

МЕХАНИКА

УДК 519.633, 532.529.6

© Л. Е. Тонков

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ КАПЛИ
ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ ФУНКЦИИ УРОВНЯ ¹**

Выполнено численное моделирование динамики капли вязкой несжимаемой жидкости на основе метода функции уровня для системы уравнений Навье–Стокса. Рассмотрены процессы нелинейных колебаний капли на плоской горизонтальной поверхности, дробления и слияния двух капель при неосевом соударении. Решения получены для фаз с отношением плотностей 10^3 . Проведено сравнение с расчетными и экспериментальными данными других авторов.

Ключевые слова: численное моделирование, метод функции уровня, вязкая жидкость, свободная поверхность, уравнения Навье–Стокса.

Введение

Задачи, связанные с описанием динамики капель вязкой жидкости, во многих практически важных случаях можно свести к рассмотрению двухфазной системы с несмешивающимися фазами. Моделирование такого рода течений приводит к необходимости решения системы уравнений Навье–Стокса для каждой фазы с учетом граничных условий на поверхности раздела и одновременным определением положения этой поверхности. Методам решения задач со свободными границами посвящено большое число публикаций. Значительная часть разработанных численных алгоритмов основана на процедуре явного выделения межфазных границ, когда расчетная сетка в процессе решения задачи постоянно перестраивается в соответствии с изменениями положения и формы поверхности раздела. Однако описание слияния и разделения подобластей, занятых одной фазой (например, дробление струи на отдельные капли), как правило, приводит к существенному усложнению алгоритма.

Значительно более удобным может оказаться применение численных методов, в которых отсутствует необходимость явного выделения границы раздела путем перестроения расчетной сетки, то есть методов сквозного счета. При этом предполагается, что движение каждой фазы подчиняется одним и тем же уравнениям гидродинамики, но параметры среды (давление, плотность, вязкость) претерпевают разрыв на границе раздела фаз.

Пусть область $\Omega \in \mathbb{R}^3$ заполнена двухфазной средой и $\Omega = \Omega_1 \cup \Gamma \cup \Omega_2$. Для определенности будем считать, что в подобласти Ω_1 находится более плотная среда (жидкость), а в Ω_2 — менее плотная (газ); Γ является границей раздела фаз. Для определения Γ можно ввести в рассмотрение скалярную функцию

$$C(t, \mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ 0, & \mathbf{x} \in \Omega_2 \cup \Gamma, \end{cases}$$

имеющую в данном случае смысл объемной концентрации жидкости. Система уравнений динамики сплошной среды дополняется уравнением переноса

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \mathbf{U} \cdot \nabla C,$$

где \mathbf{U} — вектор скорости движения среды. Такой метод получил название VOF-метод (volume of fluid) [1]. Его численная реализация обеспечивает выполнение законов сохранения для каждой фазы, но при этом не дает точного ответа на вопрос о положении поверхности раздела, так как известно лишь, что она содержится в подобласти, где $0 < C < 1$.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 10-01-96039-Урал).

Другой способ состоит в использовании специальной вспомогательной функции — функции уровня $\varphi(t, \mathbf{x})$, $|\varphi| \leq 1$, вид которой может быть в известном смысле произвольным, а сечение $\varphi(t, \mathbf{x}) = 0$ совпадает с границей раздела фаз [2]. Таким образом, мы можем формально более точно определить положение поверхности раздела по сравнению с VOF-методом. При этом с вычислительной точки зрения метод функции уровня полностью аналогичен предыдущему — дополнительно к основной системе требуется решать только одно уравнение переноса для φ .

§ 1. Математическая модель

Рассмотрим систему из двух несмешивающихся несжимаемых вязких сред, движение каждой из которых описывается уравнениями Навье–Стокса и уравнением неразрывности [3]

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U})_i = -\nabla p_i + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_i + \rho_i \mathbf{g}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U}_i = 0, \quad (2)$$

где индекс $i = \{1, 2\}$ — номер среды, ρ — плотность, \mathbf{U} — вектор скорости, p — давление, $\boldsymbol{\tau}_i = \mu_i(\nabla \mathbf{U}_i + \nabla \mathbf{U}_i^T)$ — тензор вязких напряжений, μ — динамическая вязкость, \mathbf{g} — вектор ускорения свободного падения. На границе раздела сред Γ выполняются условия динамического равновесия

$$(\boldsymbol{\tau}_1 - \boldsymbol{\tau}_2)\mathbf{e} = (p_1 - p_2 + \sigma K)\mathbf{e}, \quad (3)$$

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2. \quad (4)$$

где \mathbf{e} — единичный нормальный вектор, внешний по отношению к Ω_1 , K — кривизна поверхности Γ , σ — коэффициент поверхностного натяжения.

