и используемое в однофазном потоковом решателе.

Этап коррекции. Некоторые величины корректируются благодаря давлению смеси на момент времени $n+1$ соответственно:

$$Y_k^{n+1} = Y_k^p, \quad (40)$$

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} (p^{n+1}), \quad (41)$$

$$\rho u^{n+1} = \rho u^* - \Delta t \bar{\nabla} (p^{n+1}). \quad (42)$$

Тогда

$$\rho E^{n+1} = \rho E^* - \Delta t \bar{\nabla} (p u^{n+1}). \quad (43)$$

Исправим объемную долю по следующим параметрам:

$$\alpha_k^{n+1} = \alpha_k^R + \frac{\Delta t}{\Delta x} K^{\text{new}} (u_{i+1/2}^{n+1} - u_{i-1/2}^{n+1}). \quad (44)$$

Каждую фазовую величину можно вывести из отношений (40)—(44) с помощью уравнения состояния.

4.5.4. Резюме двухфазного алгоритма PCIC-VF

Первым идет этап предиктор:

$$\alpha_i^* = \alpha_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((u\alpha_i)_{i+1/2}^n - (u\alpha_i)_{i-1/2}^n - \alpha_i^n (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \right)$$

$$Y_{k_i}^* = Y_{k_i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((uY_k)_{i+1/2}^n - (uY_k)_{i-1/2}^n - Y_{k_i}^n (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \right)$$

$$\rho_i^* = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho u)_{i+1/2}^n - (\rho u)_{i-1/2}^n \right)$$

$$(\rho u)_i^* = (\rho u)_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho u^2)_{i+1/2}^n - (\rho u^2)_{i-1/2}^n \right)$$

$$\begin{aligned} (\alpha \rho e)_{k_i}^* &= (\alpha \rho e)_{k_i}^n - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\alpha \rho e u)_{k_{i+1/2}}^n - (\alpha \rho e u)_{k_{i-1/2}}^n + (\alpha \rho)_{k_i}^n (u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \right) \end{aligned}$$

$$(\rho E)^* = (\rho E)^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\rho E u)_{k_{i+1/2}}^n - (\rho E u)_{k_{i-1/2}}^n \right)$$

Затем выполняется процедура релаксации давления, чтобы получить $p_1 = p_2 = p$.

На следующем этапе решается уравнение Пуассона.

Завершающим этапом является шаг коррекции.

4.5.5. Результаты

В данной работе мы успели получить только результаты для распространения двухфазного интерфейса в едином потоке с постоянной скоростью и постоянным давлением. Решения, представленные в этом разделе, получены без поправки на объемные доли, это означает, что K^{new} термин в (44) устанавливается равным нулю. Шаг по времени, используемый в расчете, равен 1 КФЛ. Проблема моделируется в постановке, как показано на рис. 10.

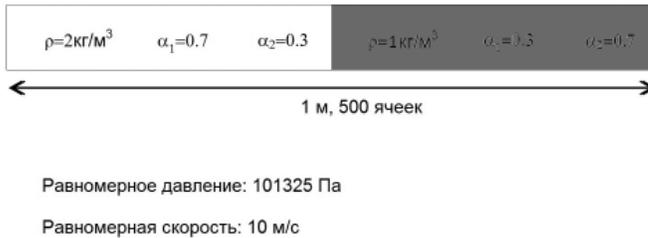


Рис. 10. Распространение материального интерфейса в многофазных потоках

Следует отметить, что интерфейс касается плотности смеси, а также объемной доли. Решения построены на момент времени 1 миллисекунда для плотности смеси (рис. 11) и объемной доли фазы 1 (рис. 12). Решение очень хорошо согласуется с аналитикой.

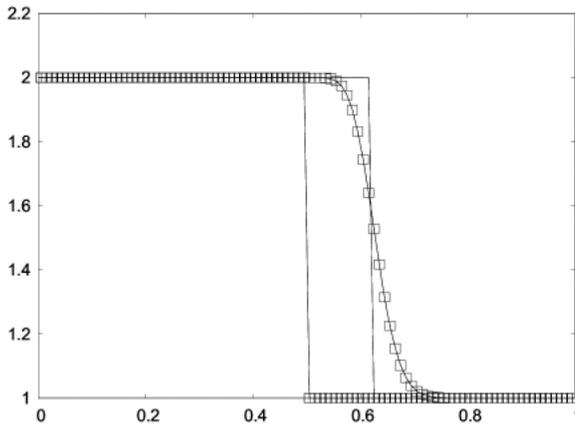


Рис. 11. Плотность смеси в движущемся со скоростью 10 м/с потоке.
Символами показаны численные результаты по сравнению с аналитическим решением

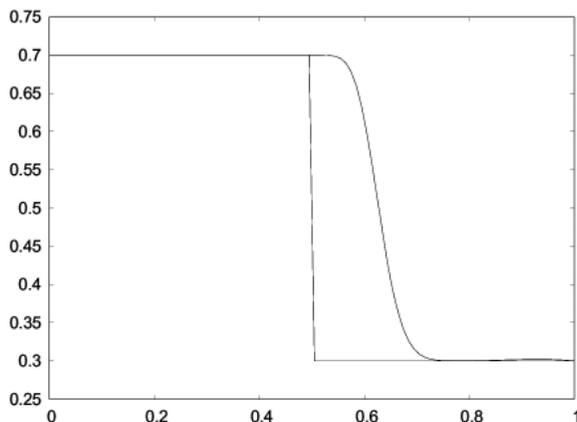


Рис. 12. Динамика объемной доли фазы 1 в случае адвекции

4.6. Заключительные замечания

В этом разделе представлена конечно-объемная версия метода PCICE. По сравнению с оригинальной версией были сделаны некоторые изменения, чтобы получить метод, свободный от осцилляций давления и скорости. Для расширения метода до более высокого порядка в пространстве и времени необходима дополнительная работа. Кроме того, очень большое отношение плотностей на интерфейсах вызывает ограничения временного шага, которые должны быть поняты для того, чтобы улучшить вычислительную эффективность в этих условиях. Некоторые первые результаты представлены в отношении двухфазной модели диффузного интерфейса. Дополнительные усилия необходимы для достижения успеха в тестах на ударных трубах с интерфейсами.

Литература

1. *Berry R. A., Martineau R. C.* Examination of the PCICE method in the nearly incompressible as well as strictly incompressible limits // *J. Power and Energy Systems.* — 2008. — 2. — P. 295. — Included with this Chapter as Appendix A.
2. *Martineau R. C., Berry R. A.* An efficient, semi-implicit pressure based scheme employing a high-resolution FEM for simulating transient Acoustic

and steady, inviscid and viscous, compressible flows on unstructured grids: INL report. — [S. 1.], 2004.

3. *Kapila A. K., Menikoff R., Bdzil J. B. et al.* Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations // *Physics of Fluids*. — 2001. — 13 (10). — P. 3002—3024.

4. *Baer M. R., Nunziato J. W.* A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials // *Inern. J. of Multiphase Flow*. — 1986. — 12 (6). — P. 861.

5. *Saurel R., Petitpas F., Berry R.* Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures // *J. of Computational Physics*. — 2008. — In revision.

6. *Massoni J., Saurel R., Nkonga R., Abgrall R.* Proposition de méthodes et modèles eulériens pour les problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur // *Intern. J. of Heat and Mass Transfer*. — 2002. — Vol. 45, № 6. — P. 1287—1307.

7. *Wood A. B.* A textbook of sound. — [S. 1.]: Bell Eds., 1930.

8. *Saurel R., Petitpas F., Abgrall R.* Modeling phase transition in metastable liquids: Application to cavitating and flashing flows // *J. of Fluid Mechanics*. — 2008. — 607. — P. 313—350.

Приложение 4А. Экспертиза PCICE метода в почти несжимаемых и строго несжимаемых средах, пределы

Консервативная форма основанного на давлении PCICE численного метода [1; 2], недавно разработанная для вычисления переходных течений жидкости на всех скоростях от очень низкой до очень высокой (при сильных ударных волнах), упрощается и обобщается. Хотя метод автоматически обрабатывает непрерывный переход сжимаемости, три различных предельных режима сжимаемости формально определяются для целей обсуждения и сравнения с традиционными методами — строго несжимаемый предел, почти несжимаемый предел и полностью сжимаемый предел. Поведение метода PCICE рассмотрено в каждом предельном режиме. В строго несжимаемом пределе алгоритм PCICE сводится к традиционному методу MAC-типа с дивергенцией скорости, управляемой уравнением Пуассона для давления. В почти несжимаемом пределе алгоритм PCICE удается свести к обобщению традиционных несжимаемых методов, т. е. к тому, в котором не только эффект дивергенции скорости, но и эффект градиента плотности включены в управляющую функцию уравнения Пуассона для давления.

Почти несжимаемому режиму уделялось в прошлом мало внимания, и, по-видимому, строго несжимаемые методы могут быть легко применены к потокам в этом режиме за счет игнорирования потенциально важного механизма сцепления. Это может оказаться существенным во многих важных потоках, например в естественной конвекции потоков в результате высокой плотности теплового потока. В полностью сжимаемом пределе или режиме найден алгоритм, сводящийся к основанным на плотности методам для высокоскоростных потоков.

4А.1. Введение

Однофазные потоки, имеющие практическое значение для нынешних и будущих ядерных реакторов, охватывают широкий спектр скоростей потока и сжимаемости. Изредка они принадлежат исключительно к ограниченным классам строго несжимаемых течений. Большинство потоков в реакторах имеют смешанную природу: существуют области с доминированием почти несжимаемых эффектов, а также области с преобладанием сильно сжимаемых эффектов. С другой стороны, существуют потоки, имеющие переходную природу, где в течение некоторого времени доминируют сжимаемые эффекты, в то время как в остальное время поток почти несжимаем. Для моделирования таких потоков был разработан вариант неявного численного метода Эйлера (ICE) с поправкой давления [3]. Метод был представлен в [1] как метод конечных элементов (PCICE-FEM) для вычисления потоков жидкости при всех скоростях от низкой дозвуковой или почти несжимаемой до большой сверхзвуковой сжимаемой среды.

PCICE является методом предиктор-корректор для аппроксимации решения консервативной формы уравнений Эйлера / Навье — Стокса:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \bar{u} = 0, \quad (4A.1)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau, \quad (4A.2)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \bar{u} h_t = \nabla \cdot (\tau \cdot \bar{u}) + \nabla \cdot k \nabla T + i(T), \quad (4A.3)$$

где ρ , \bar{u} , p и T — соответственно плотность массы жидкости, скорость, давление и температура.

В этих уравнениях τ — сдвиговые напряжения; $e_i = e + \frac{\bar{ii}}{2}$ — общая плотность энергии (e — плотность внутренней энергии); $h_i = \frac{\rho e_i + p}{\rho}$ удельная полная энтальпия; $i(T)$ — источниковый член уравнения, зависящий от температуры. Закон Фурье для теплопроводности предполагает, что k обозначает теплопроводность. Эти уравнения представляют соответственно баланс массы, импульса и полной энергии. Поскольку метод PCICE не ограничивается какими-либо конкретными уравнениями состояния, в данном случае будет использована общая функциональная форма

$$p = f(\rho, e). \quad (4A.4)$$

Следует отметить, во-первых, что, как и в [2], здесь представлено упрощенное, но обобщенное описание метода PCICE независимо от конкретных пространственных дискретизаций и уравнений состояния. Во-вторых, поведение метода PCICE рассматривается в строго несжимаемом пределе, почти несжимаемом пределе ($c\Delta t \gg l$, где c — скорость акустической волны; Δt — время разрешения; l — характерная длина), а также в полной мере сжимаемом пределе ($c\Delta t \ll l$).

4A.2. PCICE алгоритм

Неявный метод Эйлера с поправкой давления для непрерывной жидкости или алгоритм PCICE [1; 2] разработан для всех скоростей сжимаемых и почти несжимаемых течений, улучшает предыдущие основанные на давлении методы с точки зрения точности и численной эффективности и обеспечивает более широкую область применения. Из-за необходимости моделировать течения с ударными волнами важно, чтобы оба основных уравнения и их дискретизованные приближения имели консервативную форму [4; 5]. В отличие от других ICE вариантов, предложенных ранее, большинство которых записаны полностью или частично в естественных переменных, PCICE алгоритм решает консервативную форму основных уравнений.

В [10] разработан полунеявный алгоритм ICE-типа в консервативной формулировке, который объединяет уравнения импульса и энергии аналогично [6]. PCICE алгоритм более неявен и имеет более общую консервативную формулировку, может быть использован при конечно-разностной, конечно-объемной и конечно-элементной пространственной аппроксимации. В PCICE алгоритме уравнение общей энергии достаточно соединить с уравнением Пуассона для давления, чтобы избежать итерации между уравне-

нием Пуассона для давления и уравнением поправки давления. Уравнение Пуассона для давления тогда имеет усредненную по времени информацию о внутренней энергии, что требуется для получения точного неявного давления. В конце шага по времени все консервативные величины сохранения массы, импульса и полной энергии оказываются скорректированными по давлению. В результате не требуется итерационного процесса, как правило, ассоциируемого с основанными на давлении схемами. Этот аспект был признан выгодным при расчете переходных сжимаемых течений, в том числе потоков со значительным выделением энергии, химических реакций и фазовых превращений.

Алгоритм решения PCICE метода, основанного на давлении, состоит из двух дробных шагов. Первый из них заключается в явном предиктор-корректор методе Neup, он применяется без термина градиента давления, присутствующего в уравнении импульса (подход типа проекции). Во втором дробном шаге применяется неявная коррекция давления, т. е. эллиптическое уравнение Пуассона решается при давлении на новом временном шаге, следующим за явной коррекцией с новым давлением. Давление, импульс и плотность в управляющих гидродинамических уравнениях рассматриваются в неявном виде.

Так называемое объединение массы и импульса получается путем подстановки уравнения баланса импульса в уравнение сохранения массы для исключения усредненной по времени плотности импульса (или потока массы) как неизвестного. Скорость изменения плотности в уравнении сохранения массы затем выражена в терминах давления и изменения внутренней энергии посредством использования уравнения состояния. Эти замены приводят к одному эллиптическому дифференциальному уравнению второго порядка с точки зрения давления (уравнению Пуассона для давления). Эта полунеявная формулировка имеет два преимущества по сравнению с явными схемами. Во-первых, акустическая составляющая удаляется из критерия устойчивости размера явного шага по времени, устраняя, таким образом, жесткость времени интегрирования, которая является результатом медленных потоков. Во-вторых, давление, получаемое с полунеявной трактовкой, корректирует обороты для удовлетворения требований сохранения массы. Это позволяет моделировать почти несжимаемые потоки с помощью уравнений сжимаемого газа, которые могут быть использованы для моделирования потоков со скоростями от очень низких до сверхзвуковых, в том числе смешанных потоков со всеми присутствующими скоростями.

Описание алгоритма PCICE (на основе конечно-элементного подхода) было приведено с учетом уравнения состояния идеального газа, но алгоритм может быть реализован в контексте других методов пространственной дискретизации (конечных разностей, конечных объемов, grid-free и т. д.) [2].

4А.3. Временная дискретизация

Алгоритм PCICE является методом предиктор-корректор для решения следующих дискретизированных по времени уравнений баланса (4А.1), (4А.2) и (4А.3) для массы, импульса и энергии соответственно:

$$\rho^{n+1} = \rho^* - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{n+1} + (\rho \bar{u})^n], \quad (4A.5)$$

$$(\rho \bar{u})^{n+1} = (\rho \bar{u})^n - \Delta t \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} [p^{n+1} + p^n], \quad (4A.6)$$

$$(\rho e_t)^{n+1} = (\rho e_t)^n - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u})^{n+1} h_t^{n+1} + (\rho \bar{u})^n h_t^n]. \quad (4A.7)$$

Термин дивергенции в уравнении импульса находится на частично усредненном по времени уровне, полученном с использованием явного двухступенчатого модифицированного метода Хойна, который описан ниже. В оригинальном PCICE-FEM методе [1] был использован эффективный метод Тейлор — Галеркина, однако модифицированный метод Хойна обладает более низкими ошибками фазы вблизи разрывов. Эти уравнения аппроксимируются следующим дробным двухшаговым способом.

4А.3.1. Шаг 1

Первый шаг решает часть уравнений. (4А.5)—(4А.7), с шагом предиктор:

$$\rho^* = \rho^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho \bar{u})^n, \quad (4A.8)$$

$$(\rho \bar{u})^* = (\rho \bar{u})^n - \Delta t \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^n, \quad (4A.9)$$

$$(\rho e_t)^* = (\rho e_t)^n - \Delta t \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u})^n h_t^n, \quad (4A.10)$$

$$\begin{aligned} \bar{u}^* &= \frac{(\rho \bar{u})^*}{\rho^*} \dots e_t^* = \frac{(\rho e_t)^*}{\rho^*} \dots e^* = e_t^* - \frac{\bar{u}^* \cdot \bar{u}^*}{2} \dots p^* = \\ &= f(\rho^*, e^*) \dots h_t^* = \frac{(\rho e_t)^* + p^*}{\rho^*}. \end{aligned} \quad (4A.11)$$

Следующий шаг корректор:

$$\begin{aligned}\rho^{**} &= \rho^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^* + (\rho \bar{u})^n] = \\ &= \rho^* - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^* - (\rho \bar{u})^n],\end{aligned}\quad (4A.12)$$

$$\begin{aligned}(\rho \bar{u})^{**} &= (\rho \bar{u})^n - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^* + (\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^n] = \\ &= (\rho \bar{u})^* - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^* - (\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^n],\end{aligned}\quad (4A.13)$$

$$\begin{aligned}(\rho e_t)^{**} &= (\rho e_t)^n - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u})^* h_t^* + (\rho \bar{u})^n h_t^n] = \\ &= (\rho e_t)^* - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u})^* h_t^* - (\rho \bar{u})^n h_t^n],\end{aligned}\quad (4A.14)$$

$$\begin{aligned}\bar{u}^{**} &= \frac{(\rho \bar{u})^{**}}{\rho^{**}}, \\ e_t^{**} &= \frac{(\rho e_t)^{**}}{\rho^{**}}, \\ e^{**} &= e_t^{**} - \frac{\bar{u}^{**} \cdot \bar{u}^{**}}{2}, \\ p^{**} &= f(\rho^{**}, e^{**}), \\ h_t^{**} &= \frac{(\rho e_t)^{**} + p^{**}}{\rho^{**}}.\end{aligned}\quad (4A.15)$$

Важно, что величины ρ , $(\rho \bar{u})$ и (ρe_t) для предиктор (*) и корректор (**) шагов будут найдены с помощью монотонных алгоритмов высокого порядка, таких как FCT, TVD, ENO и т. д., или что они будут сглажены другим подходящим сглаживателем, например методом переменной диффузии [11], используемым в конечно-элементной версии метода PCICE-FEM [1].

Как и в случае схем проекционного типа, градиент давления не входит в частичные уравнения баланса импульса (4А.9) и (4А.13). Вместо этого он будет включен неявно на следующем шаге. Поэтому шаг по времени, стабильно ограниченный для этого дробного шага, удовлетворяет условию материального Куранта, основанному на скорости звука, или условию Куранта, основанному на скорости потока. Если напряжение сдвига, передача тепла или слагаемые источника энергии включены и трактуются в явном виде, стабильный шаг по времени на основе этих условий может быть слишком строгим. Чтобы получить дополнительную устойчивость при больших временных шагах, такие слагаемые можно рассматривать неявно либо на этом дробном шаге, либо в дополнительных (предыдущих и последующих) дробных шагах.

4А.3.2. Шаг 2

Это дробный шаг стремится решить следующую часть первоначальных дискретных уравнений (4А.5)—(4А.7), чтобы получить давление в новое время.

Импульс:

$$\begin{aligned}(\rho \bar{u})^{n+1} &= (\rho \bar{u})^{**} - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot (p^{n+1} + p^n) = \\ &= (\rho \bar{u})^{**} - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot (p^{n+1} - p^n) - \Delta t \nabla p^n.\end{aligned}\quad (4А.16)$$

Масса:

$$\rho^{n+1} = \rho^{**} - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u})^{n+1} - (\rho \bar{u})^*].\quad (4А.17)$$

Полная энергия:

$$(\rho e_i)^{n+1} = (\rho e_i)^{**} - \frac{\Delta t}{2} \bar{\nabla} \cdot [(\rho \bar{u})^{n+1} h_i^{n+1} - (\rho \bar{u})^* h_i^*].\quad (4А.18)$$

Уравнение (4А.16) требуется для достижения целевой дискретизации и получается путем вычитания уравнения (4А.13) из (4А.6) с использованием

$$(\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^{n+1/2} = \frac{1}{2} [(\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^* + (\rho \bar{u} \otimes \bar{u})^n].$$

Кроме того, уравнение (4А.17) получается путем вычитания уравнения (4А.12) из (4А.5), а уравнение (4А.18) получается вычитанием уравнения (4А.14) из (4А.7).

Решение уравнений (4А.16)—(4А.18) осуществляется в несколько этапов: сначала строится уравнение Пуассона для давления, которое решается, чтобы получить давление на новом временном слое, затем исправляются зависимые переменные с учетом нового давления на новом временном слое.

Уравнение Пуассона для давления построено сперва подстановкой уравнения (4А.16) в уравнение (4А.5):

$$\rho^{n+1} = \rho^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \left[(\rho \bar{u})^{**} - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot (p^{n+1} - p^n) - \Delta t \nabla p^n + (\rho \bar{u})^n \right]$$

или после преобразования

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} - \rho^n = & \frac{\Delta t^2}{4} \nabla \cdot \nabla (p^{n+1} - p^n) + \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \nabla p^n - \\ & - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n]. \end{aligned} \quad (4A.19)$$

Из уравнения состояния (EOS) $p = f(\rho, e)$ можно получить

$$\delta \rho = \frac{1}{\frac{\partial f}{\partial \rho}} \delta p - \frac{\frac{\partial f}{\partial e}}{\frac{\partial f}{\partial \rho}} \delta e,$$

где δ только указывает возмущение или изменение в количестве.

Это приводит к простой аппроксимации

$$\rho^{n+1} - \rho^n \approx \frac{1}{\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)^{**}} (p^{n+1} - p^n) - \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)^{**}}{\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)^{**}} (e^{**} - e^n). \quad (4A.20)$$

Уравнение Пуассона для давления в терминах $\delta p = p^{n+1} - p^n$ получено подстановкой уравнения (4А.20) в уравнение (4А.19):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)^{**}}(p^{n+1} - p^n) - \frac{\Delta t^2}{4} \nabla \cdot \nabla (p^{n+1} - p^n) = \\ & = \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)^{**}}{\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)^{**}}(e^{**} - e^n) - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n] + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \cdot \nabla p^n. \end{aligned} \quad (4A.21)$$

Численное решение этого уравнения с помощью эффективного солвера для решения эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных дает новое распределение давления p^{n+1} .

Другие зависимые переменные обновляются или корректируются с нового временного слоя давлениями в следующем порядке:

Импульс:

$$(\rho \bar{u})^{n+1} = (\rho \bar{u})^{**} - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot (p^{n+1} + p^n). \quad (4A.22)$$

Масса:

$$\rho^{n+1} = \rho^{**} - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{n+1} - (\rho \bar{u})^*]. \quad (4A.23)$$

Полная энергия:

$$h_t^{n+1} = \frac{(\rho e_t)^{**} + p^{n+1}}{\rho^{n+1}}, \quad (4A.24)$$

$$(\rho e_t)^{n+1} = (\rho e_t)^{**} - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{n+1} h_t^{n+1} - (\rho \bar{u})^* h_t^*]. \quad (4A.25)$$

4A.4. Сжимаемые и несжимаемые пределы

Цель заключается в выявлении и изучении разных сжимаемых предельных форм алгоритма PCICE. Поделив уравнение Пуассона для давления (4A.21) на Δt , заметим, что изоэнтропическая скорость звука c задается в виде

$$c^2 = \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial f}{\partial e} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right),$$

и, вводя

$$\frac{1}{\frac{\partial f}{\partial \rho}} = \frac{A}{c^2}, \text{ где } A = \left[1 + \frac{p \left(\frac{\partial f}{\partial e} \right)}{\rho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right)} \right],$$

преобразуем давление уравнение Пуассона к виду

$$\begin{aligned} \frac{A^{**}}{(c^{**})^2} \frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} &= \frac{\Delta t}{4} \nabla^2 p^{n+1} + \frac{A^{**} \left(\frac{\partial f}{\partial e} \right)^{**}}{(c^{**})^2} \frac{e^{**} - e^n}{\Delta t} - \\ &- \frac{1}{2} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n] + \frac{\Delta t}{4} \nabla^2 p^n. \end{aligned} \quad (4A.26)$$

Если уравнение (4A.26) умножается на характерную длину l и характерное время τ_c :

$$\begin{aligned} \tau_c \frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} &= \frac{lc^{**} \Delta t}{4A^{**}} \nabla^2 p^{n+1} + \tau_c \left(\frac{\partial f}{\partial e} \right)^{**} \frac{e^{**} - e^n}{\Delta t} - \\ &- \frac{lc^{**}}{2A^{**}} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n] + \frac{lc^{**} \Delta t}{4A^{**}} \nabla^2 p^n, \end{aligned} \quad (4A.27)$$

то характерное время τ_c аппроксимирует время, которое требуется акустической волне, распространяющейся со скоростью c^{**} на расстояние l , характеризующей часть решения в интересующей нас области и влияющей на изменения решения.

Таким образом, если рассматривается случай, в котором $\tau_c \ll \Delta t$, влияние физических акустических волн на решение незначительно.

Кроме того, характерное время $\tau_u = \frac{1}{|\bar{u}|}$ может быть определено как время, которое приблизительно равно времени, необходимому для решения адвекции на расстояние l .

4А.4.1. Почти несжимаемый предел

В почти несжимаемом пределе $\tau_c \ll \Delta t \ll \tau_u$ или $c^* \Delta t \gg l$, что означает, что $\frac{\tau_c}{\Delta t} \rightarrow 0$ и уравнение Пуассона для давления (4А.27) сводится к виду

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{2}{\Delta t} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n] - \nabla^2 p^n. \quad (4А.28)$$

Очевидно, почти несжимаемый предел также означает $\frac{|\bar{u}|}{c^*} \ll \frac{|\bar{u}| \Delta t}{l} < 1$, или число Маха $M \ll 1$.

4А.4.2. Строго несжимаемый предел

Подставляя градиент из уравнения состояния

$$\nabla p = \frac{1}{\left(\frac{\partial f}{\partial p}\right)} \nabla p - \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)}{\left(\frac{\partial f}{\partial p}\right)} \nabla e = \frac{A}{c^2} \nabla p - \frac{A \left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)}{c^2} \nabla e \quad (4А.29)$$

в расширение третьего члена в правой части уравнения (4А.27), имеем

$$\begin{aligned} & -\frac{lc^{**}}{2A^{**}} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n] = \\ & = -\frac{lc^{**}}{2A^{**}} [\bar{u}^{**} \cdot \nabla \rho^{**} + \rho^{**} (\nabla \cdot \bar{u}^{**}) \bar{u}^n \cdot \nabla \rho^n + \rho^n (\nabla \cdot \bar{u}^n)] = \\ & = -\frac{\tau_c}{2} \bar{u}^{**} \cdot \left[\nabla p^{**} - \left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)^{**} \nabla e^{**} \right] - \frac{lc^{**}}{2A^{**}} \rho^{**} (\nabla \cdot \bar{u}^{**}) - \\ & - \frac{\tau_c^n}{2} \left(\frac{A^n}{A^{**}}\right) \left(\frac{c^{**}}{c^n}\right) \bar{u}^n \cdot \left[\nabla p^n - \left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)^n \nabla e^n \right] - \frac{lc^{**}}{2A^{**}} \rho^n (\nabla \cdot \bar{u}^n). \end{aligned} \quad (4А.30)$$

В строго несжимаемом пределе $\tau_c \rightarrow 0$, $\tau_c^n \rightarrow 0$ (поскольку скорости звука бесконечны), тогда уравнение (4А.30) принимает вид

$$\begin{aligned} & - \lim_{\tau_c \rightarrow 0} \lim_{\tau_c^n \rightarrow 0} \frac{lc^{**}}{A^{**}} \nabla \cdot [(\rho \bar{u})^{**} + (\rho \bar{u})^n] = \\ & = - \frac{lc^{**}}{2A^{**}} [\rho^{**} (\nabla \cdot \bar{u}^{**}) + \rho^n (\nabla \cdot \bar{u}^n)], \end{aligned} \quad (4A.31)$$

и уравнение Пуассона для давления (4A.27) сводится к

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{2}{\Delta t} [\rho^{**} (\nabla \cdot \bar{u}^{**}) + \rho^n (\nabla \cdot \bar{u}^n)] - \nabla^2 p^n. \quad (4A.32)$$

Отметим: $\tau_c \rightarrow 0$, $\tau_c^n \rightarrow 0$ физически означает, что представляющий интерес характерный масштаб длины l очень мал по сравнению со скоростью звука в отличие от рассматриваемого несжимаемого потока, обладающего бесконечной скоростью звука. Если $\nabla \cdot \bar{u}^n = 0$, уравнение (4A.32) можно сравнить непосредственно с соответствующим традиционным MAC-типа уравнением Пуассона для давления [12] без конвективных членов

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho^n \nabla \cdot \bar{u}^{**}}{\Delta t}. \quad (4A.33)$$

В этих двух уравнениях поле давления будет вычисляться в соответствии с требованиями для несжимаемого течения, в котором поле скоростей не-дивергентное.

Это означает, что имеем плотность, частично обновленную по времени, как в уравнении (4A.32), вместо того, чтобы использовать плотность с предыдущего слоя, как в уравнении MAC-типа (4A.33). Кроме того, уравнение Пуассона (4A.28) в почти несжимаемом пределе позволяет дополнительно учитывать значительные градиенты давления, что может быть важно, например, при моделировании естественно-конвективных течений.

Если для строго несжимаемого подхода в примитивных переменных применяется приближение Буссинеска, то единственный способ учесть силы плавучести в уравнении Пуассона для давления — через термин дивергенции скорости в уравнении (4A.32).

При этом сила плавучести получается из уравнения предиктор-корректора для импульса. В отличие от слабо несжимаемого предела воздействием градиента плотности в уравнении Пуассона (4A.28) можно пренебречь.

4А.4.3. Полностью сжимаемый предел

На другом конце спектра для полностью сжимаемых течений ($\tau_u > \tau_c \gg \Delta t$ или $c^{**} \Delta t \ll l$) уравнение Пуассона для давления (4А.27) можно переписать в виде

$$\frac{1}{\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)^{**}} \frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} - \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial e}\right)^{**}}{\left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)^{**}} \frac{e^{**} - e^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\rho \bar{u})^{**}. \quad (4А.34)$$

Комбинация дробного шага 1 с уравнением давления (4А.34) и уравнениями коррекции (4А.22)—(4А.25) представляет собой явный алгоритм предиктор-корректор для полностью сжимаемых течений.

4А.5. Примеры

Приведем здесь три примера моделирования, вычисленные с помощью метода PCICE-FEM в двумерном пространстве по одному для каждого из трех предельных рассмотренных выше классов (режимов): строго несжимаемого, почти несжимаемого и полностью сжимаемого.

Для строго несжимаемого режима используем термически управляемый поток в квадратной полости. Дорожка Кармана за цилиндром будет использоваться в качестве примера, иллюстрирующего почти несжимаемый режим. Для полностью сжимаемого режима моделируем интенсивный сферический взрыв, иногда называемый взрывной волной Седова.

4А.5.1. Пример строгой несжимаемости

Рассматривается естественная конвекция в вертикальной квадратной области в постановке [13]: две адиабатические твердые горизонтальные стенки с условиями прилипания и две вертикальные изотермические стенки с условиями прилипания с температурой 606 К на левой стене и 594 К на правой стенке. На рис. 4А.1 показаны изолинии числа Маха вместе с функциями тока для числа Релея $Ra = 10^6$. Это согласуется с результатами, опубликованными в [13], а также с данными, полученными в предположении строго несжимаемого приближения Буссинеска. Заметим, что если изменить температуру, например 960 К и 240 К, сохраняя значение числа Релея (таким образом, вязкость должна быть повышена), тепловой

поток будет значительно выше и градиенты плотности будут играть более доминирующую роль. Поток будет находиться в пределах примерно несжимаемого режима, и результаты не будут в согласии с результатами, полученными в предположении несжимаемости в приближении Буссинеска. Этот случай также показан в [13].

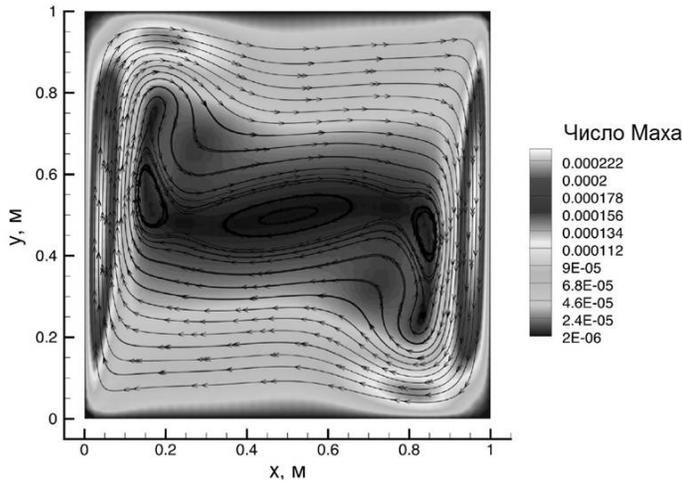


Рис. 4А.1. Термически управляемая полость: число Рейля $Ra = 10^6$,
разница температур на стенке — 12 К

4А.5.2. Пример почти несжимаемости

Общей тестовой проблемой для переходных алгоритмов, использующих несжимаемые уравнения Навье — Стокса, является поперечное обтекание цилиндра при низком числе Рейнольдса. За числом Рейнольдса, равном 40, решение становится неустойчивым, и происходит периодический сброс вихрей, известный как вихревая дорожка Кармана. Эти вихри являются ламинарными для чисел Рейнольдса примерно до 5000. Здесь мы используем сжимаемую всескоростную формулировку PCICE-FEM со свободной скоростью потока, эквивалентной числу Маха $M = 0,05$. Для температуры свободного потока 300 К и давления свободного потока 101 325 Па скорость свободного потока составляет 17,36 м/с. На верхней и нижней стенках устанавливаются условия свободного скольжения. На рис. 4А.2 показано мгновенное вычисленное распределение числа Маха. Соответствующее мгновенное вычисленное распределение температуры на тот же момент показано на рис. 4А.3.

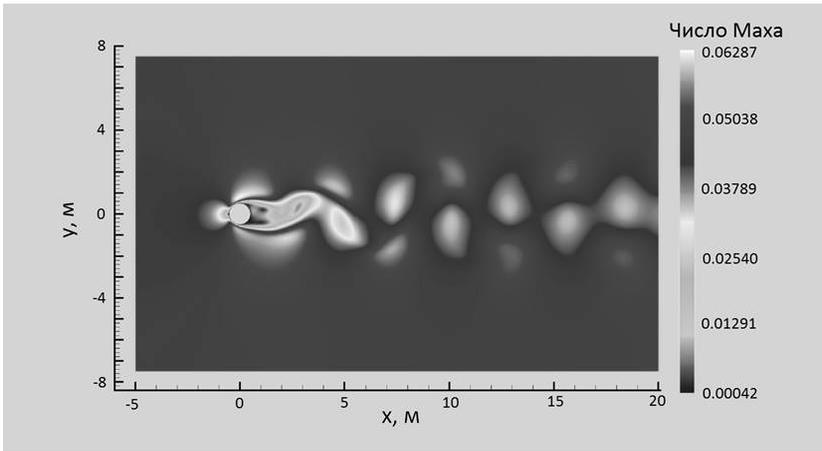


Рис. 4А.2. Вихревая дорожка Кармана. Решение в виде числа Маха, время — 4,0 с

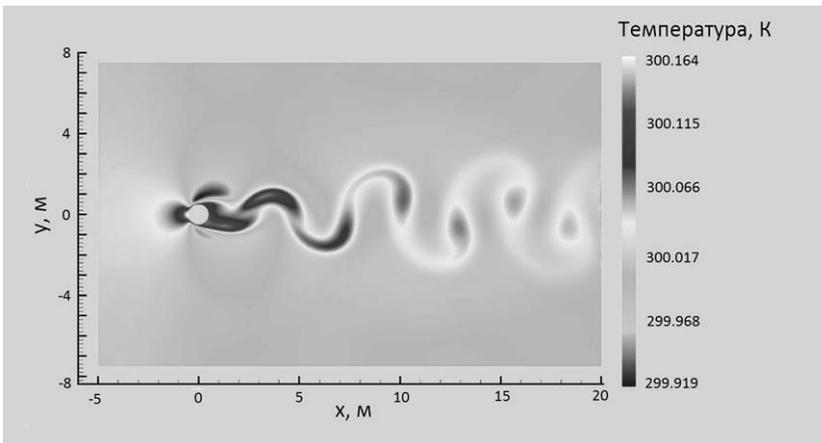


Рис. 4А.3. Вихревая дорожка Кармана.
Решение в виде поля температур, время — 4,0 с

4А.5.3. Пример полной сжимаемости

Проблема взрывной волны Седова [14] характеризуется интенсивным точечным взрывом в однородном идеальном газе, изначально покоящемся, с незначительным начальным давлением и конечной начальной плотностью. Эти результаты моделирования PCICE-FEM методом, полученные с начальными

ми условиями [15], сравниваются с аналитическим решением Седова. Полу-сферическая область радиусом 100 м представлена четвертью круговой области, интегрированной вокруг оси симметрии (оси x). По оценкам энергия взрыва при испытании «Тринити» в июле 1945 г. составляла $7,19 \cdot 10^{13}$ Дж. Чтобы аппроксимировать этот взрыв, $3,595 \cdot 10^{13}$ Дж (половина энергии взрыва для одной половины шара) мгновенно вкладываются в конечный элемент с элементарным расстоянием менее 4,5 м от начала координат. Остаток области находится при атмосферных условиях, где первоначально установлены давление $9,41831 \cdot 10^{10}$ Па и температура $2,62497 \cdot 10^8$ К. Это падение давления от 941,831 до 1 Па на первом шаге по времени. Аналитическое решение Седова для этой энергии взрыва мгновенно вкладывается в начало координат с начальной плотностью $\rho = 1,25 \text{ кг/м}^3$, что приводит к ударной волне на расстоянии 84,57 м от начала координат спустя $8,0 \cdot 10^{-3}$ с после начала взрыва. На рис. 4А.4 показано вычисленное распределение плотности (ρ/ρ_0) в это время, на рис. 4А.5 — сравнение этой плотности и давления с аналитическими решениями Седова вдоль оси координат.

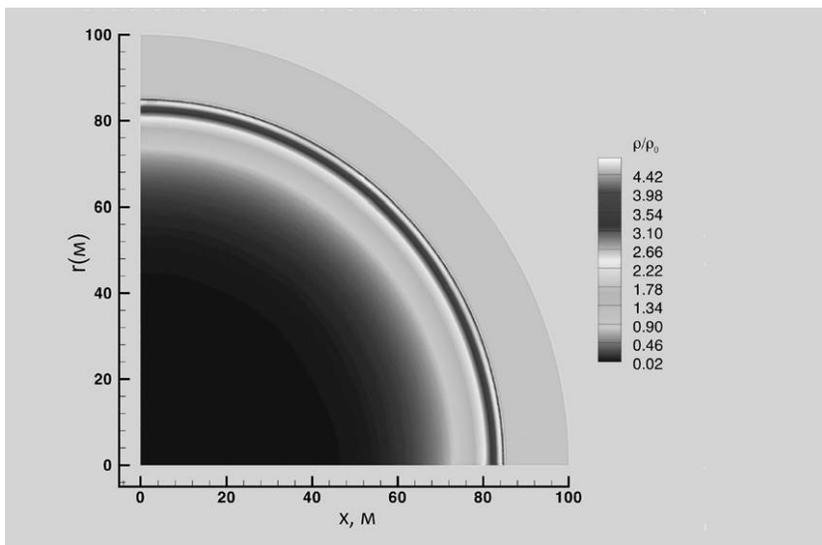


Рис. 4А.4. Расчетная плотность массы для взрывной волны Седова,
время — $8,0 \cdot 10^{-3}$ с

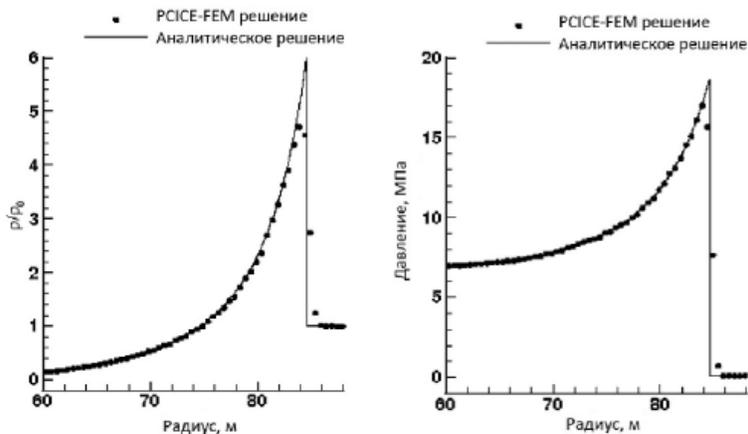


Рис. 4А.5. Расчетная плотность и давление для взрывной волны Седова, сравнение с аналитикой, время — $8,0 \cdot 10^{-3}$ с

4А.6. Выводы

Метод PCICE был сведен к варианту традиционного метода MAC-типа для строго несжимаемых потоков. Тем не менее большинство однофазных потоков, представляющих практический интерес в ядерно-энергетических системах, не попадает в этот узко ограниченный класс. Скорее они могут быть классифицированы как почти несжимаемые или полностью сжимаемые. Для почти несжимаемых течений (например, в естественно-конвективных потоках, где тепловой поток является существенным) предположение о строго несжимаемом потоке в сочетании с приближением Буссинеска физически некорректно.

В отличие от большинства других основанных на давлении методов, которые утверждают допустимость эффекта сжимаемости, метод PCICE формулируется в консервативной форме, так что сверхзвуковые потоки и потоки, содержащие сильные ударные волны, легко можно считать. Был показан способ аппроксимации в консервативной постановке метода PCICE в переменных плотности для полностью сжимаемых течений.

Поскольку метод автоматически трактует непрерывный переход или континуум сжимаемости, можно обрабатывать смешанные потоки с низкой скоростью (и даже несжимаемые) в одной области и с высокой скоростью или ударными волнами в другой.

Литература

1. *Martineau R. C., Berry R. A.* The pressure-corrected ICE finite element method (PCICE-FEM) for compressible flows on unstructured meshes // *J. Comput. Phys.* — 2004. — 198. — P. 659.
9. *Berry R. A.* Notes on the PCICE method: simplification, generalization, and compressibility properties // *J. Comput. Phys.* — 2006. — 215. — P. 6.
10. *Harlow F. H., Amsden A. A.* A numerical fluid dynamics calculation for all flow speeds // *J. Comput. Phys.* — 1971. — 8. — P. 197.
11. *Lax P., Wendroff B.* Systems of conservation laws // *Comm. on Pure and Applied Math.* — 1960. — 13. — P. 217.
12. *Leveque R. J.* Numerical Methods for Conservation Laws. — Basel: Birkhauser Verl., 1990.
13. *Casulli V., Greenspan D.* Pressure method for the numerical solution of transient, compressible fluid flow // *Intern. J. for Num. Meth. in Fluids.* — 1984. — 4. — P. 1001.
14. *Liles D. R., Reed W. H.* Semi-implicit method for two-phase fluid dynamics // *J. Comput. Phys.* — 1978. — 26. — P. 390.
15. *Westbrook C. K.* A generalized ICE method for chemically reactive flows in combustion systems // *J. Comput. Phys.* — 1978. — 28. — P. 67.
16. *Xiao F. et al.* An algorithm for simulating solid objects suspended in stratified flow // *Computer Phys. Comm.* — 1997. — 102. — P. 147.
17. *Patnaik G. et al.* A barely implicit correction for flux-corrected transport // *J. Comput. Phys.* — 1987. — 71. — P. 1.
18. *Swanson R. C., Turkel E.* On central-difference and upwind schemes // *J. Comput. Phys.* — 1992. — 101. — P. 297.
19. *Harlow F. H., Welch J. E.* Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluids with free surface // *Phys. Fluids.* — 1965. — 8. — P. 2182.
20. *Heuveline V.* On higher-order mixed FEM for low Mach number flows: application to a natural convection benchmark problem // *Intern. J. Numer. Meth. Fluids.* — 2003. — 41. — P. 1339.
21. *Sedov L. I.* Similarity and Dimensional Methods in Mechanics. — New York: Academic Press, 1959.
22. *Martineau R. C.* The PCICE-FEM scheme for highly compressible axisymmetric flows // *Computers & Fluids.* — 2007. — 36 (7). — P. 1259—1272.

Глава 5. Математические модели для DNS сжимаемых течений в присутствии капиллярных эффектов и фазовых переходов

5.1. Введение

Данный раздел посвящен модели диффузионного интерфейса, позволяющей моделировать, например, явления роста парового пузыря вследствие фазового перехода. Модель учитывает сжимаемость фаз, эффекты поверхностного натяжения и фазовые переходы.

Консервативная часть многофазной модели получена с использованием принципа стационарного действия Гамильтона. Затем вводятся диссипативные слагаемые, которые согласуются с неравенством энтропии (см. [4; 5]). Модель обобщает капиллярную модель [10] с введением релаксационных слагаемых тепло- и массообмена для описания фазового перехода. Введение релаксационных слагаемых приведено в [15].

Обычно используется несколько основных классов методов для описания интерфейсов, разделяющих жидкости. Одни методы рассматривают интерфейсы как резкие разрывы, другие — как диффузионные области, среди которых: лагранжев подход [3; 7], методы набора уровней [9; 17], методы отслеживания границы [6] и граничные интегральные методы [8].

Исследование диффузионных интерфейсов в сжимаемой жидкости, как правило, основано на теории второго градиента (еще называемой в литературе теорией жидкостей типа Кортвега). Эта теория хорошо работает в непосредственной близости от термодинамической критической точки (в окрестности этой точки), где нет разницы между жидкостью и ее паром. Плотность жидкости рассматривается в качестве параметра порядка, а внутренняя энергия жидкости является функцией плотности и градиента плотности. Значительные усилия в этом направлении сделаны в [1]. Наша цель состоит в том, чтобы изучить интерфейсы вдали от термодинамической

критической точки, т. е. плотность не может рассматриваться в качестве параметра порядка.

5.2. Вариационный принцип

Рассмотрим кинетическое уравнение для резкого интерфейса, заданного уравнением $\phi(t, x) = 0$ и имеющего интерфейсную скорость u_i :

$$\phi_t + u_i \nabla \phi = 0. \quad (1)$$

$\phi(t, x)$ не является непрерывной (функция Хевисайда), но представляет гладкую переходную зону. В этом случае должно быть решено следующее модифицированное уравнение [2; 11; 12]:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \phi_t + u \nabla \phi = 0, \quad (2)$$

где u является продолжением скорости интерфейса u_i за границы раздела.

Теперь можно объединить уравнение (2) с управляющими уравнениями неравновесной сжимаемой смеси. Во-первых, построим бездиссипативную равновесную модель с помощью принципа стационарного действия Гамильтона [4; 5]. Рассмотрим лагранжиан, которой представляет собой разницу между кинетической и потенциальной энергиями смеси:

$$L = \rho \left(\frac{|u|^2}{2} - \varepsilon \right) - \frac{\lambda}{m} |\nabla \phi|^m. \quad (3)$$

Здесь u — скорость (будем использовать односкоростное описание интерфейсов), ρ — плотность смеси, ε — удельная внутренняя энергия смеси:

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2, \quad \varepsilon = y_1 \varepsilon_1 + y_2 \varepsilon_2.$$

Объемные доли α_i и массовые доли y_i определяются по формулам

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1, \quad y_1 + y_2 = 1, \quad y_i = \frac{\alpha_i \rho_i}{\rho} = \alpha_i \rho_i v, \quad v = \frac{1}{\rho}.$$

На каждом этапе проверяется выполнение равенства Гиббса

$$\theta_i d\eta_i = d\varepsilon_i + p_i d\left(\frac{1}{\rho_i}\right),$$

где ρ_i , p_i , ε_i , θ_i , η_i — плотности, давления, удельные энергии, температуры и удельные энтропии каждого компонента.

Параметр капиллярности λ характеризует диффузионный интерфейс. Интерфейс резкий (тонкий), если $m = 1$, и диффузионный (толстый или размазанный), если $1 < m < \infty$. Другими словами, если $m = 1$ и ϕ являются ступенчатой функцией Хевисайда, то интеграл от $|\nabla\phi|^m$ по объему, занимаемому смесью, является общей площадью поверхности раздела фаз, а постоянная λ есть поверхностное натяжение. В случае $1 < m < \infty$ отдельная интерпретация интеграла $|\nabla\phi|^m$ и параметра λ менее очевидна. Только комбинация $\frac{\lambda}{m}|\nabla\phi|^m$ имеет смысл, это объемная капиллярная энергия. Рассмотрим принцип действия Гамильтона, задаваемый выражением

$$a = \int_{t_1}^{t_2} \int_D L dt dD. \quad (4)$$

Принцип Гамильтона означает, что траектории частиц являются стационарными кривыми (4) со следующими ограничениями:

$$\rho_t + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad \eta_{i,t} + u \nabla \eta_i = 0, \quad y_t + u \nabla y = 0, \quad \phi_t + u \nabla \phi = 0. \quad (5)$$

Теперь получим определяющие уравнения путем вычисления первой вариации действий, представленных ограничениями Гамильтона (5). Вариации неизвестных переменных в эйлеровых координатах и в терминах виртуальных перемещений δx определены в [4] следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta \rho &= -\operatorname{div}(\rho \delta x), \quad \delta \eta_i = -\nabla \eta_i \delta x, \quad \delta y_2 = -\nabla y_2 \delta x, \\ \delta u &= \frac{D \delta x}{Dt} - \frac{\partial u}{\partial x} \delta x, \quad \delta \phi = -\nabla \phi \delta x. \end{aligned} \quad (6)$$

В частности, по определению $\delta \phi$ подразумевает:

$$\delta(|\nabla\phi|) = \frac{\nabla\phi \cdot \nabla(\delta\phi)}{|\nabla\phi|},$$

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{|\nabla\phi|^m}{m}\right) &= |\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi \nabla(\delta\phi) = \operatorname{div}(\delta\phi |\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi) - \\ &- \operatorname{div}(|\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi) \delta\phi = \operatorname{div}(\delta\phi |\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi) + \operatorname{div}(|\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi) \nabla\phi \delta x. \end{aligned}$$

Но

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(|\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi) \nabla\phi &= \operatorname{div}(|\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi \otimes \nabla\phi) - \\ &- |\nabla\phi|^{m-2} \phi'' \nabla\phi = \operatorname{div}\left(|\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi \otimes \nabla\phi - \frac{|\nabla\phi|^m}{m} I\right). \end{aligned}$$

Однако

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{|\nabla\phi|^m}{m}\right) &= \operatorname{div}(\delta\phi |\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi) + \\ &+ \operatorname{div}\left(|\nabla\phi|^{m-2} \nabla\phi \otimes \nabla\phi - \frac{|\nabla\phi|^m}{m} I\right) \delta x. \end{aligned} \tag{7}$$

С помощью (6) можем представить (4) как линейный функционал виртуального объема δx :

$$\delta L = \delta\rho \frac{|u|^2}{2} + \rho u \delta u - \delta E = -\operatorname{div}(\rho \delta x) \frac{|u|^2}{2} + \rho u \left(\frac{d\delta x}{dt} - \frac{\partial u}{\partial x} \delta x\right) - \delta E.$$

Это означает:

$$\begin{aligned} \delta L &= \frac{\partial}{\partial t}(\rho u \delta x) + \operatorname{div}\left(\left(\rho u \otimes u - \rho \frac{|u|^2}{2} I\right) \delta x\right) - \\ &- \frac{\partial \rho u}{\partial t} \delta x - \operatorname{div}(\rho u \otimes u) \delta x - \delta E. \end{aligned} \tag{8}$$

Изменение лагранжиана (8) содержит также изменение объемной энергии δE , которая еще не оценивалась.

$$E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\nabla \phi|^m.$$

Термодинамическая энергия объема проверяется на подлинность:

$$d(\rho \varepsilon) = h d\rho + \rho(h_2 - h_1) dy_2 - (p_2 - p_1) d\alpha_2 + \rho \sum_{i=1}^2 y_i \theta_i d\eta_i,$$

где

$$h = \varepsilon + \frac{p}{\rho}, \quad p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2, \quad h_i = \varepsilon_i + \frac{p_i}{\rho_i}.$$

Это тождество можно записать в виде

$$\rho dh = d\rho + (h_2 - h_1) dy_2 - (p_2 - p_1) d\alpha_2 + \rho \sum_{i=1}^2 y_i \theta_i d\eta_i. \quad (9)$$

Наконец, изменение энергии E задается так:

$$\delta E = h \delta \rho + \rho(h_2 - h_1) \delta y_2 - (p_2 - p_1) \delta \alpha_2 + \rho \sum_{i=1}^2 y_i \theta_i \delta \eta_i + \lambda \delta \left(\frac{|\nabla \phi|^m}{m} \right).$$

Поскольку $\delta \alpha_2$ меняется независимо (это не связано с виртуальным перемещением δx), оно имеет равновесное условие

$$p_2 - p_1 = 0. \quad (10)$$

Тогда изменение полной внутренней энергии упрощается:

$$\delta E = -h \operatorname{div}(\rho \delta x) - \rho(h_2 - h_1) \nabla y_2 \delta x - \rho \sum_{i=1}^2 y_i \theta_i \nabla \eta_i \delta x +$$

$$\begin{aligned}
 +\lambda\delta\left(\frac{|\nabla\phi|^m}{m}\right) &= -\operatorname{div}(h\rho\delta x) + \rho\nabla h\delta x - \rho(h_2 - h_1)\nabla y_2\delta x - \\
 &\quad -\rho\sum_{i=1}^2 y_i\theta_i\nabla\eta_i\delta x + \lambda\delta\left(\frac{|\nabla\phi|^m}{m}\right).
 \end{aligned}$$

Используя (9), получим

$$\begin{aligned}
 \delta E &= -\operatorname{div}(h\rho\delta x) + \nabla p\delta x + \lambda\delta\left(\frac{|\nabla\phi|^m}{m}\right) = \\
 &= -\operatorname{div}\left(h\rho\delta x + \lambda|\nabla\phi|^{m-2}\nabla\phi(\nabla\phi\delta x)\right) + \\
 &\quad + \nabla p\delta x + \lambda\operatorname{div}\left(|\nabla\phi|^{m-2}\nabla\phi\otimes\nabla\phi - \frac{|\nabla\phi|^m}{m}I\right)\delta x.
 \end{aligned}$$

Наконец, с учетом (7) вариация Лагранжа будет следующей:

$$\begin{aligned}
 \delta L &= -\left[\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \right. \\
 &\quad \left. + \operatorname{div}\left(\rho u\otimes u + pI + \lambda\left(|\nabla\phi|^{m-2}\nabla\phi\otimes\nabla\phi - \frac{|\nabla\phi|^m}{m}I\right)\right)\right]\delta x + \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial t}(\rho u\delta x) + \\
 &\quad + \operatorname{div}\left(\left(\rho u\otimes u - \rho\frac{|u|^2}{2}I\right)\delta x + h\rho\delta x + \lambda|\nabla\phi|^{m-2}\nabla\phi(\nabla\phi\delta x)\right).
 \end{aligned}$$

Слагаемые $\frac{\partial}{\partial t}(\rho u\delta x)$ и

$$\operatorname{div} \left(\left(\rho u \otimes u - \rho \frac{|u|^2}{2} I \right) \delta x + h p \delta x + \lambda |\nabla \phi|^{m-2} \nabla \phi (\nabla \phi \delta x) \right)$$

линейны по отношению к δx и, следовательно, исчезают после применения теоремы Гаусса — Остроградского или интегрирования по времени, потому что $\delta x|_{\partial D} = 0$ и $\delta x|_{t=t_1} = \delta x|_{t=t_2} = 0$.

