С.А. Калиш, М.В. Крапошин,
А.М. Тагиров

III Международная конференция «Облачные вычисления: образование, исследования, разработки»

6-7 декабря 2012г.

Моделирование процессов течения двухфазной смеси с межфазным массообменом и учетом сжимаемости сред средствами OpenFOAM

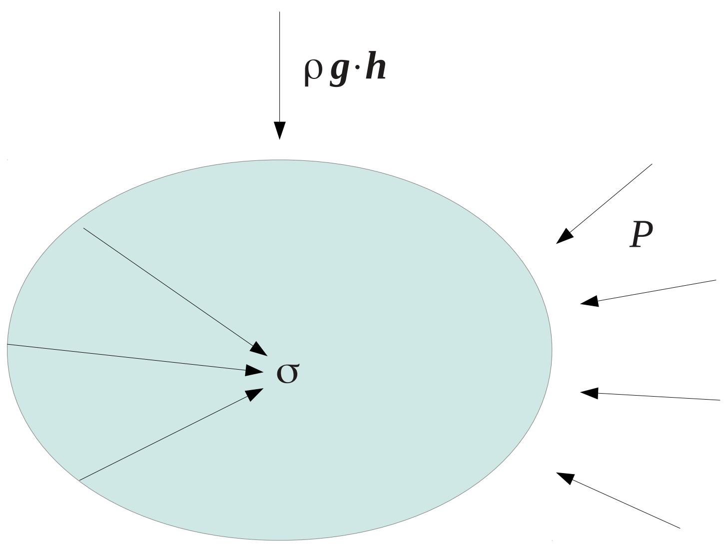
НИЦ «Курчатовкий институт»
Отделение Транспортных Ядерных Реакторов

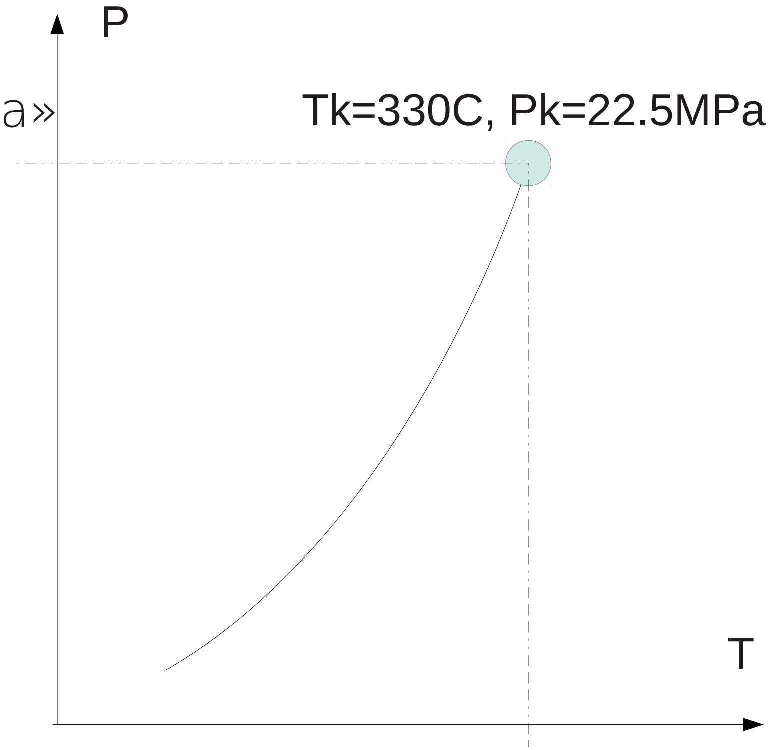
Постановка задачи

«Пока температура жидкости такова, что давление насыщенного пара внутри пузырька меньше внешнего давления над жидкостью, пузырек не может расти, потому что и теперь нет недостатка в силах, стремящихся его раздавить.

…Наконец, на пузырек действует внешнее давление, под которым находится вся жидкость, и именно оно играет главную роль. Остальные две силы лишь облегчают раздавливание пузырька внешним давлением».

И.К. Кикоин, А.К., Кикоин «Молекулярная физика»





Двухфазные модели OpenFOAM

- Модель смешивающихся жидкостей с общей системой уравнений (twoLiquidMixingFoam)
- Модель несмешивающихся жидкостей с общей системой уравнений (interFoam и остальные)
- Модель течения двух жидкостей с отдельной системой уравнений для каждой фазы (twoPhaseEulerFoam)

Скрестить ужа с ежом

- compressibleInterFoam — течение двух сжимаемых, изотермических жидкостей
- interPhaseChangeFoam — течение двух несжимаемых изотермических жидкостей с межфазным массообменом
- Нужен новый решатель (новая модель)

+

=

compressibleMixingPhaseChangeFoam

Вывод уравнений: перенос объёмной доли

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

$$\alpha_2 = \frac{V_2}{V} = 1 - \alpha_1 \qquad \rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$$

$$\Sigma_i \alpha_i = 1$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\alpha_i \rho_i \boldsymbol{U} \right) + S_i$$

Переходим от массовых потоков к объёмным

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_i \boldsymbol{U} \right) = -\frac{\alpha_i}{\rho_i} \frac{d \rho_i}{d t} + \frac{S_i}{\rho_i}$$

Массовый и объёмный источники фаз

$$\frac{\partial \rho_1 \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_1 \alpha_1 \boldsymbol{U}\right) = \dot{m}^{+} + \dot{m}^{-}$$

- В первую очередь рост/сжатие пузырьков определяется полем давления
- Поэтому принимаем, что источник массы пропорционален разнице локального давления и упругости пара в некоторой степени, например:

$$\dot{m}^{+} = C_c \frac{\sqrt{k}}{\sigma} \rho_1 \rho_2 \left(\frac{2}{3} max \frac{\left(p - p_s, 0\right)}{\rho_1} \right)^{1/2} \frac{\alpha_2 \rho_2}{\rho}$$

$$\dot{m}^{-} = -C_e \frac{\sqrt{k}}{\sigma} \rho_1 \rho_2 \left(\frac{2}{3} max \frac{\left(p_s - p, 0\right)}{\rho_1} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{\alpha_2 \rho_2}{\rho} \right)$$

Уравнение для давления

В дальнейшем все транспортные уравнения с массовыми потоками будем приводить к объёмным потокам

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_i \rho_i \zeta\right) + \nabla \cdot \left(\alpha_i \rho_i \boldsymbol{U} \zeta\right) =$$
$$\rho_i \alpha_i \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\boldsymbol{U} \zeta\right)\right) + \zeta \alpha_i \frac{d \rho_i}{dt} + \zeta \rho_i \frac{d \alpha_i}{dt}$$

Сложив уравнение сохранения объёмной доли для каждой из фаз (см. уравнение транспорта для жидкости), получаем уравнение для давления (без учета теплового расширения фаз)

$$\rho_i = \rho_{0,i} + \psi_i p$$

$$\nabla \cdot \left(\boldsymbol{U}\right) = -\frac{d p}{d t}\left(\frac{\alpha_1 \psi_1}{\rho_1} + \frac{\alpha_2 \psi_2}{\rho_2}\right) + \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right) \dot{m}_1$$

Поскольку источник массы содержит давление, он может быть включен частично неявно в уравнение для давления