Геометрические характеристики поверхности раздела фаз Γ однозначно определяются по функции уровня [2, с. 131]

$$\mathbf{e} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}, \quad K = \nabla \cdot \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}.$$

Силу поверхностного натяжения, действующую в узком переходном слое, который в пределе является бесконечно тонким и совпадает с Γ , можно свести к объемной [4]:

$$\mathbf{F} = -\sigma K \nabla \varphi \delta(\varphi), \quad (5)$$

где $\delta(\varphi)$ — дельта-функция.

Обозначим через $H(\varphi)$ функцию Хевисайда, такую, что $H(\varphi) = 1$ для $\varphi \geq 0$. Вводя в рассмотрение функции плотности $\rho = \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)H(\varphi)$, давления $p = p_2 + (p_1 - p_2)H(\varphi)$ и вязкости $\mu = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)H(\varphi)$, перепишем систему (1), (2) с учетом (3)–(5) следующим образом:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}, \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \quad (7)$$

Система (6), (7) дополняется уравнением переноса функции уровня

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{U} \cdot \nabla \varphi. \quad (8)$$

Следует отметить, что функции ρ , p , μ терпят разрыв на границе раздела фаз Γ и поэтому формально дифференциальное уравнение (6) некорректно. Однако, как будет показано далее, численный метод, применяемый для решения системы (6), (7), удовлетворяет общим интегральным законам сохранения гидродинамики [5], в частности закону сохранения

количества движения. Уравнение (6) является дифференциальной формой закона сохранения импульса, которая полностью эквивалентна интегральной в случае гладких течений. Следуя сложившимся в вычислительной гидродинамике традициям, сохраним в исходной математической постановке дифференциальную запись уравнения (6), подразумевая при этом, что ищется обобщенное в смысле [6, с. 34] решение.

§ 2. Численный метод решения

Для численного интегрирования системы (6)–(8) будем применять метод конечных объемов [7], который по определению обладает свойством консервативности и, кроме того, позволяет естественным образом использовать произвольные неструктурированные расчетные сетки, что делает его универсальным и удобным для расчета течений в областях со сложной геометрией.

Перепишем (6) в виде

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U}^T) + \mathbf{H}, \quad (9)$$

обозначив через \mathbf{H} результирующий вектор объемных сил. Разделим область Ω на непересекающиеся ячейки V_i : $\Omega = \bigcup_i V_i$ и введем сеточные функции $f_i^n = f(t^n, \mathbf{x}_i)$, где $t^n = n\Delta t$, $n = 0, 1, \dots$, а \mathbf{x}_i — геометрический центр V_i . Для краткости под обозначением V_i будем понимать также значение объема i -й ячейки. Проинтегрируем (9) по V_i и с учетом теоремы Остроградского–Гаусса получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_i} \rho \mathbf{U} dV + \oint_{\partial V_i} (\mathbf{n} \rho \mathbf{U}) \mathbf{U} ds - \oint_{\partial V_i} \mathbf{n} \mu \nabla \mathbf{U} ds = \\ = - \oint_{\partial V_i} \mathbf{n} p ds + \oint_{\partial V_i} \mathbf{n} \mu \nabla \mathbf{U}^T dV + \int_{V_i} \mathbf{H} dV. \end{aligned} \quad (10)$$

Для вычисления производной по времени воспользуемся методом Эйлера первого порядка

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_i} \rho \mathbf{U} dV \approx \frac{(\rho \mathbf{U})_i^{n+1} V_i - (\rho \mathbf{U})_i^n V_i}{\Delta t}. \quad (11)$$

