

Моделирование высокой концентрации газовой фазы в жидкости методом SPH

Давыдов М. Н.

Аннотация

Рассматриваются различные подходы в методе гидродинамических сглаженных частиц (SPH) для вычисления объемной концентрации газовой фазы в жидкости при разлете или разрушении последней. Предложена схема вычисления концентрации газовой фазы, состоящая из трех этапов. При малых концентрациях расчет проводится по полной модели, включающей в себя динамику концентрации, при высоких по упрощенной модели, когда изменение концентрации определяется динамикой жидкости. При достижении предельной концентрации, соответствующей отдельной частице без соседей, фиксируется скорость роста концентрации и дальнейшее развитие процесса происходит по инерции.

Тема работы: Основной темой проводимых работ является моделирование разрушения жидких сред при динамической разгрузке. В качестве численного метода выбран метод гидродинамических сглаженных частиц (Smoothed Particle Hydrodynamics — SPH). Программа для расчётов на C++ и CUDA написана мною, реализован параллельный вариант с использованием графических ускорителей.

Состав коллектива:

Давыдов Максим Николаевич, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института гидродинамики СО РАН (лаборатория многофазных сред и кумуляции) и старший преподаватель НГУ (ММФ, кафедра теоретической механики).

Стояновская Ольга Петровна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института гидродинамики СО РАН (лаборатория вычислительной гидродинамики).

Эффект от использования кластера в достижении целей работы:

Ускорение вычислений за счёт использования графических ускорителей и возможность запусков расчётов выполнять другую работу. Кластер НГУ используется в работе по грантам РФФИ 19-08-01010 (рук. Давыдов М.Н., срок гранта 2019–2021) и РНФ 19-71-10026 (рук. Стояновская О.П., срок гранта 2019–2021).

Перечень публикаций:

1. Davydov, M. N. Dynamics of gas phase concentration in SPH // Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing, 2019, 1359, 012082
2. Chernov A. A., Pil'nik A. A., Davydov M. N. Peculiarities of gas bubble growth in magmatic melt under the condition of rapid decompression // Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing, 2019, 1382, 012107
3. Chernov A., Pil'nik A., Davydov M., Ermanyuk E., Pakhomov M. Gas nucleus growth in high-viscosity liquid under strongly non-equilibrium conditions // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 123, 1101–1108

1 SHP метод

SPH-метод (метод сглаженных гидродинамических частиц) [1] относится к чисто лагранжевым методам и позволяет провести численное исследование течения жидкости в сильно деформирующейся области, в частности при разлете или разрушении среды. В случае разрежения SPH частицы разлетаются и в жидкости появляются пустые области, которые в реальности заполнены воздухом или парами жидкости [2].

При моделировании разлета жидкости SPH методом можно использовать различные подходы. В однофазной модели распространенное уравнение состояния жидкости в данном случае выглядит следующим образом:

$$p = \begin{cases} B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right), & \rho \geq \rho_0 \\ 0, & \rho < \rho_0 \end{cases}$$

Более корректным подходом является учет газовой фазы. Что можно сделать, полагая что разрежение мгновенно заполняется газом. В этом случае динамика концентрации газовой фазы K полностью определяется динамикой жидкости. Уравнение состояния двухфазной среды модернизируется следующим образом:

$$p = B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0(1-K)} \right)^\gamma - 1 \right), \quad K = \begin{cases} 1 - \rho/\rho_0, & \rho < \rho_0 \\ 0, & \rho \geq \rho_0 \end{cases}. \quad (1)$$

В подобном подходе отсутствует собственно динамика газовой фазы, которая может играть большую роль при декомпрессии среды, или иметь свои особенности, связанные с конкретными условиями. В более сложном случае динамика газовой фазы определяется кроме динамики жидкости собственными законами, которые могут включать в себя диффузию, дегазацию, химические реакции и тому подобное. В этих случаях, естественно, необходимо использовать многофазные модели.

В качестве примера можно привести процесс вулканического извержения, в котором в первоначально сжатой газонасыщенной магме происходит дегазация, образуются и растут пузырьки, но их рост существенно зависит от вязкости [3]. Возможна ситуация при которой рост пузырьков практически прекращается, несмотря на продолжающееся разрушение среды. Следовательно в этом случае необходимо отдельно учитывать динамику газовой фазы.