Связь уравнения для давления с уравнением транспорта фазы

При решении уравнения для давления, получаем новые значения поля скорости
Для учета нового решения, требуется связать новые потоки, поле давления и
и транспорт фазы. Перепишем правую часть уравнения транспорта жидкости

$$-\frac{\alpha_1 \psi_1}{\rho_1}\frac{d\,p}{d\,t}+\frac{\dot{m}_1}{\rho_1}-\alpha_1 \nabla\cdot\boldsymbol{U}+\alpha_1 \nabla\cdot\boldsymbol{U}$$

Одно слагаемое с дивергенцией скорости (с положительным знаком) оставим явным, второе — получим из уравнения для давления. В итоге имеем:

$$\alpha_1 \nabla\cdot\boldsymbol{U}+\alpha_1 \alpha_2\left(\frac{\psi_2}{\rho_2}-\frac{\psi_1}{\rho_1}\right)\frac{d\,p}{dt}+\dot{m}_1\frac{\rho}{\rho_1\rho_2}$$

Баланс между дивергенцией скорости и dp/dt

Уравнение для температуры (1)

- Распишем уравнение сохранения энергии в температуре для каждой фазы

$$\alpha_i \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\boldsymbol{U} T \right) \right) + T \frac{\alpha_i \psi_i}{\rho_i} \frac{d p}{dt} + T \frac{d \alpha_i}{dt} - \frac{1}{\rho_i C_{p,i}} \nabla \cdot \kappa_i^{Eff} \nabla T =$$

$$T \frac{1}{\rho_i} \dot{m}_i - \frac{1}{\rho_i C_{p,i}} \frac{p}{\rho_i} \dot{m}_i + \frac{1}{\rho_i C_{p,i}} \left(\frac{\partial \alpha_i p}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_i p \boldsymbol{U} \right) \right)$$

Уравнение для температуры (2)

- Сложим все уравнения и получим уравнение сохранения энергии для смеси

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\boldsymbol{U} T\right) - T\nabla\cdot\boldsymbol{U} - \frac{1}{\rho_1 C_{p,1}}\nabla\cdot\kappa_1^{Eff}\nabla T - \frac{1}{\rho_2 C_{p,2}}\nabla\cdot\kappa_2^{Eff}\nabla T =$$

$$\left(\frac{\alpha_1}{\rho_1 C_{p,1}} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 C_{p,2}}\right)\frac{dp}{dt} + \frac{p}{\rho_1 C_{p,1}}\frac{d\alpha_1}{dt} + \frac{p}{\rho_2 C_{p,2}}\frac{d\alpha_2}{dt}$$

$$+\dot{m}_1 p\left(-\frac{1}{\rho_1\rho_1 C_{p,1}} + \frac{1}{\rho_2\rho_2 C_{p,2}}\right)$$

Что делать с диффузией? Пусть будет пропорциональна объёмной доле фазы

Возможны два случая:

1) Жидкость

$$\rho = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial T} \Delta T + \frac{\partial \rho}{\partial p} \Delta p$$

2) Газ

$$\rho = \frac{1}{\frac{C_p}{C_v} R / M T} p$$

Остальные свойства - постоянны

Объединим их:

$$\rho = \hat{\rho} + \frac{\partial \rho}{\partial p} p$$

В случае влияния температуры на плотность, в модель следует ввести соответствующую зависимость

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{d\hat{\rho}}{dt} + \psi\frac{dp}{dt} + p\frac{d\psi}{dt}$$

Как это обычно делается:

$$\rho \boldsymbol{U} = \hat{\rho}\hat{\boldsymbol{U}} + \hat{\rho}\boldsymbol{U}' + \rho'\hat{\boldsymbol{U}} + \rho'\boldsymbol{U}'$$

Получаем конвективно-диффузионное уравнение для давления

$$\frac{\partial \psi p}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\psi \boldsymbol{U} p\right) - \frac{\nabla\cdot\hat{\rho}}{A}\nabla p = 0$$

Что видим в OpenFOAM?

```
p_rghEqnComp =
(
    fvm::ddt(p_rgh)
  + fvm::div(phi, p_rgh)
  - fvm::Sp(fvc::div(phi), p_rgh)
);
```

```
phi += p_rghEqnIncomp.flux();
```

$$\frac{\nabla\cdot\hat{\rho}}{A}\nabla p = 0$$

Но вклад в поток от сжимаемой части уже не нулевой!!!

Процедура интегрирования

- Решаем уравнение транспорта объёмной доли воды
- Делаем прогноз скорости
- Решаем уравнение для давления
- Обновляем поле скорости и потоков
- Решаем уравнение для скорости
- Решаем остальные уравнения

Пример реализации в OpenFOAM
Уравнение для температуры

```
    fvScalarMatrix TEqn
    (
  fvm::ddt(T)
+ fvm::div(phi,T)
+ fvm::SuSp(-divU,T)
//- fvm::Sp(fvc::div(phi),T)
- fvm::laplacian(kappaEff1/rho1Cp1,T)
- fvm::laplacian(kappaEff2/rho2Cp2,T)
==
Cip*m1Dot*p*(-1./(rho1*rho1Cp1) + 1./(rho2*rho2Cp2))
+
Ccw*(.....)
```

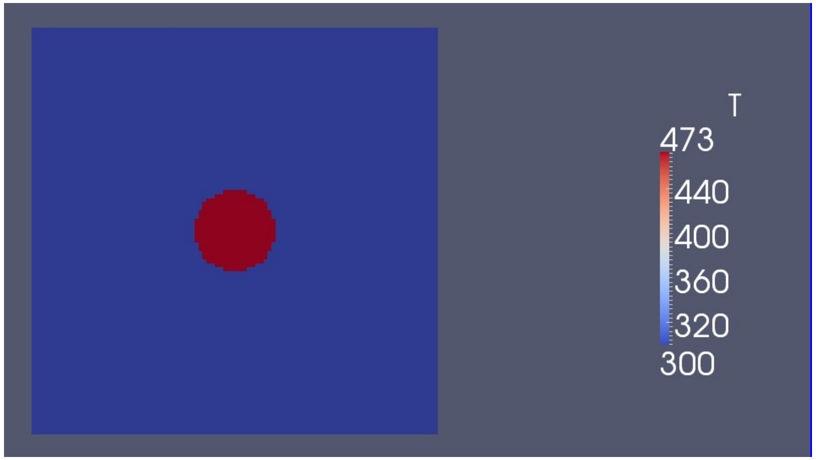
Тестирование:
Объёмное испарение и конденсация

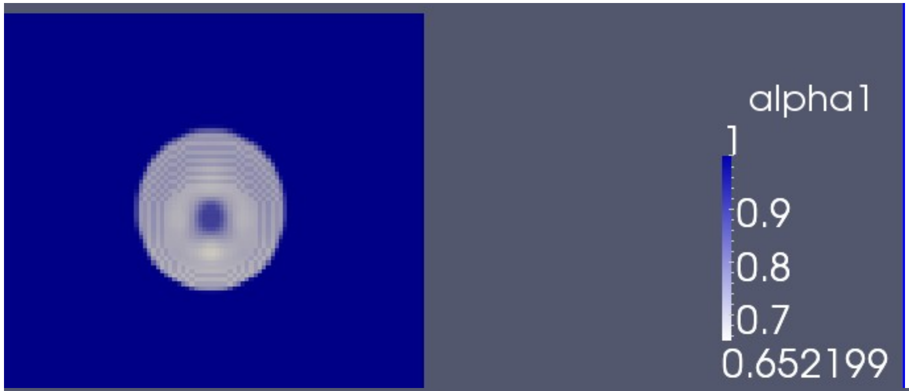
Предположим два следующих гипотетических случая:

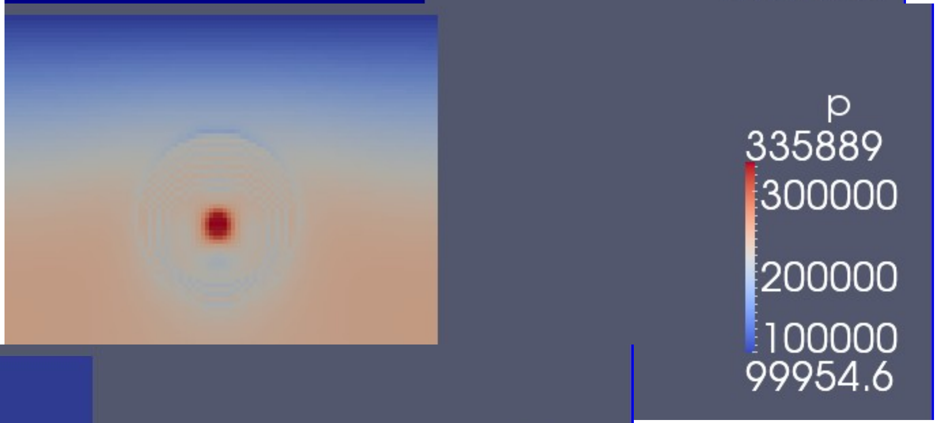
1) Объем заполнен водой, в центре которого - «горячее пятно»

2) Объем заполнен паром, в центре которого - «холодное пятно»