Обозначим через N_i множество номеров ячеек сетки, являющихся соседними для V_i , то есть имеющих с ней общие грани. Вычисление диссипативных членов уравнения (9) в предположении ортогональности сетки сведется к простому суммированию

$$\oint_{\partial V_i} \mathbf{n} \mu \nabla \mathbf{U} ds \approx \sum_{j \in N_i} \mu_i \frac{\mathbf{U}_j - \mathbf{U}_i}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|} s_{ij}, \quad (12)$$

где $s_{ij} = s_{ji}$ — площадь общей грани между ячейками i и j . В случае неортогональной сетки для вычисления лапласиана (12) применяется какой-либо способ коррекции градиента, обеспечивающий второй порядок аппроксимации по пространству.

Наиболее существенным в рамках решения данной задачи является вычисление конвективных членов, так как именно конвективный перенос физических величин определяет общую картину течения, а наличие разрывов накладывает дополнительные ограничения на применяемые методы. Запишем конвективные слагаемые уравнений (10) в следующем общем виде:

$$\oint_{\partial V_i} (\mathbf{n} \rho \mathbf{U}) \psi ds \approx \sum_{j \in N_i} Q \psi_{ij}. \quad (13)$$

Данное соотношение определяет конвективный перенос потоком Q некоторой физической величины ψ через грань между ячейками i и j . Для того чтобы воспользоваться выражением (13), необходимо задать какой-либо способ вычисления (реконструкции) потоков Q_{ij} по

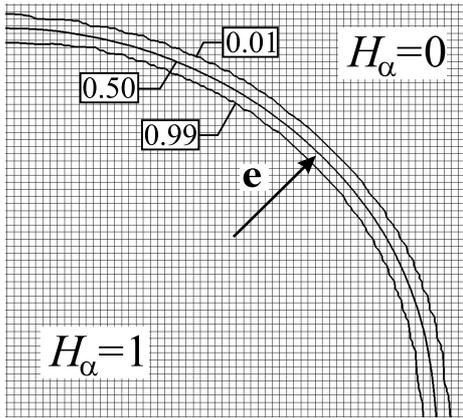


Рис. 1. Фрагмент расчетной сетки ($M = 60$) и изолинии функции $H_\alpha(\varphi)$ для $t = 1$

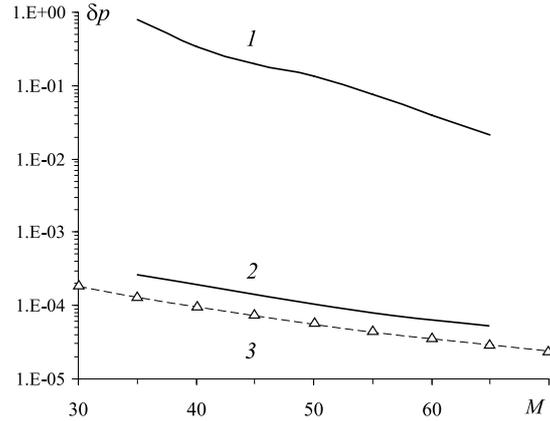


Рис. 2. Зависимость $\delta p(M)$: 1— результаты расчетов [11]; 2— результаты расчетов [12]; 3— расчет по представленной модели

известным значениям Q_i и Q_j . В данной работе для этого применена численная схема MUSCL с ограничителем поток ван Лира [8]. Полностью аналогично решается и уравнение конвективного переноса функции уровня (8).

Подставим теперь (11)–(13) в (10), полагая, что в левую часть входят значения неизвестных на временном слое $n + 1$, в правую — значения со слоя n , а интеграл от объемных сил вычисляется непосредственно по определению. Приводя подобные слагаемые, получим линейную систему алгебраических уравнений, которую будем решать методом сопряженных градиентов с предобуславливанием на основе неполной факторизации Холесского. Найденное таким образом поле скорости далее корректируется при помощи алгоритма PISO [9] для точного удовлетворения уравнению неразрывности (7).