Таким образом получается что в SPH методе имеется два механизма кавитации, первый связан с разрежением частиц, а второй с собственными физическими законами.

2 Постановка задачи

Рассмотрим модельную задачу о декомпрессии жидкого слоя в одномерной постановке. Жидкий слой длины $L = 5$ см находится при повышенном давлении $p = 150$ атм, в жидкости имеются пузырьки с воздухом при том же давлении с начальным радиусом $R_0 = 5$ мкм. В момент времени $t = 0$ правая граница становится свободной и давление на границе равно атмосферному $p_0 = 1$ атм.

Для описания происходящих процессов использовалась известная модель Иорданского–Когарко–ван Вингаардена (ИКВ) [4], состоящая из уравнений газовой динамики, которые в общепринятых обозначениях имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{dv}{dx} &= 0, \\ \frac{dv}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

уравнения Рэлея для динамики одиночного пузырька:

$$R \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{\partial R}{\partial t} \right)^2 = \rho_l^{-1} (p_g - p), \quad (3)$$

уравнения Тэта для описания сжимаемости жидкой фазы:

$$p = p_0 + \frac{\rho_0 c_0^2}{n} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0(1-K)} \right)^n - 1 \right] \quad (4)$$

и следующих соотношений:

$$\rho = \rho_l(1-K), \quad K = \frac{K_0 \rho}{\rho_l(1-K_0)} \left(\frac{R}{R_0} \right)^3, \quad p_g = p_0 \left(\frac{R}{R_0} \right)^{3\gamma}.$$

Здесь K — процентная концентрация пузырьков, R — их средний радиус, ρ_l — плотность жидкой фазы, p_g — давление в пузырьках, p — давление в среде, ρ — средняя плотность среды, c_0 — скорость звука в жидкости, p_0 и K_0 — начальное давление и концентрация.

В SPH-методе с каждой частицей связано некоторое количество моделируемой среды, будем полагать в частице также имеется некоторое количество пузырьков газа с радиусом R [5]. Динамика газовой фазы при малых концентрациях, когда пузырьки можно считать сферическими, может быть описана уравнением Рэлея (3). При больших концентрациях (в нашем случае при $K > 0.2$) будем полагать что давления в газовой и жидкой фазах выровнялись и использовать соотношения (1).

При таком подходе параметры, связанные с газовой фазой могут быть вычислены разными способами. Во-первых, в соответствии с используемой моделью динамики газовой фазы, а во вторых значение любой функции, заданной в SPH частицах, вычисляется в соответствии с инерполяционной формулой метода:

$$f(r) = \int f(r') W(r-r', h) dr' \quad (5)$$

где W — сглаживающее ядро, h — ширина ядра.

В работе, на модельной задаче о декомпрессии жидкости с микропузырьками газа, рассматриваются оба данных подхода.

3 Результаты расчетов

В начальный момент времени правая граница жидкости, находящейся при высоком давлении, становится свободной и по жидкости распространяется волна декомпрессии. На рисунке 1 показано распределение давления в среде и газовой фазы для момента времени 10 мс, за которое волна распространилась в слое на ≈ 1.5 см. Колебания пузырьков за фронтом волны вокруг нового положения равновесия приводят к пульсациям давления, хорошо заметным на графиках. На свободной границе жидкость приобретает скорость и начинается разлет среды, что видно по объемной концентрации (рис. 2), в узком слое в разных частицах параметры сильно отличаются.

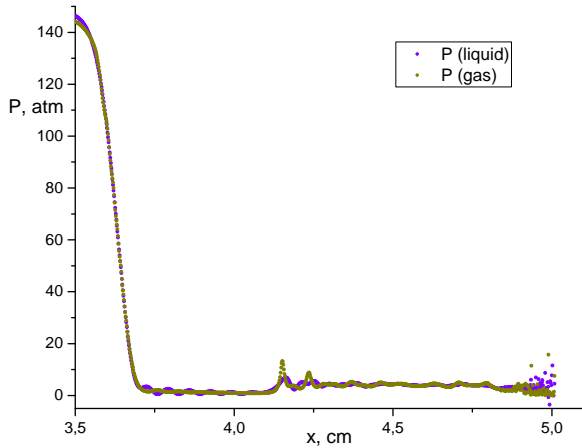


Рис. 1: Pressure of liquid and gas on $t = 10$ ms.