Тестирование: Объёмное испарение и конденсация, результаты

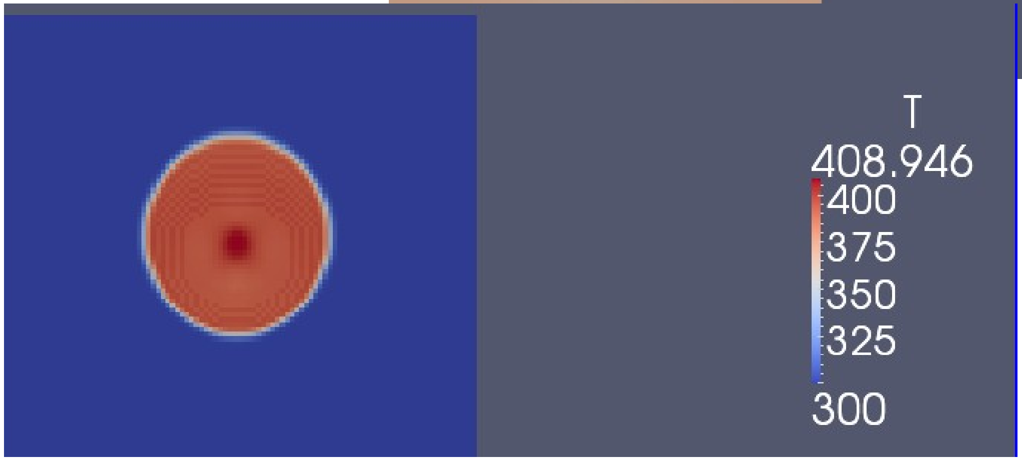




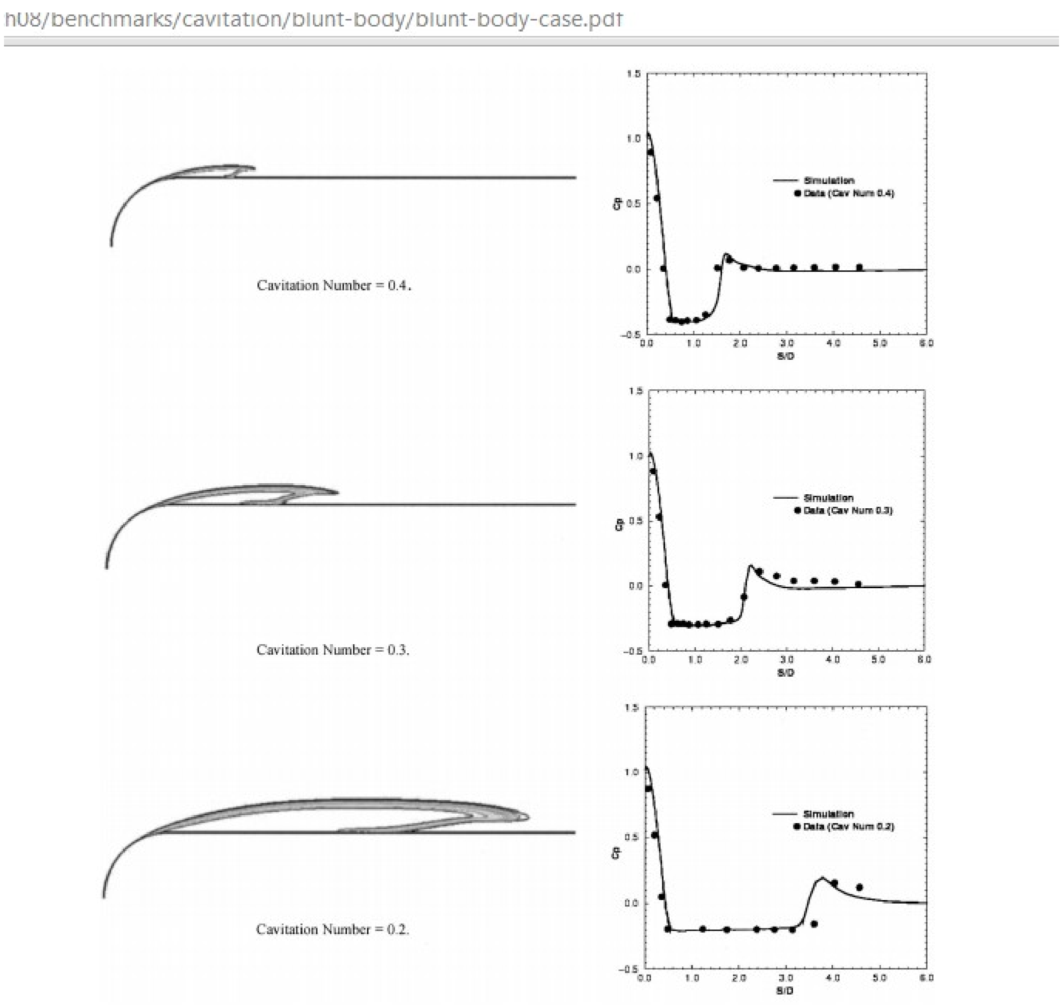


Начальное распределение T

Поля объемного содержания жидкой фазы, давления, температуры

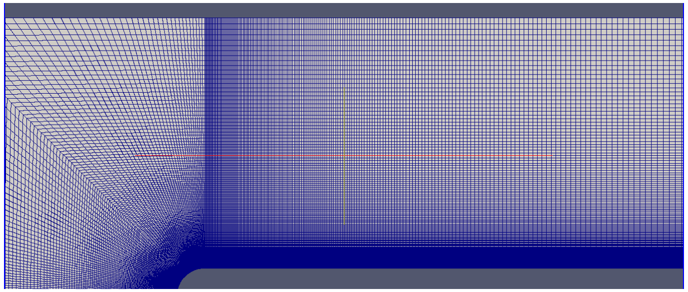


Тестирование: обтекание цилиндра со сферическим наконечником

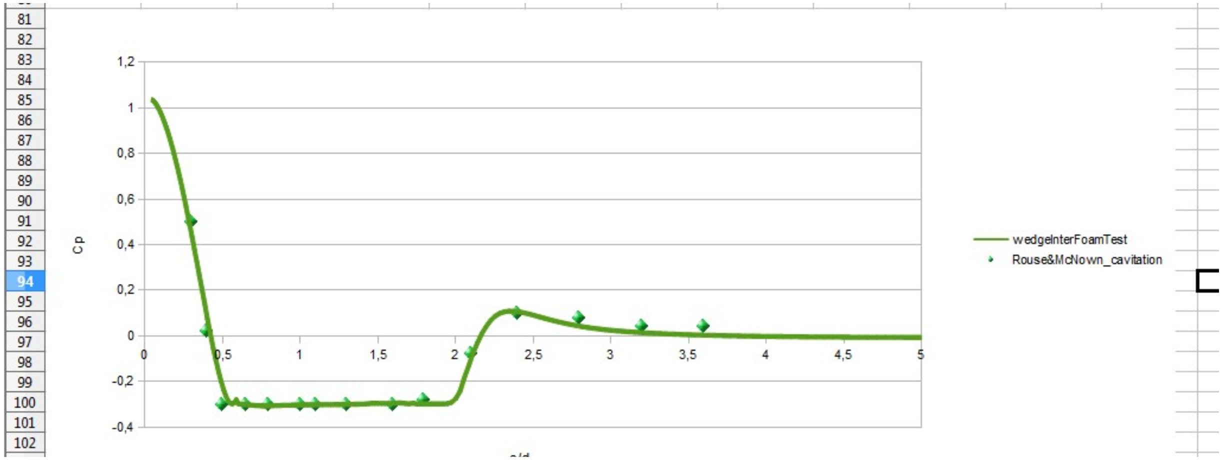


Рассматривается продольное обтекание цилиндра со сфери-ческим наконечником, при котором давление локально падает до давления насыщения что приводит к вскипанию жидкости — кавитации.

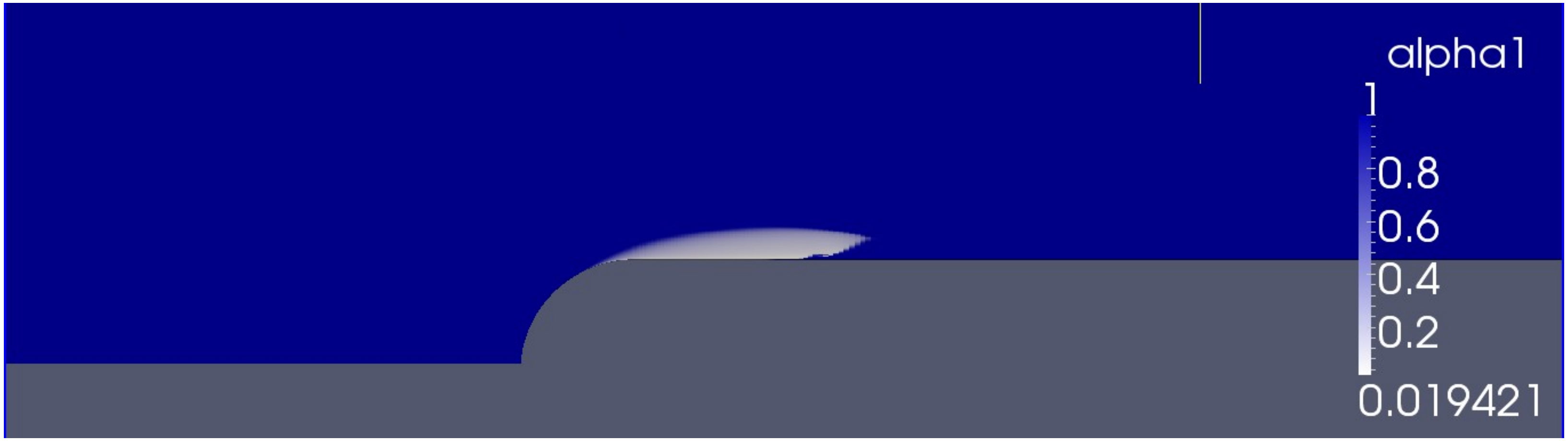
Моделирование проводилось для двух случаев: с учетом переноса тепла между фазами и без



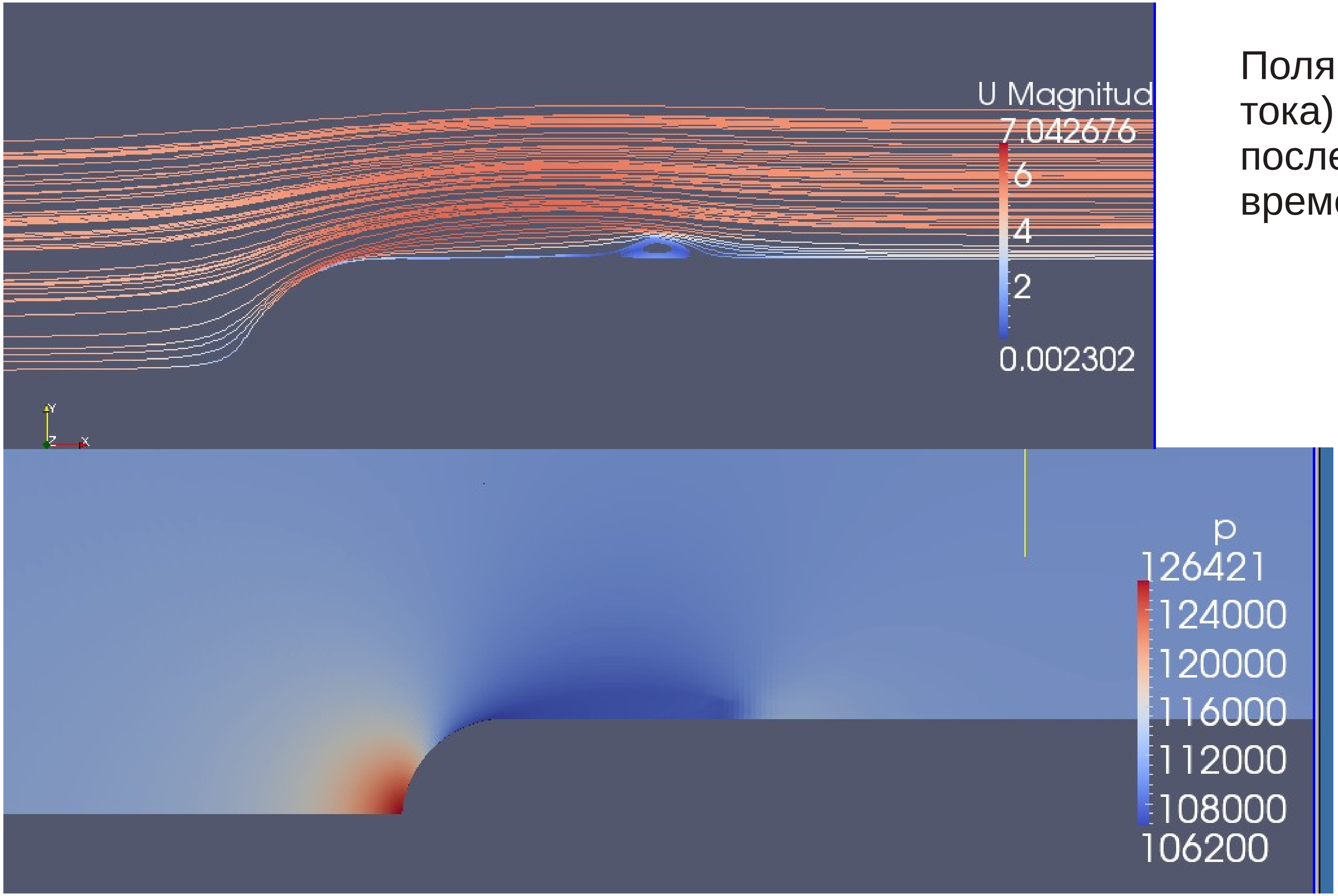
Тестирование: обтекание цилиндра результаты (1)