В результате накопления в процессе решения вычислительных ошибок определенного вида (численной диффузии) функция уровня изменяет свой вид, что неизбежно приводит к погрешностям в определении величины $\nabla\varphi$, а значит и к искажению геометрических характеристик поверхности раздела. Для управления влиянием численной диффузии возможно применение искусственного сглаживания разрывных функций на границе раздела фаз совместно с выполнением процедуры реинициализации [2, с. 64], которая заключается в отыскании стационарного решения уравнения $\partial\varphi/\partial t = \text{sign}(\varphi_0)(1 - |\nabla\varphi|)$ с начальным условием $\varphi(0, \mathbf{x}) = \varphi_0(\mathbf{x})$. Все представленные далее результаты получены без выполнения процедуры реинициализации. Для сглаживания разрывных функций, аналогично [10], функция Хевисайда $H(\varphi)$ заменялась приближенной

$$H_\alpha(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi < -\alpha, \\ \frac{\varphi + \alpha}{2\alpha} + \frac{\sin(\pi\varphi/\alpha)}{2\pi}, & |\varphi| \leq \alpha, \\ 1, & \varphi > \alpha \end{cases}$$

с параметром $\alpha = 3\sqrt[3]{\min V_i}/4$.

§ 3. Результаты

Все результаты получены методом конечных объемов на равномерной гексаэдральной сетке. Исходная область в каждом из рассмотренных случаев представляет собой прямоугольный параллелепипед $\Omega = ((x, y, z), -aR \leq x \leq aR, -bR \leq y \leq bR, -cR \leq z \leq cR)$, R — радиус капли. Для сравнительной оценки точности численной модели рассмотрена тестовая задача определения избыточного давления внутри покоящейся капли жидкости при отсутствии силы

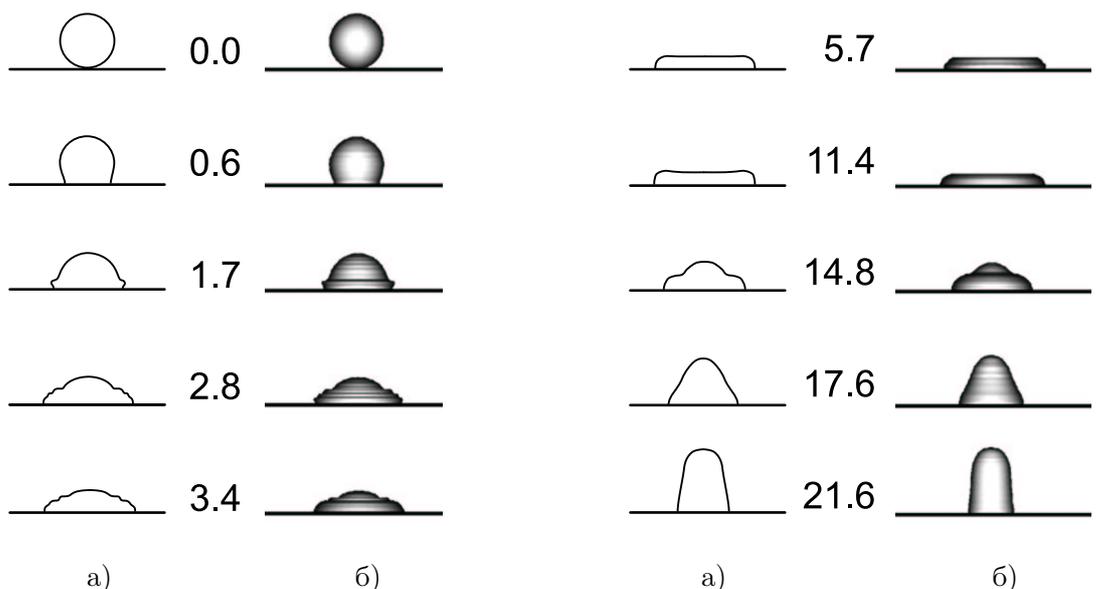


Рис. 3. Колебания капли на горизонтальной твердой поверхности (время указано в мс): *а* — расчет по представленной модели, *б* — результаты расчетов [13]