Для выполнения условия $\delta L = 0$ для любого δx уравнение импульса должно быть проверено:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u - T) = 0 \quad (11)$$

со следующим симметричным тензором напряжений:

$$T = -pI - \lambda \left(|\nabla \phi|^{m-2} \nabla \phi \otimes \nabla \phi - \frac{|\nabla \phi|^m}{m} I \right), \quad p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 = p_1 = p_2. \quad (12)$$

T может быть представлено в следующей эквивалентной форме:

$$T = - \left(p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m \right) I + \lambda |\nabla \phi|^m \Pi = -pI + |\nabla \phi|^m \Pi.$$

Введем полное давление

$$P = p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m \quad (13)$$

и оператор проекции на поверхности $\phi = \text{const}$ в нормальном направлении

$$\Pi = I - \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \otimes \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}, \quad \Pi = \Pi^2. \quad (14)$$

В случае резких границ ($m = 1$) тензор напряжений имеет вид

$$T = -pI + \lambda |\nabla \phi| \Pi, \quad \Pi = I - \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \otimes \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}.$$

Неконсервативную форму уравнения движения можно получить, используя выражение

$$\nabla(|\nabla\phi|) = \frac{\phi''\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = \frac{\partial w}{\partial x} \frac{w}{|w|} = \left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^T \frac{w}{|w|},$$

потому что

$$\frac{\partial w}{\partial x} - \left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)^T = 0.$$

Тогда будем иметь

$$\begin{aligned} \operatorname{div} T &= -\nabla P + \lambda \operatorname{div} \left(|\nabla\phi|^m \Pi \right) = -\nabla P + \\ &+ \lambda \operatorname{div} \left(|\nabla\phi|^m I - |\nabla\phi|^{m-1} \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \otimes \nabla\phi \right) = -\nabla P + \lambda (m-1) |\nabla\phi|^{m-2} \phi'' \nabla\phi - \\ &- \lambda \operatorname{div} \left(|\nabla\phi|^{m-1} \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \nabla\phi = -\nabla P + \lambda (m-1) |\nabla\phi|^{m-2} \phi'' \nabla\phi - \\ &- \lambda |\nabla\phi|^{m-1} \operatorname{div} \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \nabla\phi - \lambda (m-1) |\nabla\phi|^{m-2} \frac{(\nabla(|\nabla\phi|)\nabla\phi)}{|\nabla\phi|} \nabla\phi = \\ &= -\nabla P - \lambda |\nabla\phi|^{m-1} \operatorname{div} \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \nabla\phi + \\ &+ \lambda (m-1) |\nabla\phi|^{m-2} \left(\phi'' \nabla\phi - \frac{(\nabla(|\nabla\phi|)\nabla\phi)}{|\nabla\phi|} \nabla\phi \right) = \\ &= -\nabla P - \lambda |\nabla\phi|^{m-1} \operatorname{div} \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right) \nabla\phi + \\ &+ \lambda (m-1) |\nabla\phi|^{m-2} \left(\phi'' \nabla\phi - \frac{((\phi''\nabla\phi)\nabla\phi)}{|\nabla\phi|^2} \nabla\phi \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\nabla P - \lambda |\nabla \phi|^{m-1} \operatorname{div} \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \nabla \phi + \\
 &+ \lambda (m-1) |\nabla \phi|^{m-2} \left(I - \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \otimes \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \phi'' \nabla \phi = \\
 &= -\nabla P - \lambda |\nabla \phi|^{m-1} \operatorname{div} \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \nabla \phi + \lambda (m-1) |\nabla \phi|^{m-2} \Pi \phi'' \nabla \phi.
 \end{aligned}$$

Еще одна полезная форма записи уравнения импульса выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u + PI) &= -\lambda |w|^{m-1} \operatorname{div} \left(\frac{w}{|w|} \right) w + \\
 + \lambda (m-1) |w|^{m-2} \Pi \frac{\partial w}{\partial x} w &\equiv \lambda \operatorname{div} \left(|\nabla \phi|^m \Pi \right)
 \end{aligned}$$

Консервативной формой уравнения энергии, следующей из уравнения энтропии, является выражение вида

$$\left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \operatorname{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - Tu \right) = 0, \quad E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\nabla \phi|^m. \quad (15)$$

Еще одной полезной формой записи уравнения энергии является следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 &\left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \operatorname{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) + Pu \right) = \\
 &= \operatorname{div} \left(\lambda |\nabla \phi|^m \Pi \right) u + \lambda |\nabla \phi|^m \operatorname{tr} \left(\Pi \frac{\partial u}{\partial x} \right).
 \end{aligned}$$

Принимая во внимание изоэнтропическое характер движения, условие равновесия (10) можно переписать в виде

$$\frac{D\alpha_2}{Dt} + K \operatorname{div} u = 0, \quad K = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}.$$

Здесь c_i^2 — скорость звука каждой компоненты:

$$c_i^2 = \left. \frac{\partial p_i(\rho_i, \eta_i)}{\partial \rho_i} \right|_{\eta_i = \text{const}}.$$

Система уравнений сжимаемой жидкости с капиллярными эффектами имеет следующий вид:

$$\rho_t + \operatorname{div}(\rho u) = 0,$$

$$y_{2,t} + u \nabla y_2 = 0,$$

$$\phi_t + u \nabla \phi = 0,$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u - T) = 0, \quad T = -PI + \lambda |\nabla \phi|^m \left(I - \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \otimes \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right),$$

$$\alpha_{2,t} + u \nabla \alpha_2 + K \operatorname{div} u = 0, \quad K = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}},$$

$$\eta_{i,t} + u \nabla \eta_i = 0.$$

и к ней добавляется уравнение энергии в виде

$$\left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \operatorname{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - Tu \right) = 0, \quad E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\nabla \phi|^m.$$

Начальные условия для $\nabla \phi$ могут быть взяты такими же, как и для ∇y_2 , параметр порядка ϕ можно отождествить с массовой долей.

Если введем

$$w = \nabla \phi,$$

то, взяв градиент уравнения переноса для ϕ , сможем записать его в виде

$$w_t + \nabla(wu) = 0.$$

Это означает, что уравнение для ϕ может быть исключено и заменено следующим набором уравнений:

$$w_t + \nabla(wu) = 0, \quad \text{rot}(w) = 0.$$

Альтернативная формулировка равновесной модели, описывающей диффузионные интерфейсы:

$$\begin{aligned} \rho_t + \text{div}(\rho u) &= 0, \\ w_t + \nabla(wu) &= 0, \quad \text{rot}(w) = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \text{div}(\rho u \otimes u - T) &= 0, \\ T &= -PI + \lambda |w|^m \Pi, \quad \Pi = I - \frac{w}{|w|} \otimes \frac{w}{|w|}, \\ \alpha_{2,t} + u \nabla \alpha_2 + K \text{div} u &= 0, \quad K = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}}, \\ y_{2,t} + u \nabla y_2 &= 0, \\ \eta_{i,t} + u \nabla \eta_i &= 0. \end{aligned} \tag{16}$$

Эта модель допускает использовать то же самое уравнение энергии:

$$\left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \text{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - Tu \right) = 0, \quad E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\nabla \phi|^m.$$

Данная модель является обобщением модели из [10], в которой объемная доля была взята в качестве параметра порядка, здесь же параметром порядка является массовая фракция.

5.3. Гиперболичность равновесной модели диффузионного интерфейса

Цель настоящего раздела состоит в исследовании гиперболичности модели (16). Рассмотрим одномерный случай, когда ограничение $\text{rot}(w) = 0$ проверяется автоматически. В одномерном случае модель имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{D\rho}{Dt} + \rho u_x = 0, \quad \eta_{ii} + u\eta_{ix} = 0, \quad y_{2t} + uy_{2x} = 0, \quad w_t + (uw)_x = 0, \\ \frac{D\alpha_2}{Dt} + Ku_x = 0, \quad K = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\rho_1 c_1^2 + \rho_2 c_2^2}, \\ \rho \frac{Du}{Dt} + \left(p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m \right)_x = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Систему (17) можно переписать в терминах переменных ρ , u , η_x , y_2 , w и p .

Действительно, имеем

$$\begin{aligned} dp = d(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) = (p_2 - p_1) d\alpha_2 + \alpha_2 c_2^2 d\left(\frac{y_2 \rho}{\alpha_2}\right) + \\ + \alpha_1 c_1^2 d\left(\frac{y_1 \rho}{\alpha_1}\right) + \frac{\partial p_1}{\partial \eta_1} d\eta_1 + \frac{\partial p_2}{\partial \eta_2} d\eta_2 = \alpha_2 y_2 c_2^2 d\left(\frac{\rho}{\alpha_2}\right) + \\ + \alpha_1 y_1 c_1^2 d\left(\frac{\rho}{\alpha_1}\right) = (y_2 c_2^2 + y_1 c_1^2) d\rho + \left(\frac{y_1 c_1^2 \rho}{\alpha_1} - \frac{y_2 c_2^2 \rho}{\alpha_2}\right) d\alpha_2 = \\ = (y_2 c_2^2 + y_1 c_1^2) d\rho + \left(\frac{y_1 c_1^2 \rho}{\alpha_1} - \frac{y_2 c_2^2 \rho}{\alpha_2}\right) \rho d\alpha_2, \end{aligned}$$

но

$$\frac{D\alpha_2}{Dt} - \frac{K}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = 0, \quad K = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\rho_1 c_1^2 + \rho_2 c_2^2}. \quad (18)$$

Учитывая (18), окончательно получим:

$$dp = c_w^2 d\rho,$$

где скорость звука Вуда c_w определяется из соотношения

$$\frac{1}{\rho c_w^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}.$$

Одномерная система имеет вид

$$\begin{aligned} p_t + up_x + c_w^2 u_x &= 0, \\ u_t + uu_x + \frac{p_x}{\rho} + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^{m-1} \operatorname{sgn}(w) w_x &= 0, \\ w_t + uw_x + wu_x &= 0, \\ \alpha_{2t} + u\alpha_{2x} + Ku_x &= 0, \\ y_{2t} + uy_{2x} &= 0, \\ \eta_{it} + u\eta_{ix} &= 0, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \tag{19}$$

Если ввести вектор неизвестных

$$U^T = (p, u, w, \alpha_2, y_2, \eta_1, \eta_2),$$

то можно записать (19) в сжатой форме:

$$U_t + AU_x = 0$$

с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} u & \rho c_w^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/\rho & u & \lambda [(m-1)/\rho] |w|^{m-1} \operatorname{sgn}(w) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}.$$

Собственными значениями матрицы A являются:

$$\mu_{1,2,3,4,5} = u,$$

$$\mu_{6,7} = u \pm \sqrt{c_w^2 + \lambda \frac{m-1}{\rho} |w|^m}.$$

Можно показать, что существует ровно семь независимых собственных векторов для A . Таким образом, система является гиперболической.

5.4. Отношения скачка на разрыве

Система законов сохранения для неизвестных $(\rho, y_2, w = \nabla\phi, u, p, \eta_1, \eta_2)$ может быть переписана в виде

$$\rho_t + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (\rho y_2)_t + \operatorname{div}(\rho y_2 u) = 0,$$

$$w_t + \nabla(wu) = 0,$$

$$\operatorname{rot} w = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u - T) = 0, \quad T = -PI + \lambda |w|^m \Pi,$$

$$\left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \operatorname{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - Tu \right) = 0, \quad E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\nabla\phi|^m.$$

Объемная доля и энтропии связаны посредством выражения

$$p_1 \left(\frac{(1-\alpha_2)(1-c)}{\rho}, \eta_1 \right) = p_2 \left(\frac{\alpha_2 y_2}{\rho}, \eta_2 \right) = p.$$

Отсюда следует, что на разрывах с нормальным вектором n и касательными векторами τ , распространяющихся с нормальной скоростью D_n , имеем

$$\begin{aligned} [\rho(un - D_n)] &= 0, \\ [\rho y_2(un - D_n)] &= 0, \\ [w\tau] = 0, \quad [(wu)n - D_n w] &= 0, \\ [\rho u(un - D_n) - Tn] &= 0, \\ \left[(un - D_n) \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - nTu \right] &= 0. \end{aligned} \tag{20}$$

Мы различаем два типа разрывов: контактные разрывы (или интерфейсы), где $un - D_n = 0$, и ударные волны, где $un - D_n \neq 0$. Кроме того, в дальнейшем всегда будем рассматривать упрощенный случай, когда направление вектора нормали к разрыву совпадает с вектором w :

$$n = \frac{w}{|w|}.$$

В частности,

$$w\tau = 0, \quad w = (wn)n.$$

Мы называем эти разрывы однородными в тангенциальном направлении.

5.4.1. Контактные разрывы

Рассмотрим сначала интерфейсы с $un - D_n = 0$.

Первое соотношение $[w\tau] = 0$ и второе соотношение $[(wu)n - D_n w] = 0$ проверяются автоматически.

Действительно,

$$[wu - D_n wn] = [w((un)n + (u\tau)\tau) - D_n wn] = [(w\tau)(u\tau)] = 0. \quad (21)$$

На поверхности контакта может быть разрыв y_2 и wn . Уравнение импульсов на контактном разрыве дает

$$-[Tn] = [Pn + \lambda (|w|^{m-2} w(wn) - |w|^m n)] = [P]n = 0.$$

Уравнение энергии дает отношение, которое выполняется автоматически:

$$\begin{aligned} -[nTu] &= -[uTn] = \left[u \left(Pn + \lambda (|w|^{m-2} w(wn) - |w|^m n) \right) \right] = \\ &= [(un)P] = 0. \end{aligned}$$

Наконец, отношения на контактном разрыве

$$w\tau = 0, \quad [un] = 0, \quad [P] = 0. \quad (22)$$

Тем не менее априори

$$[y_2] \neq 0, [u\tau] \neq 0, [wn] \neq 0.$$

5.4.2. Компрессионные разрывы (разрывы сжатия)

Рассмотрим отношения Ренкина — Гюгонио для ударных волн, где $un - D_n \neq 0$ при условии $w\tau = 0$

Закон сохранения массы предполагает:

$$\begin{aligned} [\rho(un - D_n)] &= 0, \\ [y_2] &= 0. \end{aligned}$$

Те же представления n могут быть приняты:

$$n = \frac{w}{|w|}.$$

Тогда уравнение импульса эквивалентно

$$[\rho u(un - D_n) + Pn] = 0.$$

Это дает два соотношения

$$[\rho(un - D_n)^2 + P] = 0, [u\tau] = 0.$$

Тогда уравнение для w

$$\begin{aligned} [wu - D_n wn] &= [w((un)n + (u\tau)\tau) - D_n wn] = \\ &= [(wn)((un) - D_n) + (w\tau)(u\tau)] = \left[\frac{(wn)}{\rho} \rho((un) - D_n) \right]. \end{aligned}$$

Предположим, что

$$\left[\frac{(wn)}{\rho} \right] = 0 \text{ или } \left[\frac{|w|}{\rho} \right] = 0.$$

Наконец, уравнение энергии

$$\left[(un - D_n) \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) + nTu \right] = 0$$

может быть преобразовано в

$$\begin{aligned} & \left[\left(E + p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m \right) / \rho + \frac{(un - D_n)^2}{2} \right] = \\ & = \left[\frac{E}{\rho} + \frac{P}{\rho} + \frac{(un - D_n)^2}{\rho} \right] = 0, \\ & E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\nabla \phi|^m, \quad P = p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m. \end{aligned}$$

Подводя итог, отметим, что ударные отношения в случае $ut = 0$ суть

$$\begin{aligned} & [\rho(un - D_n)] = 0, \quad [y_2] = 0, \\ & [u\tau] = 0, \quad \left[\frac{(wn)}{\rho} \right] = 0, \\ & [\rho(un - D_n)^2 + P] = 0, \\ & \left[\frac{E}{\rho} + \frac{P}{\rho} + \frac{(un - D_n)^2}{\rho} \right] = 0. \end{aligned} \tag{23}$$

Введем поток массы через ударную поверхность (поверхность ударной волны)

$$q = \rho(un - D_n).$$

Пусть индекс «₀» означает состояние перед фронтом. Тогда получим обобщенное уравнение линии Рэлея

$$P - P_0 + q^2 (v - v_0) = 0$$

и обобщенное уравнение кривой Гюгионо

$$\frac{E}{\rho} - \frac{E_0}{\rho_0} + \frac{1}{2}(P + P_0)(v - v_0) = 0$$

или, что то же самое,

$$\varepsilon + \frac{\lambda v}{m}|w|^m - \varepsilon_0 - \frac{\lambda v_0}{m}|w_0|^m + \frac{1}{2}(P + P_0)(v - v_0) = 0.$$

Случай резких границ ($m = 1$).

Как следует из (13), в случае резких границ соотношение Ренкина — Гюгионо для ударных волн таково:

$$p - p_0 + q^2(v - v_0) = 0,$$

$$\varepsilon - \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(v - v_0) = 0,$$

потому что

$$P = p, \quad v|w| = v|wn| = v_0|w_0n| = v_0|w_0|.$$

Общий случай ($m > 1$).

В общем случае имеем следующие выражения:

$$P - P_0 + q^2(v - v_0) = 0,$$

$$P = p + \lambda \frac{m-1}{m}|w|^m = p + \lambda \frac{m-1}{m} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^m |w_0|^m,$$

и обобщенное уравнение кривой Гюгионо имеет вид

$$\varepsilon - \varepsilon_0 + \frac{\lambda |w_0|^m}{m} v \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^m - \frac{\rho}{\rho_0} \right) + \frac{1}{2}(P + P_0)(v - v_0) = 0.$$

В обоих случаях необходимо еще одно соотношение, чтобы определить объемную фракцию после ударной волны.

5.4.3. Принцип аддитивности

Как упоминалось выше, есть еще одно соотношение для определения скачка объемной фракции. Эта проблема хорошо известна в механике гетерогенной смеси, и ее решение дается через «принцип аддитивности», который был реализован в основном российскими экспериментаторами Альштулером, Дреминым и Карлухиным (см. [14], где этот принцип обсуждается и предлагается его обоснование). Этот принцип гласит, что в многофазном фронте ударной волны (который на самом деле дисперсный) каждый материал имеет свой собственный Гюгиони. Этот принцип был проверен экспериментально на большом масштабе давлений и плотностей. Обобщим принцип аддитивности в рассматриваемом случае:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i - \varepsilon_{i0} + \frac{\lambda |w_0|^m v_i}{m} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^m - \frac{\rho}{\rho_0} \right) + \\ + \frac{1}{2} (P + P_0) (v_i - v_{i0}) = 0, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (24)$$

Суммируя (24), умноженное на y_i , получаем сохранение полной энергии. В случае резких границ ($m=1$) это в точности соответствует классическому принципу аддитивности (см. [14]).

Если взять компоненты внутренней энергии в виде

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i(v_i, p) = \varepsilon_i \left(v_i, P - \lambda \frac{m-1}{m} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^m |w_0|^m \right),$$

можно найти неявно из (24)

$$v_i = v_i(P, v).$$

Тогда можно определить кривую Гюгиони v в зависимости от P из неявного уравнения

$$v = y_1 v_1(P, v) + y_2 v_2(P, v).$$

5.5. Механическая релаксация

Модель механического равновесия имеет ряд недостатков, которые обсуждаются в [16]. Основной недостаток связан с тем, что равновесная скорость звука не является монотонной функцией по отношению к объемной доле. Другой вопрос связан с неконсервативным уравнением объемной доли, что вызывает трудности сохранения положительности, когда волны разрежения или сжатия присутствуют на интерфейсах, поэтому предпочтительно использовать неравновесную модель давления. Неравновесные модели давления кажутся более сложными, но использование стратегии расщепления операторов упрощает их численное решение.

Соответствующая неравновесная модель имеет вид

$$\begin{aligned}
 \rho_t + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \quad (\rho y_2)_t + \operatorname{div}(\rho y_2 u) = 0, \\
 w_t + \nabla(wu) &= 0, \\
 \operatorname{rot} w &= 0, \\
 \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u - T) &= 0, \\
 T &= -PI + \lambda |w|^m \Pi = -\left(p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m\right) I + \\
 &+ \lambda |w|^m \left(I - \frac{w}{|w|} \otimes \frac{w}{|w|}\right), \\
 \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E\right)_t + \operatorname{div}\left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E\right) - Tu\right) &= 0, \quad E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |w|^m, \\
 \frac{D\alpha_2}{Dt} &= \mu (p_2 - p_1).
 \end{aligned} \tag{25}$$

Начальные условия для w должны быть согласованы с условиями для ∇y_2 :

$$w|_{t=0} = \nabla y_2|_{t=0}.$$

Это означает, что для любого момента времени

$$w = \nabla y_2.$$

Замыкать систему (25) необходимо дополнительным уравнением энергии или энтропии, которое должно быть заранее определено. Заметим, что уравнение энергии может быть преобразовано к виду

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} + p \operatorname{div}(u) + \frac{\lambda}{m} \left(\left(|w|^m \right)_t + \operatorname{div} \left(u |w|^m \right) \right) + \lambda \operatorname{tr} \left(\left(|w|^{m-2} w \otimes w - \frac{|w|^m}{m} I \right) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0.$$

Но

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \left(\left(|w|^m \right)_t + \operatorname{div} \left(u |w|^m \right) \right) + \operatorname{tr} \left(\left(|w|^{m-2} w \otimes w - \frac{|w|^m}{m} I \right) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \\ & = |w|^{m-2} w w_t + |w|^{m-2} u \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T w + |w|^{m-2} w \frac{\partial u}{\partial x} w = \\ & = |w|^{m-2} \left(w w_t + u \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T w + w \frac{\partial u}{\partial x} w \right) = 0, \end{aligned}$$

потому что

$$\left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T - \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right) = 0.$$

Следовательно,

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} + p \operatorname{div}(u) = 0,$$

но

$$\begin{aligned} d\varepsilon &= y_1 d\varepsilon_1 + y_2 d\varepsilon_2 = y_1 (\theta_1 d\eta_1 - p_1 dv_1) + y_2 (\theta_2 d\eta_2 - p_2 dv_2) = \\ &= y_1 \theta_1 d\eta_1 + y_2 \theta_2 d\eta_2 - p_1 d(y_1 v_1) - p_2 d(y_2 v_2) = \\ &= y_1 \theta_1 d\eta_1 + y_2 \theta_2 d\eta_2 - p dv + (p_1 - p_2) v d\alpha_2. \end{aligned}$$

Таким образом, выражение эквивалентно

$$\rho \left(y_1 \theta_1 \frac{D\eta_1}{Dt} + y_2 \theta_2 \frac{D\eta_2}{Dt} \right) = (p_2 - p_1) \frac{D\alpha_2}{Dt} = \mu (p_2 - p_1)^2 \geq 0. \quad (26)$$

Уравнения для энтропии каждой компонент могут быть записаны (для произвольного p_i) в виде

$$\rho y_1 \theta_1 \frac{D\eta_1}{Dt} = (p_1 - p_i) \frac{D\alpha_1}{Dt}, \quad \rho y_2 \theta_2 \frac{D\eta_2}{Dt} = (p_2 - p_i) \frac{D\alpha_2}{Dt}.$$

Суммируя их, получаем (26). Следующее определение p_i предлагается в [13]:

$$p_i = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2},$$

где Z_i — акустические импедансы.

Тогда, полагая

$$p_1 - p_i = \frac{Z_1 (p_1 - p_2)}{Z_1 + Z_2}, \quad p_2 - p_i = \frac{Z_2 (p_2 - p_1)}{Z_1 + Z_2},$$

получим

$$\rho y_1 \theta_1 \frac{D\eta_1}{Dt} = \frac{\mu Z_1}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2,$$

$$\rho y_2 \theta_2 \frac{D\eta_2}{Dt} = \frac{\mu Z_2}{Z_1 + Z_2} (p_2 - p_1)^2.$$

Эти два уравнения позволяют достичь замыкания системы (25). При этом неравенство энтропии выполняется:

$$\rho \left(y_1 \frac{D\eta_1}{Dt} + y_2 \frac{D\eta_2}{Dt} \right) = \frac{\mu}{Z_1 + Z_2} \left(\frac{Z_1}{\theta_1} + \frac{Z_2}{\theta_2} \right) (p_2 - p_1)^2 \geq 0.$$

Гиперболичность неравновесной модели. Как и в случае равновесной модели давления, достаточно изучить одномерный случай.

Система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}
 p_t + (up)_x &= 0, \\
 u_t + uu_x + \frac{p_x}{\rho} + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^{m-1} \operatorname{sgn}(w) w_x &= 0, \\
 w_t + uw_x + wu_x &= 0, \\
 \alpha_{2t} + u\alpha_{2x} &= \mu(p_2 - p_1), \\
 y_{2t} + uy_{2x} &= 0, \\
 \eta_{it} + u\eta_{ix} &= 0, \quad i = 1, 2.
 \end{aligned} \tag{27}$$

Вводя вектор неизвестных

$$V^T = (\rho, u, w, \alpha_2, y_2, \eta_1, \eta_2)$$

и принимая во внимание соотношения

$$y_1 d\varepsilon_1 + y_2 d\varepsilon_2 = y_1 (\theta_1 d\eta_1 - p_1 dv_1) + y_2 (\theta_2 d_2 - p_2 dv_2),$$

$$p_x = (y_1 c_1^2 + y_2 c_2^2) p_x + (p_2 - p_1 + \rho_1 c_1^2 - \rho_2 c_2^2) \alpha_{2x} + (c_2^2 - c_1^2) y_{2x},$$

представим (27) в матричной форме:

$$V_t + BV_x = 0,$$

$$B = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_{21} & u & B_{23} & B_{24} & B_{25} & 0 & 0 \\ 0 & w & u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix},$$

$$B_{21} = (y_1 c_1^2 + y_2 c_2^2) / \rho,$$

$$B_{23} = \lambda \left[(m-1)/\rho \right] |w|^{m-1} \operatorname{sgn}(w),$$

$$B_{24} = (p_2 - p_1 + \rho_1 c_1^2 - \rho_2 c_2^2) / \rho,$$

$$B_{25} = c_2^2 - c_1^2.$$

Система является гиперболической с собственными значениями матрицы B , определяемыми по формулам

$$\mu_{1,2,3,4,5} = u,$$

$$\mu_{6,7} = u \pm \sqrt{c_f^2 + \lambda \frac{m-1}{\rho} |w|^m},$$

где $c_f^2 = y_1 c_1^2 + y_2 c_2^2$ является замороженной скоростью звука.

Скорость звука характеризует монотонное поведение относительно массы и объемной фракции. Это облегчает численное решение [16]. Солвер Рима-на может быть построен аналогичным способом. Соответствующие ударные отношения учитывают сохранение объемной доли.

5.6. Результаты расчетов

Для иллюстрации возможностей метода в трактовке капиллярных течений предложены два тестовых случая. Осциллирующая квадратная капля представлена, чтобы продемонстрировать влияние поверхностного натяжения. Затем представлено взаимодействие между двумя каплями, чтобы показать, что метод способен справиться с исчезновением и возникновением интерфейса. Фазовый переход не рассматривается. В обоих тестах жидкость находится под управлением уравнения состояния stiffened газа (загущенного газа) с параметрами $\gamma_{\text{liq}} = 2,1$ и $p_{\infty, \text{liq}} = 10^7$ Па. Окружающий воздух регулируется уравнением состояния идеального газа с политропной экспонентой $\gamma_{\text{air}} = 1,4$.

5.6.1. Осциллирующие капли

Рассмотрим квадратную каплю жидкости, помещенную в воздухе. Первоначально в расчетной области давление устанавливается равным 1 атм. Используется сетка 100×100 ячеек. Исходная форма капли приведена на рис. 1.

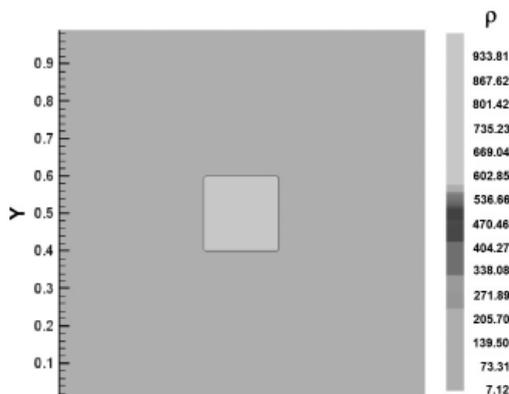


Рис. 1. Начальное условие для квадратной капли

Под влиянием эффектов поверхностного натяжения при $\lambda = 1000$ Н/м капля имеет тенденцию к снижению поверхностной энергии, что подразумевает ее колебания до равновесного состояния. На рис. 2 показаны результаты колебания капли вследствие эффектов поверхностного натяжения в разные моменты времени.

В устойчивом состоянии капля имеет практически круглую форму с радиусом 0,11 м при среднем давлении 8600 Па, что находится в согласии с законом Лапласа, прогнозирующим скачок давления 9090 Па. Ошибка в скачке давления не превышает 6%.

5.6.2. Влияние капли

В данном разделе представлено столкновение двух капель жидкости (рис. 3а), которые двигаются с относительной скоростью 10 м/с. Коэффициент поверхностного натяжения принимается равным 850 Н/м. Используется сетка 150×150 ячеек. Две капли сперва сливаются (рис. 3б).

Затем интенсивность воздействия индуцирует фазу расширения (рис. 3в). Во время этого расширения капля распадается (рис. 3г), и появляются две новых капли (рис. 3д). Затем капли колеблются, чтобы восстановить круглую форму (рис. 3е).

5.6.3. Моделирование фазовых переходов

В данном разделе рассматриваются одновременно два явления — релаксация и фазовый переход. На первом шаге происходит релаксация. Когда механическое равновесие достигается:

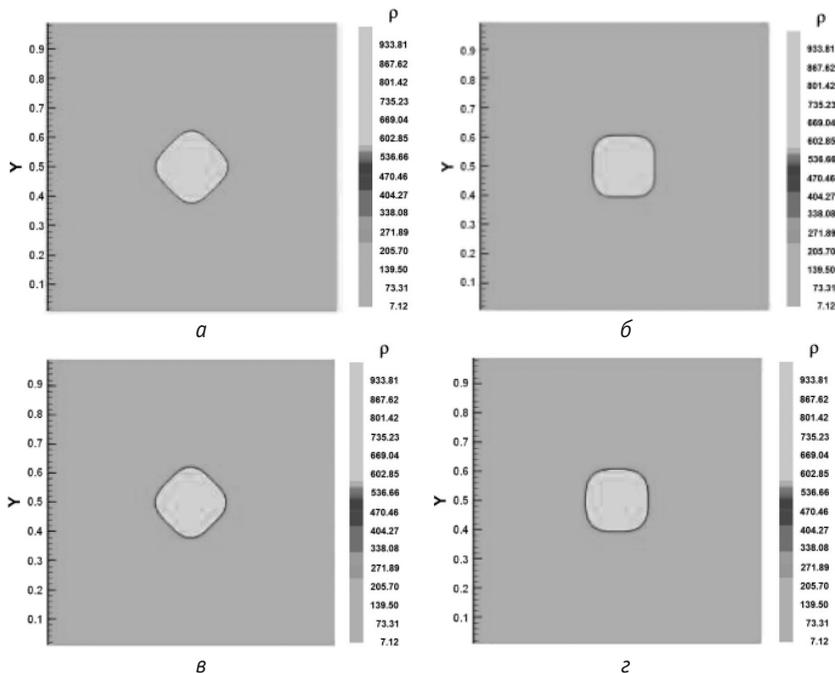


Рис. 2. Колебание капли из-за эффектов поверхностного натяжения. Результаты показаны в моменты $t_1 = 15$ мс, $t_2 = 34$ мс, $t_3 = 53$ мс и $t_4 = 72$ мс

$$p_1(\rho_1, \eta_1) = p_2(\rho_2, \eta_2),$$

происходит фазовый переход. Первый шаг был описан выше (от релаксации к равновесию), нужно только описать второй шаг.

Возьмем уравнение массы в виде [15]

$$\frac{\partial(\rho y_k)}{\partial t} + \text{div}(\rho y_k u) = \frac{Dy_k}{Dt} = \rho \dot{y}_k. \quad (28)$$

Градиент w получим из уравнения

$$w_t + \nabla(wu) = 0.$$

Начальное условие для w может быть согласовано с тем же для ∇y_2 при

$$t = 0:$$

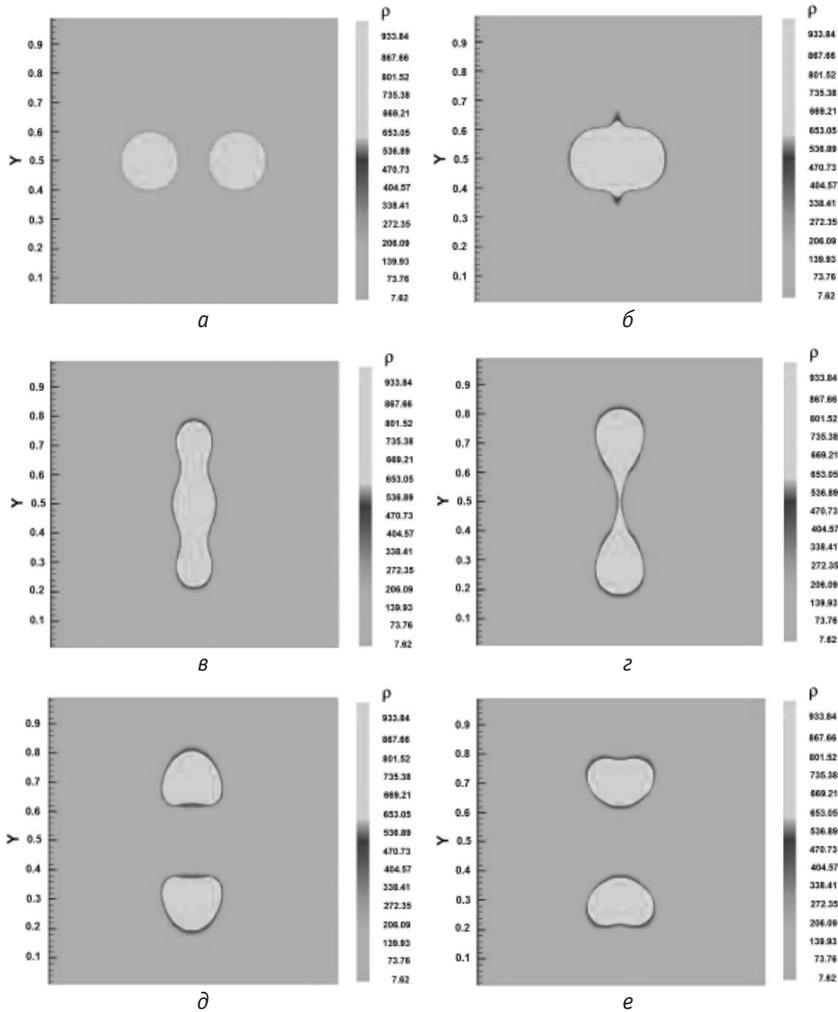


Рис. 3. Влияние двух капель, движущихся с относительной скоростью 10 м/с. Результаты показаны на моменты времени $t_0 = 0$ мс, $t_1 = 21$ мс, $t_2 = 52$ мс, $t_3 = 98$ мс, $t_4 = 120$ мс и $t_5 = 155$ мс

$$w|_{t=0} = \nabla y_2|_{t=0}.$$

Однако это не гарантирует, что в течение любого времени

$$w = \nabla y_2.$$

Когда слагаемые массопереноса добавляются в уравнение (28), следующим шагом необходимо определить перенос объемной доли связанной с этим процессом. Слагаемые определяются на основе анализа произведения энтропии в каждой фазе и в смеси. Для определения уравнения энтропии, должен быть сделан следующий анализ.

Уравнение энергии

$$\left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \operatorname{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - Tu \right) = 0$$

может быть преобразовано к виду

$$\begin{aligned} \rho \frac{D\varepsilon}{Dt} + p \operatorname{div}(u) + \frac{\lambda}{m} \left((|w|^m)_t + \operatorname{div}(u|w|^m) \right) + \\ + \lambda \operatorname{tr} \left(\left(|w|^{m-2} w \otimes w - \frac{|w|^m}{m} I \right) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0. \end{aligned}$$

Но

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \left((|w|^m)_t + \operatorname{div}(u|w|^m) \right) + \operatorname{tr} \left(\left(|w|^{m-2} w \otimes w - \frac{|w|^m}{m} I \right) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \\ = |w|^{m-2} w w_t + |w|^{m-2} u \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T w + |w|^{m-2} w \frac{\partial u}{\partial x} w = \\ = |w|^{m-2} \left(w w_t + u \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T w + w \frac{\partial u}{\partial x} w \right) = \\ = |w|^{m-2} \left(w w_t + u \left(\left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T - \frac{\partial w}{\partial x} \right) w + u \frac{\partial w}{\partial x} w + w \frac{\partial u}{\partial x} w \right) = 0. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} + p \operatorname{div}(u) = 0.$$

Поскольку

$$d\varepsilon = y_1 \theta_1 d\eta_1 + y_2 \theta_2 d\eta_2 - p dv + (h_2 - h_1) dy_2,$$

уравнение энергии эквивалентно следующему:

$$y_1 \theta_1 \frac{D\eta_1}{Dt} + y_2 \theta_2 \frac{D\eta_2}{Dt} + (h_1 - h_2) \dot{y}_1 = 0, \quad (29)$$

взяв материальную производную равновесного условия для давления, получаем

$$\frac{Dp_1(\chi_1, \eta_1)}{Dt} - \frac{Dp_2(\chi_2, \eta_2)}{Dt} = 0, \quad \chi_1 = \frac{\rho y_1}{\alpha_1}; \quad \chi_2 = \frac{\rho y_2}{\alpha_2}.$$

Это эквивалентно

$$\begin{aligned} c_1^2 \left(\frac{\rho}{\alpha_1} \frac{Dy_1}{Dt} + \frac{y_1}{\alpha_1} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\rho y_1}{\alpha_1^2} \frac{D\alpha_1}{Dt} \right) + \rho_1 \theta_1 \Gamma_1 \frac{D\eta_1}{Dt} = \\ = c_2^2 \left(\frac{\rho}{\alpha_2} \frac{Dy_2}{Dt} + \frac{y_2}{\alpha_2} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\rho y_2}{\alpha_2^2} \frac{D\alpha_2}{Dt} \right) + \rho_2 \theta_2 \Gamma_2 \frac{D\eta_2}{Dt}. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь Γ_i — коэффициенты Грюнайзена

$$\Gamma_i = \frac{1}{\rho_i \theta_i} \frac{\partial p_i}{\partial \eta_i}.$$

Решив уравнения (29) и (30), окончательно получаем

$$\begin{aligned} \rho y_1 y_2 \theta_1 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{D\eta_1}{Dt} = y_2 \left(c_2^2 \left(\frac{\rho}{\alpha_2} \frac{Dy_2}{Dt} + \frac{y_2}{\alpha_2} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\rho y_2}{\alpha_2^2} \frac{D\alpha_2}{Dt} \right) - \right. \\ \left. - c_1^2 \left(\frac{\rho}{\alpha_1} \frac{Dy_1}{Dt} + \frac{y_1}{\alpha_1} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\rho y_1}{\alpha_1^2} \frac{D\alpha_1}{Dt} \right) \right) - \rho_2 \Gamma_2 (h_1 - h_2) \dot{y}_1, \end{aligned}$$

$$\rho y_1 y_2 \theta_2 \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) \frac{D\eta_2}{Dt} = -y_1 \left(c_2^2 \left(\frac{\rho}{\alpha_2} \frac{Dy_2}{Dt} + \frac{y_2}{\alpha_2} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\rho y_2}{\alpha_2^2} \frac{D\alpha_2}{Dt} \right) - \right. \\ \left. - c_1^2 \left(\frac{\rho}{\alpha_1} \frac{Dy_1}{Dt} + \frac{y_1}{\alpha_1} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\rho y_1}{\alpha_1^2} \frac{D\alpha_1}{Dt} \right) \right) - \rho_1 \Gamma_1 (h_1 - h_2) \dot{y}_1.$$

Принимая уравнение объемной фракции в виде

$$\frac{D\alpha_1}{Dt} = K \operatorname{div}(u) + \left[\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) / \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \right] Q_1 + \frac{\rho}{\rho_l} \dot{y}_1,$$

где

$$K = (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) / \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right), \quad Q_1 = H(\theta_2 - \theta_1), \quad Y = \operatorname{const}, \\ \rho_l = \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) / \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right),$$

$$\dot{y}_1 = v(\bar{g}_2 - \bar{g}_1), \quad \bar{g}_i = h_i - \bar{\theta} \eta_i, \quad \bar{\theta} = \frac{\theta_1 \theta_2}{\theta_l},$$

$$\theta_l = \left(\frac{\Gamma_1 \theta_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2 \theta_2}{\alpha_2} \right) / \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right),$$

получаем основные уравнения в форме, приведенной в [15]. После каждого шага вычислений нужно повторно инициализировать начальные условия для w , принимая во внимание, что

$$w = \nabla y_2.$$

Полная система уравнений, описывающих равновесные фазовые переходы, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(\rho y_k)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho y_k u) = \rho \dot{y}_k, \\
 & w_i + \nabla(wu) = 0, \\
 & \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u - T) = 0, \\
 & T = -PI + \lambda |w|^m \Pi = -\left(p + \lambda \frac{m-1}{m} |w|^m\right) I + \\
 & + \lambda |w|^m \left(I - \frac{w}{|w|} \otimes \frac{w}{|w|} \right), \\
 & \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right)_t + \operatorname{div} \left(u \left(\rho \frac{|u|^2}{2} + E \right) - Tu \right) = 0, \quad E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |w|^m,
 \end{aligned} \tag{31}$$

$$\frac{D\alpha_1}{Dt} = K \operatorname{div}(u) + \left[\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right) / \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \right] Q_1 + \frac{\rho}{\rho_l} \dot{y}_1,$$

$$K = (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) / \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right), \quad Q_1 = H(\theta_2 - \theta_1), \quad Y = \text{const},$$

$$\rho_l = \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) / \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right),$$

$$\dot{y}_1 = v(\bar{g}_2 - \bar{g}_1), \quad \bar{g}_i = h_i - \bar{\theta} \eta_i, \quad \bar{\theta} = \frac{\theta_1 \theta_2}{\theta_l},$$

$$\theta_l = \left(\frac{\Gamma_1 \theta_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2 \theta_2}{\alpha_2} \right) / \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \right).$$

5.7. Заключение

Были представлены две математические модели, соответствующие двум шагам при расчете диффузионного интерфейса жидкость-газ. Первый шаг соответствует модели (25), где вычисляется только релаксация давления. Фазовый переход заморожен на этом этапе. В течение второго шага, где

достигается механическое равновесие, происходит фазовый переход. По сравнению с некорректной математической моделью, основанной на уравнении состояния типа Ван-дер-Ваальса, представленная в данном разделе модель является гиперболической, и используются уравнения состояния отдельных компонент. Способность модели правильно описывать физические явления демонстрируется на неравновесном движении капель в газе. Способность модели в описании явления фазового перехода продемонстрирована в [15].

Литература

1. *Anderson D. M., McFadden G. B., Wheeler A. A.* Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics // *Annu. Rev. of Fluid Mechanics.* — 1998. — 30. — P. 139—165.
2. *Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C.* A continuum model for modeling surface tension // *J. Comput. Physics.* — 1992. — 100. — P. 335—354.
3. *Farhat C., Roux F.* A method for finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm // *Intern. J. Numerical Meth. In Engineering.* — 1991. — 32. — P. 457—492.
4. *Gavrilyuk S. L., Gouin H.* A new form of governing equations of fluids arising from Hamilton's principle // *Intern. J. Eng. Sci.* — 1999. — 37. — P. 1495—1520.
5. *Gavrilyuk S. L., Saurel R.* Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia // *J. Comput. Physics.* — 2002. — 175. — P. 326—360.
6. *Glimm J., Grove J., Li X. et al.* Three-dimensional front tracking // *SIAM J. Scientific Computing.* — 1998. — 19. — P. 703—727.
7. *Hirt C., Amsden A., Cook J.* An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds // *J. Comput. Physics.* — 1974. — 14. — P. 227—253.
8. *Hou T. Y., Lowengrub J. S., Shelley M. J.* Boundray integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials // *J. Comput. Physics.* — 2001. — 169. — P. 302—362.
9. *Osher S., Fedkiw R.* Level set methods: an overview and some recent results // *J. Comput. Physics.* — 2001. — 169. — P. 463—502.
10. *Perigaud G., Saurel R.* A compressible flow model with capillary effects // *J. of Comput. Physics.* — 2005. — 209. — P. 139—178.

11. *Sethian J. A.* Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision and Material Sciences. — Cambridge, MA: Cambridge Univ. Press, 1999.
12. *Sethian J. A., Smereka P.* Level Set Methods for Fluid Interfaces // Annu. Rev. of Fluid Mechanics. — 2003. — 35. — P. 341—372.
13. *Saurel R., Gavriluk S., Renaud F.* A multiphase model with internal degrees of freedom: application to shock-bubble interaction // J. of Fluid Mech. — 2003. — 495. — P. 283—321.
14. *Saurel R., Lemetayer O., Massoni J., Gavriluk S.* Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation // Shock waves. — 2007. — 16. — P. 209—232.
15. *Saurel R., Petitpas F., Abgrall R.* Modelling phase transition in metastable liquids: application to cavitating and flashing flows // J. of Fluid Mech. — 2008. — 607. — P. 313—350.
16. *Saurel R., Petitpas F., Berry A.* Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixture // J. Comput. Physics. — 2009. — 228. — P. 1678—1712.
17. *Sethian J. A.* Evolution, Implementation, and Application of Level Set and Fast Marching Methods for Advancing Fronts // J. of Comput. Physics. — 2001. — 169. — P. 503—555.

Глава 6. Прямое численное моделирование кипящего пузырькового потока

Для описания поверхность раздела, разделяющего жидкость и пар, в данной главе представлена потоковая модель. В ней учитываются поверхностное натяжение, теплопроводность, энергия релаксации Гиббса и эффекты сжимаемости. Модель является гиперболической, консервативной и находится в согласии со вторым законом термодинамики. Фазовый переход рассматривается с учетом условия релаксации энергии Гиббса, как в [25]. Эффекты поверхностного натяжения смоделированы в соответствии с [6]. Таким образом, нет необходимости разрешать структуру интерфейса, поскольку условия скачка присущи особенностям представленной модели. Один и тот же набор дифференциальных уравнений решается везде, как в чистых жидкостях, так и на диффузионном интерфейсе. Существует, таким образом, уникальный гиперболический потоковый солвер, который обрабатывает динамику течения, движение интерфейса, а также динамику акустических волн. Чтобы различить «чистую» жидкость и смесь жидкости и пара, разные наборы алгебраических уравнений рассматриваются в солвере релаксации. Чтобы гарантировать точное вычисление динамики жидкости и газа, предобусловленная неявная схема [17] адаптирована для представленной настоящей модели кипящего потока. Модель и метод сверяются с одномерной тестовой задачей, имеющей точное решение. Также для иллюстрации возможностей метода представлены многомерные расчеты.

6.1. Введение

Глава посвящена численному моделированию кипящих потоков с помощью DNS-подобного (прямое численное моделирование) подхода. Эта тема имеет важные приложения в атомном машиностроении и многих другие инженерных областях. У корреляции тепло- и массообмена (широко используемых в усредненных моделях многофазных потоков и кодах) есть существенные ограничения, область ошибки охватывает несколько порядков величин. Изменение топологии течения от пузырькового до отрывного с образованием паровой пленки на стенках имеет драматические последствия для теплообмена. Основной вопрос, связанный с многофазными течениями, заключается в том, что усредненные модели двухфазных течений

не могут объяснить изменения топологии потока. Поэтому подобное DNS моделирование кипящих потоков может помочь при выводе подсеточных моделей. Это сложная область для исследования, поскольку в ней присутствуют интерфейсы жидкость-газ в сочетании с теплопроводностью, фазовым переходом и эффектами поверхностного натяжения. Только несколько численных методов способны «побороться» с такими потоками, например [30; 15], где интерфейс рассматривается как резкий скачок, разрешаемый с помощью метода *front tracking* (прослеживания фронта).

Другие подходы рассматривают интерфейс как диффузионную зону. В связи с этим следует упомянуть два вида подходов. Первый, химико-физический, связан с работой Cahn и Hilliard [8], также называется в литературе «теория второго градиента» и «теория жидкостей типа Кортевега». Эта теория хорошо работает в непосредственной близости от термодинамической критической точки, где плотности жидкости и пара близки. Плотность жидкости рассматривается как параметр порядка, и внутренняя энергия жидкости рассматривается как функция плотности и градиента плотности. Значительные усилия в развитии этого подхода были сделаны, например, в [2]. Примеры численных работ приведены в [14]. В дополнение к ограничению отношения плотностей на интерфейсе появляются и другие ограничения. Для того чтобы разрешить интерфейсную капиллярную структуру, необходимы очень подробные сетки и связанные с этим вычислительные ограничения.

Второй подход, рассматривающий интерфейс как диффузионную зону, связан с так называемыми разрешающими разрывы методами и встречается, например, в работах Годунова. При таком подходе разрывы разрешаются за счет консервативной формулировки системы уравнений, и нет необходимости разрешать внутреннюю структуру разрывов, поскольку условия скачка присутствуют в самой формулировке. Этот подход конкурировал с методами прослеживания фронта в течение 1970-х годов, с методом искусственной вязкости в течение 1980-х годов и в настоящее время используется практически во всех вычислительных кодах, касающихся уравнений газовой динамики и, в более общем виде, в гиперболических системах законов сохранения.

Подход диффузионного интерфейса, основанный на многофазном описании ячеек смеси с помощью гиперболических систем с релаксацией, представлен в [23]. Этот подход показал свою эффективность при расчете течений в сложных условиях со сколь угодно высоким давлением и соотношением плотностей в разных приложениях, начиная от физики взрыва [21—27], ударных волн в гетерогенных средах, кавитации потоков [20] и заканчивая механикой деформируемого твердого тела [11]. Трудности связаны с моделями и построением численных схем, особенно когда в модели присутствуют неконсервативные уравнения. В данной главе низкоскоростные ки-

пящие течения рассматриваются в рамках формулировки диффузионного интерфейса.

Чтобы справиться с интерфейсными зонами в условиях локального механического и теплового равновесия, было проведено упрощение модели Karila [16]. Полученная в ходе упрощения модель является версией равновесной температурной модели из [25]. Редукция механического и теплового равновесия оправданна, поскольку для моделирования фазовых изменений необходим кондуктивный теплоперенос. Вследствие этого здесь нет скачка температуры (в рамках DNS подхода) на границе раздела, и использование единой температурной модели является оправданным. Для большей точности модель Karila [16] включает в себя две температуры и хорошо подходит для моделирования интерфейсов, когда присутствуют разрывы температуры и энтропии, а интерфейс разделяет две несмешиваемых жидкости, такие, например, как вода и воздух. При наличии теплопроводности в модели температура становится непрерывной, и использование единой температурной модели оправданно. Действительно, теплопроводящий слой должен быть промоделирован в контексте кипящих потоков, как и при вычислении пламени. Температурная равновесная модель включает в себя четыре дифференциальных уравнения в частных производных и является гиперболической и консервативной. Для моделирования фазовых изменений рассматриваются слагаемые релаксации свободной энергии Гиббса. Основная разница состоит в том, что каждая фаза занимает собственный объем в отличие от газовых смесей, где каждый компонент газа занимает весь объем. Это различие имеет серьезные последствия для термодинамического замыкания. Для газовых смесей уравнение состояния смеси получают из закона Dalton. Здесь они получены из определения энергии смеси, температуры и условия равновесия давления.

К основной модели температурного равновесного потока с четырьмя дифференциальными уравнениями добавляется дополнительная физика, чтобы моделировать кипящие потоки. Эффекты поверхностного натяжения моделируются методом Brackbill [6] и рассмотрены в контексте сжимаемой жидкости в [19]. Теплопроводность и гравитационные эффекты также учтены.

Другой вопрос связан с численной аппроксимацией модели, особенно с гиперболической и эллиптической частями, капиллярными условиями и термохимической релаксацией.

Гиперболический шаг решается с помощью предобусловленного неявного гиперболического решателя, описанного в [17]. Это расширение метода [12] для потоков с низкими числами Маха, причем данный метод консервативен и использует алгоритм предобуславливания Turkel [31]. Для моделирования испарения использован релаксационный решатель.

Гиперболические и релаксационные решатели объединяются для решения уравнений модели течения в 1D случае в отсутствие капиллярных эффектов, чтобы проверить модель и сходимость метода в сравнении с точным решением при резком интерфейсе в случае кипения. Сходимость достигнута в 1D случае, приведены примеры вычисления кипящих потоков в 2D случае с различными физическими эффектами. 2D конфигурация с несколькими пузырьками вычисляется. С начального момента, когда появляются некоторые места зарождения пузырьков, динамически возникают пузырьки из мест зародышеобразования, а также в других местах, где используются идеальные условия на стенках области. Появление пузырей и их размеры, таким образом, являются самостоятельным процессом независимо от места зародышеобразования. Особенности появления динамических интерфейсов уже отмечались в контексте кавитирующих потоков при использовании температурных неравновесных моделей.