Сравнение с экспери-ментом показывает удовлетворительное совпадение



Тестирование: обтекание цилиндра результаты (2)



Поля скорости (линии тока) и давления для последнего момента времени

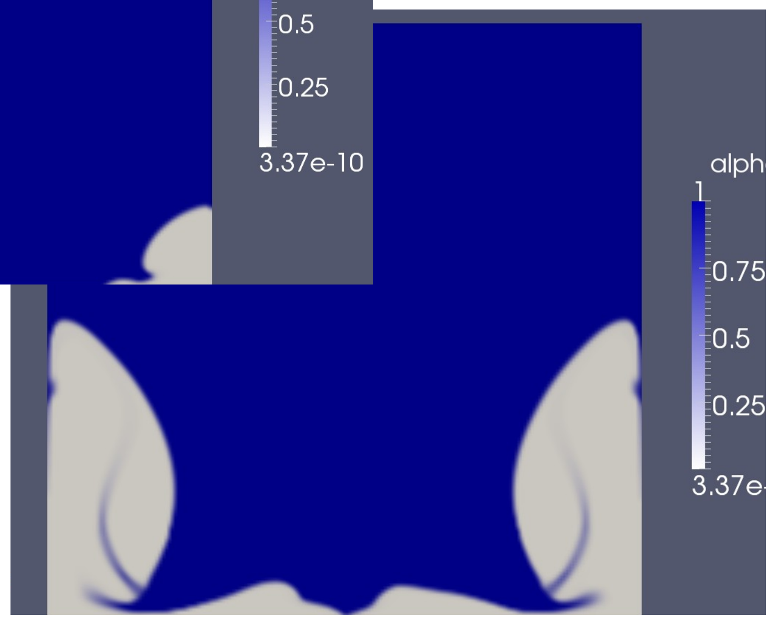
Тестирование: каверна с подогревом

Рассмотрим следующую задачу:

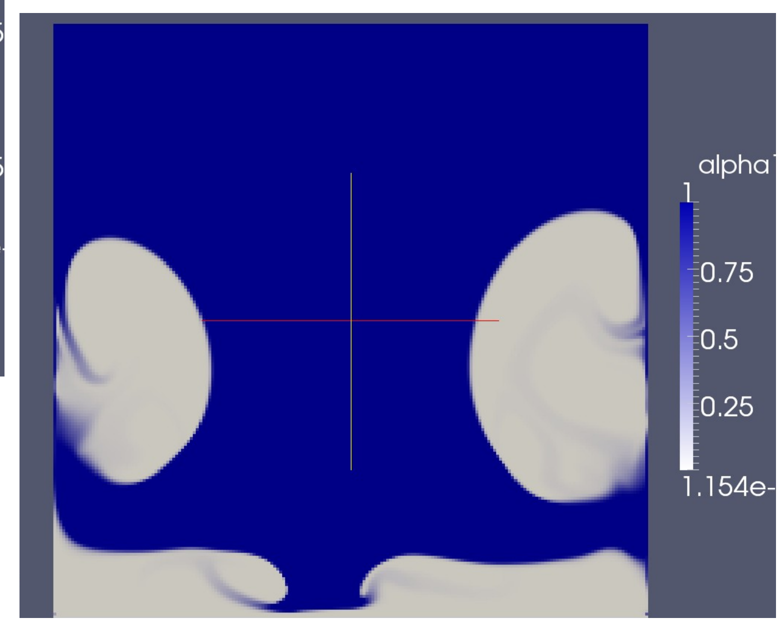
квадратная двумерная область заполнена в начальный момент времени водой с температурой 20^0С. Нижняя стенка области имеет температуру 120^0С, боковые — 20^0С. На верхней плоскости задается давление — 20кПа.

По мере развития процесса жидкость у стенки начинает нагреваться и затем, дойдя до температуры насыщения — начинается кипение.

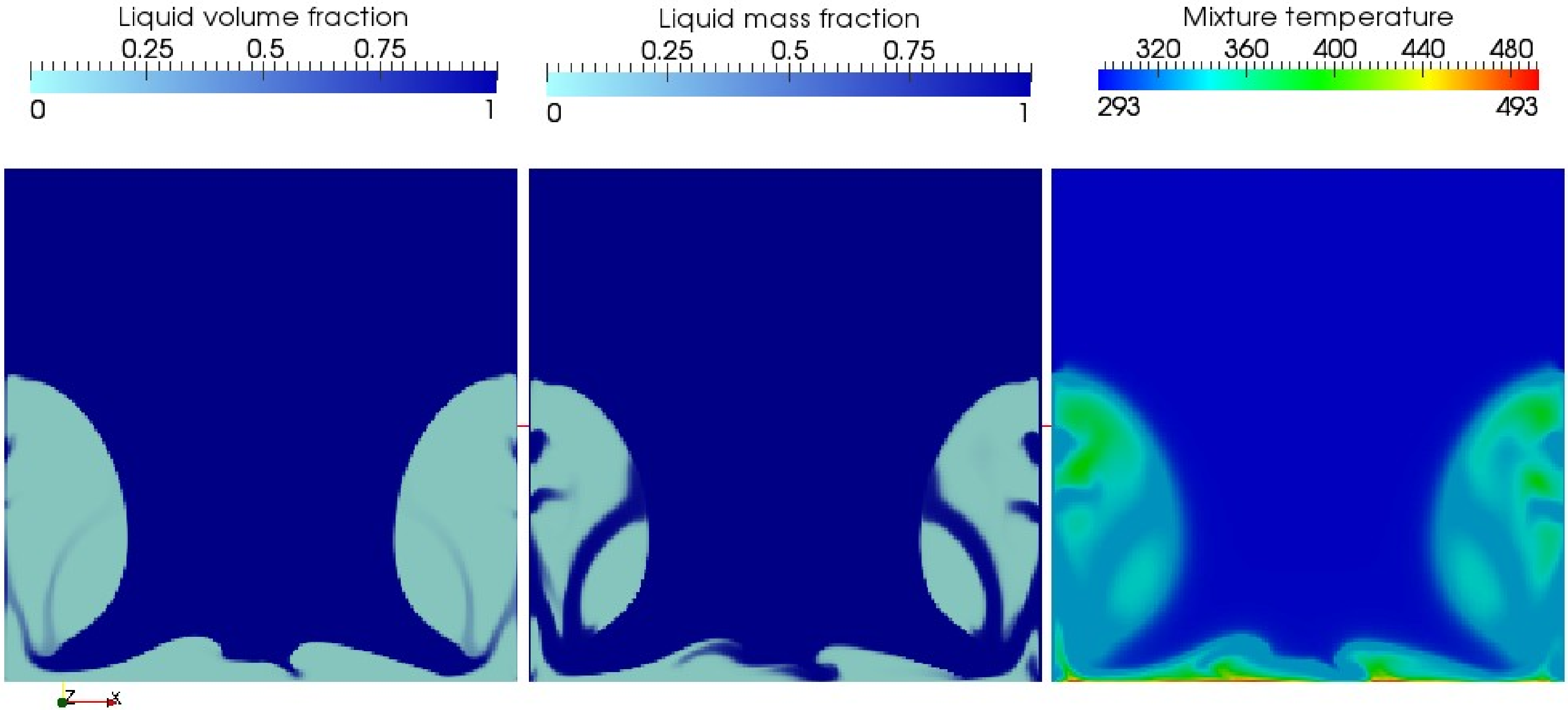
Тестирование: каверна с подогревом, результаты