тяжести ($\mathbf{g} = 0$), со следующими параметрами: $\sigma = 0.073$ Н/м, $\rho_1/\rho_2 = 1000$, $\mu_1 = 1.0 \cdot 10^{-6}$, $\mu_2 = 1.5 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $R = 0.002$ м, $a = b = c = 2$. В момент времени $t = 0$ центр капли находится в начале координат, $p_1 = p_2 = 0$, $\mathbf{U} = 0$. Следуя [12], построим зависимость относительной погрешности определения избыточного давления

$$\delta p = \sqrt{\sum_i (H_\alpha^2)_i \frac{(p_i - p_*)^2}{p_*^2}}, \quad p_* = 2\sigma/R$$

от параметра $M = R/h$, где h — в данном случае длина ребра ячейки сетки. На рис. 1 показан фрагмент сечения расчетной области при $M = 60$ и изолинии функции $H_\alpha(\varphi)$ на момент времени $t = 1$. Расстояние между изолиниями, соответствующими значениям 0.99 и 0.01, характеризуют влияние численной диссипации при решении уравнения (8). На рис. 2 приведено изменение погрешности δp при $t = 0.05$ в зависимости от параметра M . Представленный метод обеспечивает меньший уровень погрешности, чем метод [12] (рис. 2, кривая 2) даже для $M = 30$, и показывает значительно лучшую сходимость, чем модель [11] (рис. 2, кривая 1).

Для оценки адекватности представленного численного метода решим задачу о колебаниях капли воды [13] на твердой плоской горизонтальной поверхности в поле силы тяжести, полагая угол смачивания постоянным и равным $\pi/2$. В начальный момент времени сферическая капля радиусом $R = 1.8$ мм, уравновешенная избыточным давлением, касается плоскости в одной точке $\mathbf{x}_0 = (0, -bR, 0)$ и имеет скорость $\mathbf{v} = (0, -0.77, 0)$ м/с. Свободный объем, не занятый каплей, заполнен воздухом при нормальных температуре и давлении. Размеры расчетной области выберем такими же, как и в предыдущей задаче; $M = 50$. Рассчитанная методом функции уровня форма капли в различные моменты времени изображена на рис. 3, (а) как сечение $\varphi(t, x, y, 0) = 0$. При растекании капли ($t = 0, \dots, 5.7$) наблюдается хорошее совпадение полученных результатов с данными расчета [13]. Заметные различия формы в стадии обратного движения ($t = 17.6, 21.6$) объясняются, прежде всего, реализацией граничных условий на линии контакта фаз. В работе [13] применен более аккуратный способ учета влияния угла смачивания.

Рассматриваемый метод функции уровня не только позволяет моделировать движение и изменение формы границы раздела, но и естественным способом учитывает слияние и разделение подобластей, заполненных одной и той же средой, например, при слиянии и дроблении

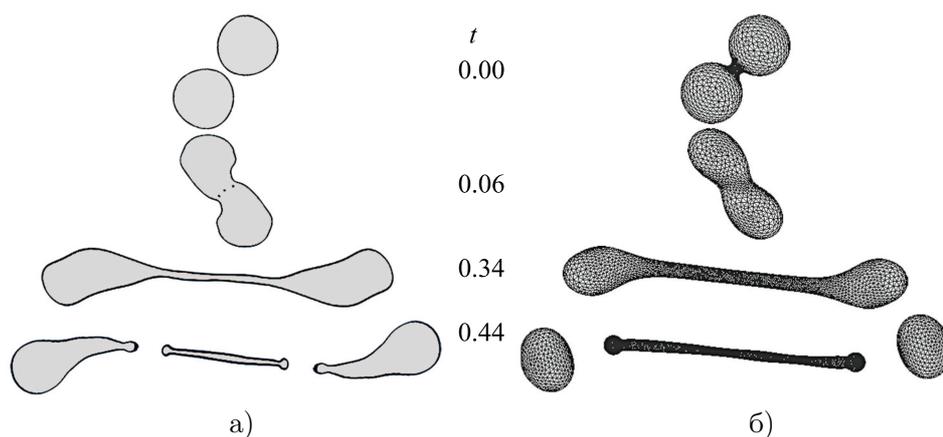


Рис. 4. Динамика неосевого соударения капель (время указано в с): *а* — расчет по представленной модели, *б* — результаты численного моделирования [14]