6.2. Построение модели

Рассмотрим механически равновесную и неравновесную по температуре потоковую модель Karila [16], куда включены тепло- и массообмен [25].

6.2.1. Равновесная модель

Модель, приводимая в [25], имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \text{grad}(\alpha_1) &= \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \text{div}(u) + \rho v (g_2 - g_1) \times \\ &\times \frac{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} + \frac{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} H(T_2 - T_1), \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \text{div}(\alpha_1 \rho_1 u) &= \rho v (g_2 - g_1), \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \text{div}(\alpha_2 \rho_2 u) &= -\rho v (g_2 - g_1), \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \text{div}(\rho u \otimes u + P I) &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \text{div}((\rho E + P)u) &= 0. \end{aligned} \tag{1}$$

Полная энергия определяется как $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} \rho u^2$, где $Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$ представляют массовые доли; $\rho = \sum_k (\alpha_k \rho_k)$ — плотность смеси. Эта модель является гиперболической с той же скоростью волн, что и в уравнениях газовой динамики, но со скоростью звука c_W из [32], которая демонстрирует немонотонное поведение по отношению к объемной доле α_k .

$$\frac{1}{\rho c_W^2} = \sum_k \frac{\alpha_k}{\rho_k c_k^2}, \quad (2)$$

где c_k представляет собой скорость звука, связанную с фазой k .

Стоит отметить, что скорость звука определяется при условии, что каждая фаза имеет выпуклое уравнение состояния. Эта особенность не удовлетворяет смешанным течениям с кубическими уравнениями состояния, подобно уравнению состояния Ван-дер-Ваальса. Настоящее уравнение состояния, обеспечивающее термодинамическое замыкание, получают из определения энергии смеси и условия равновесия давления. Это уравнение состояний включает по меньшей мере три аргумента: $P = P(\rho, e, \alpha_1)$. Например, когда каждая фаза подчиняется уравнению состояния загущенного газа (см. [18] для определения параметров),

$$p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k (e_k - q_k) - \gamma_k P_{\infty, k}, \quad (3)$$

и уравнение состояния смеси записывается в виде

$$P(\rho, e, \alpha_1) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 P_{\infty, 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 P_{\infty, 2}}{\gamma_2 - 1} \right) - \alpha_1 \rho_1 q_1 - \alpha_2 \rho_2 q_2}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}. \quad (4)$$

Параметры q_k , γ_k и $P_{\infty, k}$ являются константами и зависят от материала k . При работе с приложениями с фазовыми переходами их определение основано на кривых насыщения фазовой диаграммы. Поскольку эта модель включает в себя одно давление, но два уравнения массы и уравнение объемной доли, можно определить две температуры ($T_k = T_k(p, \rho_k)$) и две энтропии. Это последнее свойство полезно для моделирования фазового перехода. Система (1) дополняется уравнением энтропии смеси

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho S u) = \frac{H(T_2 - T_1)^2}{\rho} + \frac{pv(g_2 - g_1)^2}{T_1}, \quad (5)$$

где T_I представляет собой «температуру интерфейса», определяемую из соотношения

$$T_I = \frac{\frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2 T_2}{\alpha_2}}{\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2}}$$

и согласующуюся со вторым законом термодинамики.

Некоторые дополнительные комментарии следует дать к уравнению объемной доли.

Первое слагаемое в правой части модели Karila [16] представляет воздействие механической релаксации, присутствует во всех зонах, где дивергенция скорости не равна нулю (ударные волны, волны сжатия и расширения). Второе слагаемое представляет объемные изменения в связи с переносом массы в условиях, когда обе фазы сжимаемые. Последняя группа слагаемых представляет эффекты дилатации (от лат. dilato — расширять), обусловленные передачей тепла. Γ_k представляет собой коэффициент Грюнайзена фазы k .

Для неконсервативной системы (1) должны быть использованы нетрадиционные ударные отношения. Соответствующий набор условий приводится в [24]. Тепло- и массообмен в системе (1) рассматриваются как кинетические процессы, контролируемые соответственно скоростями релаксации H и v . Свободная энергия Гиббса обозначается как $g_k = h_k - T_k s_k$.

Степени свободы в этой модели связаны со скоростями релаксации H и v . Когда жидкости, находящиеся в контакте на интерфейсе, являются несмешивающимися (например жидкая вода и воздух), H и v полагаются равными нулю, что позволяет выполнить условия скачка для нормальных скоростей и давлений. Вычислительные примеры и сравнение с точным решением приведены в работе [26]. Когда фазовый переход случается на границе между жидкостью и ее паром при условии, что одна из фаз является метастабильной (перегрев или переохлаждение), предполагается локальное термодинамическое равновесие, что означает, что фазовый переход происходит бесконечно быстро (бесконечные H и v). Поскольку параметры релаксации установлены бесконечными только локально, фронты фа-

зовых переходов, распространяющиеся при глобальной конечной скорости [25], воспроизводятся правильно, по крайней мере для ситуации мгновенно испаряющегося потока. Чтобы удалить трудности, связанные с разрешением жесткой дифференциальной системы¹, релаксационные решатели были построены аналогично [17].

Эта модель в состоянии справиться с простым контактным интерфейсом и интерфейсами испарения (или конденсации), когда коэффициенты релаксации тепло- и массообмена учтены и являются жесткими. Пример — задача вычисления кавитирующей подводной ракеты с участием двух видов интерфейсов. Основная цель такого примера — моделирование кипящих потоков, что обязательно при рассмотрении диффузии тепла. Таким образом, модель потока (1) сводится к рассмотрению одной температуры.

6.2.2. Модель температурного равновесия

В пределе жесткой температурной релаксации (бесконечное H), система (1) сводится к виду

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P I) &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P)u) &= 0, \\ \frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_1 u) &= \rho v(g_2 - g_1).\end{aligned}\tag{6}$$

Система дополняется уравнением энтропии, где S обозначает энтропию смеси:

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho S u) = \frac{\rho v(g_2 - g_1)^2}{T}.\tag{7}$$

Полная энергия определяется как $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u u$. Формально система (6) напоминает реактивные уравнения Эйлера, широко используемые в моделировании сгорания. Тем не менее фундаментальная разница прояв-

¹ Система дифференциальных уравнений, записанная в матричном виде ($Y = AX$), считается жесткой, если матрица коэффициентов почти вырожденная.

ляется в отношениях термодинамического замыкания. При моделировании горения рассматриваются смеси газов, и для вычисления давления используется закон Дальтона. Он гласит, что каждая составляющая занимает весь объем. Это не так в случае двухфазных смесей, там жидкости, разделенные интерфейсом, занимают каждая собственный объем. Чтобы определить термодинамическое замыкание для системы (6), сначала рассмотрим определение удельного объема смеси:

$$v = Y_1 v_1 + Y_2 v_2. \quad (8)$$

С помощью уравнения состояния для данной фазы

$$e_k = C_{v,k} T + \frac{P_{\infty,k}}{\rho_k} + q_k \quad (9)$$

SG EOS (3) приобретает вид

$$p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k C_{v,k} T - P_{\infty,k}, \quad (10)$$

и соотношение для удельного объема может быть записано в виде

$$v_k = \frac{(\gamma_k - 1) C_{v,k} T}{p + P_{\infty,k}}. \quad (11)$$

Комбинируя (8) и (11), получим соотношение, связывающее температуру, давление и удельный объем смеси:

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{T(P, v, Y_1)} = \frac{Y_1 (\gamma_1 - 1) C_{v,1}}{v(P + P_{\infty,1})} + \frac{Y_2 (\gamma_2 - 1) C_{v,2}}{v(P + P_{\infty,2})}. \quad (12)$$

Запишем выражение для определения энергии смеси

$$e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2. \quad (13)$$

Комбинируя (9) и (11), получим выражение удельной внутренней энергии для фазы k :

$$e_k = C_{v,k} T \frac{P + \gamma_k P_{\infty,k}}{P + P_{\infty,k}} + q_k. \quad (14)$$

Определение энергии смеси (13) принимает вид

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{T(P, v, Y_1)} = \frac{Y_1 C_{v,1} + \frac{Y_1(\gamma_1 - 1)C_{v,1}P_{\infty,1}}{P + P_{\infty,1}} + Y_2 C_{v,2} + \frac{Y_2(\gamma_2 - 1)C_{v,2}P_{\infty,2}}{P + P_{\infty,2}}}{e - (Y_1 q_1 + Y_2 q_2)} \quad (15)$$

Объединяя соотношения (12) и (15), получим следующее уравнение, связывающее давление, удельный объем смеси, энергию смеси и массовые доли:

$$\rho \left[\frac{Y_1(\gamma_1 - 1)C_{v,1}}{P + P_{\infty,1}} + \frac{Y_2(\gamma_2 - 1)C_{v,2}}{P + P_{\infty,2}} \right] - \left[\frac{Y_1 C_{v,1} + \frac{Y_1(\gamma_1 - 1)C_{v,1}P_{\infty,1}}{P + P_{\infty,1}} + Y_2 C_{v,2} + \frac{Y_2(\gamma_2 - 1)C_{v,2}P_{\infty,2}}{P + P_{\infty,2}}}{e - (Y_1 q_1 + Y_2 q_2)} \right] = 0. \quad (16)$$

Это соответствует квадратичной зависимости от давления. В случае, когда одна из фаз представляет собой газ ($P_{\infty, \text{gas}} = 0$), как в данном контексте, положительный корень определяется по формуле

$$P = P(\rho, e, Y_1) = \frac{1}{2} \left(A_1 + A_2 - (P_{\infty,1} + P_{\infty,2}) \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(A_2 - A_1 - (P_{\infty,2} - P_{\infty,1}) \right)^2 + A_1 A_2}, \quad (17)$$

где $A_k = \frac{Y_k(\gamma_k - 1)C_{v,k}}{Y_1 C_{v,1} + Y_2 C_{v,2}} (\rho(e - q) - P_{\infty,k})$ и $q = Y_1 q_1 + Y_2 q_2$.

6.2.3. Гиперболичность и скорость звука

Система (6) гиперболическая с тремя волновыми скоростями: $\lambda_0 = u$ (дважды), $\lambda_1 = u + c$ и $\lambda_2 = u - c$ со следующим квадратом скорости звука:

$$c^2 = \frac{1}{2} \left((e-q)(a_1 + a_2) + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial R_1}{\partial \rho} \right)_e R_1 + \left(\frac{\partial R_2}{\partial \rho} \right)_e}{\sqrt{\frac{1}{4} R_1 R_1 + R_2}} + \right. \\ \left. + \frac{P}{\rho^2} \left(\rho(a_1 + a_2) + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial R_1}{\partial e} \right)_\rho R_1 + \left(\frac{\partial R_2}{\partial e} \right)_\rho}{\sqrt{\frac{1}{4} R_1 R_1 + R_2}} \right) \right) \quad (18)$$

где

$$a_1 = \frac{Y_1(\gamma_1 - 1)C_{v,1}}{Y_1 C_{v,1} + Y_2 C_{v,2}}, \quad a_2 = \frac{Y_2(\gamma_2 - 1)C_{v,2}}{Y_1 C_{v,1} + Y_2 C_{v,2}},$$

$$R_1 = a_2 \rho(e-q) - a_2 P_{\infty,2} - a_1 \rho(e-q) + a_1 P_{\infty,1} - P_{\infty,2} + P_{\infty,1},$$

$$R_2 = a_1 a_2 (\rho(e-q) - P_{\infty,1})(\rho(e-q) - P_{\infty,2}).$$

Данную скорость звука можно сравнить со скоростью звука Вуда (2). Поскольку скорость звука Вуда из (2) связана с многофазными смесями, находящимися в механическом, а не в тепловом равновесии, она всегда должна быть больше, чем скорость звука, определяемая формулой (18). Данное поведение иллюстрируют рис. 1 и 2.

Моделирование дополнительной физики. Чтобы справиться с DNS кипящими потоками, система (6) должна быть дополнена дополнительными физическими эффектами:

- плавучестью;
- поверхностным натяжением;
- теплопроводностью;
- фазовым переходом.

Этот список можно дополнить и другими дополнительными эффектами, например вязкостью, но мы далее сосредоточимся лишь на тех, что являются абсолютно необходимыми.

Эффекты поверхностного натяжения следует рассматривать через метод континуума поверхностных сил (Continuum Surface Method) [6]. Капиллярная сила моделируется так:

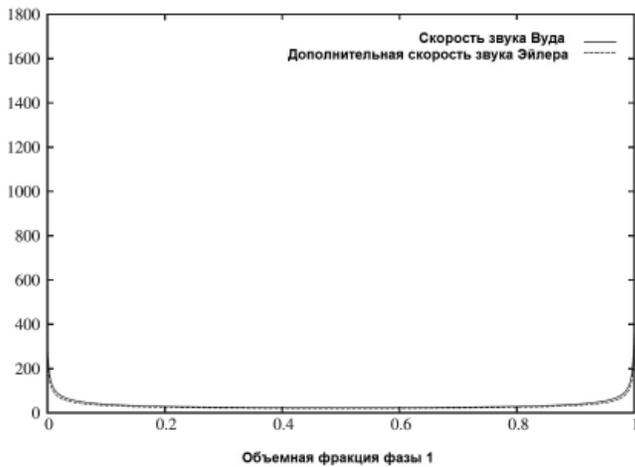


Рис. 2. Сравнение скорости звука системы (6), определяемой формулой (18), со скоростью звука Вуда (2) (крупный план)

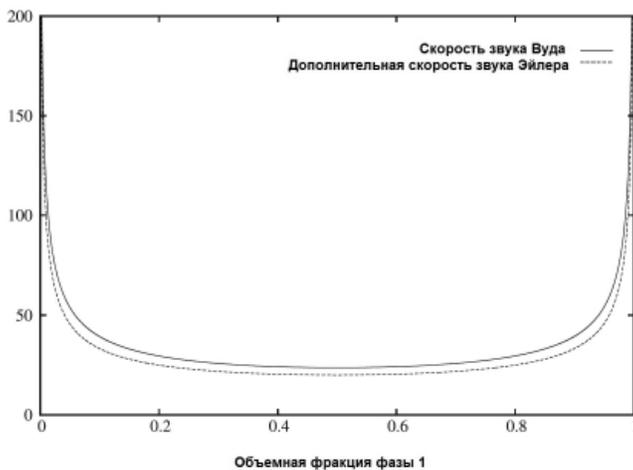


Рис. 1. Сравнение скорости звука системы (6), определяемой формулой (18), со скоростью звука Вуда (2) (общий вид)

$$F_\sigma = \sigma \kappa \overline{\nabla C}, \quad (19)$$

где σ представляет собой коэффициент поверхностного натяжения ($\text{Н}\cdot\text{м}^{-1}$), κ представляет локальную кривизну (м^{-1}), C является индикаторной функцией (color function — функция раскраски или цвета) и используется

для нахождения интерфейса между двумя фазами и вычисления локальной кривизны.

$$\kappa = -\operatorname{div} \left(\frac{\overline{\nabla C}}{|\overline{\nabla C}|} \right). \quad (20)$$

Здесь в качестве колорной функции выбрана массовая доля Y_1 фазы 1, которая не изменяется поперек ударной волны и волны расширения и варьируется только на интерфейсах.

Сила тяжести определяется из соотношения

$$F_g = \rho g,$$

где g представляет собой поле силы тяжести.

Теплопроводность входит в общее уравнении энергии модели через закон Фурье $q = -\lambda_c \overline{\nabla T}$, где теплопроводность «смеси» определяется как $\lambda_c = \alpha_1 \lambda_1 + \alpha_2 \lambda_2$, а λ_k представляет собой теплопроводность фазы k . Асимптотический анализ, приводящий к этой формулировке, кратко суммирован в приложении 6А.

Фазовый переход рассматривается в [25] через релаксацию свободной энергии Гиббса. Для выполнения равенства химических потенциалов на границе $(g_1)_l = (g_2)_l$ рассматриваются условия жесткой релаксации. Процесс релаксации используется в каждой точке сетки с некоторыми особенностями в отношении ячейки «чистой» жидкости и случаев общего испарения или полной конденсации. Подробности приведены в приложении 6Б.

С учетом дополнительных эффектов, упоминавшихся выше, получается следующая общая модель:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_1 u) &= \rho v (g_2 - g_1), \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P I) &= \sigma \kappa \overline{\nabla Y_1} + \rho g, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P)u) &= \operatorname{div}(\lambda_c \overline{\nabla T}) + \sigma \kappa \overline{\nabla Y_1} u + \rho g u. \end{aligned} \quad (21)$$

В консервативной форме модель имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_1 u) &= \rho v(g_2 - g_1), \\
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\rho u \otimes u + P I - \sigma \left(|m| I - \frac{m \otimes m}{|m|} \right) \right) &= \rho g, \\
 \frac{\partial \rho E + \sigma |m|}{\partial t} + \\
 + \operatorname{div} \left((\rho E + P + \sigma |m|) u - \sigma \left(|m| I - \frac{m \otimes m}{|m|} \right) u - \lambda_c \overline{\nabla T} \right) &= \rho g u.
 \end{aligned} \tag{22}$$

Эта система замыкается EOS (17). Гиперболичность сохраняется по волнам скорости, данным в разделе 6.2.3 «Гиперболичность и скорость звука». Уравнение энтропии, связанное с системой (21), записывается в виде

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\rho S u - \frac{\lambda_c \overline{\nabla T}}{T} \right) = \frac{\rho v(g_2 - g_1)^2}{T} + \lambda_c \frac{(\overline{\nabla T})^2}{T^2} \tag{23}$$

и согласуется со вторым законом термодинамики. Система (22) рассматривается ниже для моделирования кипящих потоков.

6.3. Численный метод

6.3.1. Введение

В этом разделе рассматриваются численные методы, используемые для приближенного решения системы (21). Численная стратегия основана на методике операторного расщепления и использует гиперболическую подсистему, где капиллярные и гравитационные силы удалены. Это приводит к упрощенному решателю Римана, но с некоторыми несбалансированными силами, которые могут производить ложные эффекты. Тем не менее использование результатов неявной схемы имеет ничтожные ложные эффекты, которые не влияют на глобальную точность и стабильность. Это соответствует анализу, проведенному в [7], где капиллярные силы включены в гиперболическое решение.

Кроме того, численное моделирование кипящих потоков приводит к двум основным видам численных вопросов. Первый из них связан с наличием сжимаемых эффектов в сочетании с условиями низкого числа Маха. Поскольку скорость потока низка (1 м/с), использование формулировки сжимаемых течений ведет к очень малым числам Маха, между 10^{-1} и 10^{-4} . Как показано в [12; 17], использование схемы типа Годунова для потоков с низкими числами Маха приводит к большим погрешностям вычислений. Способ преодоления этой проблемы заключается в адаптации методики предобуславливания к настоящей двухфазной модели диффузионного интерфейса.

Как показано в [17], обязательным является использование неявной схемы. Для простоты анализ проводится в 2D постановке. Вторая проблема касается численного анализа дополнительной физики (поверхностное натяжение, теплопроводность и фазовый переход). Она рассмотрена в следующих подразделах.

6.3.2. Неявная схема

Поскольку система является гиперболической, то в рамках декартового конечного объемного подхода для решения системы (21) используется схема типа Годунова. Вычислительная ячейка схематически показана на рис. 3. Неявная 2D схема Годунова гласит:

$$U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - F_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) + \Delta t S_{i,j}^{n+1}, \quad (24)$$

где

$$U = \begin{pmatrix} \rho Y_1 \\ \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho Y_1 u \\ \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho v u \\ (\rho E + P)u \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho Y_1 v \\ \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + P \\ (\rho E + P)v \end{pmatrix},$$

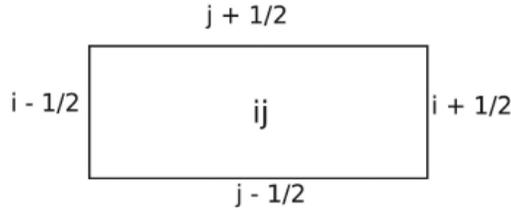


Рис. 3. Расчетная ячейка (i, j) , ограниченная четырьмя границами ячеек $(i + 1/2, j)$, $(i - 1/2, j)$, $(i, j + 1/2)$ и $(i, j - 1/2)$

$$S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma \kappa \overline{\nabla Y}_1|_x + \rho g|_x \\ \sigma \kappa \overline{\nabla Y}_1|_y + \rho g|_y \\ -\text{div}(\lambda_c \overline{\nabla T}) + \sigma \kappa \overline{\nabla Y}_1 u + \rho g u \end{pmatrix}.$$

Векторы потоков $F_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}, F_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}, G_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}, G_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}$ и источника $S_{i,j}^{n+1}$ вычисляются в соответствии с переменными в момент времени t^{n+1} . Рассмотрим общую форму этих векторов:

$$\phi^{n+1} = \phi^{n+1}(U_{i,j}^{n+1}, U_{i-1,j}^{n+1}, U_{i+1,j}^{n+1}, U_{i,j-1}^{n+1}, U_{i,j+1}^{n+1}) \quad (25)$$

Разложение в ряд Тейлора до первого порядка включительно имеет вид

$$\begin{aligned} \phi^{n+1} = & \phi^n + \left. \frac{\partial \phi}{\partial U_{i,j}} \right)^n (U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n) + \left. \frac{\partial \phi}{\partial U_{i-1,j}} \right)^n (U_{i-1,j}^{n+1} - U_{i-1,j}^n) + \\ & + \left. \frac{\partial \phi}{\partial U_{i+1,j}} \right)^n (U_{i+1,j}^{n+1} - U_{i+1,j}^n) + \left. \frac{\partial \phi}{\partial U_{i,j-1}} \right)^n (U_{i,j-1}^{n+1} - U_{i,j-1}^n) + \\ & + \left. \frac{\partial \phi}{\partial U_{i,j+1}} \right)^n (U_{i,j+1}^{n+1} - U_{i,j+1}^n). \end{aligned} \quad (26)$$

С помощью (26) можно преобразовать соотношение (24) к виду

$$\begin{aligned}
 & \left[I + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\frac{\partial F_{i+\frac{1}{2},j}}{\partial U_{i,j}} \right)^n - \frac{\partial F_{i-\frac{1}{2},j}}{\partial U_{i,j}} \right)^n + \\
 & + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\frac{\partial G_{i,j+\frac{1}{2}}}{\partial U_{i,j}} \right)^n - \frac{\partial G_{i,j-\frac{1}{2}}}{\partial U_{i,j}} \right)^n + \\
 & + \Delta t \left. \frac{\partial S_{i,j}}{\partial U_{i,j}} \right)^n \left[\delta U_{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{\partial F_{i+\frac{1}{2},j}}{\partial U_{i+1,j}} \right)^n \delta U_{i+1,j} - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{\partial F_{i-\frac{1}{2},j}}{\partial U_{i-1,j}} \right)^n \delta U_{i-1,j} + \\
 & + \Delta t \left[\frac{\partial S_{i,j}}{\partial U_{i-1,j}} \right)^n \delta U_{i-1,j} + \frac{\partial S_{i,j}}{\partial U_{i+1,j}} \right)^n \delta U_{i+1,j} \left. \right] + \\
 & + \frac{\Delta t}{\Delta y} \frac{\partial G_{i,j+\frac{1}{2}}}{\partial U_{i,j+1}} \right)^n \delta U_{i,j+1} - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta y} \frac{\partial G_{i,j-\frac{1}{2}}}{\partial U_{i,j-1}} \right)^n \delta U_{i,j-1} + \\
 & + \Delta t \left[\frac{\partial S_{i,j}}{\partial U_{i,j-1}} \right)^n \delta U_{i,j-1} + \frac{\partial S_{i,j}}{\partial U_{i,j+1}} \right)^n \delta U_{i,j+1} \left. \right] = \\
 & = - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) + \Delta t S_{i,j}^n,
 \end{aligned} \tag{27}$$

где

$$\delta U_{i,j} = U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n.$$

В компактной форме это выражение означает $M\delta U = D$, где M — пяти-диагональная разреженная матрица. Для оптимизации вычислений используются CSC метод [22], в котором хранятся только ненулевые элементы.

Система может быть решена прямыми или итерационными методами. В настоящее время для этих целей используются методы библиотеки PETSc [3—5].

6.3.3. Решатель Римана

Различные потоки в системе (24) вычисляются с HLLC римановским решателем [29].

На границе ячейки $i+1/2$ поток F^* записывается в следующем виде:

$$F_{L,R}^* = \frac{1}{2}(F_L + F_R) - \text{sign}(S_L) \frac{S_L}{2}(U_L^* - U_L) - \text{sign}(S_M) \frac{S_M}{2}(U_R^* - U_L^*) - \text{sign}(S_R) \frac{S_R}{2}(U_R - U_R^*) \quad (28)$$

с теми же обозначениями, что и ранее для векторов U и F . Индексы L и R обозначают левое и правое состояния задачи Римана соответственно, как показано на рис. 4.

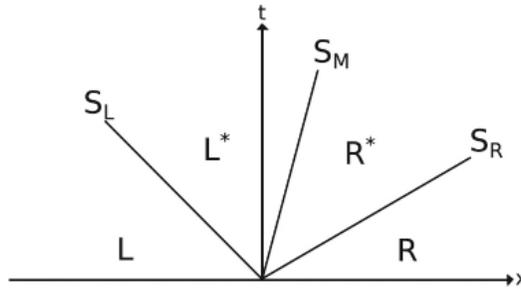


Рис. 4. Схема системы (21) для задачи Римана по HLLC приближению в отсутствие правых частей (капиллярной, релаксационной и гравитационной)

Волновые скорости S_R и S_L оцениваются с помощью следующих аппроксимаций Дэвиса [10]:

$$S_R = \max(u_R + c_R, u_L + c_L), \quad (29)$$

$$S_L = \max(u_R - c_R, u_L - c_L), \quad (30)$$

в то время как S_M оценивается в соответствии с HLL приближением [13]:

$$S_M = \frac{S_R U_R(2) - S_L U_L(2) - (F_R(2) - F_L(2))}{S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1))}. \quad (31)$$

Состояния U_L и U_R в соотношении (28) определяются с помощью отношений Ренкина — Гюнио для скачка по S_R и S_L волнам

$$F_L^* - S_L U_L^* = F_L - S_L U_L, \quad (32)$$

$$F_R^* - S_R U_R^* = F_R - S_R U_R \quad (33)$$

и с контактными отношениями $u_L^* = u_R^* = S_M$ и $P_L^* = P_R^* = P^*$:

$$U_L^* = \frac{1}{S_M - S_L} \left[F_L - S_L U_L - (0, P^*, S_M P^*)^T \right], \quad (34)$$

$$U_R^* = \frac{1}{S_M - S_R} \left[F_R - S_R U_R - (0, P^*, S_M P^*)^T \right]. \quad (35)$$

Неявная схема Годунова (27) требует выражения для потока, задаваемого (28), и его производных по отношению к консервативным переменным. Соответствующие формулы приведены в приложении БС.

6.3.4. Преобусловленное низкое число Маха

Как уже упоминалось во введении, потоки пузырькового кипения привлекают сжимаемые потоки с низкими числами Маха. Как показано в [12; 17], схема типа Годунова приводит к огромным ошибкам без соответствующей коррекции. В соответствии с Turkel [31] и Guillard [12] в контексте однофазных потоков используется метод преобуславливателя многофазных потоков. Он состоит в коррекции уравнения давления, связанного с системными уравнениями (21):

$$\frac{\partial P}{\partial t} + u \frac{\partial P}{\partial x} + c^2 \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \quad (36)$$

где множитель M^2 определяется из уравнения

$$\frac{1}{M^2} \frac{\partial P}{\partial t} + u \frac{\partial P}{\partial x} + \rho c^2 \frac{\partial P}{\partial x} = 0. \quad (37)$$

Это изменение приводит к модифицированным скоростям волны: u , $u + \tilde{c}_+$, $u - \tilde{c}_-$ с

$$\tilde{c}_- = \frac{(1 - M^2)u + \sqrt{(M^2 - 1)^2 u^2 + 4M^2 c^2}}{2}, \quad (38)$$

$$\tilde{c}_+ = \frac{(M^2 - 1)u + \sqrt{(M^2 - 1)^2 u^2 + 4M^2 c^2}}{2}, \quad (39)$$

которые непосредственно использованы в HLLC солвере (28).

Стоит отметить, что система (21) изменяется только при решении задачи Римана на основе волновых скоростей (38) и (39). Когда потоки вычисляются с помощью HLLC солвера, метод Годунова (24) используется с формулировкой (21) и немодифицированным уравнением состояния (17). Этот метод, очевидно, гарантирует консервативность и корректность условия скачка через волну. Он действует только на численную диссипацию.

Поскольку используется консервативная формулировка, даже сильные разрывы могут быть обработаны по этому методу, и, как показано в [17], он является точным по времени. Тем не менее, поскольку искусственная «скорость звука» (38), (39) имеет тенденцию к неправильным значениям, когда M стремится к нулю, на дискретном уровне используется следующая функция:

$$M = \begin{cases} 1, & \text{если } M_i \geq 0,3, \\ M_i, & \text{если } 0,3 > M_i > M_{\text{ref,min}}, \\ M_{\text{ref,min}}, & \text{если } M_i \leq M_{\text{ref,min}}, \end{cases} \quad (40)$$

где M_i — локальное число Маха внутри i -й ячейки; $M_{\text{ref,min}}$ — минимально допустимое число Маха (этот минимум, как правило, составляет порядка 10^{-2} — 10^{-3}).

6.3.5. Теплопроводность

В этом разделе рассматривается расчет теплового потока, присутствующий в уравнении сохранения полной энергии. Ради простоты анализ проводят в 1D случае. Тепловой поток на границе ячейки выражен как функция T_i и T_{i+1} , поскольку

$$q_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{\lambda_{c,i}\lambda_{c,i+1}}{\lambda_{c,i} + \lambda_{c,i+1}} \frac{T_{i+1} - T_i}{\frac{1}{2}\Delta x}. \quad (41)$$

Таким образом, 1D численная аппроксимация $\text{div}(q)$ для i -й ячейки такова:

$$\text{div}(q) \cong \frac{1}{\Delta x} (q_{i,i+1/2}^{n+1} - q_{i,i-1/2}^{n+1}). \quad (42)$$

Соответствующие потоковые производные, входящие в неявную схему (27), приведены в приложении 6D.

6.3.6. Вычисление поверхностного натяжения

Эффекты поверхностного натяжения следует рассматривать аналогично [6], и капиллярная сила моделируется так:

$$F_\sigma = \sigma \kappa \overline{\nabla C}, \quad (43)$$

где σ — коэффициент поверхностного натяжения, $\text{Н} \cdot \text{м}^{-1}$; κ — локальная кривизна, м^{-1} ; $\kappa = -\text{div} \left(\frac{\nabla C}{|\nabla C|} \right)$; C — цветовая функция, целью которой является нахождение интерфейса, разделяющего две фазы.

Массовая доля ($C = Y_1$) используется в качестве индикаторной функции, а массовые доли — как инварианты через волны давления. Тем не менее, численная диффузия добавляет слишком много диссипации в массовую долю для использования при вычислении нормали и кривизны. Таким образом, необходимо восстановить границы нулями и единицами, чтобы иметь правильный скачок давления при переходе через интерфейсы. Очевидно, что если сетка была бы достаточно хорошей, использования этой дополнительной переменной можно было избежать. Другой способ заключается в использовании методов подбора интерфейса (например, [28]).

Индикаторная (цветовая) функция определяется так:

$$\begin{cases} C = 1,0, & \text{если } C \geq 0,5, \\ C = 0,0 & \text{в иных случаях.} \end{cases}$$

Это обеспечивает резкий профиль для функции цвета и точное обнаружение интерфейса. После того как интерфейс локализован, оператор диффузии применяется к цветовой функции C , чтобы получить гладкую функцию (для расчета градиентов). В этой работе простое уравнение диффузии считается так:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_{\text{diff}} \Delta C, \quad (44)$$

где D_{diff} — коэффициент диффузии, $\text{м}^2\text{с}^{-1}$.

D_{diff} и τ выбраны таким образом, чтобы функция цвета диффундировала примерно на четыре ячейки. Затем градиенты вычисляются со вторым порядком аппроксимации:

$$\overline{\nabla C}_{ij} = \frac{(C_{i+1j} - C_{i-1j})}{2\Delta x} \vec{i} + \frac{(C_{ij+1} - C_{ij-1})}{2\Delta y} \vec{j}, \quad (45)$$

где \vec{i} и \vec{j} представляют собой единичные векторы, связанные с локальной 2D базой.

Как только градиенты известны, вычисляется кривизна. На дискретном уровне локальная кривизна внутри данной i -й ячейки определяется из следующего выражения:

$$\kappa_i = -\frac{1}{\Omega_i} \sum_{j \in V(i)} \hat{n}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} l_{ij}, \quad (46)$$

где векторы \hat{n}_{ij} представлены градиентами нормализованной цветовой функции, рассчитываемой между ячейками i и j , а Ω_i представляет собой объем i -й ячейки.

\vec{n}_{ij} представляет собой вектор, соединяющий центры ячеек и длину границы ячейки l_{ij} . Вектор нормали к интерфейсу на границе ячейки \vec{n}_{ij} вычисляется по формуле

$$\hat{n}_{ij} = \frac{1}{2}(\hat{n}_j + \hat{n}_i), \quad (47)$$

$$\text{где } \hat{n}_i = \frac{\overline{\nabla C_i^n}}{|\overline{\nabla C_i^n}|}.$$

В рамках 2D декартовых сеток оно сводится к

$$\kappa_{ij} = -\left(\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{n}_{x_{i+\frac{1}{2},j}} - \hat{n}_{x_{i-\frac{1}{2},j}} \right) + \frac{1}{\Delta y} \left(\hat{n}_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} - \hat{n}_{y_{i,j-\frac{1}{2}}} \right) \right). \quad (48)$$

Как и в предыдущем случае конвективных и диффузионных потоков, необходимы производные капиллярного слагаемого. Подробности приведены в приложении 6Е.

Верификация. Чтобы проверить обоснованность модели, численное решение, основанное на модели диффузионного интерфейса (21), сравнивается с основным решением одномерного резкого фронта испарения. Затем капиллярные эффекты в одиночку рассматриваются в 2D тестовом случае.

6.3.7. 1D фронт испарения

Цель этого раздела состоит в определении точного решения 1D стационарного фронта испарения, чтобы проверить сходимость представленного ранее метода.

Рассмотрим следующую конфигурацию с краевым условием:

- приток жидкости с заданной температурой $T = T_u$;
- отток пара при заданной температуре $T = T_{v0}$ с заданным тепловым потоком Q_0 .

Стационарный фронт испарения находится в точке $\delta = 0$, соответствующая температура равна температуре насыщения жидкость-газ: $T_{\delta=0} = T_{\text{sat}}$.

Соответствующая конфигурация схематично представлена на рис. 5.

6.3.8. Определение эталонного решения

Поскольку интерфейс рассматривается как резкий скачок, однофазные уравнения Эйлера с тепловой диффузией действительны в каждой чистой жидкости:

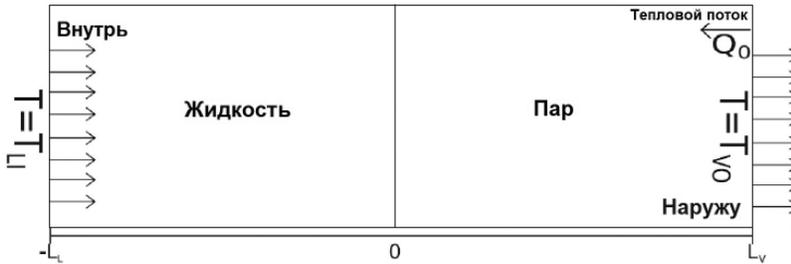


Рис. 5. Геометрия и граничные условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + P}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + P)u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (49)$$

Каждая фаза должна подчиняться уравнению состояния напряженного газа (3) с разрывными коэффициентами на границе. Поскольку мы рассматриваем стационарное решение, система (49) сводится к следующему:

$$\begin{aligned} \rho \bar{u} &= m = \text{const}, \\ \frac{m^2}{\rho_k} + P &= \text{const}, \\ m \left(h_k + \frac{1}{2} \frac{m^2}{\rho_k^2} + q_k \right) - \lambda_k \frac{\partial T}{\partial x} &= \text{const}, \end{aligned} \quad (50)$$

где \bar{u} представляет собой скорость в рамках ссылочного фронта испарения, $h_k = C_{p,k} T$ — тепловую часть энтальпии, q_k — ссылочную энтальпию фазы k .

6.3.9. Квазиизобарический поток

При слабых колебаниях давление считается постоянным с $P(x) = P_0$. Эта гипотеза широко используется в теории горения (например, [9]) и позволяет удалять слагаемое $\frac{1}{2} \frac{m^2}{\rho_k^2}$ из уравнения энергии.

Таким образом, полное сохранение энергии между притоком жидкости и истечением пара можно выразить через соотношение вида

$$mC_{p,\text{liq}}T_{LI} + mq_{\text{liq}} = mC_{p,\text{vap}}T_{VO} + mq_{\text{vap}} + Q_0. \quad (51)$$

Если T_{LI} и T_{VO} известны и первое соотношение между массовой скоростью потока m и тепловым потоком

$$Q_0 \left(Q_0 = -\lambda_{\text{vap}} \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=X_V},$$

получим

$$Q_0 = m(C_{p,\text{liq}}T_{LI} + q_{\text{liq}} - C_{p,\text{vap}}T_{VO} - q_{\text{vap}}) \quad (52)$$

Температурные профили на каждой стороне фронта испарения определяются с помощью сохранения полной энергии, выраженной между притоком и точкой внутри каждой зоны из чистой жидкости:

$$mC_{p,\text{liq}}T + mq_{\text{liq}} - \lambda_{\text{liq}} \frac{\partial T}{\partial x} = mC_{p,\text{liq}}T_{LI} + mq_{\text{liq}}, \quad (53)$$

$$mC_{p,\text{vap}}T + mq_{\text{vap}} - \lambda_{\text{vap}} \frac{\partial T}{\partial x} = mC_{p,\text{liq}}T_{LI} + mq_{\text{liq}}. \quad (54)$$

С помощью интерфейсных условий сопряжения $T_{\delta=0} = T_{\text{SAT}}$ получены следующие решения:

$$\begin{aligned} T(x) \Big|_{x<0} &= T_{LI} + (T_{\text{SAT}} - T_{LI}) e^{\frac{mC_{p,\text{liq}}x}{\lambda_{\text{liq}}}}, \\ T(x) \Big|_{x>0} &= \frac{C_{p,\text{liq}}}{C_{p,\text{vap}}} T_{LI} + \frac{q_{\text{liq}} - q_{\text{vap}}}{C_{p,\text{vap}}} + \\ &+ \left(T_{\text{SAT}} - \frac{C_{p,\text{liq}}}{C_{p,\text{vap}}} T_{LI} - \frac{q_{\text{liq}} - q_{\text{vap}}}{C_{p,\text{vap}}} \right) e^{\frac{mC_{p,\text{vap}}x}{\lambda_{\text{vap}}}}. \end{aligned} \quad (55)$$

Чтобы определить массу потока m , необходимо другое соотношение, связывающее m и Q_0 . Используется определение теплового потока на выходе:

$$Q_0 = -\lambda_{\text{vap}} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=X_V},$$

$$Q_0 = -m C_{p,\text{vap}} \left(T_{\text{SAT}} - \frac{C_{p,\text{liq}}}{C_{p,\text{vap}}} T_{LI} - \frac{q_{\text{liq}} - q_{\text{vap}}}{C_{p,\text{vap}}} \right) e^{\frac{m C_{p,\text{vap}} X_V}{\lambda_{\text{vap}}}}. \quad (56)$$

С использованием соотношений (52) и (56) массовый расход определяется следующим образом:

$$m = \frac{\lambda_{\text{vap}}}{C_{p,\text{vap}} L_V} \ln \left(\frac{C_{p,\text{vap}} T_{VO} + q_{\text{vap}} - C_{p,\text{liq}} T_{LI} - q_{\text{liq}}}{C_{p,\text{vap}} T_{\text{SAT}} + q_{\text{vap}} - C_{p,\text{liq}} T_{LI} - q_{\text{liq}}} \right). \quad (57)$$

Затем Q_0 определяется из (52).

6.3.10. Численное решение

Рассмотрим тот же тест, что и на рис. 5, с $T_{LI} = T_{\text{SAT}} = 372,79$ К и $T_{VO} = 1000$ К, $P(x) = P_0 = 1$ бар и двумя средами.

Жидкость:

$$\gamma_{\text{liq}} = 2,62, \quad P_{\infty,\text{liq}} = 9058,29 \cdot 10^5 \text{ Па}, \quad C_{v,\text{liq}} = 1606,97 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{К}^{-1},$$

$$q_{\text{liq}} = -1,150975 \cdot 10^5 \text{ Дж}, \quad \lambda_{\text{liq}} = 0,6788 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

Пар:

$$\gamma_{\text{vap}} = 1,38, \quad P_{\infty,\text{vap}} = 0 \text{ Па}, \quad C_{v,\text{vap}} = 1192,51 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{К}^{-1},$$

$$q_{\text{vap}} = 2,060759 \cdot 10^6 \text{ Дж}, \quad \lambda_{\text{vap}} = 249,97 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

Пар считается идеальным газом, даже если его температура может быть сверхкритической. В самом деле, при атмосферном давлении и, например, при высокой температуре плотность паров мала и предположение об идеальном газе справедливо. С использованием квазиизобарного аналитического решения массовый расход и тепловой поток на выходе задаются равными:

$$m = 1,1434 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-2} \text{с}^{-1}, \quad Q_0 = -3,76 \cdot 10^6 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2}.$$

Рассмотрим модель диффузионного интерфейса, которая в 1D случае записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 u}{\partial x} &= \rho v (g_2 - g_1), \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + P}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + P)u}{\partial x} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_c \frac{\partial T}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (58)$$

Она решается численно с помощью алгоритма, представленного выше. Граничное условие на входе (левая граница) соответствует заданному массовому расходу и стагнации энтальпии, вычисленным со следующим набором переменных:

$$\begin{aligned} m &= 1,1434 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-2} \text{с}^{-1}, \quad T = T_{\text{SAT}} = 372,79 \text{ К}, \\ P &= 1,0 \text{ бар}, \quad \alpha_{\text{liq}} = 0,999999. \end{aligned}$$

На выходе (правая граница) в качестве граничного условия заданы тепловой поток, а также давление:

$$Q_0 = -3,76 \cdot 10^6 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2}, \quad P_0 = 1,0 \text{ бар}.$$

Этот огромный тепловой поток связан с выбранным значением для теплопроводности газа — $249,97 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \text{К}^{-1}$.

В самом деле, цель этих вычислений — доказать способность метода сходиться к решению с резким интерфейсом испарения. Таким образом, это значение теплопроводности была выбрано, чтобы снизить вычислительные затраты, требуемые для сходимости к точному решению. Другой вариант состоит в том, чтобы установить интерфейс жидкость-газ близко к выходной секции, но это менее удобно для обоих вычислений и представления результатов.

Численное решение было рассчитано как явными, так и неявными (27) схемами на сетке, содержащей 200 ячеек. Численные результаты в сравнении с точным решением приведены на рис. 6 и 7.

Появление пиков на графиках давления связано с численной диффузией массовых долей. Действительно, поскольку рассматривается модель, имею-

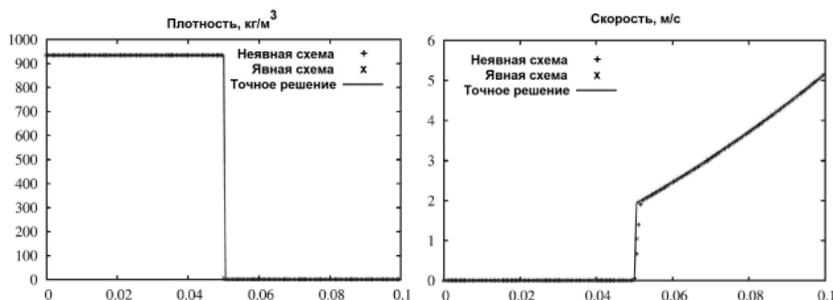


Рис. 6. Вычисленные плотность смеси и профили скорости с использованием сетки в 200 ячеек в сравнении с точным профилем. Наблюдается отличное совпадение

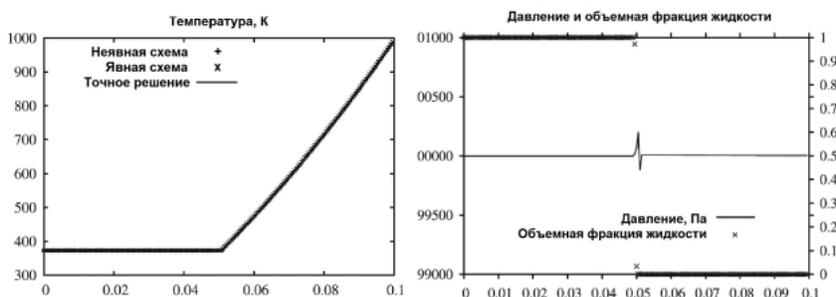


Рис. 7. Вычисленные профили температуры, давления и объемной фракции жидкости с использованием сетки в 200 ячеек и неявной схемы

щая термодинамику в сочетании давление-температура и с массовой долей, температура тесно связана с массовой долей (как показано в отношении (12) при заданном давлении). Таким образом, изменения температуры внутри диффузионной зоны приводят к монотонному увеличению профиля внутри этой зоны. Однако, поскольку рассматриваются тепло- и массообмен, давление также связано с температурой в ячейке, где тепло- и массообмен включены (как описано в приложении 6В).

Таким образом, пики давления появляются на каждой стороне интерфейса вследствие диффузии тепла и массового потребления жидкости. Это поведение иллюстрирует рис. 8, где крупным планом показаны профили давления и температуры, а также профили массовой фракции жидкости на правой стороне интерфейса.

В целом результаты демонстрируют способность метода сходиться к точному стационарному 1D решению с острым интерфейсом испарения. Таким образом, это дает первую проверку модели.

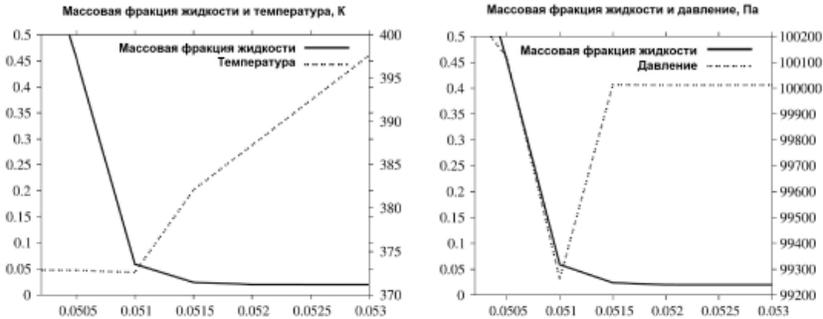


Рис. 8. Вычисленные профили температуры, давления и массовой доли жидкости, полученные с использованием сетки в 200 ячеек и неявной схемы

6.3.11. Закон Лапласа

Рассмотрим замкнутую квадратную область $2,5 \times 2,5$ см, заполненную жидкой водой. Газовый пузырь радиусом 5 мм помещен в центре (рис. 9). Первоначально давление и температура везде устанавливаются равными 1 бар и 300 К, а объемная доля пара внутри пузыря равняется 0,99999, вокруг пузыря — 10^{-5} . Коэффициент поверхностного натяжения $\sigma = 73 \cdot 10^{-3} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$. Предобуславливатель с низким числом Маха (см. раздел 6.3.4 «Предобусловленное низкое число Маха») используется со значением числа Маха, равным 0,1. Параметры SG EOS (3) таковы:

Жидкость:

$$\gamma_{\text{liq}} = 2,62, \quad P_{\infty, \text{liq}} = 9058,29 \cdot 10^5 \text{ Па}, \quad C_{v, \text{liq}} = 1606,97 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

Пар:

$$\gamma_{\text{vap}} = 1,38, \quad P_{\infty, \text{vap}} = 0 \text{ Па}, \quad C_{v, \text{vap}} = 1192,51 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

В данном вычислении требуется параметр C_v , так как используется модель температурного равновесия (6) (без переноса массы). На рис. 10 показано равновесное состояние, полученное на 2D сетке 125×125 ячеек.

Эти результаты позволяют определить численный скачок давления $(\Delta P)_{\text{num}} \cong 14,9 \text{ Па}$, который сравним с тем, что получен по закону Лапласа:

$$\Delta P = \frac{\sigma}{0,5D} = \frac{73 \cdot 0,001}{0,005} = 14,6 \text{ Па}.$$

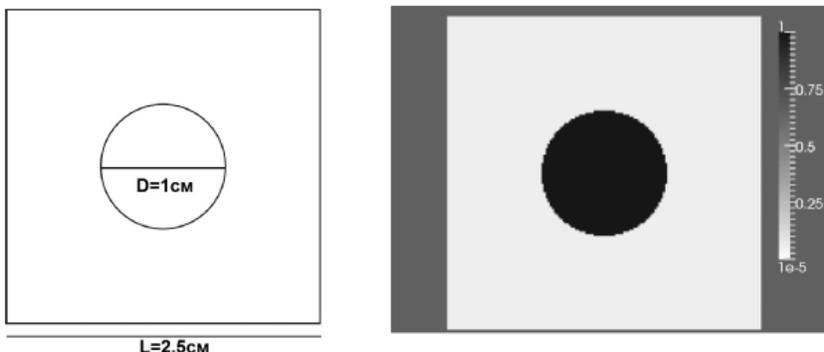


Рис. 9. Квадратная область, заполненная водой, содержащей неконденсируемый газовый пузырь. Эскиз конфигурации и контуры первоначальной объемной фракции

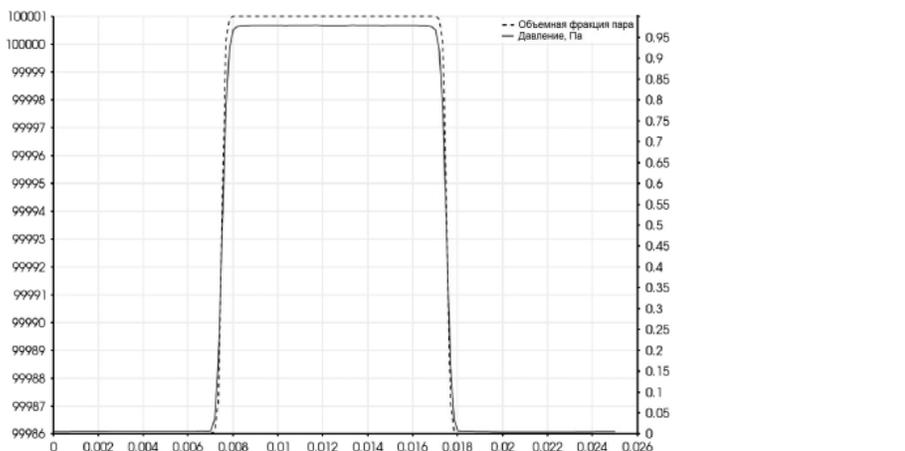


Рис. 10. Давление и профили газовой объемной фракции вдоль оси x . Сплошная линия обозначает давление, пунктирная — объемные фракции паров

Таким образом, скачок давления хорошо согласуется с точным решением (погрешность около 2,05%). Для проверки сходимости метода тот же тест был сделан на более мелкой сетке 250×250 . На этот раз скачок давления составлял 14,7 кПа, что соответствует ошибке около 0,68%.

6.3.12. 2D иллюстрации

Цель этого раздела — показать возможности модели при рассмотрении всех физических эффектов, присутствующих в системе (21). Рассматривается замкнутая и адиабатическая прямоугольная область (12×7 см), в которой

нижняя часть заполнена насыщенной жидкой водой, а верхняя половина — насыщенным паром. Изучается поведение кипящего потока внутри области. Коэффициент поверхностного натяжения $\sigma = 73 \cdot 10^{-3} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$, контактный угол θ принимается постоянным и равным 45° , ускорение силы тяжести $|g| = 9,81 \text{ мс}^{-2}$. Параметры сред таковы:

Жидкая вода:

$$\gamma_{\text{liq}} = 2,62 P_{\infty, \text{liq}} = 9058,29 \cdot 10^5 \text{ Па}, C_{v, \text{liq}} = 1606,97 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{К}^{-1},$$

$$q_{\text{liq}} = -1,150975 \cdot 10^5 \text{ Дж}, \lambda_{\text{liq}} = 0,6788 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

Водяной пар:

$$\gamma_{\text{vap}} = 1,38, P_{\infty, \text{vap}} = 0 \text{ Па}, C_{v, \text{vap}} = 1192,51 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \text{К}^{-1},$$

$$q_{\text{vap}} = 2,060759 \cdot 10^6 \text{ Дж}, \lambda_{\text{vap}} = 0,0249 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

При запуске начальная объемная доля паров в нижней половине области $\alpha_{\text{vap}} = 0,0001$, в верхней части — $\alpha_{\text{vap}} = 0,9999$. Кроме того, начальное давление и температура инициализированы с гидростатическим профилем гравитации (тяжести) с ограничением $T = T_{\text{SAT}}(P)$ в каждой ячейке. Время $T_0(t)$, зависящее от температуры, накладывается на нижнюю стенку следующим образом:

$$T_0(t) = \begin{cases} T_{\text{SAT}} + \left(\frac{t}{\tau}\right)\Delta T, & \text{если } t \leq \tau, \\ T_{\text{SAT}} + \Delta T, & \text{если } t > \tau \end{cases} \quad (59)$$

с $\tau = 150 \text{ мс}$, $T_{\text{SAT}} = 372,79 \text{ К}$, $\Delta T = 15 \text{ К}$. Этот гладкий нагрев установлен для того, чтобы избежать создания паровой пленки вдоль горячей поверхности и слишком сильных волн давления.

Поведение кипящих потоков исследуется в двух постановках. В первой три пузырька пара изначально присутствуют в нижней части области (рис. 11). На рисунке показана замкнутая и адиабатическая прямоугольная область. Нижняя ее половина заполнена жидкой водой, а верхняя половина наполнена парами воды. В области изначально присутствуют три половинки пузырьков пара радиусом 3 мм. На нижней стенке задается зависящая от времени температура $T_0(t)$.

Во второй постановке рассмотрена задача, аналогичная первой, но без пузырьков (рис. 12). Для нахождения решения использована неявная схема (27) с предобуславливанием с низким числом Маха на сетке 960×560 ячеек.