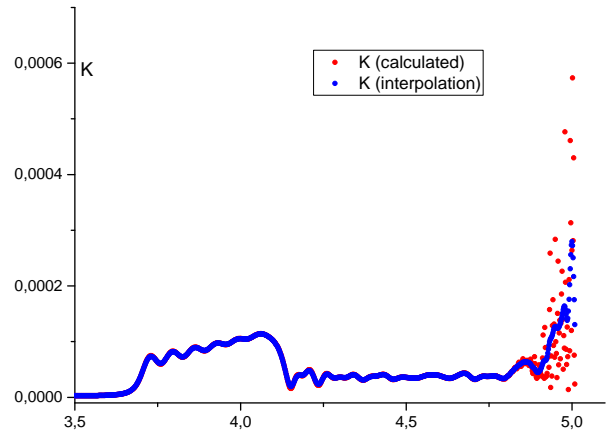


Рис. 2: Concentration of gas phase on $t = 10$ ms

Важно отметить что если во всей остальной области значение концентрации газовой фазы в частицах рассчитанной по модели ИКВ не отличается от интерполированного значения с учетом соседних частиц (5), то в области разлета это не так. Для некоторых случаев разница может оказаться важной, скажем при определении максимального значения концентрации в области. Хорошо видно что подобные значения необходимо искать по частицам без интерполяции.

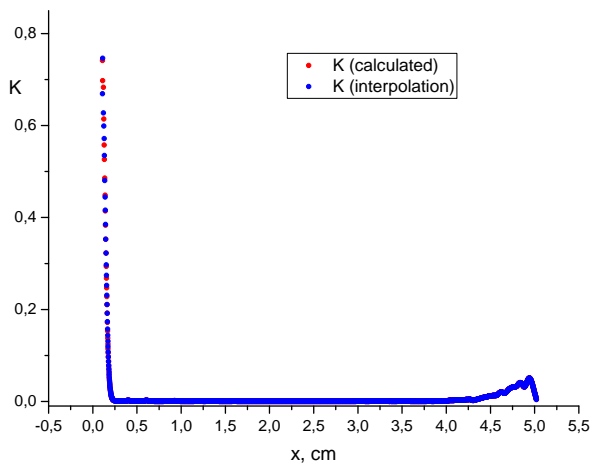


Рис. 3: Concentration of gas phase on $t = 100$ ms.

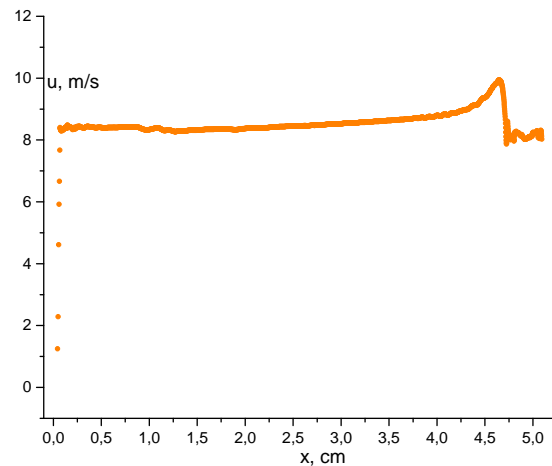


Рис. 4: Velocity on $t = 100$ ms.

После прохождения волны декомпрессии по всей области жидкий слой приобретает скорость и весь, практически как единое целое, движется вправо. Это следует из распределения массовой скорости в слое,

показанном на рисунке 4. На левой границе также наблюдается разрежение, поскольку граница, естественно, остается на месте. Распределение объемной концентрации к моменту времени 100 мс показано на рисунке 3. Также хорошо видно что интерполяционные значения концентрации отличаются от значений в частицах.