Граница двухфазной смеси — на температуре насыщения, поэтому с внешней стороны - конденсация, с внутренней - испарение



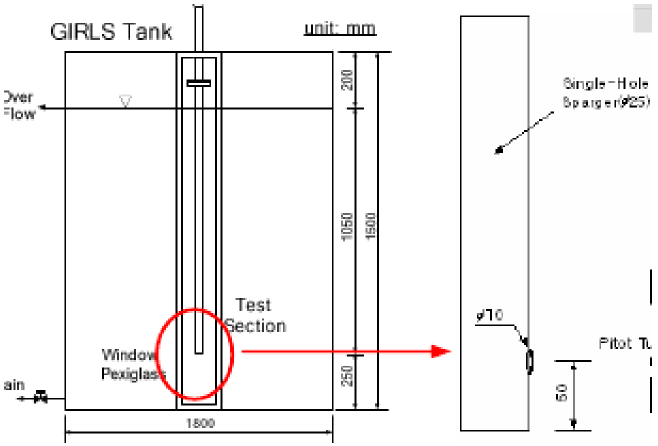
Тестирование:
каверна с подогревом, фильм



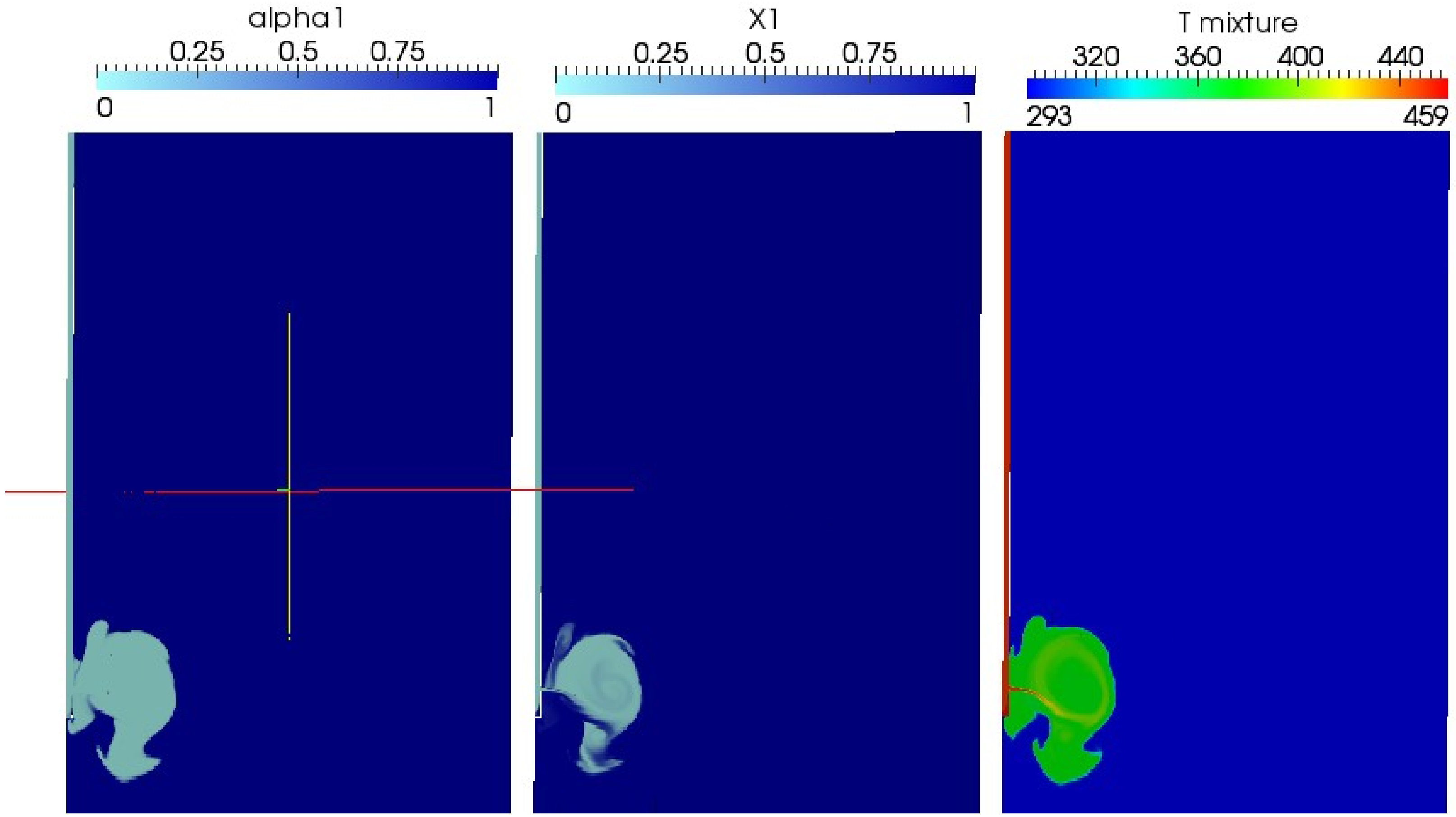
Тестирование: инжекция пара в водяной объём

Рассматривается процесс впрыска острого пара с температурой 177^{0}C и давлением 1МПа в объём воды с температурой 20^{0}C и давлением 0.1МПа.