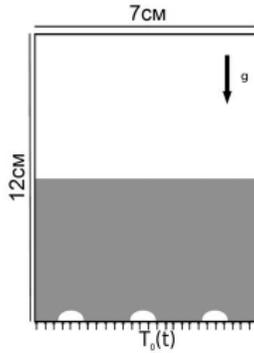


Рис. 11. Замкнутая и адиабатическая прямоугольная область. Три половинки пузырьков пара (радиус 3 мм) изначально присутствуют

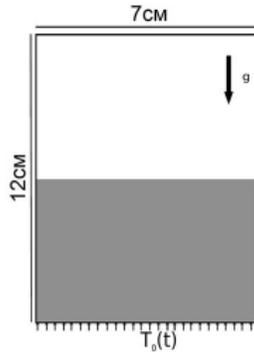


Рис. 12. Замкнутая и адиабатическая прямоугольная область. Нижняя половина области заполнена жидкой водой, верхняя половина наполнена парами воды. Температура $T_0(t)$ накладывается на нижней стенке

Кипящий поток с изначально присутствующими пузырьками пара. Рассмотрим тестовый пример, представленный в предыдущем разделе с тремя пузырьками пара (радиус 3 мм). Объемная доля паров внутри пузырьков $\alpha_{\text{vap}} = 0,9999$ (см. рис. 11). Вычисленная индикаторная функция показана на рис. 13 и 14. Индикаторная функция вычисляется, как указано в разделе 6.3.6 «Вычисление поверхностного натяжения».

На рис. 13 показана индикаторная функция на моменты $t = 0$ с, $t = 50$ мс, $t = 100$ мс, $t = 200$ мс, $t = 300$ мс, $t = 400$ мс. Три первых пузырька движутся по направлению к поверхности вследствие плавучести, но поскольку дно коробки нагревается, вода вокруг них начинает кипеть, и появляется

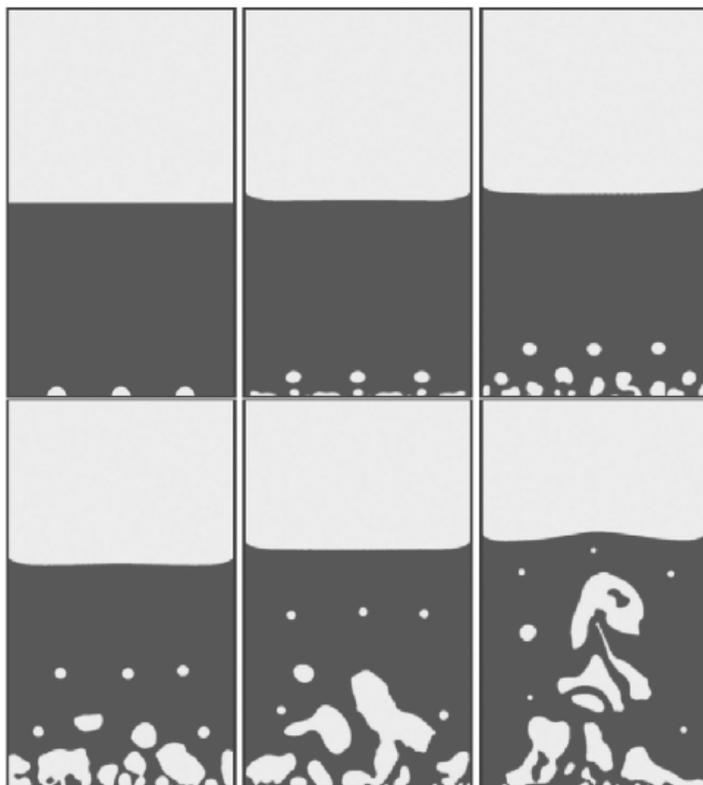


Рис. 13. Индикаторная функция на моменты времени $t = 0$ с, $t = 50$ мс, $t = 100$ мс, $t = 200$ мс, $t = 300$ мс, $t = 400$ мс

паровая пленка. Формируются новые пузырьки, которые начинают расти, поскольку позади них появляются еще новые пузырьки.

На рис. 14 показана индикаторная функция на моменты времени $t = 500$ мс, $t = 600$ мс, $t = 700$ мс, $t = 800$ мс, $t = 900$ мс, $t = 1000$ мс. Новые пузырьки продолжают расти, в то время как первые начинают взаимодействовать с верхней поверхностью жидкость-пар. В нижней части полости, которая является идеальной поверхностью, новые пузырьки появляются в разных местах, иных, чем начальные участки. Это означает, что их позиция и размер обусловлены конвекцией, теплопроводностью и капиллярностью.

Первые фрагменты показывают, что первые три пузырька движутся к поверхности за счет эффектов плавучести. В то же время нижняя стенка области нагревается, вода вокруг начинает кипеть, создавая паровую пленку.

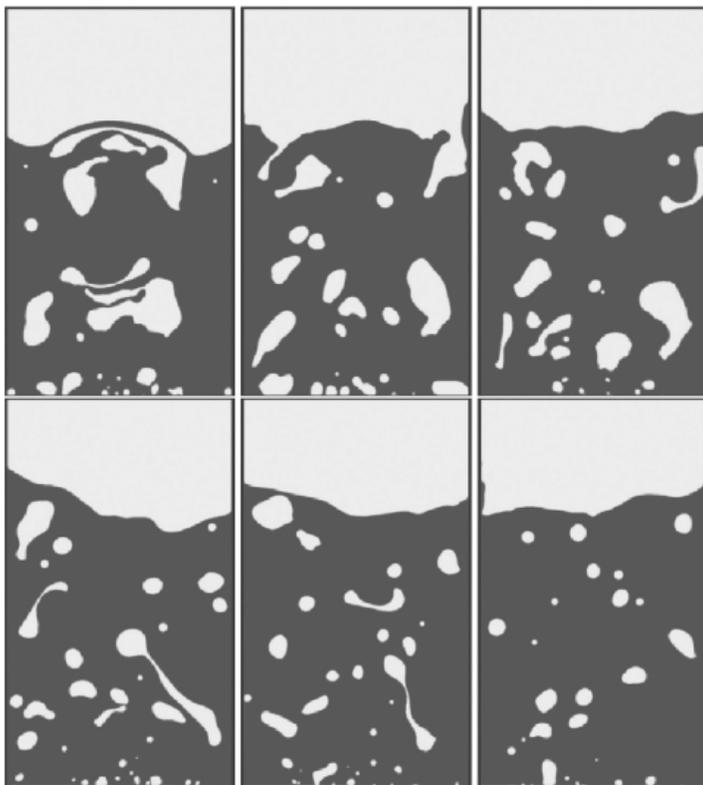


Рис. 14. Индикаторная функция на моменты времени $t = 500$ мс, $t = 600$ мс,
 $t = 700$ мс, $t = 800$ мс, $t = 900$ мс, $t = 1000$ мс

Явление кипения появляется как следствие теплового эффекта стены, что делает жидкость локально слегка перегретой. Действительно допущение, что жидкость содержит достаточно количество примеси, не принимая перегрева, так как чистые жидкости могут стать метастабильными, а реальные жидкости таковыми не являются. Таким образом, используя солвер фазового перехода из приложения 6V и убедившись, что жидкость не находится в стабильном состоянии — см. уравнения (63) и (64), можно вычислить равновесное состояние с помощью системы (66) и появление смешанных ячеек. Из «участка зарождения ячеек» и в результате эффектов слияния, обусловленных поверхностным натяжением, конвекцией и инерцией, появляются новые пузырьки. После создания эти новые пузырьки начинают расти и, поскольку теперь снова жидкость находится в контакте с нижней стенкой, за ними появляются новые пузырьки и начинают расти.

Стоит отметить, что нижняя стенка области является идеальной поверхностью, свободной от полостей или специальной обработки за исключением однородной температуры и постоянного контактного угла. В соответствии с профилями скорости первые пузырьки, похоже, создаются между конвективными валами, где скорость низкая, как показано на рис. 15.



Рис. 15. Объемные фракции водяного пара и векторы скорости вокруг пузырьков во время $t = 30$ мс и $t = 70$ мс

Эти результаты, как правило, показывают, что гетерогенному зародышеобразованию на стенках способствует явление кипения, но оно не является обязательным, если жидкость не может оставаться метастабильной. В этом случае каждый раз, когда часть жидкости перегрета, создается зародыш. Этот зародыш растет и объединяется с другими ядрами, динамически формируя пузыри. Поточковая модель не нуждается в критерии зародышеобразования за исключением отторжения метастабильных состояний, которые обычно применяются с реальными жидкостями. Процесс зародышеобразования самоподдерживающийся и сам определяет количество и размеры за-

рождающихся пузырьков. Чтобы проверить актуальность данного сценария, в следующем разделе рассмотрен такой же тест, но без изначально присутствующих пузырьков пара.

Кипящий поток без образования изначально присутствующих пузырьков пара. Тот же тест, что рассмотрен ранее, в отсутствие начальных центров зародышеобразования (рис. 12). Индикаторная функция показана на рис. 16 и 17.

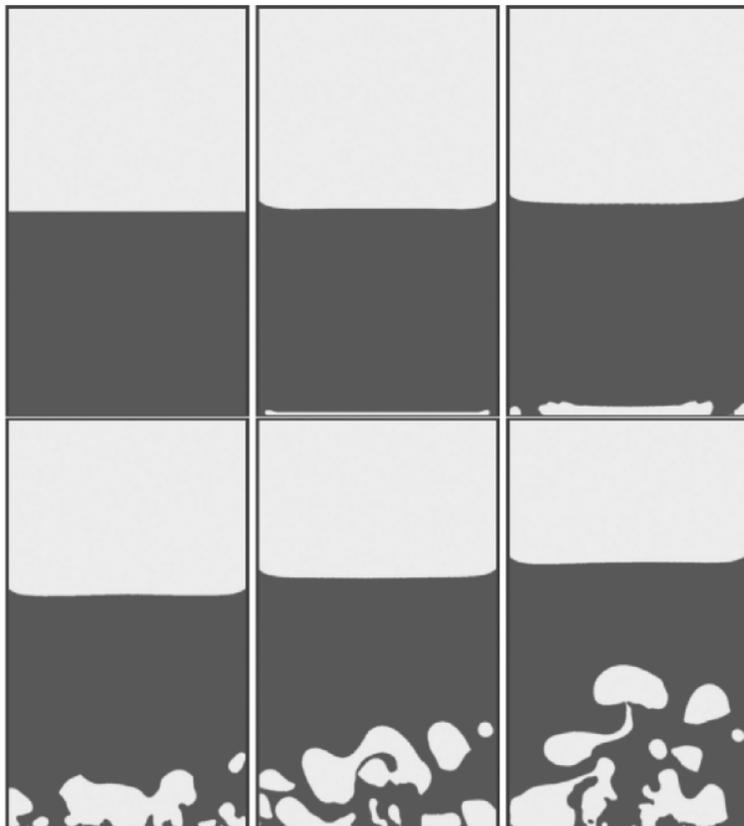


Рис. 16. Индикаторная функция показана на моменты времени $t = 0$ с, $t = 50$ мс, $t = 100$ мс, $t = 200$ мс, $t = 300$ мс, $t = 400$ мс

На рис. 16 показана индикаторная функция на моменты времени $t = 0$ с, $t = 50$ мс, $t = 100$ мс, $t = 200$ мс, $t = 300$ мс, $t = 400$ мс .

Первый фрагмент показывает создание паровой пленки. В результате поверхностного натяжения проявляются эффекты стенки, и в центре созда-

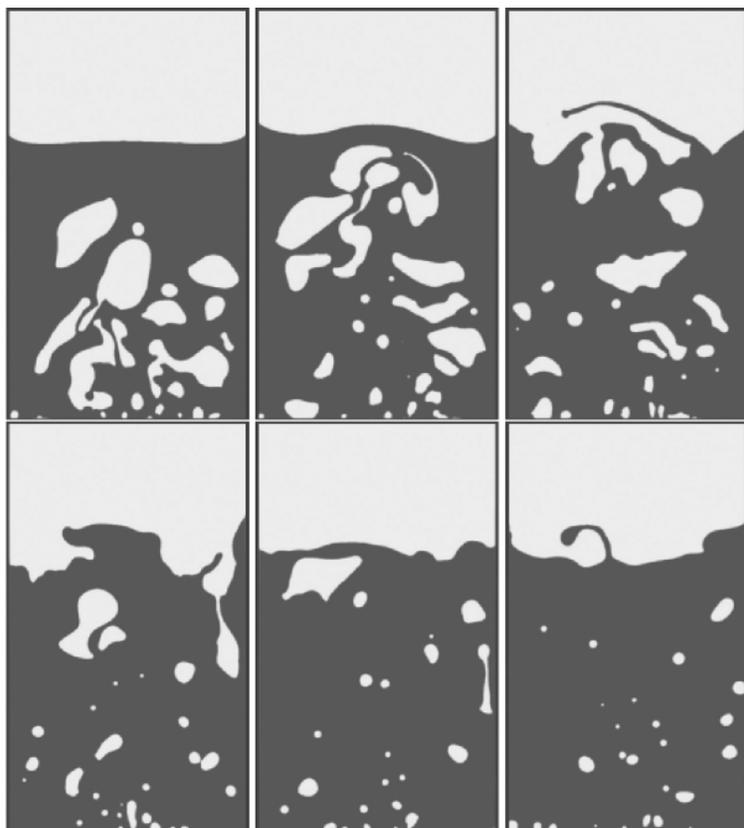


Рис. 17. Индикаторная функция на моменты времени $t = 500$ мс, $t = 600$ мс, $t = 700$ мс, $t = 800$ мс, $t = 900$ мс, $t = 1000$ мс

ется большой вытянутый пузырь пара. Затем конвективные эффекты, создаваемые первым пузырем, комбинируются с эффектами поверхностного натяжения, создавая новые пузыри на нижней стенке.

В результате эффекта стенки большой вытянутый пузырь пара, созданный в центре, распадается на несколько пузырьков. Новые пузырьки появляются на нижней стенке вследствие нагрева стенок.

На рис. 17 показана индикаторная функция на моменты времени $t = 500$ мс, $t = 600$ мс, $t = 700$ мс, $t = 800$ мс, $t = 900$ мс, $t = 1000$ мс.

Вновь созданные пузыри продолжают расти, в то время как первые начинают взаимодействовать с поверхностью.

Только возникнув, эти новые пузыри начинают расти, и поскольку теперь жидкость снова в контакте с нижней стенкой, новые пузыри появляются вслед за ними и начинают расти.

Эти результаты показывают, что явление кипения и, следовательно, связанная с ним потоковая модель не могут требовать гетерогенного зародышеобразования. Кроме того, качественно выбор размера зарождающихся пузырьков, а также способы подъема пузырьков очень похожи на предыдущий случай, когда места зарождения изначально присутствуют, консолидируя предыдущие наблюдения.

6.4. Выводы

В качестве первого шага на пути к прямому численному моделированию зародышеобразующих кипящих потоков была построена термо- и механически равновесная модель. Эта модель рассматривает сжимаемые жидкости, является гиперболической и согласуется со вторым законом термодинамики. Кроме того, она не имеет ограничений в отношении интерфейсной плотности, в отношении давления, а также скорости потока. К модели была добавлена дополнительная физика (поверхностное натяжение [6], гравитация, теплопроводность и фазовые изменения [25; 18]). Тем не менее модель кипящих потоков включает условия сжимаемости при малых числах Маха, и метод с преобуславливанием [31; 12] с неявной схемой [17] адаптируется к текущей модели, чтобы получить точные решения. Метод был проверен на точном решении 1D устойчивого резкого фронта испарения и 2D случая статического пузыря, показывающего согласие с законом Лапласа. Было рассмотрено двумерное моделирование зародышеобразующих кипящих потоков. Соответствующие результаты демонстрируют очень хорошее качественное совпадение, а также пригодность метода для вычисления таких сложных течений.

Приложение 6А. Вставка теплопроводности в уменьшенную модель

Чтобы добавить эффекты теплопроводности в систему (6), рассматривается общая неравновесная двухфазная потоковая модель:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \operatorname{grad}(\alpha_1) &= \mu(p_1 - p_2), \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_1 \rho_1 u_1) &= 0, \\
 \frac{\partial(\alpha \rho u)_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha \rho u \otimes u + \alpha p)_1 &= P_1 \nabla \alpha_1 + \lambda(u_2 - u_1), \\
 \frac{\partial(\alpha \rho E)_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha(\rho E + p)u + \alpha q)_1 &= (P_1 u_1 + q_1) \nabla \alpha_1 + \\
 + \lambda u_1'(u_2 - u_1) - \mu P_1'(p_1 - p_2) + H(T_2 - T_1), & \quad (60) \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_2 \rho_2 u_2) &= 0, \\
 \frac{\partial(\alpha \rho u)_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha \rho u \otimes u + \alpha p)_2 &= P_2 \nabla \alpha_2 - \lambda(u_2 - u_1), \\
 \frac{\partial(\alpha \rho E)_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha(\rho E + p)u + \alpha q)_2 &= (P_2 u_2 + q_2) \nabla \alpha_2 + \\
 + \lambda u_2'(u_2 - u_1) - \mu P_2'(p_1 - p_2) + H(T_2 - T_1). &
 \end{aligned}$$

Точные выражения для межфазных переменных P_i , u_i и теплового потока q_i бесполезны, также как бесполезны и точные выражения для различных параметров релаксации: давления μ , скорости λ и температуры H . Действительно, предельная модель представляет интерес, когда эти эффекты релаксации являются жесткими. Другими словами, асимптотический анализ может проводиться в пределе жесткой механической и тепловой релаксации.

Для каждой потоковой переменной f рассматривается асимптотическое расширение $f = f^0 + \epsilon f^1$. f^0 соответствует состоянию равновесия, f^1 — малым возмущениям. Кроме того, каждый коэффициент релаксации (μ , λ , H) предполагается жестким:

$$\mu = \frac{\mu_0}{\epsilon}, \quad \lambda = \frac{\lambda_0}{\epsilon}, \quad H = \frac{H_0}{\epsilon}, \quad (61)$$

где $\epsilon \rightarrow 0$.

В этом пределе ведущий системный порядок соответствует расширению системы (6) с эффектами теплопроводности:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_1 u) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P) &= 0, \\
 \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P)u + \operatorname{div}(q)) &= 0,
 \end{aligned} \tag{62}$$

где $q = -\lambda_c \overline{\nabla T}$; $\lambda_c = \alpha_1 \lambda_1 + \alpha_2 \lambda_2$, λ_k — теплопроводность смеси; λ_k — теплопроводность фазы k ; T — температура.

Приложение 6В. Солвер фазового перехода

Модель диффузионного интерфейса, представляемая системой (6), соответствует многофазному описанию в потоковой смеси, вовлеченной в механическое и тепловое равновесие, но без термодинамического равновесия. Фазовый переход осуществляется через солвер релаксации жесткой свободной энергии Гиббса. Это решатель используется везде внутри расчетной области, поскольку он считает существование чистой жидкости и чистого газа, также как и наличие смеси жидкость-газ на границах, когда фазовые изменения ожидаются. Однако если термодинамически равновесное состояние соответствует полному испарению (чистый пар) или полной конденсации (чистая жидкость), то термодинамически равновесный солвер релаксации не следует использовать. Таким образом, сначала проверяем это условие.

В каждой ячейке рассчитывается температура насыщения $T_{\text{SAT}}(P)$ с использованием давления смеси. Затем могут быть определены насыщенные объемы каждой фазы:

$$\begin{aligned}
 v_{\text{liq,SAT}} &= \frac{(\gamma_{\text{liq}} - 1) C_{v,\text{liq}} T_{\text{SAT}}}{P + P_{\infty,\text{liq}}}, \\
 v_{\text{vap,SAT}} &= \frac{(\gamma_{\text{vap}} - 1) C_{v,\text{vap}} T_{\text{SAT}}}{P}.
 \end{aligned} \tag{63}$$

Эти два объема определяют границы купольного насыщения для пары давление/температура $P, T_{\text{SAT}}(P)$. Таким образом, фазовое изменение может произойти только тогда, когда

$$v_{\text{liq,SAT}} < v < v_{\text{vap,SAT}}, \quad (64)$$

где v — удельный объем смеси.

Если данное условие выполнено, это означает, что двухфазная смесь присутствует. Тогда должно быть выполнено условие термодинамического равновесия:

$$g_{\text{liq}})_j = g_{\text{vap}})_j. \quad (65)$$

Если нет, состояние остается без изменений.

Если вычислительная ячейка содержит двухфазную смесь, соответствующая алгебраическая система для решения имеет вид:

$$\begin{aligned} \rho &= \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}} + \alpha_{\text{vap}} \rho_{\text{vap}}, \\ \text{или альтернативно } v &= \frac{1}{\rho} = Y_{\text{liq}} v_{\text{liq}} + Y_{\text{vap}} v_{\text{vap}}, \\ e &= Y_{\text{liq}} e_{\text{liq}} + Y_{\text{vap}} e_{\text{vap}}, \\ T_{\text{liq}} &= T_{\text{vap}} = T, \\ P_{\text{liq}} &= P_{\text{vap}} = P, \\ g_{\text{liq}} &= g_{\text{vap}}. \end{aligned} \quad (66)$$

Чтобы избежать численных проблем, связанных с интегрированием по времени жестких дифференциальных уравнений, когда v , появляющаяся в системе (6), стремится к бесконечности, термодинамическое равновесие системы (66) определяется методом, который приведен ниже.

Удельные объемы и внутренние энергии каждой фазы выражены как функции давления и температуры в (11) и (14). Каждый параметр, участвующий в этих выражениях ($\gamma_k, C_{v,k}, P_{\infty,k}, q_k$), рассчитывается для того, чтобы соответствовать фазовой диаграмме жидкость-пар, точнее, соответствующим кривым насыщения. Подробная информация относительно определения параметров EOS приведена в [18; 25].

Обозначим решения состояния релаксации системы (66) индексом «*», тогда ограничением консервативности массы становится

$$v_0 = Y_{\text{liq}}^* v_{\text{liq}}^* (P^*) + Y_{\text{vap}}^* v_{\text{vap}}^* (P^*) = Y_{\text{liq}}^* v_{\text{liq}}^* (P^*) + (1 - Y_{\text{liq}}^*) v_{\text{vap}}^* (P^*), \quad (67)$$

где $v_k^* (P^*) = v_k (P^*, T^*)$.

Ограничение давлений, температур и равенства свободных энергий Гиббса приводит к

$$T^*(P^*) = T_{\text{SAT}}(P^*) \quad (68)$$

Поэтому удельные объемы $v_{\text{liq}}^*(P^*)$ и $v_{\text{vap}}^*(P^*)$ становятся только функциями давления. Первое соотношение, связывающее массовую долю жидкости и давление, таким образом, примет вид

$$Y_{\text{liq}}^* = \frac{v_{\text{vap}}^*(P^*) - v_0}{v_{\text{vap}}^*(P^*) - v_{\text{liq}}^*(P^*)}. \quad (69)$$

Поскольку кинетическая энергия является постоянной, общее определение энергии смеси имеет вид

$$e_0 = Y_{\text{liq}}^* e_{\text{liq}}^*(P^*) + Y_{\text{vap}}^* e_{\text{vap}}^*(P^*) = Y_{\text{liq}}^* e_{\text{liq}}^*(P^*) + (1 - Y_{\text{liq}}^*) e_{\text{vap}}^*(P^*). \quad (70)$$

Второе соотношение, связывающее массовую фракцию жидкости и давление, примет вид

$$Y_{\text{liq}}^* = \frac{e_0 - e_{\text{vap}}^*(P^*)}{e_{\text{liq}}^*(P^*) - e_{\text{vap}}^*(P^*)}. \quad (71)$$

Это соотношение может быть также выражено в виде функции удельной энтальпии фаз:

$$Y_{\text{liq}}^* = \frac{h_{\text{vap}}^*(P^*) - (e_0 - P^* v_0)}{h_{\text{vap}}^*(P^*) - h_{\text{liq}}^*(P^*)}, \quad (72)$$

где h_{liq}^* и h_{vap}^* связаны через соотношение $h_{\text{vap}}^*(P^*) - h_{\text{liq}}^*(P^*) = L_v(P^*)$, где $L_v(P^*)$ представляет собой скрытую теплоту парообразования, которая является функцией давления.

Из предыдущих уравнений массовой доли получается единственная функция давления:

$$\frac{h_{\text{vap}}^*(P^*) - (e_0 - P^* v_0)}{h_{\text{vap}}^*(P^*) - h_{\text{liq}}^*(P^*)} - \frac{v_{\text{vap}}^*(P^*) - v_0}{v_{\text{vap}}^*(P^*) - v_{\text{liq}}^*(P^*)} = 0. \quad (73)$$

Ее решение находится с помощью метода Ньютона. Существование и единственность решения при $0 < Y_{\text{liq}}^* < 1$ доказаны в [1].

После определения давлений релаксации остальные переменные легко вычисляются из предыдущих термодинамических отношений.

Приложение 6С. HLLC Римановский солвер для производных

Напомним HLLC приближенный солвер Римана:

$$F_{L,R} = \frac{1}{2}(F_L + F_R) - \text{sign}(S_L) \frac{S_L}{2}(U_L^* - U_L) - \\ - \text{sign}(S_M) \frac{S_M}{2}(U_R^* - U_L^*) - \text{sign}(S_R) \frac{S_R}{2}(U_R - U_R^*).$$

Вектор потоковых производных определяется по формулам

$$\frac{\partial F_{LR}}{\partial U_L} = \frac{1}{2} \frac{\partial F_L}{\partial U_L} - \text{sign}(S_L) \frac{S_L}{2} \left(\frac{\partial U_L^*}{\partial U_L} - 1 \right) - \\ - \text{sign}(S_M) \frac{S_M}{2} \left(\frac{\partial (U_R^* - U_L^*)}{\partial U_L} \right) + \text{sign}(S_R) \frac{S_R}{2} \left(\frac{\partial U_R^*}{\partial U_L} \right), \quad (74)$$

$$\frac{\partial F_{LR}}{\partial U_R} = \frac{1}{2} \frac{\partial F_R}{\partial U_R} - \text{sign}(S_L) \frac{S_L}{2} \frac{\partial U_L^*}{\partial U_R} - \\ - \text{sign}(S_M) \frac{S_M}{2} \left(\frac{\partial (U_R^* - U_L^*)}{\partial U_R} \right) - \text{sign}(S_R) \frac{S_R}{2} \left(1 - \frac{\partial U_R^*}{\partial U_R} \right), \quad (75)$$

где

$$U_L^* = \frac{1}{S_M - S_L} \left[F_L - S_L U_L - [0, 0, p^*, S_M P^*]^T \right], \quad (76)$$

$$U_R^* = \frac{1}{S_M - S_R} \left[F_R - S_R U_R - (0, 0, p^*, S_M P^*)^T \right], \quad (77)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_L^*}{\partial U_L} = & \left[\left(\frac{\partial F_L}{\partial U_L} - S_L - \frac{\partial}{\partial U_L} \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, p^*, S_M P^* \right)^T \right) (S_M - S_L) - \right. \\ & \left. - \left(F_L - S_L U_L - \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, P^*, S_M P^* \right)^T \right) \frac{\partial S_M}{\partial U_L} \right] (S_M - S_L)^2, \end{aligned} \quad (78)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_L^*}{\partial U_R} = & \left[- \frac{\partial}{\partial U_L} \left(\left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, p^*, S_M P^* \right)^T \right) (S_M - S_L) - \right. \\ & \left. - \left(F_L - S_R U_L - \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, P^*, S_M P^* \right)^T \right) \frac{\partial S_M}{\partial U_R} \right] (S_M - S_L)^2, \end{aligned} \quad (79)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_R^*}{\partial U_L} = & \left[- \frac{\partial}{\partial U_L} \left(\left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, p^*, S_M P^* \right)^T \right) (S_M - S_R) - \right. \\ & \left. - \left(F_R - S_R U_R - \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, P^*, S_M P^* \right)^T \right) \frac{\partial S_M}{\partial U_L} \right] (S_M - S_R)^2, \end{aligned} \quad (80)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_R^*}{\partial U_R} = & \left[\left(\frac{\partial F_R}{\partial U_R} - S_R - \frac{\partial}{\partial U_R} \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, p^*, S_M P^* \right)^T \right) (S_M - S_R) - \right. \\ & \left. - \left(F_R - S_R U_R - \left(\mathbf{0}, \mathbf{0}, P^*, S_M P^* \right)^T \right) \frac{\partial S_M}{\partial U_R} \right] (S_M - S_R)^2. \end{aligned} \quad (81)$$

С использованием соотношений (32) и (33), а также $P_L^* = P_R^* = P^*$ получены два выражения для P^* :

$$P^* = F_L(2) - S_L U_L(2) - S_M (F_L(1) - S_L U_L(1)), \quad (82)$$

$$P^* = F_R(2) - S_R U_R(2) - S_M (F_R(1) - S_R U_R(1)). \quad (83)$$

Чтобы иметь более симметричную производную, используется следующее усредненное выражение:

$$P^* = \frac{1}{2} \left[F_R(2) - S_R U_R(2) - S_M (F_R(1) - S_R U_R(1)) + \right. \\ \left. + F_L(2) - S_L U_L(2) - S_M (F_L(1) - S_L U_L(1)) \right], \quad (84)$$

$$\frac{\partial P^*}{\partial U_L} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial F_L(2)}{\partial U_L} - S_L(0, 0, 1, 0)^T - \right. \\ \left. - S_M \left(\frac{\partial F_L(1)}{\partial U_L} - S_L(0, 1, 0, 0)^T \right) - (F_L(1) - S_L U_L(1)) \frac{\partial S_M}{\partial U_L} \right], \quad (85)$$

$$\frac{\partial P^*}{\partial U_R} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial F_R(2)}{\partial U_R} - S_R(0, 0, 1, 0)^T - \right. \\ \left. - S_M \left(\frac{\partial F_R(1)}{\partial U_R} - S_R(0, 1, 0, 0)^T \right) - (F_R(1) - S_R U_R(1)) \frac{\partial S_M}{\partial U_R} \right]. \quad (86)$$

Задается скорость контакта волны

$$S_M = \frac{S_R U_R(2) - S_L U_L(2) - (F_R(2) - F_L(2))}{S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1))}. \quad (87)$$

Задаются ее производные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_M}{\partial U_L} &= \left(\frac{\partial F_L(2)}{\partial U_L} - S_L \frac{\partial U_L(2)}{\partial U_L} \right) \times \\ &\times \frac{\left(S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1)) \right)}{\left(S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1)) \right)^2} - \\ &- \left(S_R U_R(2) - S_L U_L(2) - (F_R(2) - F_L(2)) \right) \times \\ &\times \frac{\left(\frac{\partial F_L(1)}{\partial U_L} - S_L \frac{\partial U_L(1)}{\partial U_L} \right)}{\left(S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1)) \right)^2}, \end{aligned} \quad (88)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_M}{\partial U_R} &= \left(S_R \frac{\partial U_R(2)}{\partial U_R} - \frac{\partial F_R(2)}{\partial U_R} \right) \times \\ &\times \frac{\left(S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1)) \right)}{\left(S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1)) \right)^2} - \\ &- \left(S_R U_R(2) - S_L U_L(2) - (F_R(2) - F_L(2)) \right) \times \\ &\times \frac{\left(S_R \frac{\partial U_R(1)}{\partial U_R} - \frac{\partial F_R(1)}{\partial U_R} \right)}{\left(S_R U_R(1) - S_L U_L(1) - (F_R(1) - F_L(1)) \right)^2}. \end{aligned} \quad (89)$$

Эти различные производные требуют знания $\frac{\partial F_L}{\partial U_L}$ и $\frac{\partial F_R}{\partial U_R}$.

Они соответствуют матрице Якоби рассматриваемой системы, которая требует производных от давления смеси. Давление смеси

$$P = \frac{1}{2} (A_1 + A_2 - (P_{\infty,1} + P_{\infty,2})) + \sqrt{\frac{1}{4} (A_2 - A_1 - (P_{\infty,2} - P_{\infty,1}))^2 + A_1 A_2}, \quad (90)$$

$$\text{где } A_k = \frac{Y_k (\gamma_k - 1) C v_k}{Y_1 C v_1 + Y_2 C v_2} (\rho(e - q) - P_{\infty,k})$$

Таким образом, соответствующие производные приобретают вид

$$\frac{\partial P}{\partial U} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_1}{\partial U} + \frac{\partial A_2}{\partial U} \right) + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial A_2}{\partial U} - \frac{\partial A_1}{\partial U} \right) (A_2 - A_1 - (P_{\infty,2} - P_{\infty,1})) + A_1 \frac{\partial A_2}{\partial U} + A_2 \frac{\partial A_1}{\partial U} \right] \quad (91)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4} (A_2 - A_1 - (P_{\infty,2} - P_{\infty,1}))^2 + A_1 A_2}}$$

где

$$\frac{\partial A_k}{\partial U} = (\rho(e - q) - P_{\infty,k}) \left[\frac{\frac{\partial \gamma_k}{\partial U} (\gamma_k - 1) C_{v,k} \rho (y_k (C_{v,1} - C_{v,2}) + \rho C_{v,2})}{(y_1 C_{v,1} + y_2 C_{v,2})^2} - \frac{y_k (\gamma_k - 1) C_{v,k} \left(\frac{\partial \rho}{\partial U} (y_1 (C_{v,1} - C_{v,2}) C_{v,2}) + \rho (C_{v,1} - C_{v,2}) \frac{\partial y_1}{\partial U} \right)}{(y_1 C_{v,1} + y_2 C_{v,2})^2} \right] + \quad (92)$$

$$+ \frac{y_k (\gamma_k - 1) C_{v,k}}{\rho y_1 (C_{v,1} - C_{v,2}) + \rho C_{v,2}} \left(\frac{\partial \rho e}{\partial U} - \frac{\partial \rho q}{\partial U} \right)$$

$$\text{с } y_k = \rho Y_k, \quad \rho e = \rho E - \frac{(\rho u)^2}{\rho} - \frac{(\rho v)^2}{\rho}, \quad \rho q = y_1 q_1 + y_2 q_2.$$

Приложение 6D. Производные теплового потока

Производные, входящие в термин теплопроводности, вычисляются из соотношений:

$$\frac{\partial q_{i,i+1/2}}{\partial U_i} = \frac{\lambda_{\text{eq},i} \lambda_{\text{eq},i+1}}{\frac{1}{2} \Delta x (\lambda_{\text{eq},i} + \lambda_{\text{eq},i+1})} \frac{\partial T_i}{\partial U_i} - \frac{T_{i+1} - T_i}{\frac{1}{2} \Delta x} \frac{\partial}{\partial U_i} \left(\frac{\lambda_{\text{eq},i} \lambda_{\text{eq},i+1}}{\lambda_{\text{eq},i} + \lambda_{\text{eq},i+1}} \right), \quad (93)$$

$$\frac{\partial q_{i,i+1/2}}{\partial U_{i+1}} = -\frac{\lambda_{\text{eq},i}\lambda_{\text{eq},i+1}}{\frac{1}{2}\Delta x(\lambda_{\text{eq},i} + \lambda_{\text{eq},i+1})} \frac{\partial T_{i+1}}{\partial U_{i+1}} -$$

$$-\frac{T_{i+1} - T_i}{\frac{1}{2}\Delta x} \frac{\partial}{\partial U_{i+1}} \left(\frac{\lambda_{\text{eq},i}\lambda_{\text{eq},i+1}}{\lambda_{\text{eq},i} + \lambda_{\text{eq},i+1}} \right), \quad (94)$$

$$\frac{\partial q_{i,i-1/2}}{\partial U_i} = -\frac{\lambda_{\text{eq},i-1}\lambda_{\text{eq},i}}{\frac{1}{2}\Delta x(\lambda_{\text{eq},i-1} + \lambda_{\text{eq},i})} \frac{\partial T_i}{\partial U_i} -$$

$$\frac{T_i - T_{i-1}}{\frac{1}{2}\Delta x} \frac{\partial}{\partial U_i} \left(\frac{\lambda_{\text{eq},i-1}\lambda_{\text{eq},i}}{\lambda_{\text{eq},i-1} + \lambda_{\text{eq},i}} \right), \quad (95)$$

$$\frac{\partial q_{i,i-1/2}}{\partial U_{i-1}} = \frac{\lambda_{\text{eq},i-1}\lambda_{\text{eq},i}}{\frac{1}{2}\Delta x(\lambda_{\text{eq},i-1} + \lambda_{\text{eq},i})} \frac{\partial T_{i-1}}{\partial U_{i-1}} -$$

$$-\frac{T_i - T_{i-1}}{\frac{1}{2}\Delta x} \frac{\partial}{\partial U_{i-1}} \left(\frac{\lambda_{\text{eq},i-1}\lambda_{\text{eq},i}}{\lambda_{\text{eq},i-1} + \lambda_{\text{eq},i}} \right) \quad (96)$$

c

$$\frac{1}{T} = \frac{\rho Y_1 (\gamma_1 - 1) C_{v,1}}{P + P_{\infty,1}} + \frac{\rho Y_2 (\gamma_2 - 1) C_{v,2}}{P + P_{\infty,2}}, \quad (97)$$

$$\frac{\partial \lambda_{\text{eq},i}}{\partial U_i} = \lambda_1 \frac{\partial \alpha_{i,1}}{\partial U_i} + \lambda_2 \frac{\partial \alpha_{i,2}}{\partial U_i}, \quad (98)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_i}{\partial U_i} = & -T_i^2 \left[(\gamma_1 - 1) C_{v,1} \left(\frac{\frac{\partial y_{i,1}}{\partial U_i} (P + P_{\infty,1}) - y_{i,1} \frac{\partial P_i}{\partial U_i}}{(P_i + P_{\infty,1})^2} \right) \right] + \\ & + T_i^2 \left[(\gamma_2 - 1) C_{v,2} \left(\frac{\frac{\partial y_{i,2}}{\partial U_i} (P + P_{\infty,2}) - y_{i,2} \frac{\partial P_i}{\partial U_i}}{(P_i + P_{\infty,2})^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (99)$$

где

$$y_{i,k} = \rho Y_k. \quad (100)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_{i,k}}{\partial U_i} &= \frac{\rho_k}{\rho} \frac{\partial y_{i,k}}{\partial U_i}, \\ \frac{\partial \alpha_{i,k}}{\partial U_i} &= (\gamma_k - 1) C_{v,k} \times \\ & \times \left[\frac{\left(T_i \frac{\partial y_{i,k}}{\partial U_i} + y_{i,k} \frac{\partial T_i}{\partial U_i} \right) (P_i + P_{\infty,k}) - y_{i,k} T_i \frac{\partial P_i}{\partial U_i}}{(P_i + P_{\infty,k})^2} \right]. \end{aligned} \quad (101)$$

Производная $\frac{\partial P_i}{\partial U_i}$ вычисляется с помощью соотношения (91).

Приложение 6Е. Производные поверхностных и объемных сил

Сначала рассматриваются производные поверхностного натяжения.

Кривизна κ_{ij}^n принята постоянной в каждой ячейке. Для получения производных используется выражение (45)

$$\frac{\overline{\partial \nabla C_{ij}^n}}{\partial U_{ij}} = 0, \quad \frac{\overline{\partial \nabla C_{ij}^n}}{\partial U_{i-1j}} = -\frac{1}{2\Delta x} \frac{\partial C_{i-1j}^n}{\partial U_{i-1j}}, \quad \frac{\overline{\partial \nabla C_{ij}^n}}{\partial U_{i+1j}} = \frac{1}{2\Delta x} \frac{\partial C_{i+1j}^n}{\partial U_{i+1j}}. \quad (102)$$

$$\frac{\overline{\partial \nabla C_{ij}^n}}{\partial U_{ij-1}} = -\frac{1}{2\Delta y} \frac{\partial C_{ij-1}^n}{\partial U_{ij-1}}, \quad \frac{\overline{\partial \nabla C_{ij}^n}}{\partial U_{ij+1}} = \frac{1}{2\Delta y} \frac{\partial C_{ij+1}^n}{\partial U_{ij+1}}. \quad (103)$$

Индикаторная функция является частью вектора U , производные от U очень простые. Производные слагаемого силы тяжести выглядят следующим образом:

$$\frac{\partial \rho_{ij} g}{\partial U_{ij}} = g \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial U_{ij}}, \quad (104)$$

$$\frac{\partial \rho_{ij} g u_{ij}}{\partial U_{ij}} = g \frac{\partial \rho_{ij} u}{\partial U_{ij}}. \quad (105)$$

Переменные ρ_{ij} и $\rho_{ij} u$ — части вектора U , их производные являются прямыми.

Литература

1. Allaire G., Faccanoni G., Kokh S. A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model // *Comptes Rendus Mathematique*. — 2007. — 344. — P. 135—140.
2. Anderson D., McFadden G., Wheeler A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Ann. Rev. Fluid Mech.* — 1998. — 30. — P. 139—165.
3. Balay S., Gropp W. D., McInnes L. C., Smith B. F. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries // *Modern Software Tools in Scientific Computing* / E. Arge, A. M. Bruaset, H. P. Langtangen (eds.). — [S. l.]: Birkhäuser Press, 1997. — P. 163—202.
4. Balay S., Brown J., Buschelman K. et al. PETSc User's Manual: Technical Report ANL-95/11 — Revision 3.4 / Argonne National Laboratory. — [S. l.], 2013.
5. Balay S., Brown J., Buschelman K. et al. PETSc Web page // <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.

6. *Brackbill J., Kothe D., Zemach C.* A continuum method for modeling surface tension // *J. Comput. Phys.* — 1992. — 100. — P. 335—354.
7. *Braconnier B., Nkonga B.* An all-speed relaxation scheme for interface flows with surface tension // *J. Comput. Phys.* — 2009. — 228. — P. 5722—5739.
8. *Cahn J., Hilliard J.* Free energy of a nonuniform system. — Pt. I: Interfacial free energy // *J. Chem. Phys.* — 1958. — 28. — P. 258.
9. *Clavin P., Garcia P.* The influence of the temperature dependence of diffusivities on the dynamics of flame fronts // *J. de Mécanique Théorique et Appliquée.* — 1983. — 2. — P. 245—263.
10. *Davis S.* Simplified second-order Godunov-type methods // *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* — 1988. — 9. — P. 445—473.
11. *Favrie N., Gavriljuk S., Saurel R.* Solid–fluid diffuse interface model in cases of extreme deformations // *J. Comput. Phys.* — 2009. — 228. — P. 6037—6077.
12. *Guillard H., Viozat C.* On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit // *Comput. Fluids.* — 1999. — 28. — P. 63—86.
13. *Harten A., Lax P., van Leer B.* On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws // *SIAM Rev.* — 1983. — 25. — P. 35—61.
14. *Jamet D., Lebaigue O., Coutris N., Delhay J. M.* 2001. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change // *J. Comput. Phys.* — 169. — P. 624—651.
15. *Juric D., Tryggvason G.* Computations of boiling flows // *Intern. J. Multiphase Flow.* — 1998. — 24. — P. 387—410.
16. *Kapila A., Menikoff R., Bdzil J. et al.* Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations // *Phys. Fluids.* — 2001. — 13. — P. 3002—3024.
17. *Le Martelot S., Nkonga B., Saurel R.* Liquid and liquid–gas flows at all speed // *J. Comput. Phys.* — 2013. — 255. — P. 53—82.
18. *Le Métayer O., Massoni J., Saurel R.* Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques // *Intern. J. Thermal Sci.* — 2004. — 43. — P. 265—276.
19. *Perigaud G., Saurel R.* A compressible flow model with capillary effects // *J. Comput. Phys.* — 2005. — 209. — P. 139—178.
20. *Petitpas F., Massoni J., Saurel R. et al.* Diffuse interface model for high speed cavitating underwater systems // *Intern. J. Multiphase Flow.* — 2009. — 35. — P. 747—759.

21. *Petitpas F., Saurel R., Franquet E., Chinnayya A.* Modelling detonation waves in condensed energetic materials: multiphase CJ conditions and multidimensional computations // *Shock Waves*. — 2009. — 19. — P. 377—401.
22. *Saad Y.* Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems. — [S. l.]: Manchester Univ. Press, 1992.
23. *Saurel R., Abgrall R.* A multiphase Godunov method for multifluid and multiphase flows // *J. Comput. Phys.* — 1999. — 150. — P. 425—467.
24. *Saurel R., Le Métayer O., Massoni J., Gavriljuk S.* Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation // *Shock Waves*. — 2007. — 16. — P. 209—232.
25. *Saurel R., Petitpas F., Abgrall R.* Modelling phase transition in metastable liquids: application to cavitating and flashing flows // *J. Fluid Mech.* — 2008. — 607. — P. 313—350.
26. *Saurel R., Petitpas F., Berry R.* Simple and efficient methods relaxation for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures // *J. Comput. Phys.* — 2009. — 228. — P. 1678—1712.
27. *Schoch S., Nikiforakis N., Lee B. J., Saurel R.* Multi-phase simulation of ammonium nitrate emulsion detonations // *Combust. Flame*. — 2013. — 160. — P. 1883—1899.
28. *Shukla R., Pantano C., Freund J.* An interface capturing method for the simulation of multi-phase compressible flows // *J. Comput. Phys.* — 2010. — 229. — P. 7411—7439.
29. *Toro E., Spruce M., Speares W.* Restoration of the contact surface in the HLLRiemann solver // *Shock Waves*. — 1994. — 4. — P. 25—34.
30. *Tryggvason G., Bunner B., Esmaeeli A. et al.* A front-tracking method for the computations of multiphase flow // *J. Comput. Phys.* — 2001. — 169. — P. 708—759.
31. *Turkel E.* Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations // *J. Comput. Phys.* — 1987. — 72. — P. 277—298.
32. *Wood A. B.* A textbook of Sound. — [S. l.]: Bell Eds., 1930.

Глава 7. Методика моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения

В настоящее время в ИБРАЭ РАН разработана согласованная вычислительная методика моделирования сложных ударно-волновых процессов в двухфазных средах в присутствии сил поверхностного натяжения. Методика позволяет моделировать явления кипения, испарения и конденсации. Моделирование осуществляется с помощью метода дискретных уравнений с использованием HLLC солвера с учетом тензора поверхностного натяжения, обеспечивающего выравнивание по температуре и Гиббсу, для учета особенностей решаемых двухфазных задач с уравнением состояния stiffened (сгущенного газа). Далее в главе будут изложены подробности методики и приведены результаты ее верификации, а также практические примеры применения развитого подхода.

7.1. Описание базовой физической модели

Существуют два класса методов моделирования двухфазных течений при наличии интерфейса (границы) между фазами.

В методах первого класса интерфейсная граница рассматривается как резкий разрыв. Ее положение отслеживается при помощи специального уравнения переноса или в случае лагранжева подхода движется вместе с расчетной ячейкой. Такие методы расчета не позволяют моделировать динамическое появление интерфейсной границы, а также моделировать газодинамические течения в присутствии интерфейсной границы, разделяющей чистую среду и смесь.

В методах второго класса интерфейсная граница рассматривается как диффузионная область наподобие контактных разрывов в газовой динамике. Такие диффузионные интерфейсы представляют собой двухфазную или двухкомпонентную смесь, появившуюся в результате численной диффузии.

Термодинамические параметры компонентов смеси должны обеспечивать выполнение интерфейсных условий, а также численное согласие с термодинамическими законами. Основные достоинства данного подхода заключаются в следующем:

- один и тот же алгоритм используется как для областей с беспримесной средой, так и для областей с двухкомпонентной средой;
- возможно динамическое образование новых интерфейсов, которые изначально отсутствовали, как в задаче о кавитации;
- описываются газодинамические течения в присутствии интерфейсной границы, разделяющей чистую среду и смесь.

Модели, позволяющие описывать диффузионные области, в свою очередь, подразделяются на неравновесные (нет равенства давлений и скоростей фаз) и равновесные (фазы находятся в механическом равновесии). Неравновесная двухфазная модель может быть получена с использованием процедуры усреднения Drew [1] из уравнений Навье — Стокса, записанных для каждой из фаз. Для одномерного случая в отсутствие фазовых переходов и теплообмена модель будет иметь вид [2; 3]

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g P_g)}{\partial x} = P_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x}, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \frac{\partial u_g (\alpha_g \rho_g E_g + \alpha_g P_g)}{\partial x} = P_i V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x}, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l u_l}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l u_l}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_l \rho_l u_l^2 + \alpha_l P_l)}{\partial x} = -P_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x}, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l E_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l (\alpha_l \rho_l E_l + \alpha_l P_l)}{\partial x} = -P_i V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x}, \end{array} \right. \quad (7.1.1)$$

где α_K — объемная доля ($K = g, l, \alpha_g + \alpha_l = 1$); ρ_K — плотность; P_K — давление; u_K — скорость; $E_K = e_K + 1/2 u_K^2$ — внутренняя энергия; V_i — интерфейсная скорость; P_i — интерфейсное давление.

Эта модель включает по два уравнения непрерывности, импульса и энергии для каждой из фаз, а также уравнение переноса объемной доли. Чтобы учесть

дополнительные условия на границе раздела фаз (равенство скоростей), а также процесс релаксации давлений ($P_g \neq P_l$) после прохождения ударной волны через границу раздела, в модель вводятся дополнительные члены [2]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \mu (P_g - P_l), \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g P_g)}{\partial x} = P_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \lambda (u_l - u_g), \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \frac{\partial u_g (\alpha_g \rho_g E_g + \alpha_g P_g)}{\partial x} = \\ = P_i V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \mu P_i (P_g - P_l) + \lambda V_i (u_l - u_g), \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l u_l}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l u_l}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_l \rho_l u_l^2 + \alpha_l P_l)}{\partial x} = -P_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} - \lambda (u_l - u_g), \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l E_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l (\alpha_l \rho_l E_l + \alpha_l P_l)}{\partial x} = \\ = -P_i V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} - \mu P_i (P_g - P_l) - \lambda V_i (u_l - u_g), \end{array} \right. \quad (7.1.2)$$

где λ и μ — коэффициенты релаксации скорости и давления соответственно. На интерфейсной границе фаз эти коэффициенты стремятся к бесконечности, что соответствует мгновенной релаксации скоростей и давлений. Основной недостаток данного подхода связан с присутствием неконсервативных членов. Это не позволяет определить явный вид соотношений термодинамических параметров на фронте ударной волны. Также вычисление интерфейсных величин скорости V_i и давления P_i не является однозначным.

7.2. Модель из семи уравнений

Дальнейшее развитие модели (7.1.1), (7.1.2) было проведено в работе [4], где при помощи интегрального усреднения системы (7.1.1) и более детального учета топологии смеси неконсервативные и потоковые члены выража-

ются через дискретное суммирование вкладов от возможных топологических реализаций. В одномерном случае, используя уравнение адвекции со скоростью σ для характеристической функции двухфазной смеси $\frac{\partial X_g}{\partial t} + \sigma \frac{\partial X_g}{\partial x} = 0$, можно получить следующую форму уравнений для не-равновесной модели:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \varepsilon \left(\sigma \frac{\partial X_g}{\partial x} \right) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{\partial (X_g \rho_g u_g)}{\partial x} \right) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{\partial (X_g (\rho_g u_g^2 + P_g))}{\partial x} \right) = \varepsilon \left(P_g \frac{\partial X_g}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{\partial (X_g u_g (\rho_g E_g + P_g))}{\partial x} \right) = \varepsilon \left(u_g P_g \frac{\partial X_g}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{\partial (X_l \rho_l u_l)}{\partial x} \right) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l u_l}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{\partial (X_l (\rho_l u_l^2 + P_l))}{\partial x} \right) = \varepsilon \left(P_l \frac{\partial X_l}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l E_l}{\partial t} + \varepsilon \left(\frac{\partial (X_l u_l (\rho_l E_l + P_l))}{\partial x} \right) = \varepsilon \left(u_l P_l \frac{\partial X_l}{\partial x} \right), \end{array} \right. \quad (7.2.1)$$

где $\varepsilon()$ — процедура усреднения, коммутирующая с пространственной и временной производными; $\alpha_k = \varepsilon(X_k)$.

Средняя величина конвективного потока для первой фазы в (7.2.1) $\varepsilon(X_g F_g(U_g)) = \varepsilon(X_g \rho_g u_g, X_g (\rho_g u_g^2 + P_g), X_g (\rho_g E_g + P_g) u_g)$ на $i+1/2$ интерфейсе расчетной сетки находится как сумма вкладов от возможных топологических реализаций двухфазной среды на данном интерфейсе:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(X_g F_g)_{i+1/2} &= \max((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i+1}, 0) \times \\
 &\times F_{\text{RIM}}((W_g)_i, (W_l)_{i+1})(\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^+ + \\
 &+ \min((\alpha_g)_i, (\alpha_g)_{i+1}) F_{\text{RIM}}((W_g)_i, (W_g)_{i+1}) + \\
 &+ \max((\alpha_g)_{i+1} - (\alpha_g)_i, 0) F_{\text{RIM}}((W_g)_i, (W_g)_{i+1})(\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^-,
 \end{aligned} \tag{7.2.2}$$

где $(W_k)_i = (\rho_k)_i, (\rho_k u_k)_i, (\rho_k E_k)_i)^T$, $k = g, l$; $F_{\text{RIM}}((W_L)_i, (W_R)_{i+1})$ — конвективный поток на границе $(i+1/2)$ ячейки i , вычисленный с использованием точного римановского солвера [5] или HLLC солвера [21] для начальных состояний W_L слева и W_R справа;

$$\begin{aligned}
 (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^+ &= \begin{cases} 1, & \text{если } \sigma((W_g)_i, (W_l)_{i+1}) \geq 0, \\ 0, & \text{если } \sigma((W_g)_i, (W_l)_{i+1}) < 0; \end{cases} \\
 (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- &= \begin{cases} 0, & \text{если } \sigma((W_l)_i, (W_g)_{i+1}) \geq 0, \\ 1, & \text{если } \sigma((W_l)_i, (W_g)_{i+1}) < 0. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Аналогично определяется средняя величина конвективного потока для второй фазы $\varepsilon(X_l F_l(U_l)) = \varepsilon(X_l \rho_l u_l, X_l(\rho_l u_l^2 + P_l), X_l(\rho_l E_l + P_l)u_l)^T$ в (7.2.1):

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(X_l F_l)_{i+1/2} &= \max((\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i+1}, 0) \times \\
 &\times F_{\text{RIM}}((W_l)_i, (W_g)_{i+1})(\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^+ + \\
 &+ \min((\alpha_l)_i, (\alpha_l)_{i+1}) F_{\text{RIM}}((W_l)_i, (W_l)_{i+1}) + \\
 &+ \max((\alpha_l)_{i+1} - (\alpha_l)_i, 0) F_{\text{RIM}}((W_l)_i, (W_l)_{i+1})(\beta_{i+1/2}^{(1,2)})^-.
 \end{aligned} \tag{7.2.3}$$

Средняя величина потока Лагранжа для первой фазы в (7.2.1)

$\varepsilon((F_g)_{\text{lag}}(U_g)) = \varepsilon\left(0, P_g \frac{\partial X_g}{\partial x}, P_g u_g \frac{\partial X_g}{\partial x}\right)^T$ в i -й расчетной ячейке определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon \left((F_g)_{\text{lag}} \right) &= -\max \left((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i+1}, 0 \right) \times \\
 &\times F^{\text{lag}} \left((W_g)_i, (W_l)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^- + \\
 &+ \max \left((\alpha_g)_{i+1} - (\alpha_g)_i, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_l)_i, (W_g)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- - \\
 &- \max \left((\alpha_g)_{i-1} - (\alpha_g)_i, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_g)_{i-1}, (W_l)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(g,l)})^+ + \\
 &+ \max \left((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i-1}, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_l)_{i-1}, (W_g)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(l,g)})^+ + \\
 &+ \Lambda_i \left(F^{\text{lag}} \left((W_g)_i, (W_l)_i \right) - F^{\text{lag}} \left((W_l)_i, (W_g)_i \right) \right)
 \end{aligned} \tag{7.2.4}$$

где $F^{\text{lag}} \left((W_L)_i, (W_R)_{i+1} \right) = F_{\text{RIM}} \left((W_L)_i, (W_R)_{i+1} \right) - \sigma \left((W_L)_i, (W_R)_{i+1} \right) U_g$ — поток Лагранжа на границе $(i+1/2)$ ячейки i , вычисленный с использованием точного римановского солвера [4] для начальных состояний W_L слева и W_R справа; $\Lambda_i = \frac{\varepsilon(N_{\text{int}})_i}{\Delta x_i}$ — среднее число внутренних интерфейсов в ячейке i .