капель. Рассмотрим в качестве примера задачу о неосевом соударении двух одинаковых капель вязкой жидкости [14]. Параметры расчетной области: $a = 8$, $b = 5$, $c = 4$, $M = 30$. На рис. 4 показаны основные фазы взаимодействия. Сначала происходит слияние капель, двигающихся навстречу с равными по модулю скоростями, в одну, которая затем в силу закона сохранения импульса приобретает вращательное движение вокруг центра масс ($t = 0.06$ с). Можно заметить, что центр масс рассматриваемой системы, являющийся также центром симметрии, покоится относительно наблюдателя (суммарный импульс равен нулю). Затем под влиянием сил инерции и поверхностного натяжения образуется характерный «перешеек» ($t = 0.34$ с), который в дальнейшем отделяется от основной массы жидкости ($t = 0.44$ с). Различия представленных результатов с расчетом [14] в данном примере во многом объясняются достаточно грубой сеткой, выбранной из соображений уменьшения времени расчета. По-видимому, значение параметра $M = 30$ является минимально допустимым, обеспечивающим качественное согласование результатов моделирования и физической картины процесса.

Метод функции уровня в сочетании с конечно-объемной численной схемой интегрирования системы уравнений гидродинамики позволяет моделировать сложные течения многофазных сред с изменяющейся топологией поверхностей раздела с достаточной для многих практических приложений точностью без привлечения дополнительных процедур уточнения положения свободных границ. При этом обеспечивается соблюдение законов сохранения динамики сплошных сред, в том числе, для течений, содержащих разрывы гидродинамических величин.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hirt C. W., Nichols B. D. Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // J. Comp. Physics. — 1981. — Vol. 39, №1. — P. 201–225.
2. Osher S. J., Fedkiw R. P. Level Set methods and dynamic implicit surfaces. — Springer, 2003. — 273 p.
3. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. — М.: Наука, 1987. — 840 с.
4. Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C. A. A continuum method for modelling surface tension // J. Comp. Physics. — 1992. — Vol. 100, №2. — P. 335–354.
5. Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot E. N. Transport phenomena. — John Wiley & Sons, 2002. — 913 p.
6. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2001. — 608 с.
7. Ильин В. П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. — Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2002. — 345 с.
8. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme // J. Comp. Physics. — 1977. — Vol. 32, №4. — P. 361–370.
9. Issa R. I. Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting // J. Comp. Physics. — 1986. — Vol. 62, №1. — P. 40–65.

10. Liang R., Satofuka N. Numerical study on three-dimensional unsteady motion of droplets using level set method // Computational Fluid Dynamics 98: Proc. 4th ECCOMAS conference: John Wiley & Sons, Vol.2, 1998. — P. 421–425.
11. Francois M., Shyy W. Computation of drop dynamics with the immerse boundary method. Part 1: numerical algorithm and buoyancy-induced effect // Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals. — 2003. — Vol.44, №2. — P. 101–118.
12. Майков И. Л., Директор Л. Б. Численная модель динамики капли вязкой жидкости // Вычислительные методы и программирование. — 2009. — Т. 10. — С. 148–157.
13. Francois M., Shyy W. Computation of drop dynamics with the immerse boundary method. Part 1: drop impact and heat transfer // Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals. — 2003. — Vol.44, №2. — P. 119–143.
14. Dai M., Schmidt D. P. Numerical simulation of head-on droplet collision: Effect of viscosity on maximum deformation // Phys. Fluids — 2005. — Vol. 17, №4. — P. 041701.1–041701.4.

Поступила в редакцию 01.03.10

L. E. Tonkov

Computation of viscous drop dynamics with level set method

In this paper, the numerical simulation of viscous drop dynamics was studied by level set method for the incompressible Navier–Stokes equations. Solution procedure employs finite volume method on unstructured hexahedral grid elements. Some numerical results are presented and compared with other simulations.

Keywords: numerical simulations, level set method, viscous liquid, free surface tension, Navier-Stokes equations.

Mathematical Subject Classifications: 65M08, 76D05, 76T10

Тонков Леонид Евгеньевич, к. ф.-м. н., старший научный сотрудник, Институт прикладной механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34. E-mail: tnk@udman.ru