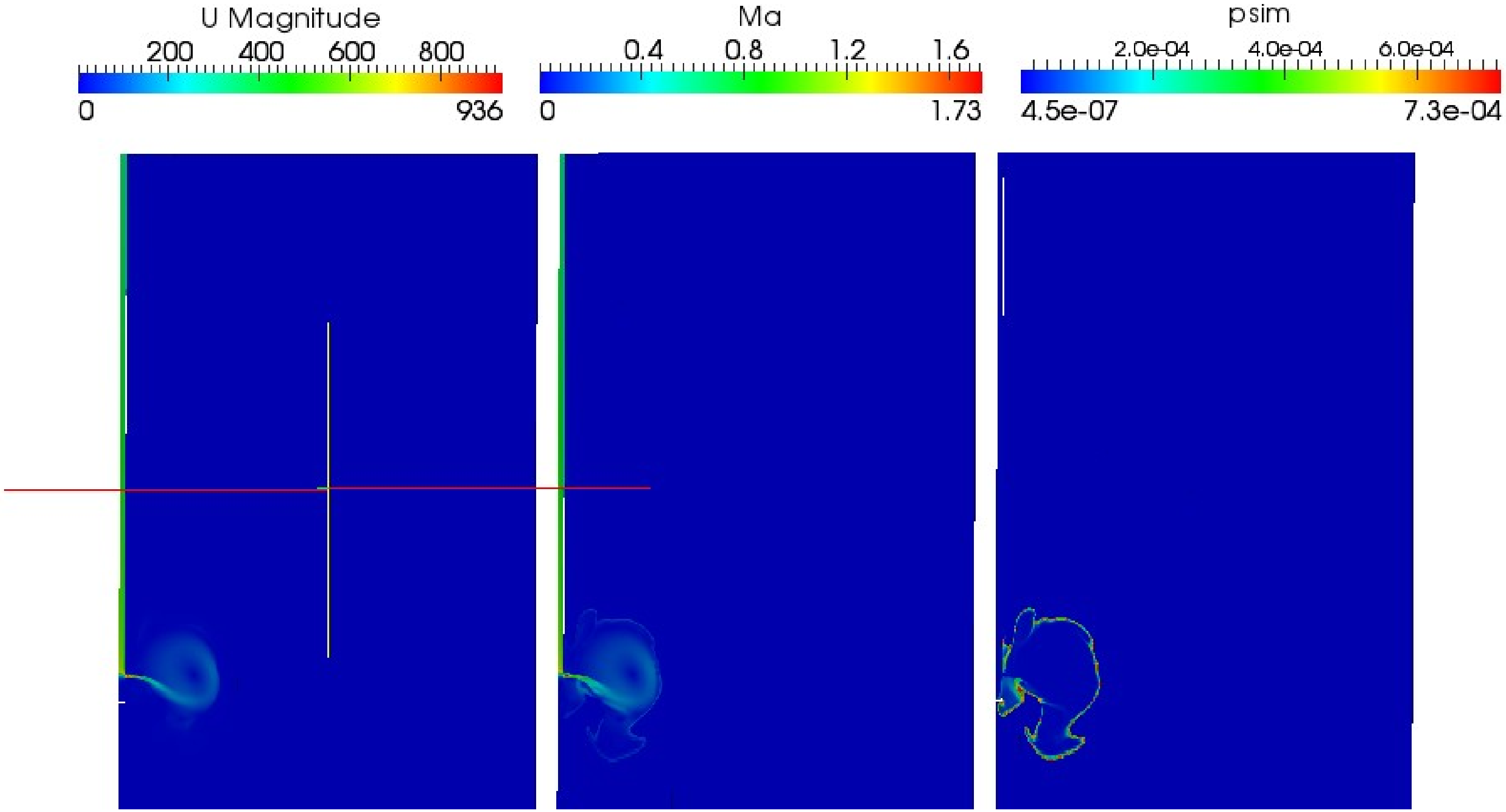
В процессе дросселирования пара реализуется сверх-звуковое истечение, приводящее к запиранию потока



Результаты — поля объемной доли, массовой доли и температуры



Результаты — поля скорости, числа Ma и сжимаемости смеси



Учет движения расчетной области

Для учета движения расчетной области, в OpenFOAM вводится скорость движения сеточных линий:

$$\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \left(\boldsymbol{U} - \boldsymbol{U}_S \right) \kappa \right) - \nabla \cdot \left(D_\kappa \nabla \kappa \right) = 0$$

Процесс интегрирования следующий:

– по абсолютным потокам вычислить Co

– переместить сетку (и получить Us)

– перейти к относительным потокам, прогноз U

– решить p, перейти к относительным потокам

– решить остальные уравнения

В уравнении транспорта объемной доли воды дивергенция потока сбалансирована давлением

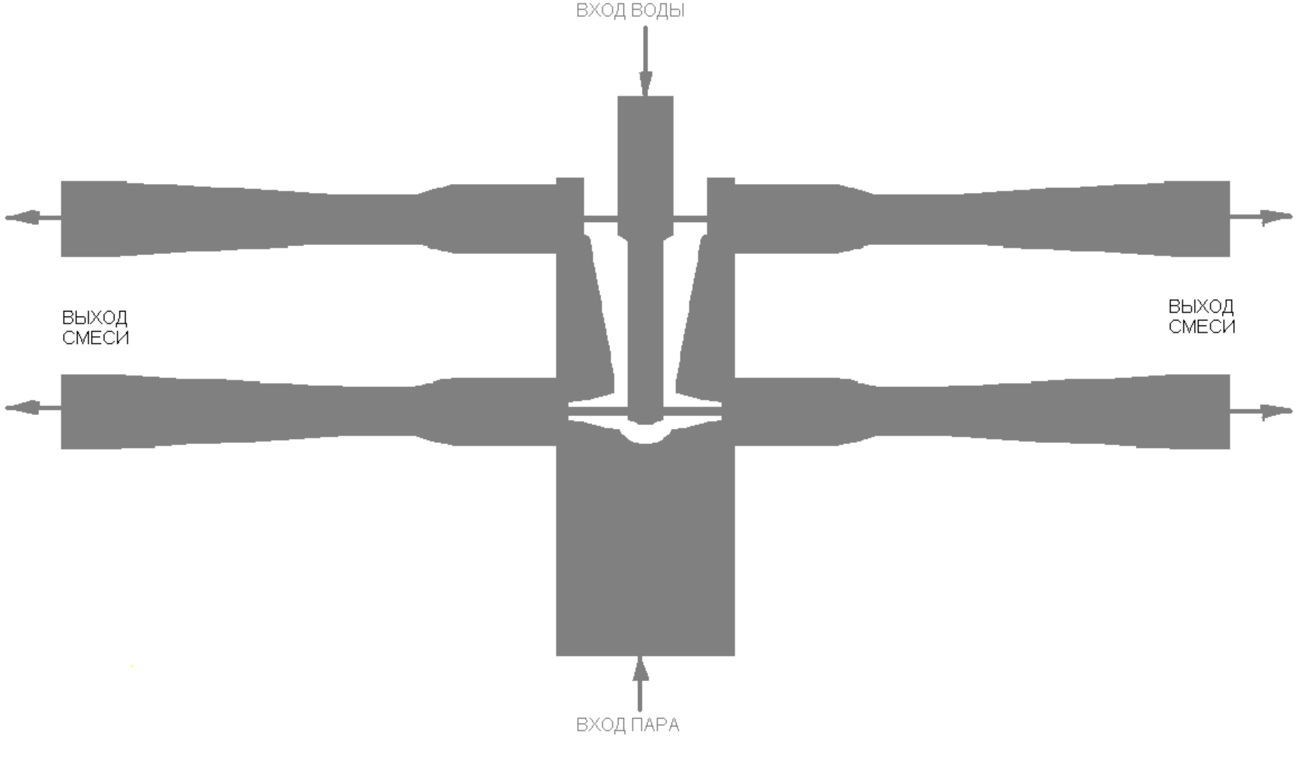
$$\alpha_1 \nabla \cdot \boldsymbol{U} + \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{\psi_2}{\rho_2} - \frac{\psi_1}{\rho_1}\right) \frac{dp}{dt} + \dot{m}_1 \frac{\rho}{\rho_1 \rho_2}$$

```
fvc::makeAbsolute(phi, U);
volScalarField divU(fvc::div(phi));
fvc::makeRelative(phi, U);
```