Также определяется средняя величина потока Лагранжа для второй фазы

в (7.2.1) $\varepsilon \left((F_l)_{\text{lag}} (U_l) \right) = \varepsilon \left(0, P_l \frac{\partial X_l}{\partial x}, P_l u_l \frac{\partial X_l}{\partial x} \right)^T$ в i -й расчетной ячейке:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon \left((F_l)_{\text{lag}} \right) &= -\max \left((\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i+1}, 0 \right) \times \\
 &\times F^{\text{lag}} \left((W_l)_i, (W_g)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- + \\
 &+ \max \left((\alpha_l)_{i+1} - (\alpha_l)_i, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_g)_i, (W_l)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^- - \\
 &- \max \left((\alpha_l)_{i-1} - (\alpha_l)_i, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_l)_{i-1}, (W_g)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(l,g)})^+ + \\
 &+ \max \left((\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_g)_{i-1}, (W_l)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(g,l)})^+ + \\
 &+ \Lambda_i \left(F^{\text{lag}} \left((W_l)_i, (W_g)_i \right) - F^{\text{lag}} \left((W_g)_i, (W_l)_i \right) \right)
 \end{aligned} \tag{7.2.5}$$

где

$$F^{\text{lag}} \left((W_L)_i, (W_R)_{i+1} \right) = F_{\text{RIM}} \left((W_L)_i, (W_R)_{i+1} \right) - \sigma \left((W_L)_i, (W_R)_{i+1} \right) U_l.$$

Численная аппроксимация уравнения адвекции объемной доли в системе (7.2.1) имеет вид

$$\begin{aligned}
 & \frac{(\alpha_g)_i^{n+1} - (\alpha_g)_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} \left[-\max((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i+1}, 0) \times \right. \\
 & \times \sigma((W_g)_i, (W_l)_{i+1}) (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^- + \\
 & + \max((\alpha_g)_{i+1} - (\alpha_g)_i, 0) \sigma((W_l)_i, (W_g)_{i+1}) (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- - \\
 & - \max((\alpha_g)_{i-1} - (\alpha_g)_i, 0) \sigma((W_g)_{i-1}, (W_l)_i) (\beta_{i-1/2}^{(g,l)})^+ + \\
 & + \max((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i-1}, 0) \sigma((W_l)_{i-1}, (W_g)_i) (\beta_{i-1/2}^{(l,g)})^+ \left. \right] + \\
 & + \Lambda_i \left(\sigma((W_g)_i, (W_l)_i) - \sigma((W_l)_i, (W_g)_i) \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{7.2.6}$$

Средняя величина потока Лагранжа из (7.2.4) и (7.2.5) может быть представлена в виде суммы вкладов от внешних и внутренних интерфейсов:

$$\varepsilon((F_k)_{\text{lag}_i}) = \varepsilon((F_k)_{\text{lag}_i})^{\text{bound}} + \varepsilon((F_k)_{\text{lag}_i})^{\text{relax}}, \tag{7.2.7}$$

где $k = g, l$;

$$\varepsilon((F_g)_{\text{lag}_i})^{\text{relax}} = \Lambda_i \left(F^{\text{lag}}((W_g)_i, (W_l)_i) - F^{\text{lag}}((W_l)_i, (W_g)_i) \right) \tag{7.2.8}$$

$$\begin{aligned}
 \varepsilon((F_g)_{\text{lag}_i})^{\text{bound}} &= -\max((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i+1}, 0) \times \\
 & \times F^{\text{lag}}((W_g)_i, (W_l)_{i+1}) (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^- + \\
 & + \max((\alpha_g)_{i+1} - (\alpha_g)_i, 0) F^{\text{lag}}((W_l)_i, (W_g)_{i+1}) (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- - \\
 & - \max((\alpha_g)_{i-1} - (\alpha_g)_i, 0) F^{\text{lag}}((W_g)_{i-1}, (W_l)_i) (\beta_{i-1/2}^{(g,l)})^+ + \\
 & + \max((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i-1}, 0) F^{\text{lag}}((W_l)_{i-1}, (W_g)_i) (\beta_{i-1/2}^{(l,g)})^+,
 \end{aligned} \tag{7.2.9}$$

$$\varepsilon((F_l)_{\text{lag}_i})^{\text{relax}} = \Lambda_i \left(F^{\text{lag}}((W_l)_i, (W_g)_i) - F^{\text{lag}}((W_g)_i, (W_l)_i) \right) \tag{7.2.10}$$

$$\begin{aligned}
 \varepsilon \left((F_l)_{\text{lag}} \right)_i^{\text{bound}} &= -\max \left((\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i+1}, 0 \right) \times \\
 &\times F^{\text{lag}} \left((W_l)_i, (W_g)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- + \\
 &+ \max \left((\alpha_l)_{i+1} - (\alpha_g)_i, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_g)_i, (W_l)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^- - (7.2.11) \\
 &- \max \left((\alpha_l)_{i-1} - (\alpha_l)_i, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_l)_{i-1}, (W_g)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(l,g)})^+ + \\
 &+ \max \left((\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}, 0 \right) F^{\text{lag}} \left((W_g)_{i-1}, (W_l)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(g,l)})^+.
 \end{aligned}$$

Аналогично разделяются вклады внешних и внутренних интерфейсов в уравнение адвекции объемной доли. Тогда численное решение системы (7.2.1) можно найти, последовательно вычисляя вклады от внешних и внутренних интерфейсов.

Первый шаг:

$$\left\{ \begin{aligned}
 &\frac{(\alpha_g)_i - (\alpha_g)_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} \left[-\max \left((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i+1}, 0 \right) \times \right. \\
 &\times \sigma \left((W_g)_i, (W_l)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(g,l)})^- + \\
 &+ \max \left((\alpha_g)_{i+1} - (\alpha_g)_i, 0 \right) \sigma \left((W_l)_i, (W_g)_{i+1} \right) (\beta_{i+1/2}^{(l,g)})^- - \\
 &- \max \left((\alpha_g)_{i-1} - (\alpha_g)_i, 0 \right) \sigma \left((W_g)_{i-1}, (W_l)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(g,l)})^+ + \\
 &\left. + \max \left((\alpha_g)_i - (\alpha_g)_{i-1}, 0 \right) \sigma \left((W_l)_{i-1}, (W_g)_i \right) (\beta_{i-1/2}^{(l,g)})^- \right] = 0, \\
 &\frac{(\alpha_g)_i (W_g)_i - (\alpha_g)_i^n (W_g)_i^n}{\Delta t} + \frac{\varepsilon (X_g F_g)_{i+1/2} - \varepsilon (X_g F_g)_{i-1/2}}{\Delta x_i} = \varepsilon (F_g^{\text{lag}})_i^{\text{bound}}, \\
 &\frac{(\alpha_l)_i (W_l)_i - (\alpha_l)_i^n (W_l)_i^n}{\Delta t} + \frac{\varepsilon (X_l F_l)_{i+1/2} - \varepsilon (X_l F_l)_{i-1/2}}{\Delta x_i} = \varepsilon (F_l^{\text{lag}})_i^{\text{bound}}.
 \end{aligned} \right. \quad (7.2.12)$$

Второй шаг:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{(\alpha_g)_{i}^{n+1} - (\alpha_g)_{i}^{\prime}}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} \Lambda_i \left\{ \sigma \left((W_g)_{i}, (W_l)_{i} \right) - \sigma \left((W_l)_{i}, (W_g)_{i} \right) \right\} = 0, \\ \frac{(\alpha_g)_{i}^{n+1} (W_g)_{i}^{n+1} - (\alpha_g)_{i}^{\prime} (W_g)_{i}^{\prime}}{\Delta t} = \varepsilon (F_g^{\text{lag}})_{i}^{\text{relax}}, \\ \frac{(\alpha_l)_{i}^{n+1} (W_l)_{i}^{n+1} - (\alpha_l)_{i}^{\prime} (W_l)_{i}^{\prime}}{\Delta t} = \varepsilon (F_l^{\text{lag}})_{i}^{\text{relax}}, \end{array} \right. \quad (7.2.13)$$

где $\varepsilon (F_k^{\text{lag}})_{i}^{\text{bound}}$ и $\varepsilon (F_k^{\text{lag}})_{i}^{\text{relax}}$ определяются из (7.2.9), (7.2.11) и (7.2.8), (7.2.10) соответственно.

В случае перемешивания фаз, т. е. при большом значении величины Λ_i , решение (7.2.13) эквивалентно введению мгновенной релаксации для скоростей и давлений [6].

Моделирование процессов испарения в двухфазных смесях в рамках описанного подхода рассматривалось в [7]. В этой работе испарение моделируется при помощи образования дополнительной ударной волны испарения. В качестве замыкающего кинетического соотношения при этом использовалось условие Чепмена — Жуге, применение которого справедливо в случае взрывного испарения сильно перегретой жидкости. Для более медленного испарения нужно использовать другое соотношение, определяющееся динамикой рассматриваемой задачи.

7.2.1. Точный римановский солвер для уравнения состояния stiffened

Общее точное решение задачи Римана для уравнений газовой динамики с двучленным уравнением состояния состоит из элементарных решений (ударная волна, тангенциальный разрыв, волна разряжения), которые отделены друг от друга областями с постоянными значениями параметров, так как такие состояния также являются точными решениями уравнений газовой динамики [5]. На рис. 1 представлена общая конфигурация для распада произвольного разрыва термодинамических параметров на границе раздела двух сред, состояние которых описывается уравнением состояния stiffened.

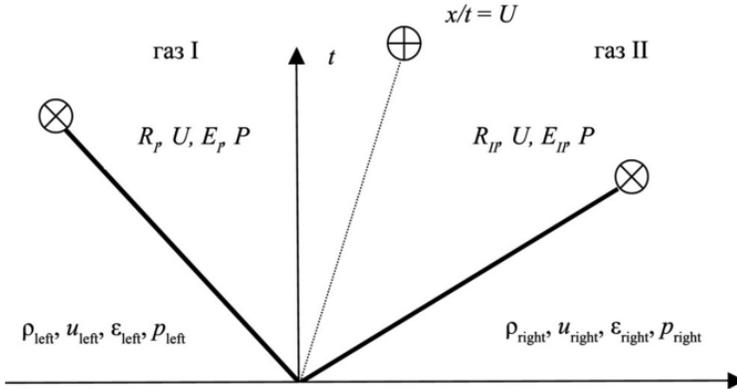


Рис. 1. Распад произвольного разрыва

Строчные буквы обозначают значения термодинамических параметров (плотности, скорости, энергии и давления) задачи Римана слева и справа от начального положения произвольного разрыва, а заглавные буквы — промежуточные значения во внутренних областях слева и справа от контактного разрыва. Значок \otimes обозначает ударную волну или волну разряжения; а значок \oplus — тангенциальный разрыв. Все возможные конфигурации решения представлены в табл. 1. В ней решение для произвольного луча ξ в плоскости (x, t) , где $-\infty < \xi < \infty$, обозначено $Z = Z(\xi) = [\rho(\xi), u(\xi), \varepsilon(\xi), p(\xi)]^T$.

Для левой ударной волны поток газа через нее определяется следующим образом:

$$m_{\text{left}} = \sqrt{\frac{\rho_{\text{left}}}{2} [(P + \pi_{\text{left}})(\gamma_{\text{left}} + 1) + (p_{\text{left}} + \pi_{\text{left}})(\gamma_{\text{left}} - 1)]}, \quad (7.2.14)$$

где π_{left} и γ_{left} — параметры двучленного уравнения состояния для среды, находящейся слева от начального положения произвольного разрыва: $p = \rho e(\gamma - 1) - \gamma \pi$.

Таблица 1. Конфигурации точного решения задачи Римана о распаде произвольного газодинамического разрыва

Тип течения	Левая сторона	Правая сторона
Ударная волна (УВ)	<p>Если $U > \xi$ и $P > p_{\text{left}}$, то</p> $W_I = u_{\text{left}} - m_{\text{left}} / \rho_{\text{left}},$ <p>W_I — скорость УВ,</p> <p>m_{left} — поток газа через УВ (см. 2.14).</p> <p>Если $\xi > W_I$, то</p> $Z = [R_I, U, E_I, P]^T.$ <p>Если $\xi \leq W_I$, то</p> $Z = [\rho_{\text{left}}, u_{\text{left}}, \varepsilon_{\text{left}}, p_{\text{left}}]^T$	<p>Если $U < \xi$ и $P > p_{\text{right}}$, то</p> $W_{II} = u_{\text{right}} + m_{\text{right}} / \rho_{\text{right}},$ <p>W_{II} — скорость УВ,</p> <p>m_{right} — поток газа через УВ (см. 2.15).</p> <p>Если $\xi < W_{II}$, то</p> $Z = [R_{II}, U, E_{II}, P]^T.$ <p>Если $\xi \geq W_{II}$, то</p> $Z = [\rho_{\text{right}}, u_{\text{right}}, \varepsilon_{\text{right}}, p_{\text{right}}]^T$
Волна разрежения (ВР)	<p>Если $U > \xi$ и $P < p_{\text{left}}$, то</p> $W_I = u_{\text{left}} - c_{\text{left}}, W_I^* = U - c_I^* —$ <p>границы ВР.</p> <p>Если $\xi > W_I^*$, то</p> $Z = [R_I, U, E_I, P]^T.$ <p>Если $\xi < W_I$, то</p> $Z = [\rho_{\text{left}}, u_{\text{left}}, \varepsilon_{\text{left}}, p_{\text{left}}]^T.$ <p>Если $W_I \leq \xi = \xi^* \leq W_I^*$, то</p> $Z = [\rho^*, u^*, \varepsilon^*, p^*]^T —$ <p>см. (7.2.16)—(7.2.20)</p>	<p>Если $U < \xi$ и $P < p_{\text{right}}$, то</p> $W_{II} = u_{\text{right}} + c_{\text{right}},$ <p>$W_{II}^* = U + c_{II}^* —$ границы ВР.</p> <p>Если $\xi < W_{II}^*$, то</p> $Z = [R_{II}, U, E_{II}, P]^T.$ <p>Если $\xi > W_{II}$, то</p> $Z = [\rho_{\text{right}}, u_{\text{right}}, \varepsilon_{\text{right}}, p_{\text{right}}]^T.$ <p>Если $W_{II}^* \leq \xi = \xi^* \leq W_{II}$, то</p> $Z = [\rho^*, u^*, \varepsilon^*, p^*]^T —$ <p>см. (7.2.21)—(7.2.25)</p>

В случае правой ударной волны поток газа определяется из соотношения

$$m_{\text{right}} = \sqrt{\frac{\rho_{\text{right}}}{2} \left[(P + \pi_{\text{right}})(\gamma_{\text{right}} + 1) + (p_{\text{right}} + \pi_{\text{right}})(\gamma_{\text{right}} - 1) \right]}, \quad (7.2.15)$$

где π_{right} и γ_{right} — параметры двучленного уравнения состояния для среды, находящейся справа от начального положения произвольного разрыва.

Значения термодинамических параметров внутри левой волны разряжения $W_I \leq \xi \leq W_I^*$ (W_I, W_I^* — границы волны разряжения, см. табл. 1) вычисляются из выражений:

$$u^* = \xi + c^*, \quad (7.2.16)$$

$$\rho^* = \rho_{\text{left}} \left(\frac{c^*}{c_{\text{left}}} \right)^{\frac{2}{(\gamma_{\text{left}} - 1)}}, \quad (7.2.17)$$

$$p^* + \pi_{\text{left}} = (\rho_{\text{left}} + \pi_{\text{left}}) \left(\frac{c^*}{c_{\text{left}}} \right)^{\frac{2}{(\gamma_{\text{left}} - 1)}}, \quad (7.2.18)$$

$$\varepsilon^* = \varepsilon(\rho^*, p^*), \quad (7.2.19)$$

где

$$c^* = \frac{2}{(\gamma_{\text{left}} + 1)} c_{\text{left}} + \frac{(\gamma_{\text{left}} - 1)}{(\gamma_{\text{left}} + 1)} (u_{\text{left}} - \xi). \quad (7.2.20)$$

Для правой волны разряжения $W_{II}^* \leq \xi \leq W_{II}$ (W_{II}^*, W_{II} — границы волны разряжения, см. табл. 1) будем иметь:

$$u^* = \xi - c^*, \quad (7.2.21)$$

$$\rho^* = \rho_{\text{right}} \left(\frac{c^*}{c_{\text{right}}} \right)^{\frac{2}{(\gamma_{\text{right}} - 1)}}, \quad (7.2.22)$$

$$p^* + \pi_{\text{right}} = (\rho_{\text{right}} + \pi_{\text{right}}) \left(\frac{c^*}{c_{\text{right}}} \right)^{\frac{2}{(\gamma_{\text{right}} - 1)}}, \quad (7.2.23)$$

$$\varepsilon^* = \varepsilon(\rho^*, p^*), \quad (7.2.24)$$

где

$$c^* = \frac{2}{(\gamma_{\text{right}} + 1)} c_{\text{left}} + \frac{(\gamma_{\text{right}} - 1)}{(\gamma_{\text{right}} + 1)} (u_{\text{right}} - \xi) \quad (7.2.25)$$

Давление P на поверхности тангенциального разрыва (рис. 2) находится из решения единственного нелинейного уравнения [5]:

$$F(P) = f_{\text{left}}(P, p_{\text{left}}, \rho_{\text{left}}) + f_{\text{right}}(P, p_{\text{right}}, \rho_{\text{right}}) = u_{\text{left}} - u_{\text{right}}, \quad (7.2.26)$$

где

$$f_n = f_n(P, p_n, \rho_n) = \begin{cases} \frac{P - p_n}{\rho_n c_n \beta_n} \text{ при } P \geq p_n, \\ \frac{2c_n}{\gamma_n - 1} (\psi_n^{\chi_n} - 1) \text{ при } P < p_n, \end{cases}$$

$$n = \text{“left” или } n = \text{“right”}, \quad (7.2.27)$$

$$\psi_n = \frac{P + \pi_n}{p_n + \pi_n}, \quad \chi_n = \frac{\gamma_n - 1}{2\gamma_n}, \quad \beta_n = \sqrt{\frac{\gamma_n + 1}{2\gamma_n} \psi_n + \frac{\gamma_n - 1}{2\gamma_n}}, \quad c_n = \sqrt{\gamma_n \frac{p_n + \pi_n}{\rho_n}}.$$

Здесь нижний индекс $n = \text{“left”}$ или $n = \text{“right”}$ соответствует двум различным уравнениям состояния слева и справа от разрыва соответственно. Анализ поведения функции $F(P)$ показывает [5], что она является монотонной и выпуклой вверх.

Вследствие этого для численного решения (7.2.26) можно воспользоваться итерационным методом Ньютона, при этом положительность первой и неположительность второй производных обеспечивают сходимость ньютоновских итераций при подходящем выборе начального приближения. В данной главе используется итерационный процесс вида

$$P^{(m+1)} = P^{(m)} + \left[f_{\text{left}}^{(m)} + f_{\text{right}}^{(m)} - (u_{\text{left}} - u_{\text{right}}) \right] \times \left[\left(\frac{\partial f_{\text{left}}}{\partial P} \right)^{(m)} + \left(\frac{\partial f_{\text{right}}}{\partial P} \right)^{(m)} \right]^{-1}. \quad (7.2.28)$$

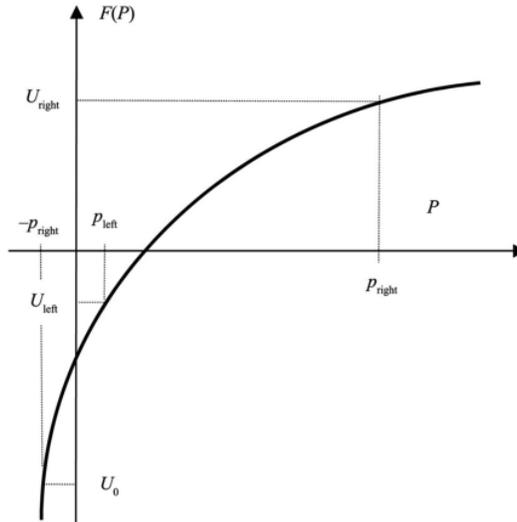


Рис. 2. График $F(P)$ для случая $p_{\text{left}} < p_{\text{right}}$

Здесь $m = 0, 1, 2, \dots$ — порядковый номер итерации, $P^{(0)}$ — начальное приближение. В силу неположительности второй производной в качестве $P^{(0)}$ может быть выбрано любое число, удовлетворяющее условию

$$F(P^{(0)}) - (u_{\text{left}} - u_{\text{right}}) \leq 0. \quad (7.2.29)$$

После нахождения значения P величина скорости U находится из выражения

$$U = \frac{1}{2} \left[u_{\text{left}} + u_{\text{right}} + f_{\text{right}}(P, p_{\text{right}}, \rho_{\text{right}}) - f_{\text{left}}(P, p_{\text{left}}, \rho_{\text{left}}) \right]. \quad (7.2.30)$$

Значения функции $F(P)$ при $P = p_{\text{right}}$, $P = p_{\text{left}}$ и $P = -p_0 = \max(-\pi_{\text{left}}, -\pi_{\text{right}})$ равны соответственно:

$$F(p_{\text{right}}) = U_{\text{right}} = \frac{p_{\text{right}} - p_{\text{left}}}{\rho_{\text{left}} c_{\text{left}} \beta_{\text{left}}},$$

где

$$\beta_{\text{left}} = \sqrt{\frac{\gamma_{\text{left}} + 1}{2\gamma_{\text{left}}} \Psi_{\text{left}} + \frac{\gamma_{\text{left}} - 1}{2\gamma_{\text{left}}}},$$

$$\Psi_{\text{left}} = \frac{p_{\text{right}} + \pi_{\text{left}}}{p_{\text{left}} + \pi_{\text{left}}},$$

$$c_{\text{left}} = \sqrt{\gamma_{\text{left}} \frac{p_{\text{left}} + \pi_{\text{left}}}{\rho_{\text{left}}}};$$

$$F(p_{\text{left}}) = U_{\text{left}} = \frac{2c_{\text{right}}}{\gamma_{\text{right}} - 1} (\Psi_{\text{right}}^{\chi_{\text{right}}} - 1),$$

где

$$\Psi_{\text{right}} = \frac{p_{\text{left}} + \pi_{\text{right}}}{p_{\text{right}} + \pi_{\text{right}}},$$

$$\chi_{\text{right}} = \frac{\gamma_{\text{right}} - 1}{2\gamma_{\text{right}}},$$

$$c_{\text{right}} = \sqrt{\gamma_{\text{right}} \frac{p_{\text{right}} + \pi_{\text{right}}}{\rho_{\text{right}}}};$$

$$F(-p_0) = U_0 = \frac{2c_n}{\gamma_n - 1} (\Psi_n^{\chi_n} - 1),$$

где индекс n соответствует среде с наибольшим значением параметра π из двучленного уравнения состояния.

В зависимости от значения $u_{\text{left}} - u_{\text{right}}$ возможна реализация следующих случаев:

- если $u_{\text{left}} - u_{\text{right}} > U_{\text{left}}$, то $P > p_{\text{right}} > p_{\text{left}}$, и реализуется конфигурация течения жидкости с правой и левой ударными волнами;

- если $U_{\text{left}} < u_{\text{left}} - u_{\text{right}} < U_{\text{right}}$, то $p_{\text{left}} < P < p_{\text{right}}$, и имеет место конфигурация, состоящая из правой волны разряжения и левой ударной волны;
- если $U_0 < u_{\text{left}} - u_{\text{right}} < U_{\text{left}}$, то $-p_0 < P < p_{\text{left}}$, и имеет место конфигурация, состоящая из правой и левой волн разряжения;
- если $u_{\text{left}} - u_{\text{right}} < U_0$, то образуется область вакуума со значениями $\rho = 0$ и $c = 0$.

Если $u_{\text{left}} - u_{\text{right}} > U_0$, то уравнение (2.26) имеет единственное решение. Случай, когда это уравнение не имеет решения при $u_{\text{left}} - u_{\text{right}} < U_0$, рассматривается подробно в [5].

Найденные значения термодинамических переменных слева и справа от контактного разрыва R_I, U, E_I, P и R_{II}, U, E_{II}, P позволяют вычислить конвективный поток $F_{\text{RIM}}(W_L, W_R)$ в (7.2.2) и (7.2.3), а также поток Лагранжа $F^{\text{lag}}(W_L, W_R) = F_{\text{RIM}}(W_L, W_R) - \sigma(W_L, W_R)U_g$ в (7.2.4), (7.2.5) и (7.2.8) — (7.2.11), где $\sigma(W_L, W_R)$ — скорость контактного разрыва.

7.3. Модель из пяти уравнений

Численная реализация модели (7.1.2) и особенно модели с учетом испарения довольно трудоемка. Также недостатком является кратное увеличение числа уравнений при многокомпонентном рассмотрении.

Другое направление по созданию более простого и робастного метода расчета многофазных и многокомпонентных потоков связано с рассмотрением равновесной модели Karila [8], которая является приближением нулевого порядка модели Ваер и Nunziato [3] при условии мгновенной релаксации скоростей и давления.

В примитивных переменных модель (7.1.2) будет иметь вид

$$\left\{ \begin{aligned}
 & \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \mu (P_g - P_l), \\
 & \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_g u_g)}{\partial x} = \frac{\rho_g}{\alpha_g} (V_i - u_g) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} - \frac{\rho_g}{\alpha_g} \mu (P_g - P_l), \\
 & \frac{\partial u_g}{\partial t} + u_g \frac{\partial u_g}{\partial x} + \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial x} = \frac{\lambda}{\alpha_l \rho_l} (u_l - u_g) + \frac{P_i - p_g}{\alpha_g \rho_g} \frac{\partial \alpha_g}{\partial x}, \\
 & \frac{\partial P_g}{\partial t} + u_g \frac{\partial p_g}{\partial x} + \rho_g c_g^2 \frac{\partial u_g}{\partial x} = \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} \right) (V_i - u_g) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} - \\
 & - \mu \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} \right) (P_g - P_l) + \lambda \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} (V_i - u_g) (u_l - u_g), \quad (7.3.1) \\
 & \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_l u_l)}{\partial x} = - \frac{\rho_l}{\alpha_l} (V_i + u_l) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \frac{\rho_l}{\alpha_l} \mu (P_g - P_l), \\
 & \frac{\partial u_l}{\partial t} + u_l \frac{\partial u_l}{\partial x} + \frac{1}{\rho_l} \frac{\partial p_l}{\partial x} = - \frac{\lambda}{\alpha_l \rho_l} (u_l - u_g) - \frac{P_i + p_l}{\alpha_l \rho_l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial x}, \\
 & \frac{\partial P_l}{\partial t} + u_l \frac{\partial p_l}{\partial x} + \rho_l c_l^2 \frac{\partial u_l}{\partial x} = - \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} \right) (V_i - u_l) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \\
 & + \mu \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} \right) (P_g - P_l) - \lambda \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} (V_i - u_l) (u_l - u_g),
 \end{aligned} \right.$$

где $e_g = e_g(\rho_g, P)$, $e_l = e_l(\rho_l, P)$ — внутренние энергии каждой из фаз;

$c_g = \frac{\rho_g}{\rho_g^2 - \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g}}$, $c_l = \frac{\rho_l}{\rho_l^2 - \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l}}$ — скорости звука каждой из фаз;

$\Gamma_g = \frac{1}{\rho_g} \left(\frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right)_{p_g}$; $\Gamma_l = \frac{1}{\rho_l} \left(\frac{\partial p_l}{\partial e_l} \right)_{p_l}$.

При выводе (7.3.1) из (7.1.2) использовались следующие соотношения:

$$\frac{\partial e_k}{\partial t} = \left(\frac{\partial e_k}{\partial p_k} \right)_{\rho_k} \frac{\partial p_k}{\partial t} + \left(\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial t}, \quad \frac{\partial e_k}{\partial x} = \left(\frac{\partial e_k}{\partial p_k} \right)_{\rho_k} \frac{\partial p_k}{\partial x} + \left(\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial x}.$$

Система (7.3.1) может быть записана в виде

$$\frac{\partial W}{\partial t} = F(W) + \Phi(W),$$

где

$$W = \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \rho_g \\ u_g \\ P_g \\ \rho_l \\ u_l \\ P_l \end{pmatrix};$$

$$F(W) = \begin{pmatrix} -V_i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \\ -\frac{\partial(\rho_g u_g)}{\partial x} + \frac{\rho_g}{\alpha_g} (V_i - u_g) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \\ -u_g \frac{\partial u_g}{\partial x} - \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial p_g}{\partial x} + \frac{P_i - p_g}{\alpha_g \tilde{n}_g} \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \\ -u_g \frac{\partial p_g}{\partial x} - \rho_g c_g^2 \frac{\partial u_g}{\partial x} + \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{\rho_g} \right) (V_i - u_g) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \\ -\frac{\partial(\rho_l u_l)}{\partial x} - \frac{\rho_l}{\alpha_l} (V_i + u_l) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \\ -u_l \frac{\partial u_l}{\partial x} - \frac{1}{\rho_l} \frac{\partial p_l}{\partial x} - \frac{P_i + p_l}{\alpha_l \rho_l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \\ -u_l \frac{\partial p_l}{\partial x} - \rho_l c_l^2 \frac{\partial u_l}{\partial x} - \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{\rho_l} \right) (V_i - u_l) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} \end{pmatrix},$$

$$\Phi(W) = \begin{pmatrix} \mu(P_g - P_l) \\ -\frac{\rho_g}{\alpha_g} \mu(P_g - P_l) \\ \frac{\lambda}{\alpha_g \rho_g} (u_l - u_g) \\ -\mu \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{P_g} \right) (P_g - P_l) + \lambda \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} (V_i - u_g) (u_l - u_g) \\ \frac{\rho_l}{\alpha_l} \mu(P_g - P_l) \\ -\frac{\lambda}{\alpha_l \rho_l} (u_l - u_g) \\ \mu \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{P_l} \right) (P_g - P_l) - \lambda \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} (V_i - u_l) (u_l - u_g) \end{pmatrix}.$$

Чтобы перейти от (7.3.1) к модели с общими величинами скорости и давления, рассматриваются предельные соотношения для мгновенной механической релаксации [9]:

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{\varepsilon} \\ \lambda &= \frac{1}{\varepsilon} \end{aligned} \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (7.3.2)$$

С учетом (7.3.2) систему (7.3.1) можно также записать в виде

$$\frac{\partial W}{\partial t} = F(W) + \frac{\Psi(W)}{\varepsilon}, \quad (7.3.3)$$

где

$$\Psi(W) = \begin{pmatrix} (P_g - P_l) \\ -\frac{\rho_g}{\alpha_g}(P_g - P_l) \\ \frac{1}{\alpha_g \rho_g}(u_l - u_g) \\ -\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} \right) (P_g - P_l) + \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} (V_i - u_g)(u_l - u_g) \\ \frac{\rho_l}{\alpha_l}(P_g - P_l) \\ -\frac{1}{\alpha_l \rho_l}(u_l - u_g) \\ \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} \right) (P_g - P_l) - \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} (V_i - u_l)(u_l - u_g) \end{pmatrix}.$$

Если состояние двухфазной системы W представить в виде возмущения около состояния механического равновесия в виде $W^\varepsilon = W_0 + \varepsilon W_1 + O(\varepsilon^2)$, то систему (7.3.3) можно представить так:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_0}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial W_1}{\partial t} &= F(W_0) + \varepsilon \frac{\partial F(W)}{\partial W}(W_0) \times \\ &\times W_1 + \frac{1}{\varepsilon} \Psi(W_0) + \frac{\partial \Psi(W)}{\partial W}(W_0) \times W_1 + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Учитывая, что в равновесном состоянии ($u_g = u_l = V_i$, $p_g = p_l = P_i$) $\Psi(W_0) = 0$, и пренебрегая членами второго порядка малости, можно получить:

$$\frac{\partial W_0}{\partial t} = F(W_0) + \frac{\partial \Psi(W)}{\partial W}(W_0) \times W_1. \quad (7.3.4)$$

Рассмотрим в (7.3.1) уравнения для давлений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial P_g}{\partial t} + u_g \frac{\partial p_g}{\partial x} + \rho_g c_g^2 \frac{\partial u_g}{\partial x} = \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} \right) (V_i - u_g) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} - \\ - \mu \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(P_i - \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} \right) (P_g - P_l) + \lambda \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} (V_i - u_g) (u_l - u_g) \\ \frac{\partial P_l}{\partial t} + u_l \frac{\partial p_l}{\partial x} + \rho_l c_l^2 \frac{\partial u_l}{\partial x} = - \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} \right) (V_i - u_l) \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \\ + \mu \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(P_i - \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} \right) (P_g - P_l) - \lambda \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} (V_i - u_l) (u_l - u_g) \end{array} \right.$$

Применяя (7.3.4) к этой системе для состояния вблизи механического равновесия, с учетом

$$c_k = \frac{\frac{p_k}{\rho_k^2} - \left(\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k}}{\left(\frac{\partial e_k}{\partial p_k} \right)_{n_g}} = \rho_k \Gamma_k \left(\frac{p_k}{\rho_k^2} - \left(\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k} \right) = \frac{\Gamma_k}{\rho_k} \left(p_k - \rho_k^2 \left(\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right)_{p_k} \right)$$

можно получить:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dP_g^0}{dt} + \rho_g^0 (c_g^0)^2 \frac{\partial u_g^0}{\partial x} = - \frac{\Gamma_g}{\alpha_g^0} \left(p_g^0 - (\rho_g^0)^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} \right) (P_g^1 - P_l^1) = \\ = - \frac{\rho_g^0 (c_g^0)^2}{\alpha_g^0}, \\ \frac{dP_l^0}{dt} + \rho_l^0 (c_l^0)^2 \frac{\partial u_l^0}{\partial x} = \frac{\Gamma_l}{\alpha_l^0} \left(p_l^0 - (\rho_l^0)^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} \right) (P_g^1 - P_l^1) = \\ = \frac{\rho_l^0 (c_l^0)^2}{\alpha_l^0}, \end{array} \right. \quad (7.3.5)$$

где $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}$.

Учитывая, что $\frac{dP_g^0}{dt} = \frac{dP_l^0}{dt}$, из (7.3.5) можно получить:

$$P_g^1 - P_l^1 = \frac{\rho_l^0 (c_l^0)^2 - \rho_g^0 (c_g^0)^2}{\frac{\rho_l^0 (c_l^0)^2}{\alpha_l^0} + \frac{\rho_g^0 (c_g^0)^2}{\alpha_g^0}} \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (7.3.6)$$

Подставляя оценку (7.3.6) в уравнение для объемной доли, можно получить систему уравнений, описывающих двухфазную среду в механическом равновесии (уравнения для импульсов и для энергий фаз складываются, и вместо четырех уравнений в (7.1.2) получается два):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \frac{\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2}{\frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_l}} \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u (\rho E + P)}{\partial x} = 0, \end{array} \right. \quad (7.3.7)$$

где $\rho = \alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l$ — плотность двухфазной смеси; $E = e + \frac{u^2}{2}$ — полная энергия смеси; $e = Y_g e_g(\rho_g, P) + Y_l e_l(\rho_l, P)$ — внутренняя энергия смеси;

$Y_g = \frac{\alpha_g \rho_g}{\rho}$ — массовая доля газовой фазы; $Y_l = \frac{\alpha_l \rho_l}{\rho}$ — массовая доля

жидкой фазы; $e_g = e_g(\rho_g, P)$, $e_l = e_l(\rho_l, P)$ — каждая фаза описывается собственным уравнением состояния; $c_g = c_g(\rho_g, P)$, $c_l = c_l(\rho_l, P)$ — скорости звука каждой из фаз.

Если каждая фаза описывается уравнением состояния вида

$$p = (\gamma - 1)\rho e - \gamma \pi \quad (7.3.8),$$

то уравнение состояния смеси можно записать следующим образом:

$$p(\rho, e, \alpha_g, \alpha_l) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_g \gamma_g \pi_g}{\gamma_g - 1} + \frac{\alpha_l \gamma_l \pi_l}{\gamma_l - 1} \right)}{\frac{\alpha_g}{\gamma_g - 1} + \frac{\alpha_l}{\gamma_l - 1}}. \quad (7.3.9)$$

В присутствии ударных волн система (7.3.7) дополняется следующими соотношениями (в приближении слабых волн) [10]:

$$\begin{aligned} Y_g &= Y_g^0, \quad Y_l = Y_l^0, \\ \rho(u - \sigma) &= \rho^0(u^0 - \sigma) = m, \\ P - P^0 + m^2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho^0} \right) &= 0, \\ e_g - e_g^0 + \frac{P + P^0}{2} \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_g^0} \right) &= 0, \quad e_l - e_l^0 + \frac{P + P^0}{2} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_l^0} \right) = 0, \end{aligned} \quad (7.3.10)$$

где σ — скорость ударной волны, а индекс « 0 » означает невозмущенное состояние.

В данной модели каждая фаза описывается собственным уравнением состояния и имеет собственное значение энтропии. Этим обеспечивается возможность присутствия нестабильных состояний (перегретой жидкости), а также возможность рассчитывать массообмен как кинетический процесс, а не как термодинамический в случае кубического уравнения состояния [9]. В этом случае скорость звука двухфазной смеси определена для любого состояния данной смеси. Параметры уравнений состояния фаз связаны условием согласованности с фазовой кривой при достижении равновесного состояния по температуре и химическому потенциалу [7].

Для уравнения состояния вида

$$e(P, \rho) = \frac{P + \gamma \pi}{(\gamma - 1)\rho} + q \quad (7.3.11)$$

или

$$\rho(P, \rho) = \frac{P + \pi}{(\gamma - 1)C_v T}, \quad (7.3.12)$$

где T — температура; C_v — теплоемкость при постоянном объеме; γ , π — константы, характеризующие свойства вещества; q — базовая энергия фазы в заданном состоянии, это условие будет следующим:

$$\ln(p + \pi_g) = A + \frac{B}{T} + C \ln T + D \ln(p + \pi_l), \quad (7.3.13)$$

где

$$A = \frac{\gamma_l (C_v)_l - \gamma_g (C_v)_g + q'_g - q'_l}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g};$$

$$B = \frac{q_l - q_g}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g};$$

$$C = \frac{\gamma_g (C_v)_g - \gamma_l (C_v)_l}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g};$$

$$D = \frac{(\gamma_l - 1)(C_v)_l}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g}.$$

При этом параметры $(C_p)_g$, $(C_p)_l$, q_g , q_l , π_g , π_l , γ_g , γ_l находятся из требования наилучшего согласия с экспериментальными линиями насыщения $p_{\text{SAT}}(T)$, $h_g(T)$, $h_l(T)$, $\rho_g(T)$, $\rho_l(T)$ в предположении линейной зависимости энтальпии от температуры: $h = C_p T + q = \gamma C_v T + q$.

Основные уравнения с учетом теплообмена и массообмена также получают-ся из неравновесной (у каждой фазы разные скорости и давления) модели Ваггера и Nunziato [3]. Учет межфазового теплообмена в пределе мгновенной механической релаксации неравновесной модели приводит систему (7.3.7) к следующему виду:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \frac{\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2}{\rho_l c_l^2 + \rho_g c_g^2} \frac{\partial u}{\partial x} + \left(\frac{\Gamma_l}{\alpha_l} + \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \right) \frac{Q}{\rho_l} + \frac{\rho \dot{Y}_g}{\rho_l}, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u}{\partial x} = \rho \dot{Y}_g; \quad \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l u}{\partial x} = -\rho \dot{Y}_g, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u (\rho E + P)}{\partial x} = 0, \end{array} \right. \quad (7.3.11)$$

где $\rho \dot{Y}_l$ — поток массы от фазы l к фазе g ; ρ_l — модельный параметр;
 $Q = H(T_l - T_g) = h S_l$; h — коэффициент конвективной теплопередачи;
 S_l — интерфейсная поверхность теплообмена.

Выражения для скорости испарения \dot{Y}_g и интерфейсной плотности ρ_l определяются из анализа соотношений для энтропии двухфазной смеси. Комбинируя уравнения для импульса и полной энергии двухфазной смеси из системы (7.3.11), можно получить:

$$\frac{de}{dt} + p \frac{d\left(\frac{1}{\rho}\right)}{dt} = 0. \quad (7.3.12)$$

Выражение (3.12) можно также представить в виде

$$Y_g \left(\frac{de_g}{dt} + p \frac{d\left(\frac{1}{\rho_g}\right)}{dt} \right) + Y_l \left(\frac{de_l}{dt} + p \frac{d\left(\frac{1}{\rho_l}\right)}{dt} \right) + (h_g - h_l) \dot{Y}_g = 0, \quad (7.3.13)$$

где $h_k = e_k + p \frac{1}{\rho_k}$ — энтальпия фазы k .

Далее, используя в (7.3.13) соотношения Гиббса $\frac{de_k}{dt} + p \frac{d\left(\frac{1}{\rho_k}\right)}{dt} = T_k \frac{ds_k}{dt}$ для каждой фазы, можно получить:

$$Y_g T_g \frac{ds_g}{dt} + Y_l T_l \frac{ds_l}{dt} + (h_g - h_l) \dot{Y}_g = 0. \quad (7.3.14)$$

В выражении (7.3.14) функции $\frac{ds_1}{dt}$ и $\frac{ds_2}{dt}$ являются модельными параметрами, которые необходимо определить.

Используя условие равенства давлений каждой из фаз $p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2)$, можно записать:

$$\left(\frac{\partial p_g}{\partial \rho_g}\right)_{s_g} \frac{d\rho_g}{dt} + \left(\frac{\partial p_g}{\partial s_g}\right)_{\rho_g} \frac{ds_g}{dt} = \left(\frac{\partial p_l}{\partial \rho_l}\right)_{s_l} \frac{d\rho_l}{dt} + \left(\frac{\partial p_l}{\partial s_l}\right)_{\rho_l} \frac{ds_l}{dt}. \quad (7.3.15)$$

С учетом определения скорости звука и коэффициента Грюнайзена для каждой из фаз $\left(\frac{\partial p_k}{\partial \rho_k}\right)_{s_k} = c_k^2$ и $\left(\frac{\partial p_k}{\partial s_k}\right)_{\rho_k} = \rho_k \Gamma_k T_k$, соответственно, выражение (7.3.15) примет вид

$$c_g^2 \frac{d\rho_g}{dt} + \rho_g \Gamma_g T_g \frac{ds_g}{dt} = c_l^2 \frac{d\rho_l}{dt} + \rho_l \Gamma_l T_l \frac{ds_l}{dt}. \quad (7.3.16)$$

Уравнения (7.3.14) и (7.3.16) образуют систему с двумя неизвестными $\frac{ds_g}{dt}$ и $\frac{ds_l}{dt}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_g \rho_g \alpha_l \rho_l}{\rho} T_g \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right) \frac{ds_g}{dt} = \\ = Y_l \left(c_l^2 \frac{d\rho_l}{dt} - c_g^2 \frac{d\rho_g}{dt} \right) - \rho_l \Gamma_l (h_g - h_l) \dot{Y}_g, \\ \frac{\alpha_g \rho_g \alpha_l \rho_l}{\rho} T_l \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right) \frac{ds_l}{dt} = \\ = -Y_g \left(c_l^2 \frac{d\rho_l}{dt} - c_g^2 \frac{d\rho_g}{dt} \right) - \rho_g \Gamma_g (h_g - h_l) \dot{Y}_g. \end{array} \right. \quad (7.3.17)$$

Выражения для производных $\frac{d\rho_l}{dt}$ и $\frac{d\rho_g}{dt}$ можно получить из второго и третьего уравнений системы (7.3.11). Тогда система (7.3.17) примет вид

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\alpha_g \rho_g \alpha_l \rho_l}{\rho} T_g \left(\frac{\Gamma_g}{\Gamma_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right) \frac{ds_g}{dt} = \\ & = Y_l \left(\left(\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l} \right) \frac{d\alpha_g}{dt} - (\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2) \operatorname{div} \bar{u} \right) - \\ & - \rho Y_l \left(\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l} \right) \dot{Y}_g - \rho_l \Gamma_l (h_g - h_l) \dot{Y}_g, \\ & \frac{\alpha_g \rho_g \alpha_l \rho_l}{\rho} T_l \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right) \frac{ds_l}{dt} = \\ & = -Y_g \left(\left(\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l} \right) \frac{d\alpha_g}{dt} - (\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2) \operatorname{div} \bar{u} \right) + \\ & + \rho Y_g \left(\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l} \right) \dot{Y}_g - \rho_g \Gamma_g (h_g - h_l) \dot{Y}_g. \end{aligned} \right. \quad (7.3.18)$$

Выражая производную $\frac{d\alpha_g}{dt}$ из первого уравнения системы (7.3.11), можно привести систему (7.3.18) к виду

$$\left. \begin{aligned}
 Y_g \frac{ds_g}{dt} &= \frac{H(T_l - T_g)}{\rho T_g} - \frac{\dot{Y}_g (h_g - h_l)}{\frac{\Gamma_g T_g}{\alpha_g} \left(\frac{\alpha_g}{\Gamma_g} + \frac{\alpha_l}{\Gamma_l} \right)} + \\
 &+ \frac{\dot{Y}_g}{T_g \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right)} \left(\frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\rho_l} - \left(\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l} \right) \right), \\
 Y_l \frac{ds_l}{dt} &= \frac{H(T_l - T_g)}{\rho T_l} - \frac{\dot{Y}_g (h_g - h_l)}{\frac{\Gamma_l T_l}{\alpha_l} \left(\frac{\alpha_g}{\Gamma_g} + \frac{\alpha_l}{\Gamma_l} \right)} + \\
 &+ \frac{\dot{Y}_g}{T_l \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right)} \left(-\frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\rho_l} + \left(\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l} \right) \right).
 \end{aligned} \right\} \quad (7.3.19)$$

Таким образом, производные $\frac{ds_g}{dt}$ и $\frac{ds_l}{dt}$ являются функцией теплообмена, массообмена и интерфейсной плотности ρ_l . Третий член в (7.3.19) связан с процессом релаксации давления при массообмене. Этот изэнтропический процесс сопровождается испусканием акустических волн малой амплитуды [9]. В предположении изэнтропии релаксации давления при испарении вклад третьего члена в (7.3.19) в изменение энтропии становится нулевым. Это позволяет получить выражение для интерфейсной плотности:

$$\rho_l = \frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l}}. \quad (7.3.20)$$

Теперь окончательный вид двухфазной модели из пяти уравнений с учетом теплообмена и массообмена будет иметь вид

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} &= \frac{\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2}{\rho_l c_l^2 + \rho_g c_g^2} \frac{\partial u}{\partial x} + \\ &+ \frac{\left(\frac{\Gamma_l}{\alpha_l} + \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \right) Q}{\frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_l}} + \frac{\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}} \rho \dot{Y}_g, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u}{\partial x} &= \rho \dot{Y}_g, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l u}{\partial x} &= -\rho \dot{Y}_g, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u (\rho E + P)}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \right. \quad (7.3.21)$$

где давление двухфазной смеси определяется из следующего уравнения состояния:

$$p(\rho, e, \alpha_g, \alpha_l, Y_g, Y_l) = \frac{\rho(e - Y_g q_g - Y_l q_l) - \left(\frac{\alpha_g \gamma_g \pi_g}{\gamma_g - 1} + \frac{\alpha_l \gamma_l \pi_l}{\gamma_l - 1} \right)}{\frac{\alpha_g}{\gamma_g - 1} + \frac{\alpha_l}{\gamma_l - 1}}. \quad (7.3.22)$$

Записывая второй закон термодинамики для двухфазной среды

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho s \vec{u}) \geq 0,$$

где $s = Y_1 s_1 + Y_2 s_2$, и используя систему (7.3.19), можно получить соотношение

$$\frac{H(T_l - T_g)^2}{\rho} + (\bar{g}_l - \bar{g}_g) \frac{\frac{\Gamma_g T_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l T_l}{\alpha_l}}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}} \dot{Y}_g \geq 0, \quad (7.3.23)$$

где $\bar{g}_k = h_k - \frac{T_g T_l \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \right)}{\frac{\Gamma_g T_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l T_l}{\alpha_l}} s_k$ — эффективная энергия Гиббса фазы k .

Видно, что выполнение второго закона термодинамики обеспечивается в предположении, что

$$\dot{Y}_g = v(\bar{g}_l - \bar{g}_g), \quad (7.3.24)$$

где v — положительный параметр, определяющий скорость перехода двухфазной системы в равновесное состояние при релаксации.

Явно оценить величины H и v , контролирующие процессы теплообмена и массообмена, довольно трудно. Вместо этого используется процедура мгновенной релаксации температур и энергий Гиббса только в выбранных областях, а именно вблизи межфазовых интерфейсов. Вдали от этих интерфейсов величины H и v полагаются равными нулю:

$$H, v = \begin{cases} +\infty, & \text{если } \varepsilon \leq \alpha_g \leq 1 - \varepsilon, \\ 0 & \text{в иных случаях,} \end{cases} \quad (7.3.25)$$

где ε — малый параметр, определяющий наличие метастабильных состояний.

Главным условием появления нестабильных состояний в двухфазной среде является превышение температуры насыщения при данном давлении:

$$T_k > T_{\text{насыщ.}}(p). \quad (7.3.26)$$

В случае выполнения условий (3.26) и $\varepsilon \leq \alpha_g \leq 1 - \varepsilon$ для расчета массообмена и теплообмена в двухфазной среде на интерфейсной границе выполняется численное интегрирование членов-источников в правой части системы уравнений (7.3.21).

Неизвестные величины Q и \dot{Y}_g определяются в предположении мгновенной релаксации температур и химических потенциалов. Это означает, что при численном интегрировании в конце каждого временного шага достигается равенство температур и химических потенциалов каждой из фаз. Важно повторить, что такое равновесное состояние реализуется только вблизи интерфейсной границы раздела фаз, вдали от этого интерфейса двухфаз-

ная среда может находиться в неравновесном по температуре и химическому потенциалу состоянии.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \frac{\left(\frac{\Gamma_l}{\alpha_l} + \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \right) Q}{\frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_l}} + \frac{\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}} \rho \dot{Y}_g = S_{\alpha_g}, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} = \rho \dot{Y}_g = S_{\dot{Y}_g}; \quad \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} = -\rho \dot{Y}_g, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} = 0. \end{array} \right. \quad (7.3.27)$$

Временная эволюция разности температур и потенциалов Гиббса может быть выражена с использованием (7.3.27) следующим образом [9]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Delta T}{\partial t} = A Q + B \dot{Y}_g, \\ \frac{\partial \Delta g}{\partial t} = A' Q + B' \dot{Y}_g, \end{array} \right. \quad (7.3.28)$$

где

$$A = -(C_g - C_l) \rho c^2 \left(\frac{\Gamma_g}{\rho_g c_g^2} - \frac{\Gamma_l}{\rho_l c_l^2} \right) + \frac{1}{(C_v)_g \gamma_g \alpha_g \rho_g} + \frac{1}{(C_v)_l \gamma_l \alpha_l \rho_l};$$

$$B = -(C_g - C_l) \rho \left[\left(\frac{\rho c^2}{\rho_g} - \Gamma h_g \right) - \left(\frac{\rho c^2}{\rho_l} - \Gamma h_l \right) \right] -$$

$$-\rho \Gamma (h_g - h_l) \left(\frac{1}{(C_v)_g \gamma_g \Gamma_g \rho_g} - \frac{1}{(C_v)_l \gamma_l \Gamma_l \rho_l} \right);$$

$$A' = (D_g C_g - D_l C_l) \rho c^2 \left(\frac{\Gamma_g}{\rho_g c_g^2} - \frac{\Gamma_l}{\rho_l c_l^2} \right) -$$

$$\begin{aligned}
 & - \left(1 + \frac{D_g}{(C_v)_g \gamma_g} \right) \frac{1}{\alpha_g \rho_g} - \left(1 + \frac{D_l}{(C_v)_l \gamma_l} \right) \frac{1}{\alpha_l \rho_l}; \\
 B' = & (D_g C_g - D_l C_l) \rho \left[\left(\frac{\rho c^2}{\rho_g} - \Gamma h_g \right) - \left(\frac{\rho c^2}{\rho_l} - \Gamma h_l \right) \right] + \\
 & + \rho \Gamma (h_g - h_l) \left[\left(1 + \frac{D_g}{(C_v)_g \gamma_g} \right) \frac{1}{\Gamma_g \rho_g} + \left(1 + \frac{D_l}{(C_v)_l \gamma_l} \right) \frac{1}{\Gamma_l \rho_l} \right]; \\
 C_k = & \frac{(1 - \gamma_k T_k)}{\gamma_k (p + \pi_k)}, \quad k = g, l; \\
 D_k = & \frac{q_k - g_k}{T_k}, \quad k = g, l; \\
 \Gamma_k = & \frac{1}{\rho_k} \left(\frac{\partial p}{\partial e_k} \right)_{\rho_k} = \gamma_k - 1, \quad k = g, l; \\
 \Gamma = & \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial e} \right)_\rho = \frac{1}{\frac{\alpha_g}{\gamma_g - 1} + \frac{\alpha_l}{\gamma_l - 1}}; \\
 c_k^2 = & \gamma_k \frac{p + \pi_k}{\rho_k}, \quad k = g, l; \\
 c^2 = & \frac{1}{\rho \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} \right)}.
 \end{aligned}$$

Наиболее простой способ численной аппроксимации системы (7.3.28) для двух последовательных моментов времени t^n и t^{n+1} , соответствующих гидродинамическому шагу при численном решении системы (7.3.7), может быть записан в виде

$$\begin{cases} \frac{(\Delta T)^{n+1} - (\Delta T)^n}{\Delta t} = A^n Q^n + B^n \dot{Y}_g^n, \\ \frac{(\Delta g)^{n+1} - (\Delta g)^n}{\Delta t} = A'^n Q^n + B'^n \dot{Y}_g^n. \end{cases} \quad (7.3.29)$$

Значения переменных с верхним временным индексом n в (7.3.29) соответствуют величинам, полученным в результате решения гиперболической системы (7.3.7). Переменные в момент времени t^{n+1} соответствуют окончательным значениям, вычисленным с учетом как гидродинамических эффектов, так и теплообмена и массообмена. Так как в конце каждого временного шага состояние системы является равновесным: $(\Delta T)^{n+1} = 0$ и $(\Delta g)^{n+1} = 0$, то явный вид параметров теплообмена и массообмена будет следующим:

$$\begin{cases} Q = -\frac{B'}{AB' - A'B} \frac{(\Delta T)^n}{\Delta t} + \frac{B}{AB' - A'B} \frac{(\Delta g)^n}{\Delta t}, \\ \dot{Y}_g = \frac{A'}{AB' - A'B} \frac{(\Delta T)^n}{\Delta t} + \frac{A}{AB' - A'B} \frac{(\Delta g)^n}{\Delta t}. \end{cases} \quad (7.3.30)$$

Выражения (7.3.30) позволяют вычислить значения величин S_{α_g} и $S_{\dot{Y}_g}$ в правой части системы (7.3.27). Однако такая оценка не обеспечивает положительность объемной и массовой долей, получаемых при численном интегрировании системы (7.3.27). Поэтому при вычислении величин S_{α_g} и $S_{\dot{Y}_g}$ вводятся специальные ограничители.