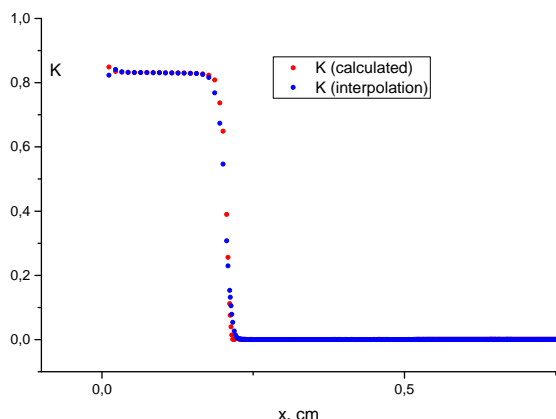


Рис. 5: Concentration of gas phase on $t = 10000$ ms.

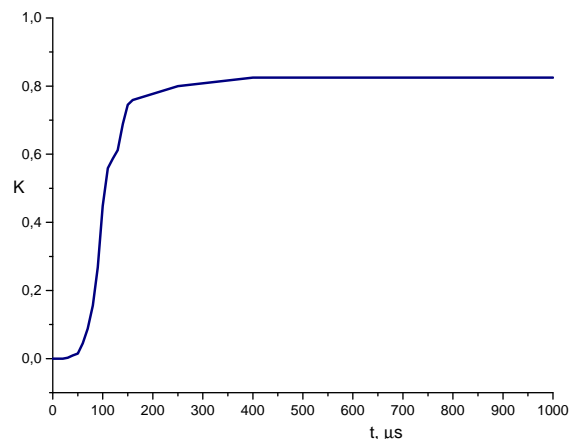


Рис. 6: Dynamics of concentration of gas phase on single particle near left border.

В более поздние времена (рис. 5) наблюдается сильное разрежение частиц в этой области и образованию промежутков между ними. Необходимо отметить что график на рисунке выполнен не линией а точками, каждая из которых соответствует частице. И если там где частицы находятся близко друг к другу промежутки в данном масштабе не видны, то в зоне разрежения их видно на графике. С точки зрения метода это соответствует уменьшению числа соседей у каждой частицы, вплоть до потерей всех соседних частиц.

В данной ситуации плотность в частице достигает своего теоретического минимума, что будет соответствовать максимально возможному значению K согласно модели (1). В этом случае более правильно говорить уже о каплях жидкости, разлетающихся в окружающем пространстве. И, с этой точки зрения, K должно продолжать расти, поскольку частицы разлетаются все больше и больше. Но в рамках модели (1) рост останавливается на максимальном значении. На рисунке 6 показана динамика концентрации газовой фазы в частице вблизи левой границы.

Это можно учесть положив постоянной значение скорости роста K при достижении предельной концентрации. Фактически это означает что дальнейший рост концентрации будет происходить с постоянной скоростью, по инерции. С другой стороны, когда SPH частица теряет всех соседей ее дальнейшее движение тоже будет происходить по инерции, поскольку силы со стороны других частиц будут равны нулю.

4 Заключение

Проведенное моделирование позволяет предложить следующую схему расчета разлета и разрушения жидкости при декомпрессии методом SPH. Вычисление объемной концентрации газовой фазы разбивается на 3 этапа. При малых концентрациях расчет ведется по полной модели ИКВ (2)–(4), возможно с дополнительными эффектами, такими как диффузия или химические реакции. При высоких концентрациях, вплоть до предельных используется упрощенная модель (1). При достижении предельной концентрации полагается $dK/dt = \text{const}$.

Список литературы

- [1] J J Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on Progress in Physics*, 68(8):1703, 2005.
- [2] Damien Violeau and Benedict D. Rogers. Smoothed particle hydrodynamics sph for free-surface flows: past, present and future. *Journal of Hydraulic Research*, 54(1):1–26, 2016.

- [3] A.A. Chernov, A.A. Pil'nik, M.N. Davydov, E.V. Ermanyuk, and M.A. Pakhomov. Gas nucleus growth in high-viscosity liquid under strongly non-equilibrium conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 123:1101 – 1108, 2018.
- [4] L. Van Wijngaarden. On the equations of motion for mixtures of liquid and gas bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, 33(03):465–474, 1968.
- [5] M. N. Davydov and V. K. Kedrinskii. Smooth particle hydrodynamics method for modelling cavitation-induced fracture of a fluid under shock-wave loading. *J. Appl. Mech. and Tech. Phys.*, 54(6), 2013.