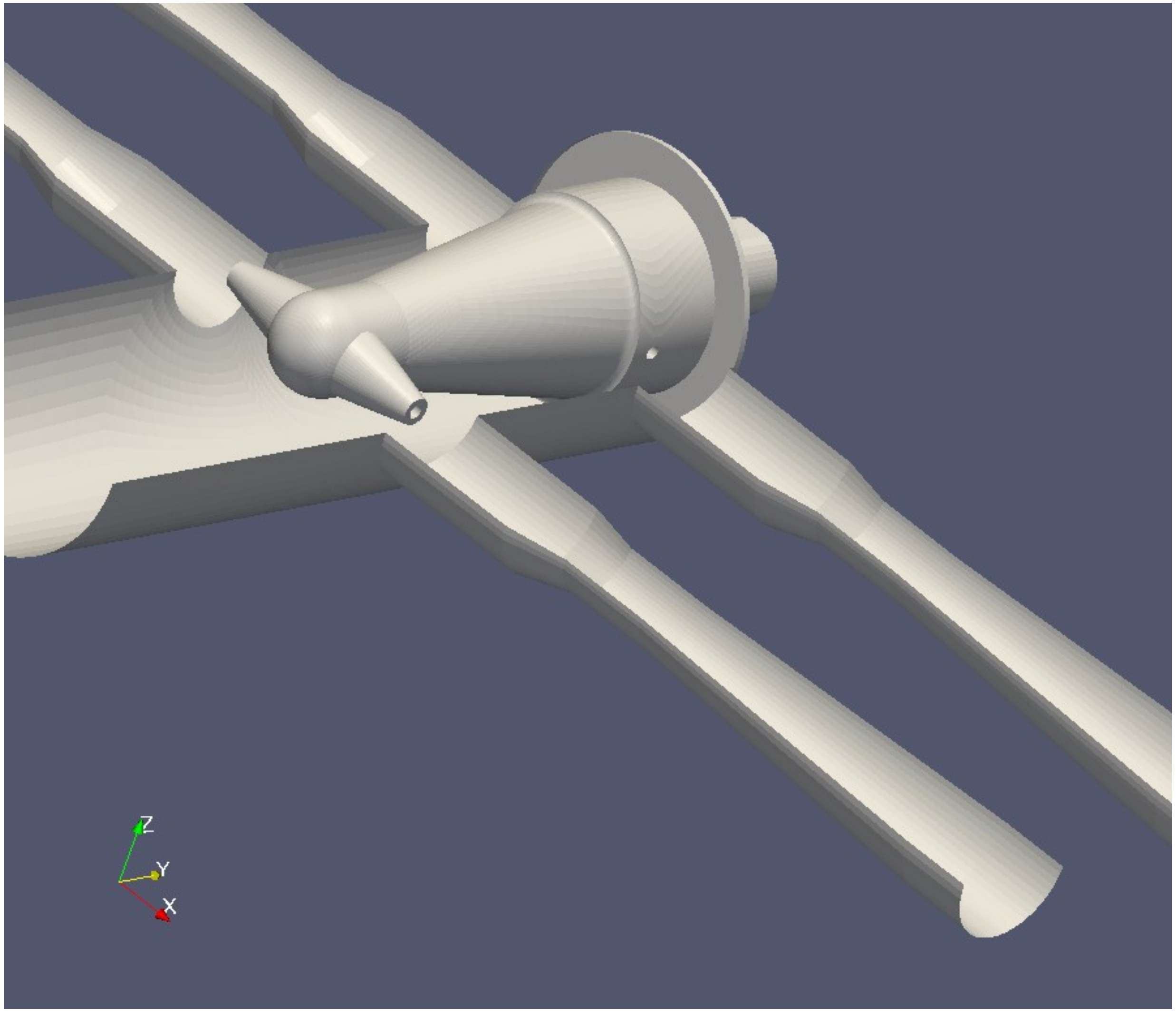
Но для расчета сеточных потоков берется текущее значение, что не соответствует текущей схеме - <u>ЭТО НЕПРАВИЛЬНО?</u>

Сопряжение с FEM-кодом UZOR- постановка задачи

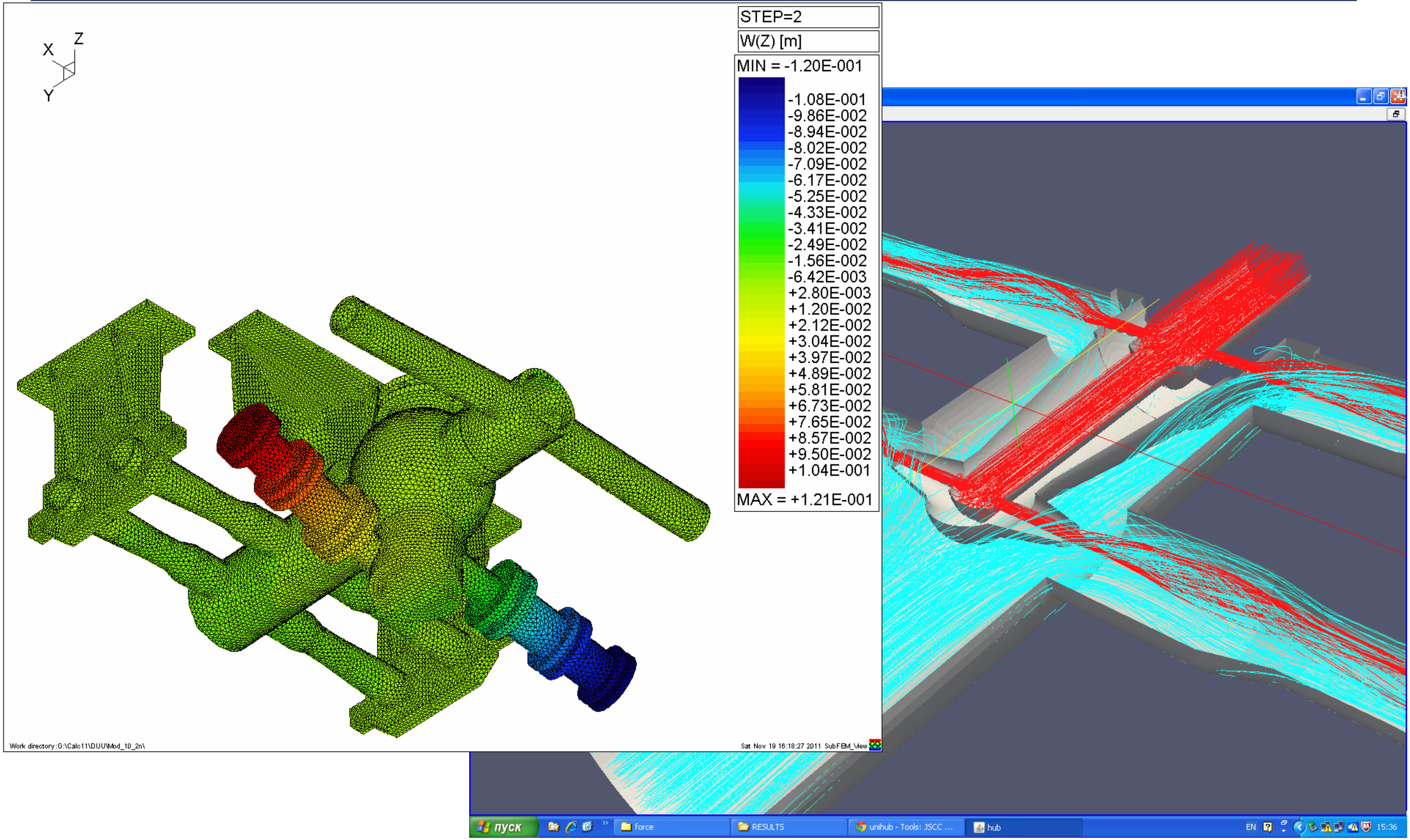
Решается задача «впрыска» воды в поток острого пара и анализа динамики несущих конструкций



Сопряжение с FEM-кодом расчетная область



Сопряжение с FEM-кодом UZOR - результат



Заключение

- Как кипит вода? Как напишешь — так и кипит!
- Разработана и протестирована модель течения двухфазной среды с межфазным тепло-массообменa
- Модель нуждается в дальнейшем интенсивном тестировании
- Требуется разработка неявных методов моделирования околозвуковых течений с использованием объёмных потоков для транспорта
- <u>Основная проблема — разработка гибридной модели движения 2-фазной среды с подсеточным моделированием</u>