Ограничитель для параметра S_{α_g} :

$$S_{\max, \alpha_g} = \begin{cases} \frac{1 - \alpha_g}{\Delta t}, & \text{если } S_{\alpha_g} > 0, \\ -\frac{\alpha_g}{\Delta t} & \text{в иных случаях.} \end{cases} \quad (7.3.31)$$

Ограничитель для параметра $S_{\dot{Y}_g}$:

$$S_{\max, \dot{Y}_g} = \begin{cases} \frac{\min(\alpha_g \rho_g, \alpha_l \rho_l)}{\Delta t}, & \text{если } S_{\dot{Y}_g} > 0, \\ -\frac{\min(\alpha_g \rho_g, \alpha_l \rho_l)}{\Delta t} & \text{в иных случаях.} \end{cases} \quad (7.3.32)$$

Если $|S_{\max, Y_g}| > |S_{\alpha_g}|$ и $|S_{\max, Y_g}| > |S_{\dot{Y}_g}|$, то численное интегрирование системы (7.3.27) с оценками (7.3.30) может быть выполнено с использованием гидродинамического временного шага $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. В противном случае, если $|S_{\max, \alpha_g}| \leq |S_{\alpha_g}|$, то вычисляется величина отношения $R_{\alpha_g} = \frac{S_{\max, \alpha_g}}{S_{\alpha_g}}$, и численное интегрирование системы (7.3.27) на временном шаге Δt выполняется с временными шагами $\Delta t_{\text{хим}} = R_{\alpha_g} \frac{\Delta t}{2}$. Если $|S_{\max, Y_g}| \leq |S_{\dot{Y}_g}|$, то вычисляется величина отношения $R_{Y_g} = \frac{S_{\max, Y_g}}{S_{\dot{Y}_g}}$, и численное интегрирование системы (7.3.27) выполняется с временными шагами $\Delta t_{\text{хим}} = R_{Y_g} \frac{\Delta t}{2}$. Если $|S_{\max, \alpha_g}| \leq |S_{\alpha_g}|$ и $|S_{\max, Y_g}| \leq |S_{\dot{Y}_g}|$, то $\Delta t_{\text{хим}} = \min(R_{\alpha_g}, R_{Y_g}) \frac{\Delta t}{2}$.

Модель (7.3.7), (7.3.10) обладает следующими недостатками:

1. Даже в случае получения точного решения задачи Римана с использованием соотношений (7.3.10) сходимость к точному решению достигается не всегда, что связано с присутствием неконсервативных членов. Усреднение неконсервативных членов в расчетной ячейке не имеет физического смысла, поэтому средние величины находятся с использованием процедуры релаксации [11; 12]. Для получения точного решения при распространении ударной волны через интерфейс, разделяющий двухфазные смеси, необходимо вводить искусственный теплообмен. При этом распределение внутренней энергии между компонентами в двухфазной смеси получается корректным.
2. Положительность объемной доли в присутствии ударных волн и сильных волн расширения сохраняется не всегда.
3. Зависимость скорости звука двухфазной смеси:

$$\frac{1}{\rho c_{\text{eq}}^2} = \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} \quad (7.3.33)$$

от объемной доли крайне немонотонна (см. рис. 3), что приводит к нарушению хронологии при распространении ударной волны через интерфейс, разделяющий фазы. Вычисленная из (7.3.33) скорость звука оказывается меньше замороженной скорости

$$c_f^2 = Y_g c_g^2 + Y_l c_l^2, \quad (7.3.34)$$

с которой распространяются акустические возмущения. В результате возмущения проходят через интерфейсную диффузионную область с задержкой [13].

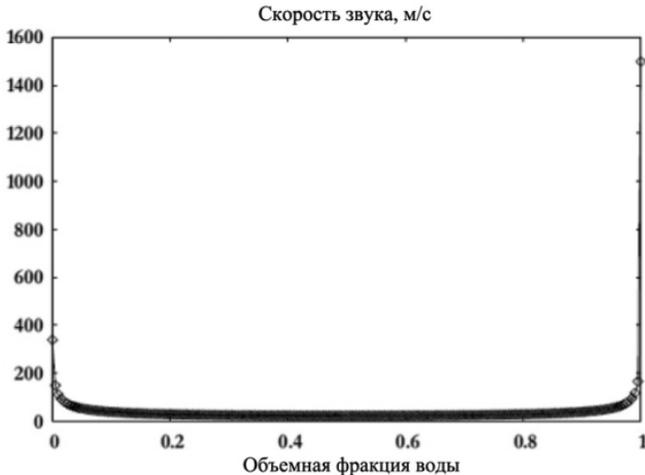


Рис. 3. Зависимость скорости звука равновесной смеси от объемной доли для смеси воды и воздуха в модели (7.3.7), (7.3.10)

7.4. Модель из шести уравнений

Для устранения перечисленных недостатков модели (7.3.7), (7.3.10) была введена формальная возможность сохранения разных давлений в двухфазной среде. Получающаяся модель состоит из шести уравнений и может быть получена из модели Ваер и Nunziato [3] в асимптотическом пределе мгновенной релаксации скорости:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \mu (P_g - P_l), \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + \alpha_g P_g + \alpha_l P_l)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g e_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g e_g u}{\partial x} + \alpha_g P_g \frac{\partial u}{\partial x} = -P_l \mu (P_g - P_l), \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l e_l}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_l \rho_l e_l u}{\partial x} + \alpha_l P_l \frac{\partial u}{\partial x} = P_l \mu (P_g - P_l) \end{array} \right. \quad (7.4.1)$$

Величина интерфейсного давления вычисляется как асимптотический предел интерфейсного давления в симметричной неравновесной модели Вагг и Nunziato [3] из семи уравнений [14]:

$$P_l = \frac{Z_l P_g + Z_g P_l}{Z_g + Z_l}, \quad (7.4.2)$$

где $Z_g = \rho_g c_g$; $Z_l = \rho_l c_l$.

Модель (7.4.1) обеспечивает положительность объемной доли и монотонность скорости звука двухфазной смеси (7.3.34). Эта модель является гиперболической со скоростями волн $u + c_f$, $u - c_f$, u и рассматривается как промежуточный шаг при решении системы уравнений (7.3.7).

Комбинация уравнений для внутренней энергии с уравнениями непрерывности и импульса из (7.4.1) позволяет получить дополнительное уравнение для полной энергии двухфазной смеси:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho \left(Y_g e_g + Y_l e_l + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial u \left(\rho \left(Y_g e_g + Y_l e_l + \frac{u^2}{2} \right) + (\alpha_g P_g + \alpha_l P_l) \right)}{\partial x} = 0. \end{aligned} \quad (7.4.3)$$

Это уравнение позволяет исправить неточности, которые возникают при численном разрешении неконсервативных уравнений для внутренних энергий в присутствии ударных волн.

Модель (7.4.1), (7.4.3) дополняется следующими соотношениями на фронте ударной волны:

$$\begin{aligned}
 \alpha_g \rho_g (u - \sigma) &= \alpha_g^0 \rho_g^0 (u^0 - \sigma) = m_g, \\
 \alpha_l \rho_l (u - \sigma) &= \alpha_l^0 \rho_l^0 (u^0 - \sigma) = m_l, \\
 P - P^0 + m^2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho^0} \right) &= 0, \\
 e - e^0 + \frac{P + P^0}{2} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho^0} \right) &= 0, \\
 e_g - e_g^0 + \frac{P_g + P_g^0}{2} \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_g^0} \right) &= 0, \\
 e_l - e_l^0 + \frac{P_l + P_l^0}{2} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_l^0} \right) &= 0, \\
 \alpha_g &= \alpha_g^0,
 \end{aligned} \tag{7.4.4}$$

где $P = \alpha_g P_g + \alpha_l P_l$; $e = Y_g e_g + Y_l e_l$; $m = m_g + m_l$; $\frac{1}{\rho} = Y_g \frac{1}{\rho_g} + Y_l \frac{1}{\rho_l}$.

Численное решение системы (7.4.1) разбивается на два этапа. На первом этапе решается гиперболическая часть с применением римановского солвера. При этом точность определения новых значений внутренних энергий каждой из фаз не так важна, так как эти значения будут более точно определены на следующем этапе решения системы (7.4.1). На втором этапе учитывается влияние релаксационных членов:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \mu (P_g - P_l), \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_g \rho_g e_g}{\partial t} = -P_l \mu (P_g - P_l), \\ \frac{\partial \alpha_l \rho_l e_l}{\partial t} = P_l \mu (P_g - P_l) \end{array} \right. \quad (7.4.5)$$

Следующая поправка значений внутренних энергий каждой фазы вычисляется с использованием уравнения для полной энергии смеси (7.4.3), которое записано в консервативной форме. Далее из уравнения состояния смеси (7.3.9) или (7.3.22) находится новое окончательное значение давления. Новые значения внутренних энергий вычисляются из уравнений состояния каждой из фаз:

$$e_g = e_g(P, \alpha_g \rho_g, \alpha_g), \quad e_l = e_l(P, \alpha_l \rho_l, \alpha_l).$$

7.4.1. Поверхностное натяжение в модели из шести уравнений

Бездиссипативная механически равновесная модель двухфазной или двухкомпонентной среды с учетом поверхностного натяжения получается с использованием принципа наименьшего действия Гамильтона. Эта модель имеет следующий вид [15]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \frac{\rho_l c_l^2 - \rho_g c_g^2}{(\rho_l c_l^2 / \alpha_g) + (\rho_g c_g^2 / \alpha_l)} \operatorname{div} \bar{u}, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_l \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{w} \bar{u}) = 0, \quad \operatorname{rot} \bar{w} = 0, \\ \frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u} \otimes \bar{u} - T) = 0 \\ \frac{\partial \left(\frac{\rho |\bar{u}|^2}{2} + E \right)}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\bar{u} \left(\frac{\rho |\bar{u}|^2}{2} + E \right) - T \bar{u} \right) = 0, \end{array} \right. \quad (7.4.6)$$

где параметр m характеризует интерфейсную границу раздела фаз ($m=1$ — резкая граница, $m>1$ — граница не резкая, а размытая и имеет конечную толщину), причем λ при $m=1$ совпадает с коэффициентом поверхностного натяжения;

$$\rho = \alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l; \quad Y_l = \frac{\alpha_l \rho_l}{\rho}; \quad \bar{w} = \nabla Y_l \text{ — параметр «порядка»};$$

$$E = \rho \varepsilon + \frac{\lambda}{m} |\bar{w}|^m = \alpha_g \rho_g \varepsilon_g + \alpha_l \rho_l \varepsilon_l + \frac{\lambda}{m} |\bar{w}|^m;$$

$$T = - \left(p + \lambda \frac{m-1}{m} |\bar{w}|^m \right) I + \lambda |\bar{w}|^m \left(I - \frac{\bar{w}}{|\bar{w}|} \otimes \frac{\bar{w}}{|\bar{w}|} \right).$$

Для устранения недостатков, возникающих при численном решении уравнений механически равновесной модели (7.4.6), вводится формальная возможность сохранения разных давлений в двухфазной среде. Тогда по аналогии с (7.4.1) механически неравновесная по давлению модель для прямого моделирования сжимаемых двухфазных потоков с учетом капиллярных эффектов будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \bar{u} \nabla \alpha_g = \mu (p_g - p_l), \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_l \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{w} \bar{u}) = 0, \operatorname{rot} \bar{w} = 0, \\ \frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u} \otimes \bar{u} - T) = 0, \\ \frac{\partial \left(\frac{\rho |\bar{u}|^2}{2} + E \right)}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\bar{u} \left(\frac{\rho |\bar{u}|^2}{2} + E \right) - T \bar{u} \right) = 0, \end{array} \right. \quad (7.4.7)$$

где $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$; μ — коэффициент релаксации.

Для замыкания системы (7.4.7) необходимо дополнительное уравнение для энергии или энтропии. Уравнение для полной энергии можно преобразовать к виду [15]

$$\rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{u} \nabla \varepsilon \right) + p \operatorname{div} \bar{u} = 0. \quad (7.4.8)$$

С учетом (4.8) и второго уравнения системы (7.4.7) легко получить

$$\frac{\partial (\rho \varepsilon)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \rho \varepsilon) + p \operatorname{div} \bar{u} = 0. \quad (7.4.9)$$

Выражение (7.4.9) можно представить в виде суммы двух уравнений:

$$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \alpha_g \rho_g e_g) + \alpha_g p_g \operatorname{div} \bar{u} = -P_l \mu (p_g - p_l)$$

и

$$\frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \alpha_l \rho_l e_l) + \alpha_l p_l \operatorname{div} \bar{u} = P_l \mu (p_g - p_l),$$

где $P_I = \frac{Z_l p_g + Z_g p_l}{Z_g + Z_l}$ — интерфейсное давление; $Z_g = \rho_g c_g$; $Z_l = \rho_l c_l$.

Окончательно механически неравновесная по давлению модель для прямого моделирования сжимаемых двухфазных потоков с учетом капиллярных эффектов будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \bar{u} \nabla \alpha_g = \mu (p_g - p_l), \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_l \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{w} \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u} \otimes \bar{u} - T) = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \alpha_g \rho_g e_g) + \alpha_g p_g \operatorname{div} \bar{u} = -P_I \mu (p_g - p_l), \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \alpha_l \rho_l e_l) + \alpha_l p_l \operatorname{div} \bar{u} = P_I \mu (p_g - p_l), \end{array} \right. \quad (7.4.10)$$

Численное решение системы (7.4.10) выполняется в два этапа. На первом этапе решается гиперболическая часть системы (7.4.10):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \bar{u} \nabla \alpha_g = 0, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_l \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{w} \bar{u}) = 0, \\ \frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{u} \otimes \bar{u} - T) = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \alpha_g \rho_g e_g) + \alpha_g p_g \operatorname{div} \bar{u} = 0; \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u} \alpha_l \rho_l e_l) + \alpha_l p_l \operatorname{div} \bar{u} = 0. \end{array} \right. \quad (7.4.11)$$

На втором этапе учитывается релаксация давлений в предположении мгновенной релаксации ($\mu \rightarrow +\infty$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \mu (p_g - p_l), \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho \bar{u})}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = -P_l \mu (p_g - p_l); \quad \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = P_l \mu (p_g - p_l). \end{array} \right. \quad (7.4.12)$$

Значения параметра «порядка» $\bar{w} = \nabla Y_l$ пересчитываются вначале каждого временного шага.

В явном виде для трехмерного случая система (7.4.11) имеет вид

$$\left\{ \begin{aligned}
 & \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u_x \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + u_y \frac{\partial \alpha_g}{\partial y} + u_z \frac{\partial \alpha_g}{\partial z} = 0, \\
 & \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0, \\
 & \frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_l u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho Y_l u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho Y_l u_z)}{\partial z} = 0, \\
 & \frac{\partial w_k}{\partial t} + \frac{\partial(w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z)}{\partial k} = 0, \quad k = x, y, z, \\
 & \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho u_x^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_x^2}{w^2}\right)\right)}{\partial x} + \\
 & + \frac{\partial\left(\rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w}\right)}{\partial y} + \frac{\partial\left(\rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w}\right)}{\partial z} = 0, \\
 & \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w}\right)}{\partial x} + \\
 & + \frac{\partial\left(\rho u_y^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_y^2}{w^2}\right)\right)}{\partial y} + \frac{\partial\left(\rho u_y u_z + \lambda \frac{w_y w_z}{w}\right)}{\partial z} = 0, \\
 & \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w}\right)}{\partial x} + \frac{\partial\left(\rho u_z u_y + \lambda \frac{w_y w_z}{w}\right)}{\partial y} + \\
 & + \frac{\partial\left(\rho u_z^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_z^2}{w^2}\right)\right)}{\partial z} = 0, \\
 & \frac{\partial(\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \frac{\partial(u_x \alpha_g \rho_g e_g)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y \alpha_g \rho_g e_g)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z \alpha_g \rho_g e_g)}{\partial z} + \\
 & + \alpha_g p_g \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) = 0, \\
 & \frac{\partial(\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \frac{\partial(u_x \alpha_l \rho_l e_l)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y \alpha_l \rho_l e_l)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z \alpha_l \rho_l e_l)}{\partial z} + \\
 & + \alpha_l p_l \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) = 0.
 \end{aligned} \right. \quad (7.4.13)$$

Численное решение уравнений системы (7.4.13) (за исключением первого) находится с применением схемы Годунова:

$$U_{i,j,k}^{n+1} = U_{i,j,k}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \times (F_{i+1/2,j,k}^* - F_{i-1/2,j,k}^*) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \times (G_{i,j+1/2,k}^* - G_{i,j-1/2,k}^*) - \frac{\Delta t}{\Delta z} \times (H_{i,j,k+1/2}^* - H_{i,j,k-1/2}^*), \quad (7.4.14)$$

где $U = (\rho, \rho Y_2, w_x, w_y, w_z, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z)^T$;

$$F = \begin{pmatrix} \rho u_x \\ \rho Y_2 u_x \\ w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z \\ 0 \\ 0 \\ \rho u_x^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_x^2}{w^2} \right) \\ \rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w} \\ \rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w} \end{pmatrix};$$

$$G = \begin{pmatrix} \rho u_y \\ \rho Y_2 u_y \\ 0 \\ w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z \\ 0 \\ \rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w} \\ \rho u_y^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_y^2}{w^2} \right) \\ \rho u_z u_y + \lambda \frac{w_z w_y}{w} \end{pmatrix};$$

$$H = \begin{pmatrix} \rho u_z \\ \rho Y_2 u_z \\ 0 \\ 0 \\ w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z \\ \rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w} \\ \rho u_y u_z + \lambda \frac{w_y w_z}{w} \\ \rho u_z^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_z^2}{w^2} \right) \end{pmatrix}.$$

Величины консервативных потоков F, G, H находятся с применением HLLC солвера.

Решение неконсервативного уравнения для переноса объемной доли — первое уравнение системы (7.4.13) — находится следующим образом:

$$\begin{aligned} (\alpha_g)_{i,j,k}^{n+1} = & (\alpha_g)_{i,j,k}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(u_x)_{i+1/2,j,k}^* (\alpha_g)_{i+1/2,j,k}^* - (u_x)_{i-1/2,j,k}^* (\alpha_g)_{i-1/2,j,k}^* - \right. \\ & \left. - (\alpha_g)_{i,j,k}^n \left((u_x)_{i+1/2,j,k}^* - (u_x)_{i-1/2,j,k}^* \right) \right] - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[(u_y)_{i,j+1/2,k}^* (\alpha_g)_{i,j+1/2,k}^* - \right. \\ & \left. - (u_y)_{i,j-1/2,k}^* (\alpha_g)_{i,j-1/2,k}^* - (\alpha_g)_{i,j,k}^n \left((u_y)_{i,j+1/2,k}^* - (u_y)_{i,j-1/2,k}^* \right) \right] - \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[(u_z)_{i,j,k+1/2}^* (\alpha_g)_{i,j,k+1/2}^* - (u_z)_{i,j,k-1/2}^* (\alpha_g)_{i,j,k-1/2}^* - \right. \\ & \left. - (\alpha_g)_{i,j,k}^n \left((u_z)_{i,j,k+1/2}^* - (u_z)_{i,j,k-1/2}^* \right) \right]. \end{aligned} \quad (7.4.15)$$

Решение неконсервативных уравнений для внутренней энергии каждой из фаз — десятое и одиннадцатое уравнения системы (7.4.13) — находится так:

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_g)_{i,j,k}^{n+1} (\rho_g)_{i,j,k}^{n+1} (e_g)_{i,j,k}^{n+1} = (\alpha_g)_{i,j,k}^n (\rho_g)_{i,j,k}^n (e_g)_{i,j,k}^n - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(\alpha_g)_{i+1/2,j,k}^* (\rho_g)_{i+1/2,j,k}^* (e_g)_{i+1/2,j,k}^* (u_x)_{i+1/2,j,k}^* - \right. \\
 & - (\alpha_g)_{i-1/2,j,k}^* (\rho_g)_{i-1/2,j,k}^* (e_g)_{i-1/2,j,k}^* (u_x)_{i-1/2,j,k}^* + \\
 & \left. + (\alpha_g)_{i,j,k}^n (\rho_g)_{i,j,k}^n \left((u_x)_{i+1/2,j,k}^* - (u_x)_{i-1/2,j,k}^* \right) \right] - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[(\alpha_g)_{i,j+1/2,k}^* (\rho_g)_{i,j+1/2,k}^* (e_g)_{i,j+1/2,k}^* (u_y)_{i,j+1/2,k}^* - \right. \\
 & - (\alpha_g)_{i,j-1/2,k}^* (\rho_g)_{i,j-1/2,k}^* (e_g)_{i,j-1/2,k}^* (u_y)_{i,j-1/2,k}^* + \\
 & \left. + (\alpha_g)_{i,j,k}^n (\rho_g)_{i,j,k}^n \left((u_y)_{i,j+1/2,k}^* - (u_y)_{i,j-1/2,k}^* \right) \right] - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[(\alpha_g)_{i,j,k+1/2}^* (\rho_g)_{i,j,k+1/2}^* (e_g)_{i,j,k+1/2}^* (u_z)_{i,j,k+1/2}^* - \right. \\
 & - (\alpha_g)_{i,j,k-1/2}^* (\rho_g)_{i,j,k-1/2}^* (e_g)_{i,j,k-1/2}^* (u_z)_{i,j,k-1/2}^* + \\
 & \left. + (\alpha_g)_{i,j,k}^n (\rho_g)_{i,j,k}^n \left((u_z)_{i,j,k+1/2}^* - (u_z)_{i,j,k-1/2}^* \right) \right],
 \end{aligned} \tag{7.4.16}$$

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_l)_{i,j,k}^{n+1} (\rho_l)_{i,j,k}^{n+1} (e_l)_{i,j,k}^{n+1} = (\alpha_l)_{i,j,k}^n (\rho_l)_{i,j,k}^n (e_l)_{i,j,k}^n - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[(\alpha_l)_{i+1/2,j,k}^* (\rho_l)_{i+1/2,j,k}^* (e_l)_{i+1/2,j,k}^* (u_x)_{i+1/2,j,k}^* - \right. \\
 & - (\alpha_l)_{i-1/2,j,k}^* (\rho_l)_{i-1/2,j,k}^* (e_l)_{i-1/2,j,k}^* (u_x)_{i-1/2,j,k}^* + \\
 & \left. + (\alpha_l)_{i,j,k}^n (\rho_l)_{i,j,k}^n \left((u_x)_{i+1/2,j,k}^* - (u_x)_{i-1/2,j,k}^* \right) \right] - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[(\alpha_l)_{i,j+1/2,k}^* (\rho_l)_{i,j+1/2,k}^* (e_l)_{i,j+1/2,k}^* (u_y)_{i,j+1/2,k}^* - \right. \\
 & - (\alpha_l)_{i,j-1/2,k}^* (\rho_l)_{i,j-1/2,k}^* (e_l)_{i,j-1/2,k}^* (u_y)_{i,j-1/2,k}^* + \\
 & \left. + (\alpha_l)_{i,j,k}^n (\rho_l)_{i,j,k}^n \left((u_y)_{i,j+1/2,k}^* - (u_y)_{i,j-1/2,k}^* \right) \right] - \\
 & - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[(\alpha_l)_{i,j,k+1/2}^* (\rho_l)_{i,j,k+1/2}^* (e_l)_{i,j,k+1/2}^* (u_z)_{i,j,k+1/2}^* - \right. \\
 & - (\alpha_l)_{i,j,k-1/2}^* (\rho_l)_{i,j,k-1/2}^* (e_l)_{i,j,k-1/2}^* (u_z)_{i,j,k-1/2}^* + \\
 & \left. + (\alpha_l)_{i,j,k}^n (\rho_l)_{i,j,k}^n \left((u_z)_{i,j,k+1/2}^* - (u_z)_{i,j,k-1/2}^* \right) \right].
 \end{aligned} \tag{7.4.17}$$

Значения термодинамических параметров со звездочкой относятся к центрам боковых поверхностей объемной ячейки и вычисляются, как и величины консервативных потоков F, G, H , с применением HLLC солвера.

7.4.2. HLLC солвер для неравновесной по давлению двухфазной модели с учетом поверхностного натяжения

HLLC солвер записывается для трех направлений — X, Y и Z . В HLLC солвере рассматривается конфигурация из трех волн: левой, средней и правой (рис. 4). Соответствующие скорости распространения этих волн: S_L, S_M и S_R оцениваются априори.

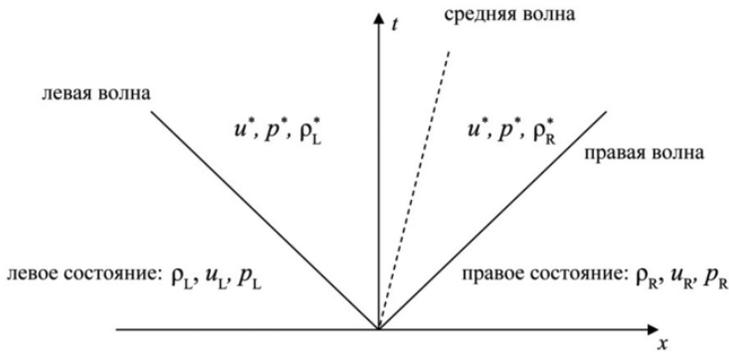


Рис. 4. Конфигурации волн в HLLC солвере

Для направления X система (7.4.13) будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u_x \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho Y_l u_x)}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial w_x}{\partial t} + \frac{\partial (w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z)}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_x^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_x^2}{w^2} \right) \right)}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w} \right)}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w} \right)}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \frac{\partial (u_x \alpha_g \rho_g e_g)}{\partial x} + \alpha_g p_g \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \\
 \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \frac{\partial (u_x \alpha_l \rho_l e_l)}{\partial x} + \alpha_l p_l \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0.
 \end{array} \right. \quad (7.4.18)$$

Значения скоростей S_{Lx} и S_{Rx} находятся следующим образом:

$$\begin{aligned}
 S_{Lx} &= \min \left((u_x)_{Lx} - c_{Lx}, (u_x)_{Rx} - c_{Rx} \right), \\
 S_{Rx} &= \min \left((u_x)_{Lx} + c_{Lx}, (u_x)_{Rx} + c_{Rx} \right),
 \end{aligned} \quad (7.4.19)$$

где $c = \frac{1}{\rho \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} \right)}$; c_g и c_l — фазовые скорости звука.

$$S_{Mx} = u_x^* = \frac{(A_x)}{S_{Rx}\rho_{Rx} - S_{Lx}\rho_{Lx} - \rho_{Rx}(u_x)_{Rx} + \rho_{Lx}(u_x)_{Lx}}, \quad (7.4.20)$$

где

$$A_x = \left(\rho_{Lx}(u_x)_{Lx}^2 + p_{Lx} - \lambda w_{Lx} \left(1 - \frac{(w_x)_{Lx}^2}{w_{Lx}^2} \right) \right) -$$

$$- \left(\rho_{Rx}(u_x)_{Rx}^2 + p_{Rx} - \lambda w_{Rx} \left(1 - \frac{(w_x)_{Rx}^2}{w_{Rx}^2} \right) \right) -$$

$$- S_{Lx}\rho_{Lx}(u_x)_{Lx} + S_{Rx}\rho_{Rx}(u_x)_{Rx};$$

$$(u_y^*)_{Rx} = (u_y)_{Rx}; \quad (7.4.21)$$

$$(u_y^*)_{Lx} = (u_y)_{Lx}; \quad (7.4.22)$$

$$(u_z^*)_{Rx} = (u_z)_{Rx}; \quad (7.4.23)$$

$$(u_z^*)_{Lx} = (u_z)_{Lx}; \quad (7.4.24)$$

$$(w_y^*)_{Rx} = (w_y)_{Rx}; \quad (7.4.25)$$

$$(w_y^*)_{Lx} = (w_y)_{Lx}; \quad (7.4.26)$$

$$(w_z^*)_{Rx} = (w_z)_{Rx}; \quad (7.4.27)$$

$$(w_z^*)_{Lx} = (w_z)_{Lx}; \quad (7.4.28)$$

$$(Y_l^*)_{Rx} = (Y_l)_{Rx}; \quad (7.4.29)$$

$$\left(Y_l^*\right)_{Lx} = \left(Y_l\right)_{Lx}. \quad (7.4.30)$$

В предположении о постоянстве объемной доли в отсутствие релаксации давления:

$$\left(\alpha_g^*\right)_{Rx} = \left(\alpha_g\right)_{Rx} \quad (7.4.31);$$

$$\left(\alpha_l^*\right)_{Rx} = \left(\alpha_l\right)_{Rx} \quad (7.4.32);$$

$$\left(\alpha_g^*\right)_{Lx} = \left(\alpha_g\right)_{Lx} \quad (7.4.33);$$

$$\left(\alpha_l^*\right)_{Lx} = \left(\alpha_l\right)_{Lx} \quad (7.4.34);$$

$$\rho_{Rx}^* = \rho_{Rx} \times \frac{S_{Rx} - (u_x)_{Rx}}{S_{Rx} - S_{Mx}} \quad (7.4.35);$$

$$\rho_{Lx}^* = \rho_{Lx} \times \frac{S_{Lx} - (u_x)_{Lx}}{S_{Lx} - S_{Mx}} \quad (7.4.36);$$

$$\left(w_x^*\right)_{Rx} = \left(w_x\right)_{Rx} \frac{S_{Rx} - (u_x)_{Rx}}{S_{Rx} - S_{Mx}} \quad (7.4.37);$$

$$\left(w_x^*\right)_{Lx} = \left(w_x\right)_{Lx} \frac{S_{Lx} - (u_x)_{Lx}}{S_{Lx} - S_{Mx}} \quad (7.4.38);$$

$$\begin{aligned} p_x^* = & p_{Rx} + \rho_{Rx} (u_x)_{Rx} \left((u_x)_{Rx} - S_{Rx} \right) - \rho_{Rx}^* S_{Mx} (S_{Mx} - S_{Rx}) + \\ & + \lambda w_{Rx}^* \left(1 - \frac{(w_x^*)_{Rx}^2}{(w_{Rx}^*)^2} \right) - \lambda w_{Rx} \left(1 - \frac{(w_x)_{Rx}^2}{w_{Rx}^2} \right), \end{aligned} \quad (7.4.39)$$

где

$$p_x^* = (\alpha_g^*)_{Rx} (p_g^*)_{Rx} + (\alpha_l^*)_{Rx} (p_l^*)_{Rx} = \\ = (\alpha_g^*)_{Lx} (p_g^*)_{Lx} + (\alpha_l^*)_{Lx} (p_l^*)_{Lx},$$

$$w_{Rx}^2 = (w_x)_{Rx}^2 + (w_y)_{Rx}^2 + (w_z)_{Rx}^2,$$

$$w_{Lx}^2 = (w_x)_{Lx}^2 + (w_y)_{Lx}^2 + (w_z)_{Lx}^2,$$

$$\rho_{Rx}^* = (\alpha_g^*)_{Rx} (\rho_g^*)_{Rx} + (\alpha_l^*)_{Rx} (\rho_l^*)_{Rx},$$

$$\rho_{Lx}^* = (\alpha_g^*)_{Lx} (\rho_g^*)_{Lx} + (\alpha_l^*)_{Lx} (\rho_l^*)_{Lx}.$$

$$(\rho_g^*)_{Rx} = (\rho_g)_{Rx} \frac{(u_x)_{Rx} - S_{Rx}}{S_{Mx} - S_{Rx}}, \quad (7.4.40)$$

$$(\rho_l^*)_{Rx} = (\rho_l)_{Rx} \frac{(u_x)_{Rx} - S_{Rx}}{S_{Mx} - S_{Rx}}, \quad (7.4.41)$$

$$(\rho_g^*)_{Lx} = (\rho_g)_{Lx} \frac{(u_x)_{Lx} - S_{Lx}}{S_{Mx} - S_{Lx}}, \quad (7.4.42)$$

$$(\rho_l^*)_{Lx} = (\rho_l)_{Lx} \frac{(u_x)_{Lx} - S_{Lx}}{S_{Mx} - S_{Lx}}, \quad (7.4.43)$$

$$(p_g^*)_{Rx} = f((\rho_g^*)_{Rx}) = \\ = ((p_g)_{Rx} + \pi_g) \frac{(\gamma_g - 1)(\rho_g)_{Rx} - (\gamma_g + 1)(\rho_g^*)_{Rx}}{(\gamma_g - 1)(\rho_g^*)_{Rx} - (\gamma_g + 1)(\rho_g)_{Rx}} - \pi_g, \quad (7.4.44)$$

$$\begin{aligned} (p_l^*)_x &= f \left((\rho_l^*)_{Rx} \right) = \\ &= \left((p_l)_{Rx} + \pi_l \right) \frac{(\gamma_l - 1)(\rho_l)_{Rx} - (\gamma_l + 1)(\rho_l^*)_{Rx}}{(\gamma_l - 1)(\rho_l^*)_{Rx} - (\gamma_l + 1)(\rho_l)_{Rx}} - \pi_l. \end{aligned} \quad (7.4.45)$$

Соотношения (7.4.19)—(7.4.45) используются для вычисления потока вдоль оси X в схеме (7.4.14)

$$F = \begin{pmatrix} \rho u_x \\ \rho Y_2 u_x \\ w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z \\ 0 \\ 0 \\ \rho u_x^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_x^2}{w^2} \right) \\ \rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w} \\ \rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w} \end{pmatrix}$$

а также значений параметров для вычисления производных вдоль оси X в (7.4.15)—(7.4.17).

Для направления Y система (7.4.13) будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u_y \frac{\partial \alpha_g}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho Y_l u_y)}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial w_y}{\partial t} + \frac{\partial (w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z)}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_x u_y + \lambda \frac{w_x w_y}{w} \right)}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_y^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_y^2}{w^2} \right) \right)}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_z u_y + \lambda \frac{w_z w_y}{w} \right)}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \frac{\partial (u_y \alpha_g \rho_g e_g)}{\partial y} + \alpha_g p_g \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0, \\
 \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \frac{\partial (u_y \alpha_l \rho_l e_l)}{\partial y} + \alpha_l p_l \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0.
 \end{array} \right. \quad (7.4.46)$$

Значения скоростей S_{Ly} и S_{Ry} находятся следующим образом:

$$S_{Ly} = \min \left((u_y)_{Ly} - c_{Ly}, (u_y)_{Ry} - c_{Ry} \right),$$

$$S_{Ry} = \min \left((u_y)_{Ly} + c_{Ly}, (u_y)_{Ry} + c_{Ry} \right)$$
(7.4.47)

где $c = \frac{1}{\rho \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} \right)}$; c_g и c_l — фазовые скорости звука.

$$S_{My} = u_y^* = \frac{A_y}{S_{Ry} \rho_{Ry} - S_{Ly} \rho_{Ly} - \rho_{Ry} (u_y)_{Ry} + \rho_{Ly} (u_y)_{Ly}},$$
(7.4.48)

где

$$A_y = \left(\rho_{Ly} (u_y)_{Ly}^2 + p_{Ly} - \lambda w_{Ly} \left(1 - \frac{(w_y)_{Ly}^2}{w_{Lx}^2} \right) \right) -$$

$$- \left(\rho_{Ry} (u_y)_{Ry}^2 + p_{Ry} - \lambda w_{Ry} \left(1 - \frac{(w_y)_{Ry}^2}{w_{Rx}^2} \right) \right) -$$

$$- S_{Ly} \rho_{Ly} (u_y)_{Ly} + S_{Ry} \rho_{Ry} (u_y)_{Ry};$$

$$(u_x^*)_{Ry} = (u_x)_{Ry};$$
(7.4.49)

$$(u_x^*)_{Ly} = (u_x)_{Ly};$$
(7.4.50)

$$(u_z^*)_{Ry} = (u_z)_{Ry};$$
(7.4.51)

$$(u_z^*)_{Ly} = (u_z)_{Ly};$$
(7.4.52)

$$(w_x^*)_{Ry} = (w_x)_{Ry};$$
(7.4.53)

$$(w_x^*)_{Ly} = (w_x)_{Ly}; \quad (7.4.54)$$

$$(w_z^*)_{Ry} = (w_z)_{Ry}; \quad (7.4.55)$$

$$(w_z^*)_{Ly} = (w_z)_{Ly}; \quad (7.4.56)$$

$$(Y_l^*)_{Ry} = (Y_l)_{Ry}; \quad (7.4.57)$$

$$(Y_l^*)_{Ly} = (Y_l)_{Ly}. \quad (7.4.58)$$

В предположении о постоянстве объемной доли в отсутствие релаксации давления:

$$(\alpha_g^*)_{Ry} = (\alpha_g)_{Ry}, \quad (7.4.59)$$

$$(\alpha_l^*)_{Ry} = (\alpha_l)_{Ry}, \quad (7.4.60)$$

$$(\alpha_g^*)_{Ly} = (\alpha_g)_{Ly}, \quad (7.4.61)$$

$$(\alpha_l^*)_{Ly} = (\alpha_l)_{Ly}, \quad (7.4.62)$$

$$\rho_{Ry}^* = \rho_{Ry} \frac{S_{Ry} - (u_y)_{Ry}}{S_{Ry} - S_{My}}, \quad (7.4.63)$$

$$\rho_{Ly}^* = \rho_{Ly} \frac{S_{Ly} - (u_y)_{Ly}}{S_{Ly} - S_{My}}, \quad (7.4.64)$$

$$(w_y^*)_{Ry} = (w_y)_{Ry} \frac{S_{Ry} - (u_y)_{Ry}}{S_{Ry} - S_{My}}, \quad (7.4.65)$$

$$(w_y^*)_{Ly} = (w_y)_{Ly} \frac{S_{Ly} - (u_y)_L}{S_{Ly} - S_{My}}, \quad (7.4.66)$$

$$p_y^* = p_{Ry} + \rho_{Ry} (u_y)_{Ry} \left((u_y)_{Ry} - S_{Ry} \right) - \rho_{Ry}^* S_{My} (S_{My} - S_{Ry}) + \\ + \lambda w_{Ry}^* \left(1 - \frac{(w_y^*)_{Ry}^2}{(w_{Ry}^*)^2} \right) - \lambda w_{Ly} \left(1 - \frac{(w_y)_{Ly}^2}{w_{Ry}^2} \right), \quad (7.4.67)$$

где

$$p_y^* = (\alpha_g^*)_{Ry} (p_g^*)_{Ry} + (\alpha_l^*)_{Ry} (p_l^*)_{Ry} = (\alpha_g^*)_{Ly} (p_g^*)_{Ly} + (\alpha_l^*)_{Ly} (p_l^*)_{Ly};$$

$$w_{Ry}^2 = (w_x)_{Ry}^2 + (w_y)_{Ry}^2 + (w_z)_{Ry}^2;$$

$$w_{Ly}^2 = (w_x)_{Ly}^2 + (w_y)_{Ly}^2 + (w_z)_{Ly}^2;$$

$$\rho_{Ry}^* = (\alpha_g^*)_{Ry} (\rho_g^*)_{Ry} + (\alpha_l^*)_{Ry} (\rho_l^*)_{Ry};$$

$$\rho_{Ly}^* = (\alpha_g^*)_{Ly} (\rho_g^*)_{Ly} + (\alpha_l^*)_{Ly} (\rho_l^*)_{Ly};$$

$$(p_g^*)_{Ry} = (p_g)_{Ry} \frac{(u_y)_{Ry} - S_{Ry}}{S_{My} - S_{Ry}}; \quad (7.4.68)$$

$$(p_l^*)_{Ry} = (p_l)_{Ry} \frac{(u_y)_{Ry} - S_{Ry}}{S_{My} - S_{Ry}}; \quad (7.4.69)$$

$$(p_g^*)_{Ly} = (p_g)_{Ly} \frac{(u_y)_{Ly} - S_{Ly}}{S_{My} - S_{Ly}}; \quad (7.4.70)$$

$$(\rho_l^*)_{Ly} = (\rho_l)_{Ly} \frac{(u_y)_{Ly} - S_{Ly}}{S_{My} - S_{Ly}}; \quad (7.4.71)$$

$$\begin{aligned} (p_g^*)_y &= f\left((\rho_g^*)_{Ry}\right) = \\ &= \left((p_g)_{Ry} + \pi_g\right) \frac{(\gamma_g - 1)(\rho_g)_{Ry} - (\gamma_g + 1)(\rho_g^*)_{Ry}}{(\gamma_g - 1)(\rho_g^*)_{Ry} - (\gamma_g + 1)(\rho_g)_{Ry}} - \pi_g; \end{aligned} \quad (7.4.72)$$

$$\begin{aligned} (p_l^*)_y &= f\left((\rho_l^*)_{Ry}\right) = \\ &= \left((p_l)_{Ry} + \pi_l\right) \frac{(\gamma_l - 1)(\rho_l)_{Ry} - (\gamma_l + 1)(\rho_l^*)_{Ry}}{(\gamma_l - 1)(\rho_l^*)_{Ry} - (\gamma_l + 1)(\rho_l)_{Ry}} - \pi_l. \end{aligned} \quad (7.4.73)$$

Соотношения (7.4.47)—(7.4.73) используются для вычисления потока вдоль оси Y в схеме (7.4.14)

$$\begin{aligned} G = & \left(\rho u_y, \rho Y_2 u_y, 0, w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z, 0, \rho u_x u_y + \right. \\ & \left. + \lambda \frac{w_x w_y}{w}, \rho u_y^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_y^2}{w^2} \right), \rho u_z u_y + \lambda \frac{w_z w_y}{w} \right)^T, \end{aligned}$$

а также значений параметров для вычисления производных вдоль оси Y в (7.4.15)—(7.4.17).

Для направления Z система (7.4.13) будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u_z \frac{\partial \alpha_g}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial(\rho Y_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_l u_z)}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial w_z}{\partial t} + \frac{\partial(w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z)}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w}\right)}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho u_y u_z + \lambda \frac{w_y w_z}{w}\right)}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho u_z^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_z^2}{w^2}\right)\right)}{\partial z} = 0, \\
 \frac{\partial(\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \frac{\partial(u_z \alpha_g \rho_g e_g)}{\partial z} + \alpha_g p_g \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \\
 \frac{\partial(\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} + \frac{\partial(u_z \alpha_l \rho_l e_l)}{\partial z} + \alpha_l p_l \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0.
 \end{array} \right. \quad (7.4.74)$$

Значения скоростей S_{Lz} и S_{Rz} находятся следующим образом:

$$\begin{aligned}
 S_{Lz} &= \min\left((u_z)_{Lz} - c_{Lz}, (u_z)_{Rz} - c_{Rz}\right), \\
 S_{Rz} &= \min\left((u_z)_{Lz} + c_{Lz}, (u_z)_{Rz} + c_{Rz}\right).
 \end{aligned} \quad (7.4.75)$$

где $c = \frac{1}{\rho \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l c_l^2} \right)}$, c_g и c_l — фазовые скорости звука.

$$S_{Mz} = u_z^* = \frac{(A_z)}{S_{Rz} \rho_{Rz} - S_{Lz} \rho_{Lz} - \rho_{Rz} (u_z)_{Rz} + \rho_{Lz} (u_z)_{Lz}}, \quad (7.4.76)$$

где

$$A_z = \left(\rho_{Lz} (u_z)_{Lz}^2 + p_{Lz} - \lambda w_{Lz} \left(1 - \frac{(w_z)_{Lz}^2}{w_{Lz}^2} \right) \right) - \\ - \left(\rho_{Rz} (u_z)_{Rz}^2 + p_{Rz} - \lambda w_{Rz} \left(1 - \frac{(w_z)_{Rz}^2}{w_{Rz}^2} \right) \right) - \\ - S_{Lz} \rho_{Lz} (u_z)_{Lz} + S_{Rz} \rho_{Rz} (u_z)_{Rz};$$

$$(u_x^*)_{Rz} = (u_x)_{Rz}. \quad (7.4.77)$$

$$(u_x^*)_{Lz} = (u_x)_{Lz}; \quad (7.4.78)$$

$$(u_y^*)_{Rz} = (u_y)_{Rz}; \quad (7.4.79)$$

$$(u_y^*)_{Lz} = (u_y)_{Lz}; \quad (7.4.80)$$

$$(w_x^*)_{Rz} = (w_x)_{Rz}; \quad (7.4.81)$$

$$(w_x^*)_{Lz} = (w_x)_{Lz}; \quad (7.4.82)$$

$$(w_y^*)_{Rz} = (w_y)_{Rz}; \quad (7.4.83)$$

$$(w_y^*)_{Lz} = (w_y)_{Lz}; \quad (7.4.84)$$

$$(Y_l^*)_{Rz} = (Y_l)_{Rz}; \quad (7.4.85)$$

$$(Y_l^*)_{Lz} = (Y_l)_{Lz}. \quad (7.4.86)$$

В предположении о постоянстве объемной доли в отсутствие релаксации давления:

$$(\alpha_g^*)_{Rz} = (\alpha_g)_{Rz}; \quad (7.4.87)$$

$$(\alpha_l^*)_{Rz} = (\alpha_l)_{Rz}; \quad (7.4.88)$$

$$(\alpha_g^*)_{Lz} = (\alpha_g)_{Lz}; \quad (7.4.89)$$

$$(\alpha_l^*)_{Lz} = (\alpha_l)_{Lz}; \quad (7.4.90)$$

$$\rho_{Rz}^* = \rho_{Rz} \frac{S_{Rz} - (u_z)_{Rz}}{S_{Rz} - S_{Mz}}; \quad (7.4.91)$$

$$\rho_{Lz}^* = \rho_{Lz} \frac{S_{Lz} - (u_z)_{Lz}}{S_{Lz} - S_{Mz}}; \quad (7.4.92)$$

$$(w_z^*)_{Rz} = (w_z)_{Rz} \frac{S_{Rz} - (u_z)_{Rz}}{S_{Rz} - S_{Mz}}; \quad (7.4.93)$$

$$(w_z^*)_{Lz} = (w_z)_{Lz} \frac{S_{Lz} - (u_z)_{Lz}}{S_{Lz} - S_{Mz}}; \quad (7.4.94)$$

$$p_z^* = p_{Rz} + \rho_{Rz} (u_z)_{Rz} \left((u_z)_{Rz} - S_{Rz} \right) - \rho_{Rz}^* S_{Mz} (S_{Mz} - S_{Rz}) + \\ + \lambda w_{Rz}^* \left(1 - \frac{(w_z^*)_{Rz}^2}{(w_{Rz}^*)^2} \right) - \lambda w_{Rz} \left(1 - \frac{(w_z)_{Rz}^2}{w_{Rz}^2} \right), \quad (7.4.95)$$

где

$$p_z^* = (\alpha_g^*)_{Rz} (p_g^*)_{Rz} + (\alpha_l^*)_{Rz} (p_l^*)_{Rz} = (\alpha_g^*)_{Lz} (p_g^*)_{Lz} + (\alpha_l^*)_{Lz} (p_l^*)_{Lz};$$

$$w_{Rz}^2 = (w_x)_{Rz}^2 + (w_y)_{Rz}^2 + (w_z)_{Rz}^2;$$

$$w_{Lz}^2 = (w_x)_{Lz}^2 + (w_y)_{Lz}^2 + (w_z)_{Lz}^2;$$

$$\rho_{Rz}^* = (\alpha_g^*)_{Rz} (\rho_g^*)_{Rz} + (\alpha_l^*)_{Rz} (\rho_l^*)_{Rz};$$

$$\rho_{Lz}^* = (\alpha_g^*)_{Lz} (\rho_g^*)_{Lz} + (\alpha_l^*)_{Lz} (\rho_l^*)_{Lz};$$

$$(\rho_g^*)_{Rz} = (\rho_g)_{Rz} \frac{(u_z)_{Rz} - S_{Rz}}{S_{Mz} - S_{Rz}}; \quad (7.4.96)$$

$$(\rho_l^*)_{Rz} = (\rho_l)_{Rz} \frac{(u_z)_{Rz} - S_{Rz}}{S_{Mz} - S_{Rz}}; \quad (7.4.97)$$

$$(\rho_g^*)_{Lz} = (\rho_g)_{Lz} \frac{(u_z)_{Lz} - S_{Lz}}{S_{Mz} - S_{Lz}}; \quad (7.4.98)$$

$$(\rho_l^*)_{Lz} = (\rho_l)_{Lz} \frac{(u_z)_{Lz} - S_{Lz}}{S_{Mz} - S_{Lz}}; \quad (7.4.99)$$

$$\begin{aligned} (p_g^*)_z &= f\left((\rho_g^*)_{Rz}\right) = \\ &= \left((p_g)_{Rz} + \pi_g\right) \frac{(\gamma_g - 1)(\rho_g)_{Rz} - (\gamma_g + 1)(\rho_g^*)_{Rz}}{(\gamma_g - 1)(\rho_g^*)_{Rz} - (\gamma_g + 1)(\rho_g)_{Rz}} - \pi_g; \end{aligned} \quad (7.4.100)$$

$$\begin{aligned} (p_l^*)_z &= f\left((\rho_l^*)_{Rz}\right) = \\ &= \left((p_l)_{Rz} + \pi_l\right) \frac{(\gamma_l - 1)(\rho_l)_{Rz} - (\gamma_l + 1)(\rho_l^*)_{Rz}}{(\gamma_l - 1)(\rho_l^*)_{Rz} - (\gamma_l + 1)(\rho_l)_{Rz}} - \pi_l. \end{aligned} \quad (7.4.101)$$

Соотношения (7.4.75)—(7.4.101) используются для вычисления потока вдоль оси Z в схеме (7.4.14):

$$H = \left(\begin{array}{l} \rho u_z, \rho Y_2 u_z, 0, 0, w_x u_x + w_y u_y + w_z u_z, \rho u_x u_z + \lambda \frac{w_x w_z}{w}, \rho u_y u_z + \\ + \lambda \frac{w_y w_z}{w}, \rho u_z^2 + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l - \lambda w \left(1 - \frac{w_z^2}{w^2} \right) \end{array} \right)^T,$$

а также значений параметров для вычисления производных вдоль оси Z в (7.4.15)—(7.4.17).

7.4.3. Релаксация давлений и консервативная поправка на величины давления

После нахождения численного решения (7.4.13), (7.4.15)—(7.4.17) применяется процедура релаксации давлений. В явном виде для трехмерного случая система (7.4.12) имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \mu (p_g - p_l), \\ \frac{\partial p}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho Y_l)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = -P_l \mu (p_g - p_l), \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = P_l \mu (p_g - p_l), \end{array} \right. \quad (7.4.102)$$

где $\mu \rightarrow +\infty$.

Уравнения для внутренних энергий можно преобразовать к виду

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial e_g}{\partial t} + P_l \frac{\partial \frac{1}{\rho_g}}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial e_l}{\partial t} + P_l \frac{\partial \frac{1}{\rho_l}}{\partial t} = 0. \end{array} \right. \quad (7.4.103)$$

В качестве оценки величины интерфейсного давления P_I используется следующее выражение [14]:

$$P_I = \frac{Z_l p_g + Z_g p_l}{Z_g + Z_l}, \quad (7.4.104)$$

где $Z_g = \rho_g c_g$, $Z_l = \rho_l c_l$.

Численная аппроксимация системы (7.4.103) имеет вид

$$\begin{cases} e_g(p, \rho_g) - e_g(p_g^0, \rho_g^0) + P_I \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_g^0} \right) = 0, \\ e_l(p, \rho_l) - e_l(p_l^0, \rho_l^0) + P_I \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_l^0} \right) = 0. \end{cases} \quad (7.4.105)$$

Для уравнения состояния $e = \frac{p + \gamma\pi}{\rho(\gamma - 1)} + q$ можно получить следующие зависимости плотностей фаз или компонентов смеси от величины равновесного давления:

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho_g}(p) = \frac{1}{\rho_g^0} \frac{p_g^0 + \gamma_g \pi_g + P_I (\gamma_g - 1)}{p + \gamma_g \pi_g + P_I (\gamma_g - 1)}, \\ \frac{1}{\rho_l}(p) = \frac{1}{\rho_l^0} \frac{p_l^0 + \gamma_l \pi_l + P_I (\gamma_l - 1)}{p + \gamma_l \pi_l + P_I (\gamma_l - 1)}. \end{cases} \quad (7.4.106)$$

Далее из (7.4.106) и соотношения насыщения для объемных долей можно получить

$$\alpha_g + \alpha_l = \frac{(\alpha_g \rho_g)}{\rho_g} + \frac{(\alpha_l \rho_l)}{\rho_l} = \frac{1}{\rho_g}(p) (\alpha_g \rho_g)^0 + \frac{1}{\rho_l}(p) (\alpha_l \rho_l)^0 = 1. \quad (7.4.107)$$

Решение уравнения (7.4.107) позволяет определить давление двухфазной среды после релаксации. Значения фазовых плотностей находятся из

(4.106), а объемная доля — из третьего уравнения системы (7.4.102), кото-

рое может быть записано в виде
$$\frac{\partial \left((1 - \alpha_g) \rho_l \right)}{\partial t} = 0.$$

После процесса релаксации общее давление двухфазной смеси должно удовлетворять уравнению состояния

$$p = \frac{\rho e - \alpha_g \rho_g q_g - \alpha_l \rho_l q_l - \frac{\alpha_g \gamma_g \pi_g}{\gamma_g - 1} - \frac{\alpha_l \gamma_l \pi_l}{\gamma_l - 1}}{\frac{\alpha_g}{\gamma_g - 1} + \frac{\alpha_l}{\gamma_l - 1}}, \quad (7.4.108)$$

где $\rho e = \rho E - \frac{\rho(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)}{2} - \lambda w$.

Значение ρE не меняется в ходе релаксации и может быть определено из численного решения избыточного консервативного уравнения для полной энергии — см. последнее уравнение в (7.4.7):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \left(\frac{\rho u_x^2}{2} + \frac{\rho u_y^2}{2} + \frac{\rho u_z^2}{2} + \alpha_g \rho_g e_g + \alpha_l \rho_l e_l + \lambda w \right)}{\partial t} + \\ & + \frac{\partial \left(u_x \left(\frac{\rho u_x^2}{2} + \frac{\rho u_y^2}{2} + \frac{\rho u_z^2}{2} + \alpha_g \rho_g e_g + \alpha_l \rho_l e_l + \lambda w + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l \right) \right)}{\partial x} + \\ & + \frac{\partial \left(\lambda u_x \left(\frac{w_x w_y}{w} + \frac{w_x w_z}{w} - w \left(1 - \frac{w_x^2}{w^2} \right) \right) \right)}{\partial x} + \\ & + \frac{\partial \left(u_y \left(\frac{\rho u_x^2}{2} + \frac{\rho u_y^2}{2} + \frac{\rho u_z^2}{2} + \alpha_g \rho_g e_g + \alpha_l \rho_l e_l + \lambda w + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l \right) \right)}{\partial y} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\partial \left(\lambda u_y \left(\frac{w_x w_y}{w} + \frac{w_y w_z}{w} - w \left(1 - \frac{w_y^2}{w^2} \right) \right) \right)}{\partial y} + \\
 & + \frac{\partial \left(u_z \left(\frac{\rho u_x^2}{2} + \frac{\rho u_y^2}{2} + \frac{\rho u_z^2}{2} + \alpha_g \rho_g e_g + \alpha_l \rho_l e_l + \lambda w + \alpha_g p_g + \alpha_l p_l \right) \right)}{\partial z} + \\
 & + \frac{\partial \left(\lambda u_z \left(\frac{w_x w_z}{w} + \frac{w_y w_z}{w} - w \left(1 - \frac{w_z^2}{w^2} \right) \right) \right)}{\partial z} = 0.
 \end{aligned}$$

Значения термодинамических параметров в потоковых членах относятся к центрам боковых поверхностей объемной ячейки и вычисляются с применением HLLC солвера в каждом из трех направлений. Величины $\frac{\rho(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)}{2}$ и λw в (4.108) не меняются в ходе релаксации и определяются из численного решения (7.4.14), (7.4.15)—(7.4.17). Величины объемной доли и плотностей фаз в (7.4.108) соответствуют значениям, установленным после релаксационной процедуры. Таким образом, соотношение (7.4.108) позволяет вычислить окончательную поправку к общей величине давления двухфазной среды и фазовых внутренних энергий.

7.4.4. Моделирование межфазового теплообмена и фазовых переходов

После моделирования газодинамических процессов в двухфазной среде с учетом поверхностного натяжения, а также учета процесса релаксации давлений выполняется расчет межфазового теплообмена и фазовых переходов.

Неравновесная модель испарения. В данной модели межфазовый теплообмен и фазовые переходы могут привести двухфазную систему в состояние с разными величинами давлений и температур. Эти процессы моделируются с использованием следующей правой части в системе уравнений (7.4.10):

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \frac{\Gamma A_I}{\rho_I}, \\
 \frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = \Gamma A_I, \\
 \frac{\partial (\alpha_I \rho_I)}{\partial t} = -\Gamma A_I, \\
 \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\
 \frac{\partial \left(\alpha_g \rho_g e_g + \alpha_g \rho_g \left(\frac{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}{2} \right) \right)}{\partial t} = \\
 = -\Gamma A_I \left(\frac{p_I}{\rho_I} - H_{gI} \right) + A_I h_{Tg} (T_I - T_g), \\
 \frac{\partial \left(\alpha_I \rho_I e_I + \alpha_I \rho_I \left(\frac{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}{2} \right) \right)}{\partial t} = \\
 = \Gamma A_I \left(\frac{p_I}{\rho_I} - H_{II} \right) + A_I h_{TI} (T_I - T_I).
 \end{array} \right. \quad (7.4.109)$$

В примитивных переменных система (7.4.109) будет иметь вид

$$\left. \begin{aligned}
 & \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \frac{\Gamma A_l}{\rho_l}, \\
 & \frac{\partial (\alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l)}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial \rho_g}{\partial t} = \frac{\Gamma A_l \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_l}\right)}{\alpha_g}, \\
 & \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial u_x}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial u_y}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial u_z}{\partial t} = 0, \\
 & \frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\gamma_g - 1}{\alpha_g} \times \\
 & \quad \times \left[A_l h_{Tg} (T_l - T_g) - \Gamma A_l \left(\frac{p_l (\gamma_g - 1) + p_g + \gamma_g \pi_g}{\rho_l (\gamma_g - 1)} - (c_p)_g T_l \right) \right], \\
 & \frac{\partial p_l}{\partial t} = \frac{\gamma_l - 1}{\alpha_l} \times \\
 & \quad \times \left[A_l h_{Tl} (T_l - T_l) + \Gamma A_l \left(\frac{p_l (\gamma_l - 1) + p_l + \gamma_l \pi_l}{\rho_l (\gamma_l - 1)} - (c_p)_l T_l \right) \right].
 \end{aligned} \right\} (7.4.110)$$

где:

$$1. A_l = A_{l,\max} \left[6,75 \alpha_g^2 (1 - \alpha_g) \right] = 5100 \left[6,75 \alpha_g^2 (1 - \alpha_g) \right]; \quad A_{l,\max} = \left[\frac{\text{M}^2}{\text{M}^3} \right]. [16]$$

2. Интерфейсная температура T_l , которую имеют обе фазы на интерфейсе, находится по кривой насыщения $T_l = T_{\text{SAT}}(p_l)$; кривая насыщения связывает температуру насыщения и давление насыщения и получается из условия равенства химических потенциалов Гиббса $g_g = g_l$ (фазы находятся в термодинамическом равновесии на интерфейсе).

Учитывая, что $g_k = (\gamma_k (c_v)_k - q'_k) T_k - (c_v)_k T_k \ln \frac{T_k^\gamma}{(p_k + \pi_k)^{\gamma_k - 1}} + q_k$, $k = g, l$,

а также что $p_g = p_l = P_l$ и $T_g = T_l = T_l$, можно получить

$$\ln(P_l + \pi_g) = A + \frac{B}{T_l} + C \ln T_l + D \ln(P_l + \pi_l), \quad (7.4.111)$$

где $A = \frac{\gamma_l (C_v)_l - \gamma_g (C_v)_g + q'_g - q'_l}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g}$; $B = \frac{q_l - q_g}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g}$;

$$C = \frac{\gamma_g (C_v)_g - \gamma_l (C_v)_l}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g}; \quad D = \frac{(\gamma_l - 1)(C_v)_l}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g}.$$

$$3. \quad \rho_l = \rho_l(p_l, T_l) = \frac{P_l + \pi_l}{(\gamma_l - 1)(C_v)_l T_l}. \quad (7.4.112)$$

4. Величина Γ определяется из сохранения баланса массы и полной энергии двухфазной смеси на интерфейсной границе:

$$\Gamma = \frac{h_{T_l}(T_{l\infty} - T_l) + h_{T_g}(T_{g\infty} - T_l)}{h_{gl} - h_{ll}}, \quad (7.4.113)$$

где h_{T_g} — коэффициент теплообмена газовой фазы, Дж/м²Кс; h_{T_l} — коэффициент теплообмена жидкой фазы, Дж/м²Кс; $T_{g\infty}$, $T_{l\infty}$ — температуры газовой и жидкой фаз из макроскопической двухфазной модели;

$h_{gl} = (c_p)_g T_l + q_g$ — интерфейсная энтальпия газовой фазы;

$h_{ll} = (c_p)_l T_l + q_l$ — интерфейсная энтальпия жидкой фазы.

Для круглой жидкой капли радиусом R коэффициент теплообмена h_{Tl} вычисляется следующим образом:

$$h_{Tl} = \frac{5\lambda_l}{R}, \quad (7.4.114)$$

где λ_l — коэффициент теплопроводности жидкой фазы, Дж/мКс.

Коэффициент теплообмена газовой фазы h_{Tg} вычисляется из корреляций с использованием числа Нуссельта, характеризующего соотношение между интенсивностью теплообмена за счет конвекции и интенсивностью теплообмена за счет теплопроводности (в условиях неподвижной среды). Зная h_{Tg} и h_{Tl} , можно вычислить Γ .

$$H_{gl} = (c_p)_g T_l + q_g + \frac{u^2}{2} \text{ — полная энтальпия газовой фазы на интерфейсе.}$$

$$H_{ll} = (c_p)_l T_l + q_l + \frac{u^2}{2} \text{ — полная энтальпия жидкой фазы на интерфейсе.}$$

Система (7.4.110) решается в случае перегретого состояния жидкой фазы

($T_l > T_{\text{насыщ.}}$) или переохлажденного насыщенного газа ($T_g < T_{\text{насыщ.}}$) при данном давлении P . Зависимость $P(T_{\text{насыщ.}})$ находится из условия равенства химических потенциалов Гиббса $g_g = g_l$ при термодинамическом равновесии:

$$\ln(P + \pi_g) = A + \frac{B}{T_{\text{насыщ.}}} + C \ln T_{\text{насыщ.}} + D \ln(P + \pi_l). \quad (7.4.115)$$

Равновесная модель испарения. В равновесной модели испарения межфазовый теплообмен и фазовые переходы приводят двухфазную систему в состояние с одинаковыми величинами давлений, температур и энергий

Гиббса [17]: $g_g = e_g + \frac{P_g}{\rho_g} - T_g S_g$ и $g_l = e_l + \frac{P_l}{\rho_l} - T_l S_l$.

Для моделирования этих процессов правая часть системы уравнений (7.4.10) будет иметь вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \frac{Q}{k} + \frac{\dot{m}}{\rho_l}, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = \dot{m}, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l)}{\partial t} = -\dot{m}, \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = Q + e_l \dot{m}, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = -Q - e_l \dot{m}, \end{array} \right. \quad (7.4.116)$$

где k , ρ_l и e_l — неизвестные величины, которые нужно определить.

В операторном виде (7.4.116) можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = S_Q + S_m, \quad (7.4.117)$$

где $U = (\alpha_g, \alpha_g \rho_g, \alpha_l \rho_l, w_x, w_y, w_z, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z, \alpha_g \rho_g E_g, \alpha_l \rho_l E_l)^T$;

$S_Q = \left(\frac{Q}{k}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, Q, -Q \right)^T$ — вектор правой части для моделирования межфазового теплообмена;

$$S_m = \begin{pmatrix} \dot{m} \\ \rho_l \\ \dot{m} \\ -\dot{m} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ e_l \times \dot{m} \\ -e_l \times \dot{m} \end{pmatrix} \quad \text{— вектор правой части для моделирования} \\ \text{фазовых переходов.}$$

Операторное расщепление в (7.4.117) на оператор межфазового теплообмена и оператор фазовых переходов основывается на предположении о разных скоростях релаксации температур и энергий Гиббса фаз при испарении. Выравнивание температур фаз происходит гораздо быстрее, чем релаксация энергий Гиббса [9; 17]. Быстрее всего происходит релаксация давлений фаз [17], поэтому в предположении о мгновенной (в пределах расчетного временного шага) релаксации давлений, температур ($Q = \theta(T_l - T_g)$, $\theta \rightarrow \infty$) и энергий Гиббса ($\dot{m} = v(g_l - g_g)$, $v \rightarrow \infty$) сначала применяется оператор S_Q , сохраняющий равенство давлений фаз, а затем оператор S_m , сохраняющий равенство давлений и температур фаз.

Для моделирования релаксации температур при равенстве давлений решается следующая система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \frac{Q}{k}, \\ \frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} = 0 \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = Q, \\ \frac{\partial(\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = -Q. \end{array} \right. \quad (7.4.118).$$

Используя второе и третье уравнения, можно получить для седьмого, восьмого и девятого:

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial u_y}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial t} = 0. \quad (7.4.119)$$

С учетом первого уравнения из (7.4.118) и (7.4.119) десятое уравнение примет вид

$$\alpha_g \rho_g \frac{\partial e_g}{\partial t} = k \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.120)$$

Дифференцируя в (7.4.120) $e_g = e_g(p_g, \rho_g)$, с учетом второго уравнения из (7.4.118) можно получить

$$\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{k + \rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g}}{\alpha_g \rho_g \left(\frac{\partial e_g}{\partial p_g} \right)_{\rho_g}} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.121)$$

Аналогичным образом получается соотношение

$$\frac{\partial p_l}{\partial t} = - \frac{k + \rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l}}{\alpha_l \rho_l \left(\frac{\partial e_l}{\partial p_l} \right)_{\rho_l}} \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}. \quad (7.4.122)$$

Условие равенства давлений до и после релаксации температур $\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\partial p_l}{\partial t}$ позволяет получить выражение для неизвестной величины k :

$$k = \frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}} - \frac{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} p_g + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} p_l}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}}, \quad (7.4.123)$$

где $\Gamma_g = \frac{1}{\rho_g} \left(\frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right)_{\rho_g}$, $\Gamma_l = \frac{1}{\rho_l} \left(\frac{\partial p_l}{\partial e_l} \right)_{\rho_l}$.

Учитывая, что $p_g = p_l$, (7.4.123) примет вид

$$k = \frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}} - p. \quad (7.4.124)$$

Для уравнений состояния (7.3.11) и (7.3.12) выражение (7.4.124) можно записать так:

$$k = \frac{\frac{p + \gamma_g \pi_g}{\alpha_g} + \frac{p + \gamma_l \pi_l}{\alpha_l}}{\frac{\gamma_g - 1}{\alpha_g} + \frac{\gamma_l - 1}{\alpha_l}}. \quad (7.4.125)$$

Численное решение (7.4.118) ищется в предположении о мгновенной релаксации температур, т. е. $Q = \theta(T_l - T_g)$, $\theta \rightarrow \infty$. Интегрирование (7.4.120) с учетом второго уравнения системы (7.4.118) позволяет получить

$$e_g^* = e_g^0 + \frac{\bar{k}}{\alpha_g^0 \rho_g^0} (\alpha_g^* - \alpha_g^0), \quad (7.4.126)$$

где индексы «0» и «*» означают состояние до и после релаксационного процесса; \bar{k} — среднее значение величины в процессе релаксации между состояниями $(\alpha_g^0, \rho_g^0, e_g^0)$ и $(\alpha_g^*, \rho_g^*, e_g^*)$.

Величина e_g^* в (7.4.126) является функцией величины α_g^* , также как и ρ_g^*

$$\left(\rho_g^* = \frac{\rho_g^0 \alpha_g^0}{\alpha_g^*} = \frac{\text{const}}{\alpha_g^*} \right).$$

Аналогичным образом находится значение внутренней энергии для другой фазы:

$$e_l^* = e_l^0 - \frac{\bar{k}}{\alpha_l^0 \rho_l^0} (\alpha_g^* - \alpha_g^0) \quad (7.4.127)$$

Величина e_l^* в (7.4.127) является функцией величины α_g^* , также как и ρ_l^*

$$\left(\rho_l^* = \frac{\rho_l^0 (1 - \alpha_g^0)}{1 - \alpha_g^*} = \frac{\text{const}}{1 - \alpha_g^*} \right).$$

Тогда и функция $f = T_g^*(e_g^*, \rho_g^*) - T_l^*(e_l^*, \rho_l^*) = 0$, выражающая условие равенства температур после релаксации, будет зависеть только от одного параметра:

$$f(\alpha_g^*) = T_g^*(\alpha_g^*) - T_l^*(\alpha_g^*) = 0. \quad (7.4.128)$$

Решение уравнения (7.4.128) позволяет определить новое состояние для каждой из фаз после процесса релаксации температур. Для оценки средней величины \bar{k} используется соотношение

$$\bar{k} = \frac{\tilde{k} + k^0}{2}, \quad (7.4.129)$$

где \tilde{k} оценивается для каждого нового состояния, полученного при итерационном решении (7.4.128).

Для моделирования релаксации энергий Гиббса при равенстве давлений и температур решается следующая система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = \frac{\dot{m}}{\rho_l}, \\ \frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = \dot{m}, \\ \frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} = -\dot{m}, \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = \dot{m} e_l, \\ \frac{\partial(\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = -\dot{m} e_l. \end{array} \right. \quad (7.4.130)$$

Условия равенства давлений $\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\partial p_l}{\partial t}$ и температур $\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{\partial T_l}{\partial t}$ до и после релаксации энергий Гиббса позволяют получить выражения для неизвестных величин e_l и ρ_l .

С учетом второго уравнения десятое уравнение из (7.4.130) примет вид

$$\alpha_g \rho_g \frac{\partial e_g}{\partial t} = (e_l - e_g) \dot{m}. \quad (7.4.131)$$

Дифференцируя в (7.4.131) $e_g = e_g(p_g, \rho_g)$, с учетом второго уравнения из (7.4.130) можно получить

$$\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} + \rho_l (e_l - e_g) \right) \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.132)$$

Аналогичным образом получается соотношение

$$\frac{\partial p_l}{\partial t} = -\frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(-\rho_l (\rho_l - \rho_l) \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} + \rho_l (e_l - e_l) \right) \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.133)$$

Условия равенства давлений $\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\partial p_l}{\partial t}$ до и после релаксации энергий

Гиббса позволяют получить соотношение

$$\begin{aligned} & \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} + \rho_l (e_l - e_g) \right) = \\ & = -\frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \left(-\rho_l (\rho_l - \rho_l) \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} + \rho_l (e_l - e_l) \right). \end{aligned} \quad (7.4.134)$$

Дифференцируя в (7.4.131) $e_g = e_g(T_g, \rho_g)$, с учетом второго уравнения из (7.4.130) можно получить

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{1}{\alpha_g \rho_g \left(\frac{\partial e_g}{\partial T_g} \right)_{\rho_g}} \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g} + \rho_l (e_l - e_g) \right) \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.135)$$

С учетом определения теплоемкости при постоянном объеме $\left(\frac{\partial e_g}{\partial T_g} \right)_{\rho_g} = (C_V)_g$ соотношение (7.4.135) примет вид

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{1}{\alpha_g \rho_g (C_V)_g} \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g} + \rho_l (e_l - e_g) \right) \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.136)$$

Аналогично получается выражение

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = -\frac{1}{\alpha_l \rho_l (C_V)_l} \left(-\rho_l (\rho_l - \rho_l) \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l} + \rho_l (e_l - e_l) \right) \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.137)$$

Учитывая условие равенства температур $\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{\partial T_l}{\partial t}$ до и после релаксации энергий Гиббса, можно получить

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha_g \rho_g (C_V)_g} \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g} + \rho_l (e_l - e_g) \right) &= \\ = -\frac{1}{\alpha_l \rho_l (C_V)_l} \left(-\rho_l (\rho_l - \rho_l) \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l} + \rho_l (e_l - e_l) \right). & \end{aligned} \quad (7.4.138)$$

Два уравнения (7.4.134) и (7.4.138) позволяют получить явные выражения для неизвестных величин ρ_l и e_l .

$$\rho_l = \frac{CH1}{CH2},$$

$$CH1 = \varphi \left(\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l} \right) - \varphi \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} p_g + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} p_l \right) +$$

$$+ \psi \left(\frac{\rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right), \quad (7.4.139)$$

$$CH2 = \varphi \left(\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l} \right) - \varphi \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} h_g + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} h_l \right) +$$

$$+ \psi \left(\frac{e_g + \rho_g \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l + \rho_l \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right).$$

$$e_l = \frac{\frac{e_g + \rho_g \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l + \rho_l \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\varphi} \quad (7.4.140)$$

$$- \frac{\frac{\rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\rho_l \varphi},$$

где $\varphi = \frac{1}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{1}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}$, $\psi = \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}$, $h_g = e_g + \frac{p_g}{\rho_g}$, $h_l = e_l + \frac{p_l}{\rho_l}$.

Для уравнений состояния (7.3.11) и (7.3.12) выражения (7.4.139) и (7.4.140) примут вид соответственно

$$\rho_l = \frac{\varphi \left(\frac{p_g + \gamma_g \pi_g}{\alpha_g} + \frac{p_l + \gamma_l \pi_l}{\alpha_l} \right) - \psi \left(\frac{\pi_g}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\pi_l}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right)}{-\varphi \left(\frac{(\gamma_g - 1)q_g}{\alpha_g} + \frac{(\gamma_l - 1)q_l}{\alpha_l} \right) + \psi \left(\frac{e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right)}, \quad (7.4.141)$$

$$e_l = \frac{\frac{e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\varphi} + \frac{\frac{\pi_g}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\pi_l}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\rho_l \varphi}. \quad (7.4.142)$$

Используя выражения для энергий Гиббса $g_g = e_g + \frac{p_g}{\rho_g} - T_g S_g$ и $g_l = e_l + \frac{p_l}{\rho_l} - T_l S_l$ можно получить для уравнений состояния (7.3.11) и (7.3.12) следующие выражения:

$$\frac{\partial g_g}{\partial t} = \left[\frac{(\gamma_g - 1)(C_v)_g - s_g}{\alpha_g \rho_g \rho_l (C_v)_g} ((e_g - q_g)(\rho_l - \rho_g) + \rho_l (e_l - e_g)) + \left(T_g (s_g + \gamma_g (C_v)_g) - \frac{p_g}{\rho_g} - (e_g - q_g) \right) \frac{\rho_l - \rho_g}{\alpha_g \rho_g \rho_l} \right] \dot{m} = A \dot{m}, \quad (7.4.143)$$

$$\frac{\partial g_l}{\partial t} = \left[-\frac{(\gamma_l - 1)(C_v)_l - s_l}{\alpha_l \rho_l \rho_l (C_v)_l} ((e_l - q_l)(\rho_l - \rho_l) + \rho_l (e_l - e_l)) - \left(T_l (s_l + \gamma_l (C_v)_l) - \frac{p_l}{\rho_l} - (e_l - q_l) \right) \frac{\rho_l - \rho_l}{\alpha_l \rho_l \rho_l} \right] \dot{m} = B \dot{m}, \quad (7.4.144)$$

где $s_g = (C_v)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q'_g$, $s_l = (C_v)_l \ln \left(\frac{T_l^{\gamma_l}}{(p_l + \pi_l)^{\gamma_l - 1}} \right) + q'_l$.

Система (7.4.130) решается в предположении о мгновенной релаксации (выравнивании) энергий Гиббса обеих фаз. Это означает, что по окончании текущего временного шага энергии Гиббса обеих фаз должны быть равны между собой. Из (7.4.143) и (7.4.144) следует, что

$$\frac{\partial \Delta g}{\partial t} = \frac{\partial (g_g - g_l)}{\partial t} = (A - B)\dot{m}, \text{ или для простейшей аппроксимации в чис-}$$

ленном виде:

$$\frac{(\Delta g)^{n+1} - (\Delta g)^n}{\Delta t} = (A^n - B^n)(\dot{m})^n. \quad (7.4.145)$$

Условие равенства энергии Гиббса обеих фаз по окончании текущего временного шага означает, что $(\Delta g)^{n+1} = 0$. Отсюда получается оценка коэффициента массообмена на текущем временном шаге:

$$(\dot{m})^n = \frac{-(\Delta g)^n}{\Delta t (A^n - B^n)}. \quad (7.4.146)$$

Оценка (7.4.146) с учетом (7.4.141) и (7.4.142) позволяет выполнить явное численное интегрирование системы (7.4.130). Однако при этом может не сохраняться положительность объемной доли. Поэтому при вычислении

$S_{\alpha} = \frac{\dot{m}}{\rho_l}$ вводится специальный ограничитель:

$$S_{\max, \alpha_g} = \begin{cases} \frac{1 - \alpha_g}{\Delta t}, & \text{если } S_{\alpha_g} > 0, \\ -\frac{\alpha_g}{\Delta t} & \text{в иных случаях.} \end{cases} \quad (7.4.147)$$

Если $|S_{\max, \alpha_g}| > |S_{\alpha_g}|$, то численное интегрирование системы (7.4.130) с оценкой (7.4.146) может быть выполнено с использованием гидродинамического временного шага $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. В противном случае, если

$|S_{\max, \alpha_g}| \leq |S_{\alpha_g}|$, вычисляется величина отношения $R_{\alpha_g} = \frac{S_{\max, \alpha_g}}{S_{\alpha_g}}$, и числен-

ное интегрирование системы (7.4.130) на временном шаге Δt последовательно осуществляется на временных шагах $\Delta t_{\text{дв}} = R_{\alpha_g} \frac{\Delta t}{2}$. Данный способ

интегрирования системы (7.4.130) довольно удобен, но рассмотренный метод не обеспечивает мгновенную релаксацию.

Десятое уравнение системы (7.4.130) с учетом первого уравнения может быть записано в виде

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = \rho_l e_l \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.148)$$

Численное интегрирование (7.4.148) дает следующую оценку:

$$(\alpha_g \rho_g e_g)^* = (\alpha_g \rho_g e_g)^0 + \overline{\rho_l e_l} (\alpha_g^* - \alpha_g^0), \quad (7.4.149)$$

где $\overline{\rho_l e_l}$ — среднее значение произведения интерфейсных величин в процессе релаксации между состояниями $(\alpha_g^0, \rho_g^0, e_g^0)$ и $(\alpha_g^*, \rho_g^*, e_g^*)$.

Второе уравнение системы (7.4.130) с учетом первого уравнения может быть записано в виде

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = \rho_l \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}. \quad (7.4.150)$$

Численное интегрирование (7.4.150) дает следующую оценку:

$$(\alpha_g \rho_g)^* = (\alpha_g \rho_g)^0 + \overline{\rho_l} (\alpha_g^* - \alpha_g^0), \quad (7.4.151)$$

где $\overline{\rho_l}$ — среднее значение интерфейсной плотности в процессе релаксации между состояниями $(\alpha_g^0, \rho_g^0, e_g^0)$ и $(\alpha_g^*, \rho_g^*, e_g^*)$.

Аналогичным образом получаются уравнения для другой фазы:

$$(\alpha_l \rho_l e_l)^* = (\alpha_l \rho_l e_l)^0 - \overline{\rho_l e_l} (\alpha_g^* - \alpha_g^0), \quad (7.4.152)$$

$$(\alpha_l \rho_l)^* = (\alpha_l \rho_l)^0 - \overline{\rho_l} (\alpha_g^* - \alpha_g^0). \quad (7.4.153)$$

Из уравнения (7.4.151) видно, что плотность ρ_g является функцией только от α_g . Поэтому и внутренняя энергия e_g в (7.4.149) также является функцией только от α_g . Аналогично величины ρ_l и e_l в (7.4.153) и (7.4.152) являются функциями только от α_g . Из приведенных рассуждений очевидно, что и уравнение, выражающее условие равновесия:

$$f(\alpha_g) = g_g(e_g, \rho_g) - g_l(e_l, \rho_l) = 0 \quad (7.4.154)$$

зависит только от α_g . Решение уравнения (7.4.154) находится с применением итерационной процедуры. Данный метод обеспечивает мгновенную релаксацию (выравнивание) энергий Гиббса.

Для уравнения состояния

$$e_g(p_g, \rho_g) = \frac{p_g + \gamma_g \pi_g}{(\gamma_g - 1)\rho_g} + q_g, \quad e_l(p_l, \rho_l) = \frac{p_l + \gamma_l \pi_l}{(\gamma_l - 1)\rho_l} + q_l \quad (7.4.155)$$

или

$$\rho_g(p_g, \rho_g) = \frac{p_g + \pi_g}{(\gamma_g - 1)(C_v)_g T_g}, \quad \rho_l(p_l, \rho_l) = \frac{p_l + \pi_l}{(\gamma_l - 1)(C_v)_l T_l}, \quad (7.4.156)$$

где T_g, T_l — температура; $(C_v)_g, (C_v)_l$ — теплоемкость при постоянном объеме; $\gamma_g, \gamma_l, \pi_g, \pi_l$ — константы, характеризующие свойства вещества; q_g, q_l — базовая энергия фазы в заданном состоянии,

выражение для удельной энтропии будет иметь вид

$$s_g(p_g, T_g) = (C_v)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q'_g, \quad (7.4.157)$$

$$s_l(p_l, T_l) = (C_v)_l \ln \left(\frac{T_l^{\gamma_l}}{(p_l + \pi_l)^{\gamma_l - 1}} \right) + q'_l,$$

где q'_g и q'_l — константы.

Используя (7.4.155) и (7.4.157), а затем (7.4.156), можно получить выражение для энергии Гиббса:

$$\begin{aligned}
 g_g &= e_g + \frac{p_g}{\rho_g} - T_g S_g = \frac{p_g + \gamma_g \pi_g}{(\gamma_g - 1) \rho_g} + q_g + \frac{p_g}{\rho_g} - \\
 &- T_g \left((C_V)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q'_g \right) = \\
 &= \frac{\gamma_g (p_g + \pi_g)}{(\gamma_g - 1) \rho_g} + q_g - T_g \left((C_V)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q'_g \right) = \\
 &= \gamma_g (C_V)_g T_g + q_g - T_g \left((C_V)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q'_g \right) = \quad (7.4.158) \\
 &= (\gamma_g (C_V)_g - q'_g) T_g - T_g (C_V)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q_g, \\
 g_l &= e_l + \frac{p_l}{\rho_l} - T_l S_l = (\gamma_l (C_V)_l - q'_l) T_l - \\
 &- T_l (C_V)_l \ln \left(\frac{T_l^{\gamma_l}}{(p_l + \pi_l)^{\gamma_l - 1}} \right) + q_l.
 \end{aligned}$$

Переходя в (7.4.158) от переменных (T, p) к переменным (e, ρ) , ис-

пользуя соотношения $T_g = \frac{e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g} - q_g}{(C_V)_g}$ и $T_l = \frac{e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l} - q_l}{(C_V)_l}$, а также

$p_g = \rho_g (e_g - q_g) (\gamma_g - 1) - \gamma_g \pi_g$ и $p_l = \rho_l (e_l - q_l) (\gamma_l - 1) - \gamma_l \pi_l$, будем иметь

$$g_g = q_g + \left(e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g} - q_g \right) \left[\gamma_g \left(1 + \ln \left((C_V)_g \right) \right) + (\gamma_g - 1) \ln (\gamma_g - 1) - \right. \\ \left. - \gamma_g \ln \left(e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g} - q_g \right) + (\gamma_g - 1) \ln \left((e_g - q_g) \rho_g - \pi_g \right) - \frac{q'_g}{(C_V)_g} \right], \quad (7.4.159)$$

$$g_l = q_l + \left(e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l} - q_l \right) \left[\gamma_l \left(1 + \ln \left((C_V)_l \right) \right) + (\gamma_l - 1) \ln (\gamma_l - 1) - \right. \\ \left. - \gamma_l \ln \left(e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l} - q_l \right) + (\gamma_l - 1) \ln \left((e_l - q_l) \rho_l - \pi_l \right) - \frac{q'_l}{(C_V)_l} \right].$$

Из (7.4.149), (7.4.151) получается оценка нового состояния (e_g^*, ρ_g^*) :

$$\rho_g^* = \frac{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)}{\alpha_g^*} = \bar{\rho}_l + \frac{\alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)}{\alpha_g^*}, \quad (7.4.160) \\ e_g^* = \frac{\alpha_g^* \bar{\rho}_l \bar{e}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l)}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)}.$$

Из (7.4.152), (7.4.153) получается оценка нового состояния (e_l^*, ρ_l^*) :

$$\rho_l^* = - \frac{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0}{1 - \alpha_g^*} = \bar{\rho}_l + \frac{\alpha_l^0 (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l)}{1 - \alpha_g^*}, \quad (7.4.161) \\ e_l^* = \frac{\alpha_g^* \bar{\rho}_l \bar{e}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l \bar{e}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0 e_l^0}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0}.$$

После подстановки (7.4.160) и (7.4.161) в (7.4.159) выражения для энергий Гиббса становятся функцией только одного параметра α_g^* :

$$g_g = f_1(\alpha_g^*) = q_g + \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_g) + \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l)}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)} - q_g \right) \times \\ \times \left[\gamma_g \left(1 + \ln \left((C_V)_g \right) \right) + (\gamma_g - 1) \ln (\gamma_g - 1) - \right.$$

$$-\gamma_g \ln \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_g) + \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l)}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)} - q_g \right) + (\gamma_g - 1) \times \\ \times \ln \left(\frac{\alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_g (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l))}{\alpha_g^*} + \bar{\rho}_l (\bar{e}_l - q_g) - \pi_g \right) - \frac{q_g}{(C_V)_g} \Bigg].$$

и

$$g_l = f_2(\alpha_g^*) = q_l + \\ + \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_l) - \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l) + \pi_l - \bar{\rho}_l \bar{e}_l}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0} - q_l \right) \times \\ \times \left[\gamma_l \left(1 + \ln((C_V)_l) \right) + (\gamma_l - 1) \ln(\gamma_l - 1) - \right. \\ \left. - \gamma_l \ln \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_l) - \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l) + \pi_l - \bar{\rho}_l \bar{e}_l}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0} - q_l \right) + (\gamma_l - 1) \times \right. \\ \left. \times \ln \left(\frac{\alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_l (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l))}{1 - \alpha_g^*} + \bar{\rho}_l (\bar{e}_l - q_l) - \pi_l \right) - \frac{q_l}{(C_V)_l} \right]. \quad (7.4.162)$$

В обозначениях из (7.4.162) уравнение (7.4.154) примет вид

$$f_1(\alpha_g^*) - f_2(\alpha_g^*) = 0,$$

и его решение ищется итерационным методом Ньютона:

$$(\alpha_g^*)^{(k)} = (\alpha_g^*)^{(k-1)} - \frac{f_1((\alpha_g^*)^{(k-1)}) - f_2((\alpha_g^*)^{(k-1)})}{\frac{\partial f_1(\alpha_g^*)}{\partial \alpha_g^*} \Big|_{(\alpha_g^*)^{(k-1)}} - \frac{\partial f_2(\alpha_g^*)}{\partial \alpha_g^*} \Big|_{(\alpha_g^*)^{(k-1)}}}, \quad (7.4.163)$$

где средние значения интерфейсной плотности $\bar{\rho}_l$ и интерфейсной энергии \bar{e}_l вычисляются на каждой k -й итерации с использованием соотношений (7.4.141) и (7.4.142):

$$\begin{aligned}\bar{\rho}_l &= \frac{\bar{\rho}_l^{(k)} + \bar{\rho}_l^{(0)}}{2}, \\ \bar{e}_l &= \frac{\bar{e}_l^{(k)} + \bar{e}_l^{(0)}}{2}.\end{aligned}\tag{7.4.164}$$

Выражения для производных в (7.4.163) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_1(\alpha_g^*)}{\partial \alpha_g^*} &= \frac{\alpha_g^0 (\bar{\rho}_l \rho_g^0 (\bar{e}_l - e_g^0) + \pi_g (\bar{\rho}_l - \rho_g^0))}{(\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l))^2} \times \\ &\times \left[\gamma_g \left(1 + \ln((C_V)_g) \right) + (\gamma_g - 1) \ln(\gamma_g - 1) - \right. \\ &- \gamma_g \ln \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_g) + \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l)}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)} - q_g \right) + \\ &+ \left. (\gamma_g - 1) \ln \left(\frac{\alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_g (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l))}{\alpha_g^*} + \bar{\rho}_l (\bar{e}_l - q_g) - \pi_g \right) - \frac{q_g}{(C_V)_g} \right] + \\ &+ \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_g) + \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l)}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)} - q_g \right) \times A_1,\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}A_1 &= - \frac{\gamma_g \alpha_g^0 (\bar{\rho}_l \rho_g^0 (\bar{e}_l - e_g^0) + \pi_g (\bar{\rho}_l - \rho_g^0))}{\left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_g) + \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l)}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)} - q_g \right) (\alpha_g^* \bar{\rho}_l + \alpha_g^0 (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l))^2} - \\ &- \frac{(\gamma_g - 1) \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_g (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l))}{\alpha_g^* \alpha_g^0 (\rho_g^0 e_g^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_g (\rho_g^0 - \bar{\rho}_l)) + (\alpha_g^*)^2 (\bar{\rho}_l (\bar{e}_l - q_g) - \pi_g)}\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_2(\alpha_g^*)}{\partial \alpha_g^*} &= \frac{\alpha_l^0 (\bar{\rho}_l \rho_l^0 (e_l^0 - \bar{e}_l) + \pi_l (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l))}{(\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0)^2} \times \\ &\times \left[\gamma_l \left(1 + \ln \left((C_V)_l \right) \right) + (\gamma_l - 1) \ln(\gamma_l - 1) - \right. \\ &- \gamma_l \ln \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_l) - \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l) + \pi_l - \bar{\rho}_l \bar{e}_l}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0} - q_l \right) + \\ &+ (\gamma_l - 1) \ln \left(\frac{\alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_l (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l))}{1 - \alpha_g^*} + \bar{\rho}_l (\bar{e}_l - q_l) - \pi_l \right) - \\ &\quad \left. - \frac{q_l}{(C_V)_l} \right] + \\ &+ \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_l) - \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l) + \pi_l - \bar{\rho}_l \bar{e}_l}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0} - q_l \right) \times A_2, \\ \text{где } A_2 &= -\gamma_l \alpha_l^0 (\bar{\rho}_l \rho_l^0 (e_l^0 - \bar{e}_l) + \pi_l (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l)) \times \\ &\times \left(\frac{\alpha_g^* (\bar{\rho}_l \bar{e}_l - \pi_l) - \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l) + \pi_l - \bar{\rho}_l \bar{e}_l}{\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0} - q_l \right)^{-1} \times \\ &\times (\alpha_g^* \bar{\rho}_l - \alpha_g^0 \bar{\rho}_l - \alpha_l^0 \rho_l^0)^{-2} + \\ &+ \frac{(\gamma_l - 1) \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_l (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l))}{(1 - \alpha_g^*) \alpha_l^0 (\rho_l^0 e_l^0 - \bar{\rho}_l \bar{e}_l - q_l (\rho_l^0 - \bar{\rho}_l)) + (1 - \alpha_g^*)^2 (\bar{\rho}_l (\bar{e}_l - q_l) - \pi_l)}. \end{aligned}$$

7.5. Верификация методики и моделирование практических задач

В разделе приведены результаты верификации методики на задачах двухфазной среды в ударной трубе, на задаче распространения ударной волны в жидкой среде с пузырьками газа. Во всех случаях получено хорошее совпадение с экспериментом.

Вместе с этим представлены результаты численного моделирования обтекания стационарного газового снаряда опускным потоком жидкости.

7.5.1. Тестовых задач для различных состояний двухфазной среды в ударной трубе

В данном разделе представлены результаты расчетов тестовых задач для различных состояний двухфазной среды в ударной трубе.

Первый расчет был выполнен для однородной покоящейся двухфазной среды с объемной долей газа 0,5 в одномерной трубе длиной 1 м с учетом процессов релаксации скорости и давления. Газ и жидкость имеют начальные плотности 50 и 1000 кг/м³ соответственно. Давление двухфазной среды в левой половине трубы равно 10⁹ Па, а в правой — 10⁵ Па. Обе фазы описываются двучленным уравнением состояния $P = (\gamma - 1)\rho e - \gamma\pi$. Параметры уравнения состояния для газа $\gamma = 1,4$, $\pi = 0$, для жидкости $\gamma = 4,4$, $\pi = 6 \cdot 10^8$ Па. Результаты расчета на момент времени 150 мкс на сетке в 200 ячеек для числа Куранта 0,8 представлены на рис. 5.

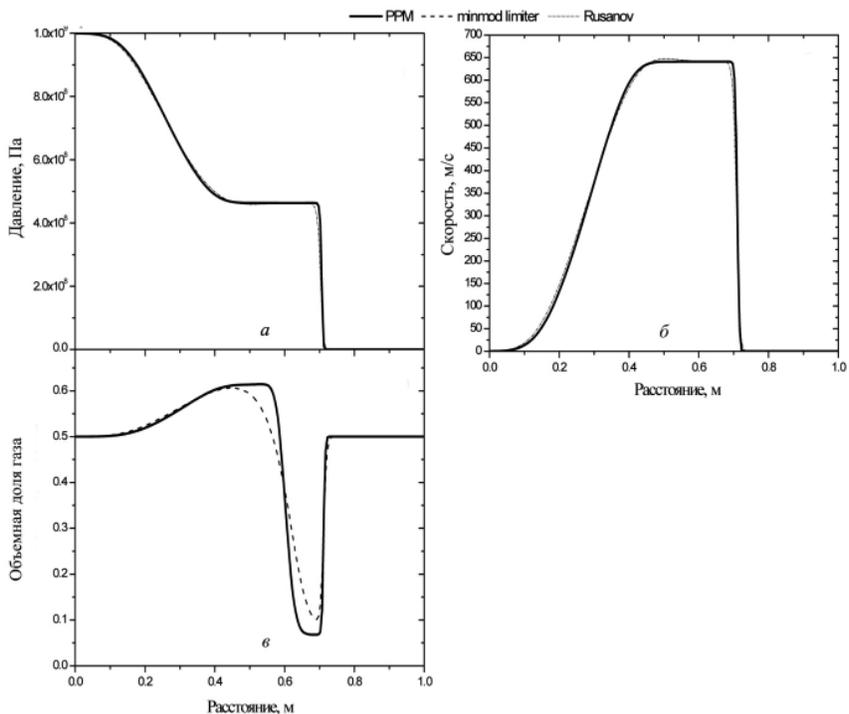


Рис. 5. Ударная труба для двухфазной среды с однородным профилем объемной доли: *a* — давление, *б* — скорость, *в* — объемная доля. С учетом релаксации давления и скорости

Следующий расчет был выполнен для разрывного профиля объемной доли: $\alpha_1 = 1 - \epsilon$ ($\epsilon = 10^{-6}$) при $x < 0,8$ м и $\alpha_2 = \epsilon$ при $x > 0,8$ м.

В левой части трубы ($x < 0,8$ м) начальное давление равно 10^9 Па, а в правой ($x > 0,8$ м) — 10^5 Па. Результаты расчета с учетом процессов релаксации скорости и давления на сетке в 400 ячеек и для числа Куранта 0,8 представлены на рис. 6 для момента времени 300 мкс.

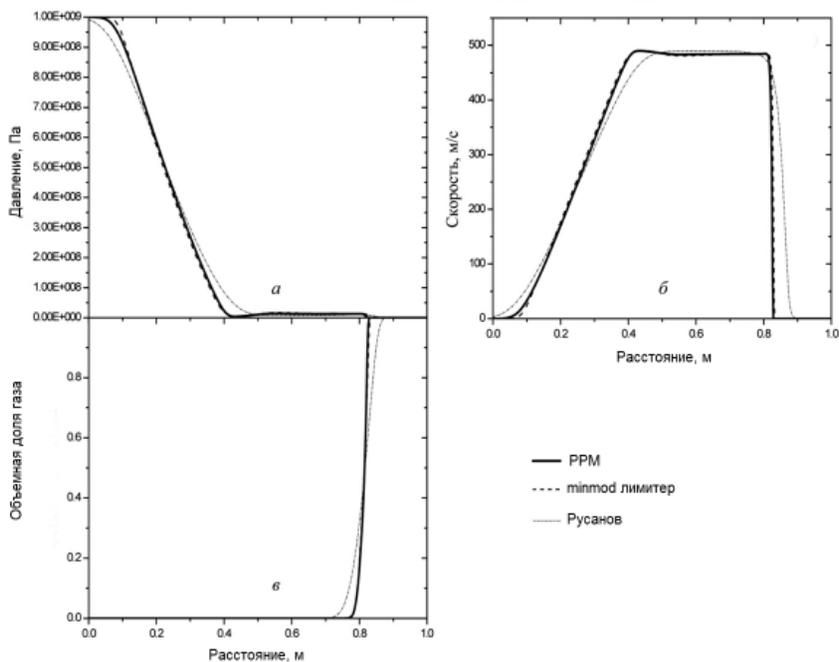


Рис. 6. Ударная труба для интерфейса, разделяющего две чистых фазы: *а* — давление, *б* — скорость, *в* — объемная доля. С учетом релаксации давления и скорости

На рис. 7 приведены результаты расчета для предыдущей задачи, но без учета релаксационных членов.

Увеличенные профили давления и скорости вблизи интерфейса показаны на рис. 8. Видно, что граничные условия выполнены на интерфейсе автоматически.

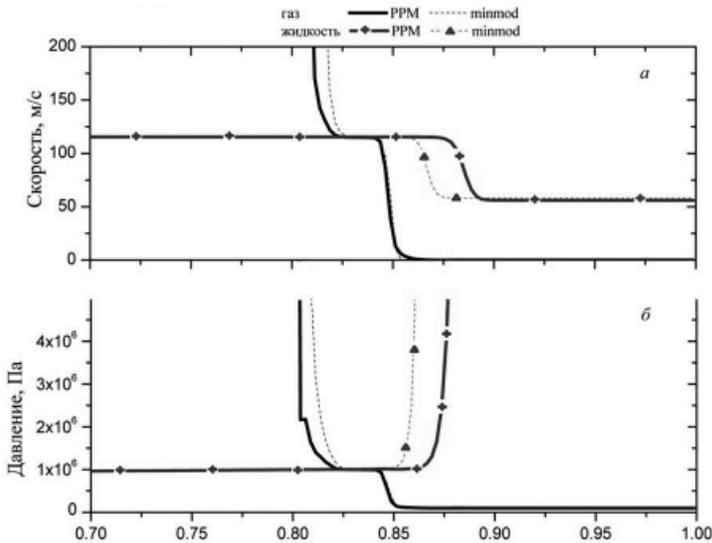


Рис. 8. Увеличенные профили скорости (а) и давления (б)
из рис. 5 вблизи интерфейса

Также с использованием описанной методики был выполнен расчет задачи о водяном кране, который представляет собой вертикальную трубу длиной 2 м, заполненную газом и водой. Нижняя часть трубы открыта, в верхнюю часть поступает вода со скоростью 10 м/с.

Начальные данные:

Вода	Газ
$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$	$\rho_g = 1 \text{ кг/м}^3$
$P_l = 10^5 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$
$\vartheta_l = 10 \text{ м/с}$	$\vartheta_g = 0 \text{ м/с}$
$\alpha_l = 0,8$	$\alpha_g = 0,2$

Граничные условия:

	Вода	Газ
Входные условия	$\vartheta_l = 10 \text{ м/с}$	$\vartheta_g = 0 \text{ м/с}$
	$\alpha_l = 0.8$	$\alpha_g = 0.2$
Выходные условия	$P_l = 10^5 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$

α_l, α_g экстраполируются

Время расчета 0,1 с, $g = 10 \text{ м/с}^2$.

Результаты расчетов представлены для момента времени 0,1 с на рис. 9 вместе с аналитическим решением. Отличие численных расчетов от аналитического может быть связано с тем, что условия данной задачи находятся вне диапазона применимости расчетных моделей (скорость переноса объемной доли в задаче много меньше, чем скорость распространения характеристических волн). Для численного расчета данной задачи лучше использовать неявную схему с предиктором, описанную в [1].

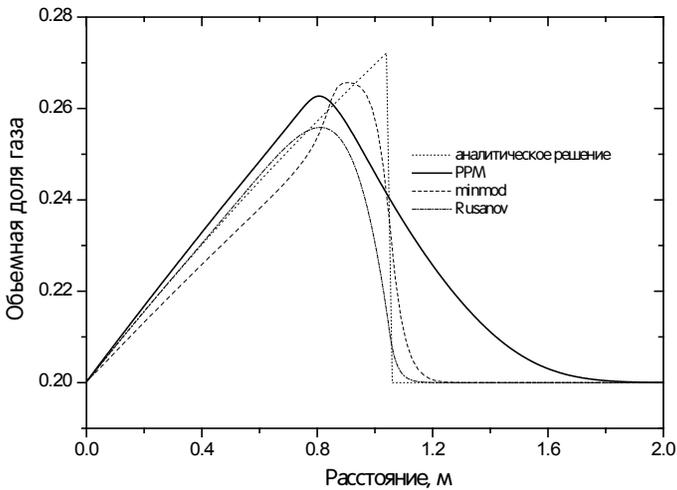


Рис. 9. Эволюция объемной доли в задаче о водяном кране (точное решение представлено точечной линией)

С использованием математической модели двухфазной среды, учитывающей ее топологию, был выполнен тестовый расчет для эксперимента, в котором ударная волна проходит через разрывный профиль объемной доли [2; 3]. В вертикальной трубе, заполненной воздухом, расположена прослойка из мелких частиц толщиной 2 см (рис. 10).

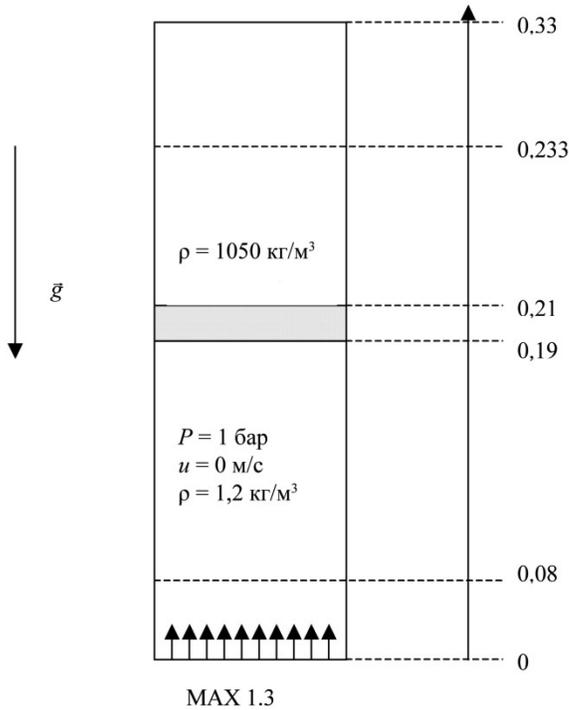


Рис. 10. Схема численного эксперимента

Ударная волна распространяется снизу и взаимодействует со слоем частиц. Движение частиц моделировалось при помощи уравнения состояния сжимаемой жидкости $P = \epsilon\rho(\gamma - 1) - \gamma\pi$. В результате возникают отраженная и преломленная волны. Эффекты трения моделировались путем введения в уравнения движения силы трения: $F_d = \frac{3}{4}C_d \frac{\rho^g}{d_p} (1 - \alpha^g) |u^g - u^l| (u^g - u^l)$, где $C_d = 0,6$ — коэффициент трения; $d_p = 2$ мм — диаметр частиц.

Временная эволюция величины давления после прохождения ударной волны измеряется счетчиками, расположенными на расстоянии 4,3 см до слоя частиц и 11 см после. Величины давления в месте расположения счетчиков в зависимости от времени представлены на рис. 11.

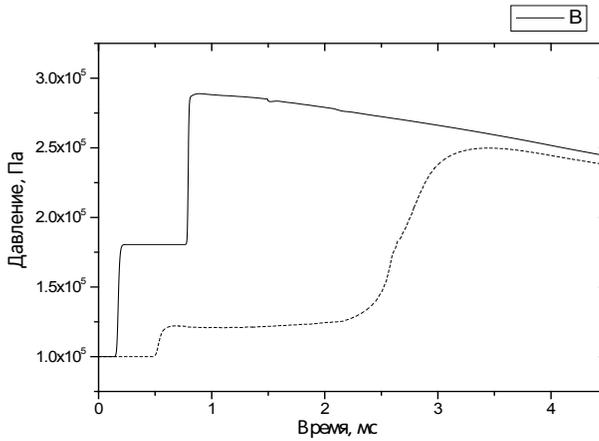


Рис. 11. Временная эволюция давления в точках с координатами 0,08 (сплошная линия) и 0,233 (штриховая линия)

В качестве теста для методики была также рассмотрена задача распространения ударной волны в жидкой среде с пузырьками газа. Недавно были получены надежные данные с использованием жидкой среды, в которой практически отсутствовали растворенные газы [18] в установке, представляющей собою вертикальную трубку (рис. 12).



Рис. 12. Схема экспериментальной установки

В эксперименте удалось обеспечить сохранение однородного начального пространственного распределения газовых пузырьков. Пузырьки газа ин-

жективировались с нижнего конца трубки и поднимались вверх за счет естественной и вынужденной конвекции. Ударная волна взаимодействовала со свободной поверхностью смеси и распространялась вниз. Прибор, измеряющий давление, располагался на расстоянии 1,462 м от нижней части трубки. Полная длина трубки составляла 4 м.

В численном расчете использовались начальные значения физических величин, аналогичные эксперименту. Начальная концентрация пузырьков газа N была однородной и равнялась $2,42 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$.

Динамическая вязкость жидкой фазы μ равнялась $0,00415 \text{ Па} \cdot \text{с}$. Объемная доля газа невелика, и плотность жидкой фазы во много раз больше плотности газа, поэтому относительным скольжением фаз можно пренебречь и использовать коэффициент релаксации скорости $\lambda \rightarrow +\infty$. На входе трубки с двухфазной смесью вместо моделирования ударной волны в газовой камере поддерживалась постоянная скорость $0,427 \text{ м/с}$. Результаты расчета получены на сетке в 2500 точек.

На рис. 13 приведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, полученными при помощи прибора, расположенного на расстоянии 1,462 м от нижнего конца вертикальной трубки [18]. Очевидно хорошее совпадение первых трех осцилляций разности величин мгновенного и гидростатического давлений. Следующие осцилляции совпадают с результатами расчета значительно хуже, однако расчетные значения остаются в пределах экспериментальной ошибки 15 КПа. Методика предсказывает существование волны-предвестника, которая была обнаружена в другом эксперименте [19].

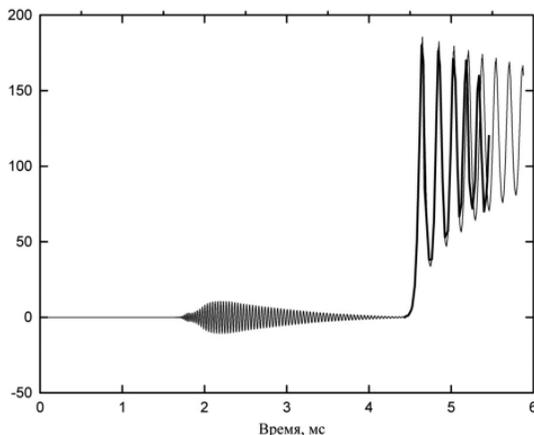


Рис. 13. Сравнение эксперимента (жирная линия) и расчета (тонкая линия)

7.5.2. Моделирование практических задач

Ниже представлены результаты численного моделирования обтекания стационарного газового снаряда опускным потоком жидкости. Моделируется одиночная ячейка газожидкостного снарядного потока. На рис. 14 приведена расчетная зависимость напряжения трения на стенке под снарядом от его носика для двух снарядов диаметром 16 мм (красная линия) и диаметром 30 мм (черная линия), что хорошо согласуется с результатами [20].

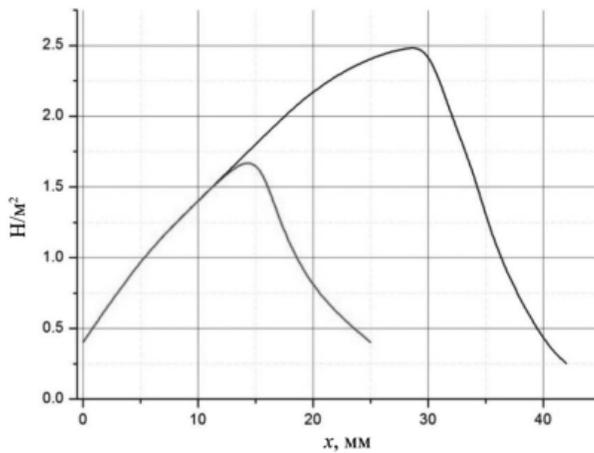


Рис. 14. Среднее напряжение трения на стенке под снарядом для двух разных диаметров пузырька

Была использована сетка в 10 млн ячеек. С увеличением расстояния от носика снаряда трение под снарядом существенно возрастает и многократно превышает трение в случае однофазного течения. Это вызвано тем, что газовый снаряд перекрывает собой существенную часть сечения трубы, поэтому скорость жидкости в ее пленке, обтекающей снаряд, существенно выше, чем скорость жидкости в пристенной области однофазного течения. Форма газового снаряда в виде профиля объемной газовой фракции на разные моменты времени приведена на рис. 15.

Крупный план поверхности газового снаряда в жидкости вместе с полем скоростей показан на рис. 16.

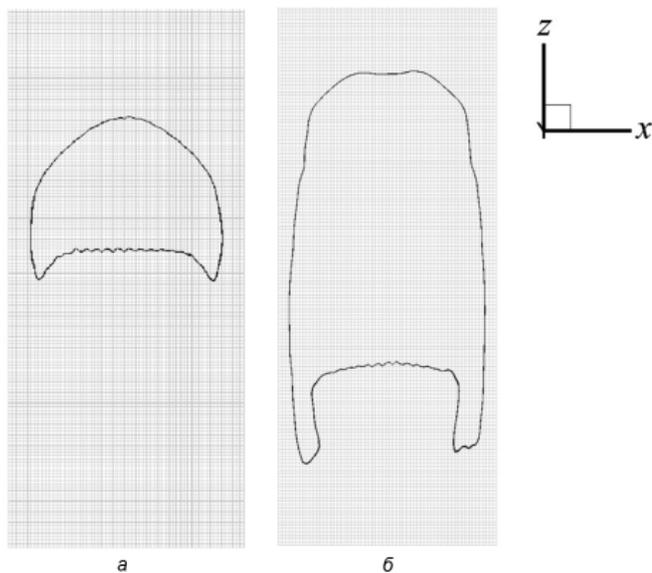


Рис. 15. Поверхность газового пузыря (снаряда) в жидкости под воздействием градиента плотности в поле силы тяжести в разные моменты времени

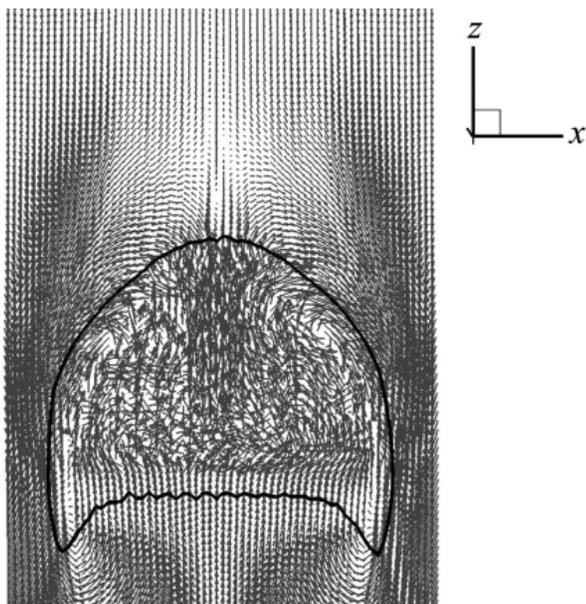


Рис. 16. Поверхность газового пузыря (снаряда) в жидкости. Крупный план

7.5.3. Тесты для жидкости с уравнением состояния stiffened

Во всех приведенных в данном разделе вычислениях жидкость описывается уравнениями состояния stiffened с параметрами: $\gamma_{\text{liq}} = 2,1$, $\pi_{\text{liq}} = 10^7$ Па. Газ описывается уравнением состояния идеального газа с политропной экспонентой $\gamma_{\text{gas}} = 1,4$.

Первый тест был выполнен с круглой каплей воды. Круглая капля воды с радиусом $R = 0,11$ м находится в воздухе. Всюду вне капли давление 105 Па.

Внутри капли давление $10^5 + \frac{\lambda}{R} = 10^5 + \frac{1000}{0,11} = 109\,090$ Па в соответствии

с законом Лапласа. Была использована сетка 100×100 ячеек. Профили давления на начальный момент и после 100 000 шагов расчета приведены на рис. 17. Схема сохраняет скачок давления с погрешностью, которая ниже, чем 10% по сравнению со значением из закона Лапласа.

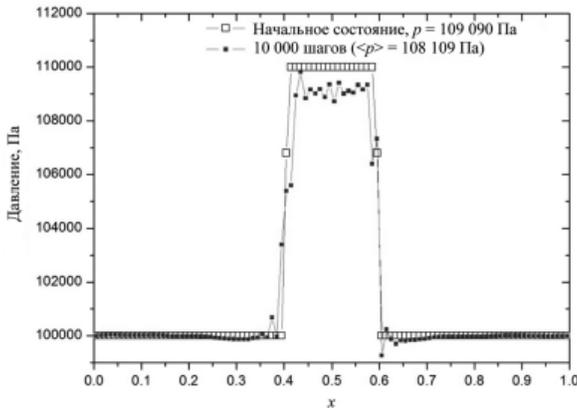


Рис. 17. Профили давления в начальный момент и после 100 000 шагов расчета

Второй тест был выполнен с осциллирующей квадратной каплей воды. Повсюду в расчетной области давление 10^5 Па. Была использована сетка размером 100×100 ячеек. Квадратная капля воды находится в воздухе. Начальное положение квадратной капли показано на рис. 18 с использованием объемной газовой фракции. Капля становится меньше своей поверхностной энергии за счет эффекта поверхностного натяжения, который характеризуется параметром $\lambda = 1000$ Н/м. Это вызывает колебания (отклонения) от равновесного состояния. На рис. 19 приведены результаты расчетов в разные моменты времени ($t_1 = 26$ мс, $t_2 = 53$ мс, $t_3 = 79$ мс, $t_4 = 106$ мс). В устойчивом состоянии капля имеет круглую форму (радиус

0,13 м), среднее избыточное давление — 7010 Па. Ошибка в скачке давления ниже 10% по сравнению со значением из закона Лапласа, который дает величину примерно 7690 Па.

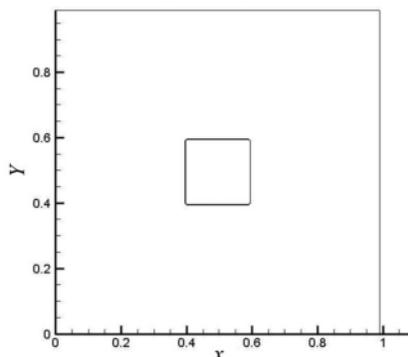


Рис. 18. Исходное положение квадратной капли

Третий тест был проведен с осциллирующим пузырьком эллипсоидальной формы. Эллипсоидальный газовый пузырь с соотношением осей 1:1,5 был помещен в воду. Повсюду в расчетной области давление 105 Па. Для расчета была использована сетка 100×100 ячеек. Начальное положение эллипсоидального пузыря показано на рис. 20 с использованием профиля объемной газовой фракции. Пузырь становится меньше своей поверхностной энергии за счет эффекта поверхностного натяжения, который характеризуется параметром $\lambda = 1000$ Н/м. Это вызывает колебания (отклонения) от равновесного состояния. Результаты расчетов в разные моменты времени ($t_1 = 43$ мс, $t_2 = 68$ мс, $t_3 = 145$ мс, $t_4 = 183$ мс) приведены на рис. 21. В устойчивом состоянии пузырь имеет круглую форму (радиус 0,135 м), среднее избыточное давление 6750 Па. Ошибка в скачке давления ниже 10% по сравнению со значением из закона Лапласа, который дает величину примерно 7400 Па.

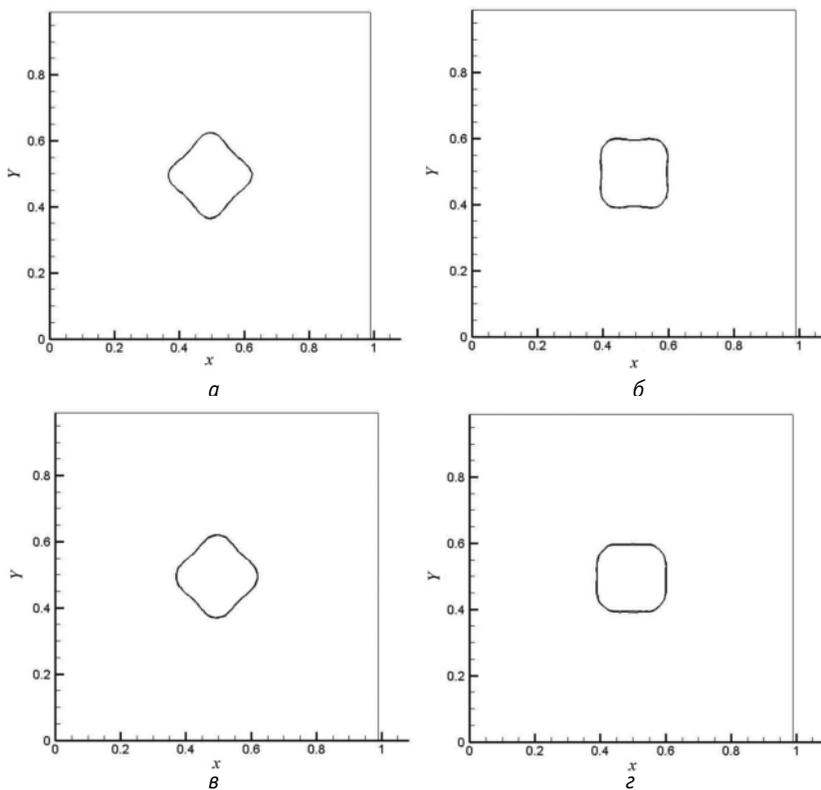


Рис. 19. Колебания квадратной капли из-за эффектов поверхностного натяжения в разные моменты времени: $a - t_1 = 26$, $б - t_2 = 53$, $в - t_3 = 79$, $г - t_4 = 106$

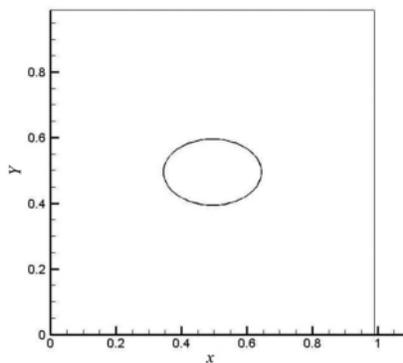


Рис. 20. Исходное положение эллипсоидального пузыря

Четвертый тест был проведен газовым пузырьком, размещенным в жидкости. Круглый газовый пузырь первоначально был помещен в нижней части сплошной вертикальной трубки, заполненной водой. Профиль давления стратифицирует от 10^5 Па в нижней части трубки под действием силы тяжести (рис. 22). Пузырь начинает подниматься с поверхности за счет градиента плотности в гравитационном поле и изменяет форму благодаря эффектам поверхностного натяжения, которые характеризуются параметром $\lambda = 2$ Н/м. Положения пузырька в виде профиля объемной газовой фракции в разные моменты времени ($t_1 = 0,28$ с, $t_2 = 0,82$ с, $t_3 = 1,37$ с, $t_4 = 2,06$ с) приведены на рис. 23.

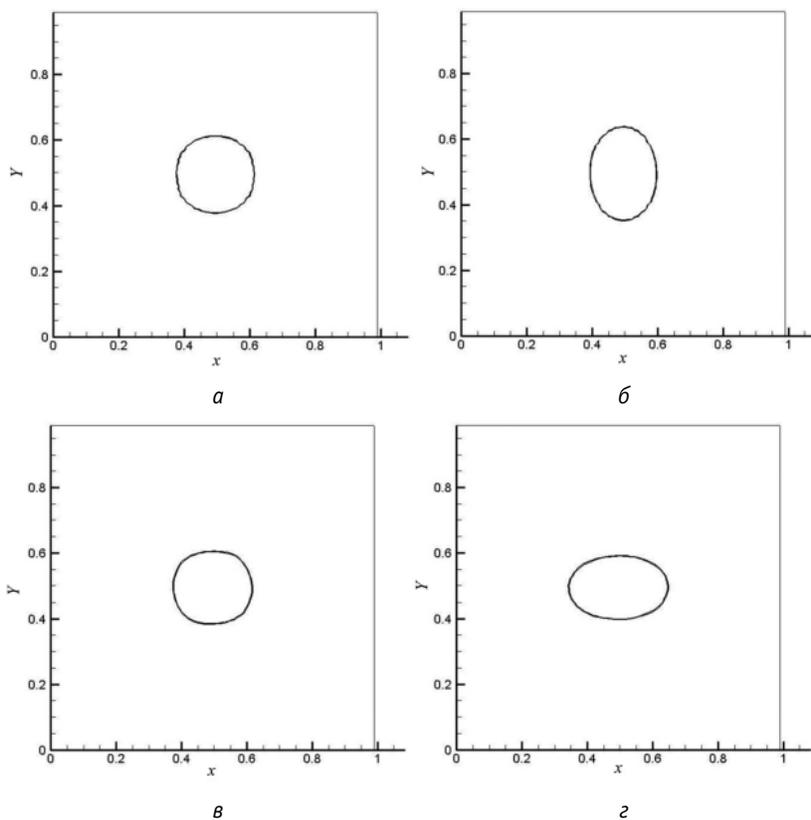


Рис. 21. Колебания эллипсоидального газового пузыря из-за эффектов
поверхностного натяжения в разные моменты времени:
а — $t_1 = 43$, б — $t_2 = 68$, в — $t_3 = 145$, г — $t_4 = 183$

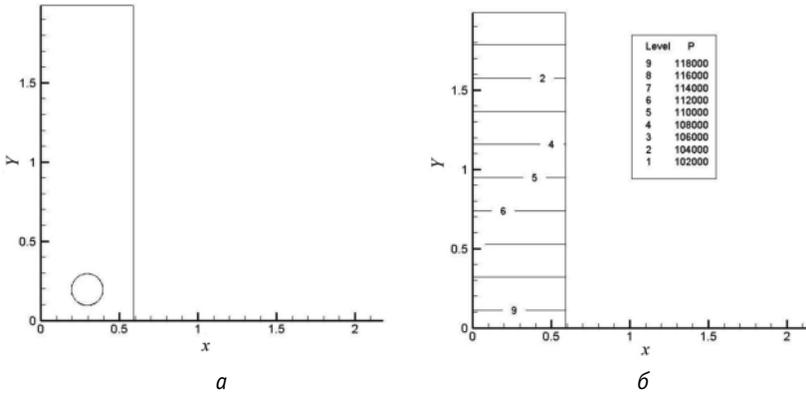


Рис. 22. Исходное положение пузырька газа в твердой трубке (а — вверх) со стратифицированным профилем давления (б — вниз)

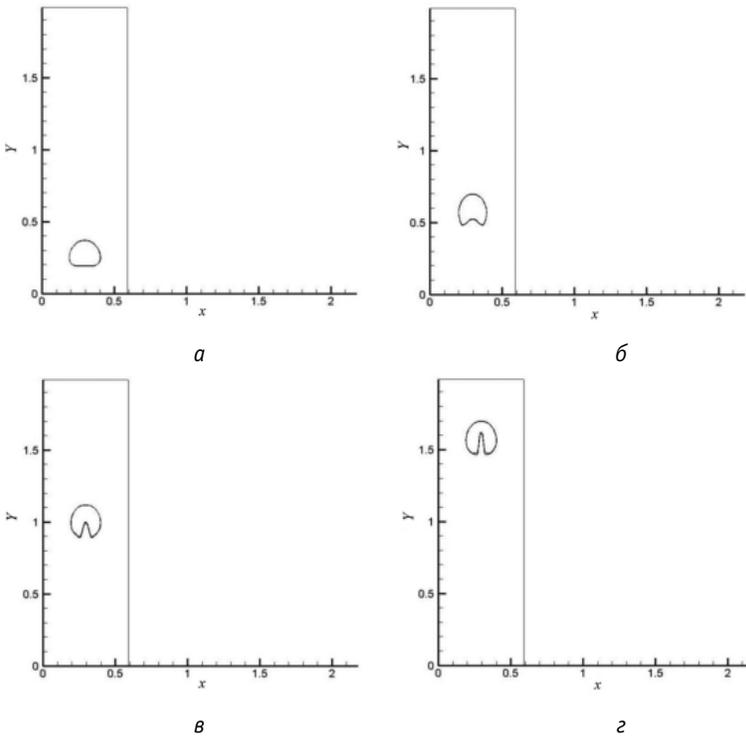


Рис. 23. Поверхность газового пузырька в жидкости под воздействием градиента плотности в поле силы тяжести. Позиция пузырька в разные моменты времени: а — $t_1 = 0,28$, б — $t_2 = 0,82$, в — $t_3 = 1,37$, г — $t_4 = 2,06$

Заключение

Разработана двухфазная многомерная методика решения взаимодействия жидкость-газ с выделением межфазной границы. Методика верифицирована на задачах двухфазной среды в ударной трубе, задаче моделирования распространения ударной волны в жидкой среде с пузырьками газа и во всех случаях получено хорошее совпадение с экспериментом. Представлены результаты численного моделирования обтекания стационарного газового снаряда опускным потоком жидкости. Верификация методики будет продолжена на экспериментах Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН с модельным теплоносителем. С помощью методики смогут решаться такие практические задачи, как, например, анализ аварии с межконтурными течами в парогенераторе реакторной установки БРЕСТ-ОД-300.

Литература

1. *Drew D. A., Passman S. L.* Theory of multicomponent fluids // Applied Mathematical Sciences. — Vol. 135. — New York: Springer, 1998.
2. *Saurel R., Abgrall R.* A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows // J. Comput. Phys. — 1999. — 150. — P. 425—467.
3. *Baer M. R., Nunziato J. W.* A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials // Intern. J. of Multiphase Flow. — 1986. — 12 (6). — P. 861.
4. *Abgrall R., Saurel R.* Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures // J. Comput. Phys. — 2003. — 186 (2). — P. 361—396.
5. *Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2001.
6. *Saurel R., Le Métayer O.* A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation // J. Fluid. Mech. — 2001. — 431. — P. 239—271.
7. *Le Métayer O., Massoni J., Saurel R.* Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers // J. Comput. Phys. — 2005. — 205. — P. 567—610.
8. *Kapila A. R., Menikoff R., Bdzil J. B. et al.* Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: reduced equations // Physics of Fluids. — 2001. — 13 (10). — P. 3002—3024.

9. Saurel R., Petitpas F., Abgrall R. Modelling phase transition in metastable liquids: application to cavitating and flashing flows // *Fluid Mech.* — 2008. — 607. — P. 313—350.
10. Saurel R., Le Métayer O., Massoni J., Gavriluk S. Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation // *Shock Waves.* — 2007. — 16 (3). — P. 209—232.
11. Saurel R., Franquet E., Daniel E., Le Métayer O. A relaxation-projection method for compressible flows. — Pt. 1: The numerical equation of state for the Euler equations // *J. Comput. Phys.* — 2007. — 223 (2). — P. 822—845.
12. Petitpas F., Franquet E., Saurel R., Le Métayer O. A relaxation-projection method for compressible flows. — Pt. 2: The artificial heat exchange for multiphase shocks // *J. Comput. Phys.* — 2007. — 225 (2). — P. 2214—2248.
13. Saurel R., Petitpas F., Berry R. A. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures // *J. Comput. Phys.* — 2009. — 228. — P. 1678—1712.
14. Saurel R., Gavriluk S., Renaud F. A multiphase model with internal degrees of freedom: application to shock-bubble interaction // *J. of fluid mechanics.* — 2003. — 495. — P. 283—321.
15. Berry R. A., Saurel R., Petitpas F. et al. Progress in the development of compressible, multiphase flow modeling capability for nuclear reactor flow applications / Idaho National Laboratory. Contract DE-AC07-05ID14517. — [S. l.], Oct. 2008.
16. Berry R. A., Saurel R., Le Métayer O. The discrete equation method (DEM) for fully compressible, two-phase flows in ducts of spatially varying cross-section // *Nuclear Engineering and Design.* — 2010. — 240. — P. 3797—3818.
17. Zein A., Hantke M., Warnecke G. Modeling phase transition for compressible two-phase flows applied to metastable liquids // *J. Comput. Phys.* — 2010. — 229. — P. 2964—2998.
18. Kameda M., Shimaura N., Higashino F., Matsumoto Y. Shock waves in uniform bubbly flow // *Phys. Fluids.* — 1998. — Vol. 10, № 10. — P. 2661—2668.
19. Кердинский В. К. Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. — Новосибирск: Наука, 2000. — 435 с.
20. Кашинский О. Н., Курдюмов А. С., Лобанов П. Д. Трение на стенке при обтекании стационарного газового снаряда опускным потоком жидкости // *Теплофизика и аэромеханика.* — 2008. — Т. 15, № 1. — С. 93—98.
21. Toro E. F., Spruce M., Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver // *Shock Waves.* — 1994. — 4. — P. 25—34.

Приложение 7А. Фазовые переходы в модели из шести уравнений

В равновесной по давлению модели испарения межфазовый теплообмен и фазовые переходы приводят двухфазную систему в состояние с одинаковыми величинами температур и энергий Гиббса: $g_g = e_g + \frac{p_g}{\rho_g} - T_g S_g$ и $g_l = e_l + \frac{p_l}{\rho_l} - T_l S_l$.

Для моделирования этих процессов решается следующая система уравнений [1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} = \frac{Q}{k} + \frac{\dot{m}}{\rho_l}, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l)}{\partial t} = \dot{m}, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = -\dot{m}, \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = Q + e_l \times \dot{m}, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = -Q - e_l \times \dot{m}, \end{array} \right. \quad (7A.1)$$

где k , ρ_l и e_l — неизвестные величины, которые нужно определить.

В операторном виде (7А.1) можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = S_Q + S_m, \quad (7A.2)$$

где $U = (\alpha_l, \alpha_l \rho_l, \alpha_g \rho_g, w_x, w_y, w_z, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z, \alpha_l \rho_l e_l, \alpha_g \rho_g e_g)^T$;

$S_Q = \left(\frac{Q}{k}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, Q, -Q \right)^T$ — вектор правой части для моделирования межфазового теплообмена;

$S_m = \left(\frac{\dot{m}}{\rho_l}, \dot{m}, -\dot{m}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, e_l \times \dot{m}, -e_l \times \dot{m} \right)^T$ — вектор правой части для моделирования фазовых переходов.

Операторное расщепление в (7А.2) на операторы межфазового теплообмена и фазовых переходов основывается на предположении о разных скоростях релаксации температур и энергий Гиббса фаз при испарении. Выравнивание температур фаз происходит гораздо быстрее, чем релаксация энергий Гиббса [1; 2]. Быстрее всего происходит релаксация давлений фаз [1], поэтому в предположении о мгновенной (в пределах расчетного временного шага) релаксации давлений, температур ($Q = \theta(T_l - T_g)$, $\theta \rightarrow \infty$) и энергий Гиббса ($\dot{m} = v(g_l - g_g)$, $v \rightarrow \infty$) сначала применяется оператор S_Q , сохраняющий равенство давлений фаз, а затем оператор S_m , сохраняющий равенство давлений и температур фаз.

7А.1. Релаксация температур

Для моделирования релаксации температур при равенстве давлений решается следующая система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = -\frac{Q}{k}, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = -Q, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = Q. \end{array} \right. \quad (7A.3)$$

Комбинируя уравнения в (7A.3), можно получить:

$$\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{k + \rho_g^2 \times \left(\frac{\partial e_g}{\partial p_g} \right)_{p_g}}{\alpha_g \rho_g \times \left(\frac{\partial e_g}{\partial p_g} \right)_{\rho_g}} \times \frac{\partial \alpha_g}{\partial t}, \quad (7A.4)$$

$$\frac{\partial p_l}{\partial t} = - \frac{k + \rho_l^2 \times \left(\frac{\partial e_l}{\partial p_l} \right)_{p_l}}{\alpha_l \rho_l \times \left(\frac{\partial e_l}{\partial p_l} \right)_{p_l}} \times \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}. \quad (7A.5)$$

Условие равенства давлений до и после релаксации температур $\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\partial p_l}{\partial t}$ позволяет получить выражение для неизвестной величины k

$$k = \frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}} - \frac{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} p_g + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} p_l}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}}, \quad (7A.6)$$

где $\Gamma_g = \frac{1}{\rho_g} \left(\frac{\partial p_g}{\partial e_g} \right)_{p_g}$, $\Gamma_l = \frac{1}{\rho_l} \left(\frac{\partial p_l}{\partial e_l} \right)_{p_l}$.

Учитывая, что $p_g = p_l$, соотношение (7A.6) примет вид

$$k = \frac{\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l}}{\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l}} - p. \quad (7A.7)$$

Для уравнения состояния stiffened выражение (7A.7) можно записать так:

$$k = \frac{\frac{p + \gamma_g \pi_g}{\alpha_g} + \frac{p + \gamma_l \pi_l}{\alpha_l}}{\frac{\gamma_g - 1}{\alpha_g} + \frac{\gamma_l - 1}{\alpha_l}}. \quad (7A.8)$$

Численное решение (7A.3) ищется в предположении о мгновенной релаксации температур, т. е. $Q = \theta(T_l - T_g)$, $\theta \rightarrow \infty$. Интегрирование уравнений для внутренних энергий позволяет получить

$$e_g^* = e_g^0 + \frac{\bar{k}}{\alpha_g^0 \rho_g^0} \times (\alpha_g^* - \alpha_g^0) \quad (7A.9)$$

где индексы «0» и «*» означают состояние до и после релаксационного процесса; \bar{k} — среднее значение величины в процессе релаксации между состояниями $(\alpha_g^0, \rho_g^0, e_g^0)$ и $(\alpha_g^*, \rho_g^*, e_g^*)$.

Величина e_g^* в (7A.9) является функцией величины α_g^* , также как и величина ρ_g^* :

$$\rho_g^* = \frac{\rho_g^0 \alpha_g^0}{\alpha_g^*} = \frac{\text{const}}{\alpha_g^*}.$$

Аналогичным образом находится значение внутренней энергии для другой фазы:

$$e_l^* = e_l^0 - \frac{\bar{k}}{\alpha_l^0 \rho_l^0} \times (\alpha_g^* - \alpha_g^0) \quad (7A.10)$$

Величина e_l^* в (7A.10) является функцией величины α_g^* , также как и величина ρ_l^* :

$$\rho_l^* = \frac{\rho_l^0 (1 - \alpha_g^0)}{1 - \alpha_g^*} = \frac{\text{const}}{1 - \alpha_g^*}.$$

Тогда и функция $f = T_g^*(e_g^*, \rho_g^*) - T_l^*(e_l^*, \rho_l^*) = 0$, выражающая условие равенства температур после релаксации, будет зависеть только от одного параметра:

$$f(\alpha_g^*) = T_g^*(\alpha_g^*) - T_l^*(\alpha_g^*) = 0. \quad (7A.11)$$

Решение уравнения (7A.11) позволяет определить новое состояние для каждой из фаз после процесса релаксации температур.

Для оценки средней величины \bar{k} используется соотношение

$$\bar{k} = \frac{\tilde{k} + k^0}{2}, \quad (7A.12)$$

где \tilde{k} оценивается для каждого нового состояния, полученного при итерационном решении (7А.11).

7А.2. Релаксация энергий Гиббса

Для моделирования релаксации энергий Гиббса при равенстве давлений и температур решается следующая система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} = -\frac{\dot{m}}{\rho_l}, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g)}{\partial t} = -\dot{m}, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l)}{\partial t} = \dot{m}, \\ \frac{\partial w_x}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_y}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial w_z}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_x)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_y)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} = -\dot{m} \times e_l, \\ \frac{\partial (\alpha_l \rho_l e_l)}{\partial t} = \dot{m} \times e_l. \end{array} \right. \quad (7А.13)$$

Условия равенства давлений $\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\partial p_l}{\partial t}$ и температур $\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{\partial T_l}{\partial t}$ до и после релаксации энергий Гиббса позволяют получить выражения для неизвестных величин e_l и ρ_l .

Условие равенства давлений $\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{\partial p_l}{\partial t}$ до и после релаксации энергий Гиббса позволяет получить соотношение

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} \times \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \times \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{p_g} + \rho_l \times (e_l - e_g) \right) = \\ = -\frac{\Gamma_l}{\alpha_l} \times \left(-\rho_l (\rho_l - \rho_l) \times \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{p_l} + \rho_l \times (e_l - e_l) \right). \end{aligned} \quad (7A.14)$$

Учитывая условие равенства температур $\frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{\partial T_l}{\partial t}$ до и после релаксации энергий Гиббса, можно получить

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} \times \left(-\rho_g (\rho_l - \rho_g) \times \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g} + \rho_l \times (e_l - e_g) \right) = \\ = -\frac{1}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \times \left(-\rho_l (\rho_l - \rho_l) \times \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l} + \rho_l \times (e_l - e_l) \right). \end{aligned} \quad (7A.15)$$

Уравнения (7A.14) и (7A.15) позволяют получить явные выражения для неизвестных величин ρ_l и e_l .

$$\rho_l = \frac{\text{term1}}{\text{term2}}, \quad (7A.16)$$

где

$$\begin{aligned} \text{term1} = \varphi \times \left(\frac{\rho_g c_g^2}{\alpha_g} + \frac{\rho_l c_l^2}{\alpha_l} \right) - \varphi \times \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} p_g + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} p_l \right) + \\ + \psi \times \left(\frac{\rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{term2} &= \varphi \times \left(\frac{c_g^2}{\alpha_g} + \frac{c_l^2}{\alpha_l} \right) - \varphi \times \left(\frac{\Gamma_g}{\alpha_g} h_g + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l} h_l \right) + \\
 &+ \psi \times \left(\frac{e_g + \rho_g \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l + \rho_l \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right), \\
 e_l &= \frac{\frac{e_g + \rho_g \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l + \rho_l \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\varphi} \\
 &= \frac{\frac{\rho_g^2 \left(\frac{\partial e_g}{\partial \rho_g} \right)_{T_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\rho_l^2 \left(\frac{\partial e_l}{\partial \rho_l} \right)_{T_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\rho_l \times \varphi},
 \end{aligned} \tag{7A.17}$$

$$\text{где } \varphi = \frac{1}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{1}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}, \quad \psi = \frac{\Gamma_g}{\alpha_g} + \frac{\Gamma_l}{\alpha_l},$$

$$h_g = e_g + \frac{p_g}{\rho_g}, \quad h_l = e_l + \frac{p_l}{\rho_l}.$$

Для уравнения состояния stiffened выражения (7A.16) и (7A.17) примут вид

$$\begin{aligned}
 \rho_l &= \frac{\varphi \times \left(\frac{p_g + \gamma_g \pi_g}{\alpha_g} + \frac{p_l + \gamma_l \pi_l}{\alpha_l} \right) - \psi \times \left(\frac{\pi_g}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\pi_l}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right)}{-\varphi \times \left(\frac{(\gamma_g - 1) q_g}{\alpha_g} + \frac{(\gamma_l - 1) q_l}{\alpha_l} \right) + \psi \times \left(\frac{e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l} \right)}, \tag{7A.18}
 \end{aligned}$$

$$e_l = \frac{\frac{e_g - \frac{\pi_g}{\rho_g}}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{e_l - \frac{\pi_l}{\rho_l}}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\varphi} + \frac{\frac{\pi_g}{\alpha_g \rho_g (C_v)_g} + \frac{\pi_l}{\alpha_l \rho_l (C_v)_l}}{\rho_l \times \varphi}. \quad (7A.19)$$

Используя выражения для энергий Гиббса $g_g = e_g + \frac{p_g}{\rho_g} - T_g S_g$ и $g_l = e_l + \frac{p_l}{\rho_l} - T_l S_l$, можно получить из (7A.13) для уравнения состояния stiffened следующие выражения:

$$\frac{\partial g_l}{\partial t} = \left\{ \frac{(\gamma_l - 1) \times (C_v)_l - s_l}{\alpha_l \rho_l \rho_l (C_v)_l} \times [(e_l - q_l) \times (\rho_l - \rho_l) + \rho_l \times (e_l - e_l)] + \left[T_l (s_l + \gamma_l (C_v)_l) - \frac{p_l}{\rho_l} - (e_l - q_l) \right] \times \frac{\rho_l - \rho_l}{\alpha_l \rho_l \rho_l} \right\} \dot{m} = A \times \dot{m}, \quad (7A.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_g}{\partial t} &= \\ &= \left\{ - \frac{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g - s_g}{\alpha_g \rho_g \rho_l (C_v)_g} \times [(e_g - q_g) \times (\rho_l - \rho_g) + \rho_l \times (e_l - e_g)] - \right. \\ &\quad \left. - \left[T_g (s_g + \gamma_g (C_v)_g) - \frac{p_g}{\rho_g} - (e_g - q_g) \right] \times \frac{\rho_l - \rho_g}{\alpha_g \rho_g \rho_l} \right\} \dot{m} = B \times \dot{m}, \end{aligned} \quad (7A.21)$$

где $s_g = (C_v)_g \ln \left(\frac{T_g^{\gamma_g}}{(p_g + \pi_g)^{\gamma_g - 1}} \right) + q'_g$, $s_l = (C_v)_l \ln \left(\frac{T_l^{\gamma_l}}{(p_l + \pi_l)^{\gamma_l - 1}} \right) + q'_l$.

Система (7А.13) решается в предположении о мгновенной релаксации (выравнивании) энергий Гиббса обеих фаз. Это означает, что по окончании текущего временного шага энергии Гиббса обеих фаз должны быть равны

междусобой. Из (7А.20) и (7А.21) следует, что $\frac{\partial \Delta g}{\partial t} = \frac{\partial (g_l - g_g)}{\partial t} = (A - B)\dot{m}$,

или для простейшей аппроксимации в численном виде

$$\frac{(\Delta g)^{n+1} - (\Delta g)^n}{\Delta t} = (A^n - B^n) \times (\dot{m})^n. \quad (7A.22)$$

Условие равенства энергии Гиббса обеих фаз по окончании текущего временного шага означает, что $(\Delta g)^{n+1} = 0$. Отсюда получается оценка коэффициента массообмена на текущем временном шаге:

$$(\dot{m})^n = \frac{-(\Delta g)^n}{\Delta t \times (A^n - B^n)}. \quad (7A.23)$$

Оценка (7А.23) с учетом (7А.18) и (7А.19) позволяет выполнить явное численное интегрирование системы (7А.13). Однако при этом может не сохраняться положительность объемной доли. Поэтому при вычислении

$S_{\alpha} = -\frac{\dot{m}}{\rho_l}$ вводится специальный ограничитель

$$S_{\max, \alpha_g} = \begin{cases} \frac{1 - \alpha_g}{\Delta t}, & \text{если } S_{\alpha_g} > 0, \\ \frac{\alpha_g}{\Delta t} & \text{в прочих случаях.} \end{cases} \quad (7A.24)$$

Если $|S_{\max, \alpha_g}| > |S_{\alpha_g}|$, то численное интегрирование системы (7А.13) с оценкой (7А.23) может быть выполнено с использованием гидродинамического

временного шага $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. В противном случае, если $|S_{\max, \alpha_g}| \leq |S_{\alpha_g}|$, то

вычисляется величина отношения $R_{\alpha_g} = \frac{S_{\max, \alpha_g}}{S_{\alpha_g}}$, и численное интегрирование системы (7А.13) на временном шаге Δt последовательно осуществля-

ется на временных шагах $\Delta t_{\text{ХИМ}} = R_{\alpha_g} \frac{\Delta t}{2}$. Данный способ интегрирования системы (7А.13) довольно удобен, но рассмотренный метод не обеспечивает мгновенную релаксацию.

7А.3. Расчеты

При проведении расчетов для додекана параметры уравнения состояния stiffened определялись с использованием линейной аппроксимации экспериментальных кривых насыщения [3] в диапазоне температур 450—750 К. В табл. 7А.1 приведены значения параметров уравнения состояния stiffened для жидкого и газообразного додекана. На рис. 7А.1 приведена кривая насыщения додекана для параметров уравнения состояния из табл. 7А.1, которая удовлетворяет следующему соотношению [1]:

$$\ln(p + \pi_g) = A + \frac{B}{T} + C \ln T + D \ln(p + \pi_l), \quad (7A.25)$$

где

$$A = \frac{\gamma_l \times (C_v)_l - \gamma_g \times (C_v)_g + q'_g - q'_l}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

$$B = \frac{q_l - q_g}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

$$C = \frac{\gamma_g \times (C_v)_g - \gamma_l \times (C_v)_l}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

$$D = \frac{(\gamma_l - 1) \times (C_v)_l}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g}.$$

Таблица 7А.1. Параметры уравнения состояния stiffened для жидкого и газообразного додекана

Фаза	γ	π , Па	CV , Дж/кг/К	CP , Дж/кг/К	q , Дж/кг	q' , Дж/кг/К
Пар	1,025	0	$1,956 \cdot 10^3$	$2,005 \cdot 10^3$	$-237 \cdot 10^3$	-24 445
Жидкость	2,35	$4 \cdot 10^8$	$1,077 \cdot 10^3$	$2,534 \cdot 10^3$	$-755 \cdot 10^3$	0

Основным условием появления метастабильных состояний в жидкости и начала испарения является увеличение температуры жидкой фазы выше температуры насыщения при данном давлении (см. рис. 7А.1):

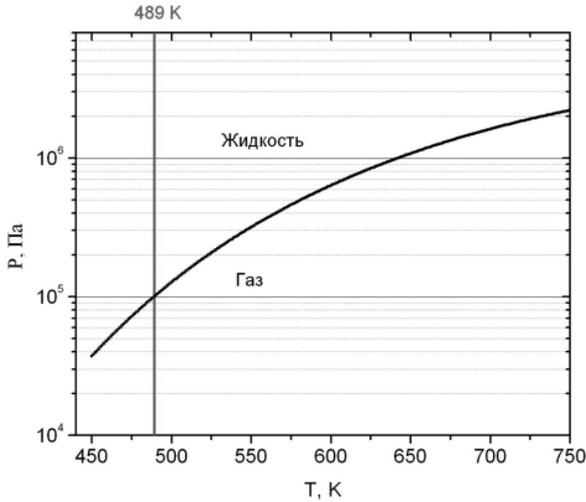


Рис. 7А.1. Кривая насыщения додекана для параметров уравнения состояния из табл. 7А.1. Вертикальная линия соответствует температуре испарения жидкого додекана при атмосферном давлении

$$T_l > T_{\text{НАСЫЩ}}(P). \quad (7A.26)$$

Основным условием начала конденсации пара является понижение температуры пара ниже температуры насыщения при данном давлении (см. рис. 7А.1):

$$T_g < T_{\text{НАСЫЩ}}(P). \quad (7A.27)$$

7А.3.1. Задача о распаде разрыва в додекане

Левая часть метровой трубы ($x < 0,75$ м) заполнена жидким додеканом с температурой 485 К при высоком давлении $2 \cdot 10^6$ Па. Правая часть трубы ($x > 0,75$ м) содержит газообразный додекан с температурой 495 К при атмосферном давлении. Для согласованности численной модели каждая фаза в начальный момент времени содержит малую долю (10^{-6}) другой фазы. В начальный момент двухфазная среда находится в состоянии покоя. Начальные данные приведены в табл. 7А.2. Результаты расчета без учета и с учетом массообмена представлены на рис. 7А.2 для момента времени 450 мкс. Показаны зависимости для давления, скорости, объемной доли

газообразного додекана и массовой доли газообразного додекана. Расчет был выполнен на сетке из 128 ячеек для значения числа Куранта 0,4.

**Таблица 7А.2. Начальные значения параметров
для задачи о распаде разрыва в додекане**

Слева	Справа
$\rho_l = 500 \text{ кг/м}^3$	$\rho_l = 500 \text{ кг/м}^3$
$P_l = 2 \cdot 10^6 \text{ Па}$	$P_l = 10^5 \text{ Па}$
$u_l = 0 \text{ м/с}$	$u_l = 0 \text{ м/с}$
$\rho_g = 2 \text{ кг/м}^3$	$\rho_g = 2 \text{ кг/м}^3$
$P_g = 2 \cdot 10^6 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$
$u_g = 0 \text{ м/с}$	$u_g = 0 \text{ м/с}$
$\alpha_g = 10^{-6}$	$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$

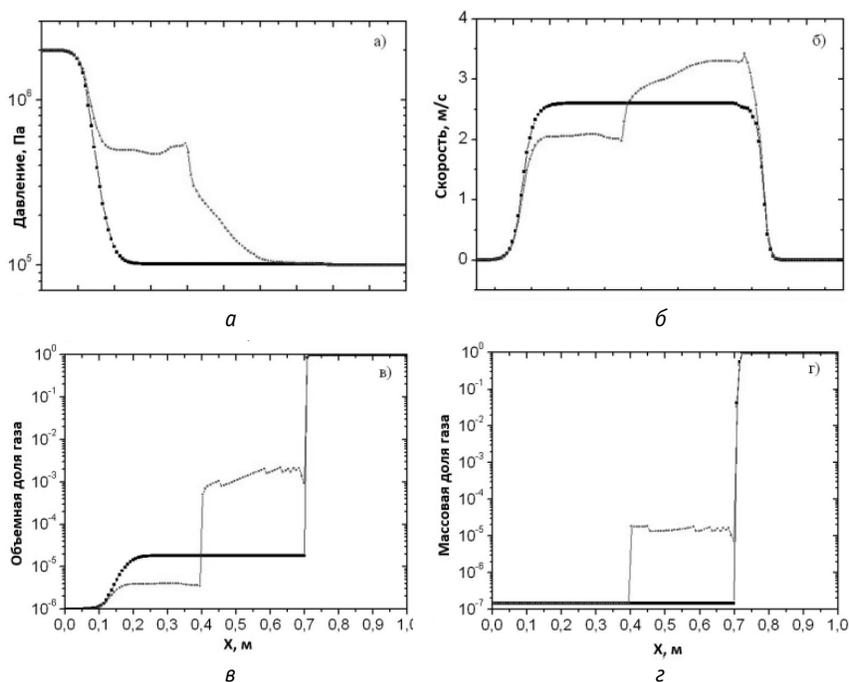


Рис. 7А.2. Распад разрыва в додекане.
Зависимости для давления (а), скорости (б), объемной доли газообразного додекана (в) и массовой доли газообразного додекана (г)

В данном расчете испарение моделировалось только на межфазовом интерфейсе. Положение межфазового интерфейса определялось из анализа профиля объемной доли. На интерфейсной границе величина объемной доли газа должна находиться в диапазоне

$$\varepsilon_2 \leq \alpha \leq 1 - \varepsilon_2, \quad (7A.28)$$

где $\varepsilon_2 = 5 \cdot 10^{-6}$.

7A.3.2. Кавитация в додекане

Метровая труба заполнена жидким додеканом с температурой 485 К при атмосферном давлении. Объемная примесь пара с температурой 495 К составляет величину 10^{-2} . Скорость двухфазной среды в левой части трубы ($x < 0,5$ м) равна -10 м/с, а скорость в правой части трубы ($x > 0,5$ м) составляет 10 м/с. В данном расчете явный межфазовый интерфейс изначально отсутствует, кавитация происходит в двухфазной смеси с малой долей газовой фазы. Критерием начала процессов испарения являются только условия (7A.26; 7A.27). На рис. 7A.3 представлены результаты расчета на сетке из 128 ячеек для момента времени 1 мс при значении числа Куранта 0,4. Показаны профили давления и массовой доли газовой фазы. На каждом графике представлены зависимости, полученные с использованием описанной в данной работе модели с учетом и без учета массообмена.

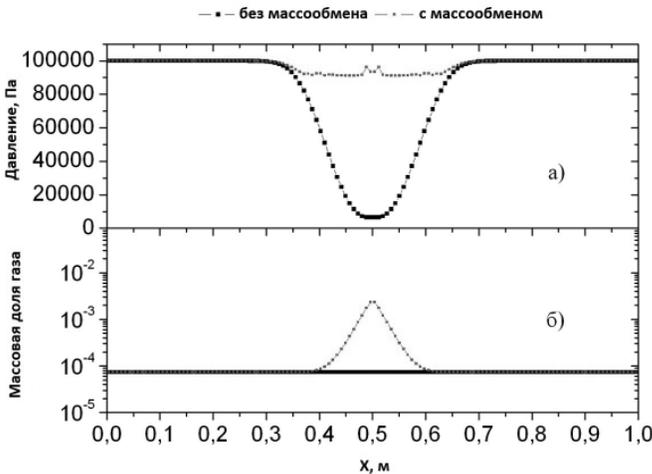


Рис. 7A.3. Расчет кавитации в додекане. Профили давления (а) и массовой доли газовой фазы (б)

На рис. 7А.3 видно распространение влево и вправо двух волн разрежения. В центральной области увеличивается объемная доля газовой фазы, что приводит к динамическому появлению интерфейсной границы раздела фаз. В случае отсутствия массообмена рост объемной доли связан с механическим расширением газа, который изначально содержится в воде в малых пропорциях. Таким образом, при отсутствии массообмена рост газовых пузырьков при кавитации обусловлен только процессом механической релаксации. В случае учета процессов массообмена после прохождения волн разрежения жидкая фаза оказывается в нестабильном состоянии. Затем процессы испарения приводят к образованию дополнительного количества газовой фазы, что приводит к значительным изменениям величин всех газодинамических параметров по сравнению со значениями, полученными при вычислениях без учета массообмена.

Литература

1. *Zein A., Hantke M., Warnecke G.* Modeling phase transition for compressible two-phase flows applied to metastable liquids // *J. Comput. Phys.* — 2010. — 229. — P. 2964—2998.
2. *Saurel R., Petitpas F., Abgrall R.* Modelling phase transition in metastable liquids: application to cavitating and flashing flows // *Fluid Mech.* — 2008. — 607. — P. 313—350.
3. *Le Metayer O., Massoni J., Saurel R.* Elaborating equations of state of a liquid and its vapor for two-phase flow models // *Intern. J. of Thermal Sciences.* — 2004. — 43. — P. 265—276.

Научное издание

ТРУДЫ ИБРАЭ

Под общей редакцией чл.-кор. РАН Л. А. Большова

Выпуск 16

**МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ДЛЯ РАСЧЕТА
МНОГОМЕРНЫХ ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ
В ПРИСУТСТВИИ СИЛ ПОВЕРХНОСТНОГО
НАТЯЖЕНИЯ**

*Утверждено к печати Ученым советом
Института проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук*

Редактор А. И. Иоффе

Оригинал-макет подготовлен ИБРАЭ РАН
Иллюстрации приведены в авторской редакции

Формат 60x90 ¹/₁₆. Бумага офсетная 80 г/м²
Печать офсетная. Гарнитура «Оффисина». Тираж 500 экз.
Уч.-изд. л. 18,38. Уч.-печ. л. 23,25
Заказ № 505

Заказное

Отпечатано в ООО «Типография «Миттель Пресс»
Адрес: 127254, г. Москва, ул. Руставели, д. 14, стр.6
Тел./факс +7 (495) 619-08-30, 647-01-89
E-mail: mittelpress@mail.ru

Сборники научных трудов ИБРАЭ РАН

Под общей редакцией члена-корреспондента РАН

Л. А. Большова

Выпуск 15: «Развитие систем аварийного реагирования и радиационного мониторинга» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *Р. В. Арутюняна*, 2014 г.

Выпуск 14: «Методы прямого численного моделирования в двухфазных средах», 2013 г.

Выпуск 13: «Авария на АЭС «Фукусима-1»: опыт реагирования и уроки» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *Р. В. Арутюняна*, 2013 г.

Выпуск 12: «Разработка и применение интегральных кодов для анализа безопасности АЭС» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *Р. В. Арутюняна*, 2013 г.

Выпуск 11: «Вопросы радиоэкологии» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *И. И. Линге*, 2009 г.

Выпуск 10: «Безопасность и надежность газотранспортной системы» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *В. М. Головизнина*, 2009 г.

Выпуск 9: «Моделирование распространения радионуклидов в окружающей среде» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *Р. В. Арутюняна*, 2008 г.

Выпуск 8: «Свободная конвекция и теплоотдача жидкости с внутренними источниками тепла» под научной редакцией члена-корреспондента РАН, доктора физико-математических наук *Л. А. Большова*, 2008 г.

Выпуск 7: «Физические модели аномального переноса примеси в сильно неоднородных средах» под научной редакцией члена-корреспондента РАН, доктора физико-математических наук *Л. А. Большова*, 2008 г.

Выпуск 6: «Механика преднапряженных защитных оболочек АЭС» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *Р. В. Арутюняна* (на рус. и англ. языках), 2008 г.

Выпуск 5: «Models of the MFPR Code for Fission Products Release from Irradiated UO_2 Fuel» («Модели выхода продуктов деления из облученного топлива») (на англ. языке) под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *Р. В. Арутюняна*, 2008 г.

Выпуск 4: «Численные схемы решения систем гиперболического типа для моделирования ударно-волновых процессов в двухфазных средах» (на рус. и англ. языках) под научной редакцией доктора физико-математических наук *В. М. Головизнина*, 2008 г.

Выпуск 3: «Методы вычислительной гидродинамики для анализа безопасности объектов ТЭК» (на рус. и англ. языках) под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *В. Ф. Стрижова*, 2008 г.

Выпуск 2: «Численные исследования естественно-конвективных течений затвердевающей жидкости» под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *В. Ф. Стрижова*, 2007 г.

Выпуск 1: «Models for the Fuel Rod Materials Interaction during Reactor Core Degradation under Severe Accident Conditions at NPP» («Модели взаимодействия материалов топливных элементов в процессах разрушения активной зоны реактора при тяжелых авариях на атомных станциях») (на англ. языке) под научной редакцией профессора, доктора физико-математических наук *В. Ф. Стрижова*, 2007 г.

Под редакцией академиков РАН

А. А. Саркисова, Г. А. Филиппова

Коллективный сборник ИБРАЭ РАН и Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН: **Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений**. Том 3, 2012 г.

Коллективный сборник ИБРАЭ РАН и Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН: **Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений**: Том 1: «Теория и эксперимент»; Том 2: «Численное моделирование», 2010 г.

Монографии ИБРАЭ РАН

(в том числе коллективные)

А. А. Саркисов, Ю. В. Сивинцев, В. Л. Высоцкий, В. С. Никитин. **Атомное наследие на дне Арктики. Радиоэкологические и технико-экономические проблемы радиационной реабилитации морей**, 2015 г.

Коллектив авторов. Атомные станции малой мощности: новое направление развития энергетики: Том 2. (по материалам международной конференции «Атомные станции малой мощности — актуальное направление развития атомной энергетики», прошедшей 3—5 декабря 2013 г. в Президентском зале Российской академии наук), 2015 г.

Е. Ф. Селезнев. **Кинетика реакторов на быстрых нейтронах**, 2013 г.

А. А. Саркисов, В. Н. Пучков. **Нейтронно-физические процессы в быстрых реакторах с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем**, 2011 г.

Коллектив авторов. **Атомные станции малой мощности: новое направление развития энергетики** (по материалам межотраслевой межрегиональной научно-технической конференции «Перспектива развития системы атомных станций малой мощности в регионах, не имеющих централизованного электроснабжения», состоявшейся 11—12 ноября 2010 г. в Президентском зале Российской академии наук), 2011 г.

Л. А. Большов, А. А. Боровой, Е. П. Велихов, А. А. Ключников. **Ядерное топливо в объекте «Укрытие» Чернобыльской АЭС**, 2010 г.

В. В. Демьянов, Е. А. Савельева. **Геостатистика: теория и практика**, 2010 г.

А. В. Носов, А. Л. Крылов, В. П. Киселев, С. В. Казаков. **Моделирование миграции радионуклидов в поверхностных водах**, 2010 г.

Коллектив авторов. **Аномальная диффузия радионуклидов в сильно-неоднородных геологических формациях**, 2010 г.

Коллектив авторов. **Стратегические подходы к решению экологических проблем, связанных с выведенными из эксплуатации объектами атомного флота на Северо-Западе России**, 2010 г.

А. А. Саркисов, Л. Б. Гусев, Р. И. Калинин. **Основы теории и эксплуатации судовых ядерных реакторов**, 2008 г.

С. В. Казаков, С. С. Уткин. **Подходы и принципы радиационной защиты водных объектов**, 2008 г.

А. И. Иойрыш, А. А. Козодубов, В. Г. Маркаров, В. Г. Терентьев, А. Б. Чопорняк. **Нормативное правовое обеспечение безопасности при выводе из эксплуатации ядерно- и радиационно опасных объектов атомного флота России**, 2008 г.