

УДК 532.5.032

Разработка программного комплекса для решения гидродинамических задач со свободными поверхностями на базе метода MPS

Д.В. Гудеменко, П.С. Климов, В.И. Мелихов, О.И. Мелихов

Гудеменко Дмитрий Владимирович — аспирант кафедры атомных электрических станций НИУ «МЭИ», e-mail: gudemenkodv@mail.ru

Климов Петр Сергеевич — аспирант кафедры атомных электрических станций НИУ «МЭИ», e-mail: peter426@mail.ru

Мелихов Владимир Игорьевич — доктор технических наук, профессор кафедры атомных электрических станций НИУ «МЭИ», e-mail: vladimir.melikhov@erec.ru

Мелихов Олег Игорьевич — доктор физико-математических наук, зам. директора по научной работе АО «Электрогорский научно-исследовательский центр по безопасности атомных электростанций», профессор кафедры атомных электрических станций НИУ «МЭИ», e-mail: oleg.melikhov@erec.ru

Представлено описание программного комплекса, разработанного для расчетов течений жидкости со свободной поверхностью, включая процессы фрагментации и коалесценции. Программный комплекс основан на численном методе MPS (Moving Particle Semi-implicit), в котором используется полуявная аппроксимация уравнений движения и применяются движущиеся «лагранжевы» частицы для описания течения жидкости.

Вся жидкость, находящаяся в расчетной области, разбивается на множество точечных взаимодействующих между собой объектов (жидких частиц), каждый из которых характеризуется своим номером, массой, объемом, а также текущими значениями радиуса-вектора и гидродинамических параметров (скорости, плотности и давления).

Численное решение уравнений, описывающих движение частиц, производят в три этапа.

1. Для каждой частицы выполняется явная аппроксимация уравнения движения без учета члена с давлением и определяется предварительное значение скорости этой частицы на новом временном слое. По этому значению скорости вычисляется предварительное значение координат частицы на новом временном слое.

2. Для выполнения уравнения неразрывности рассчитывается поле давления на новом временном слое путем решения уравнения Пуассона, которое получается путем комбинации уравнений неразрывности и движения.

3. По вычисленным значениям давления на новом временном слое определяются поправки к предварительным значениям скоростей жидких частиц, а по ним – координаты частиц в новый момент времени.

Разработанный программный комплекс позволяет в онлайн режиме вводить исходные данные исследуемой гидродинамической задачи и визуализировать поля давления и скорости жидкости в ходе выполнения расчета.

Приведены примеры расчетов, демонстрирующих возможности программного комплекса: трансформация капли жидкости; обрушение столба жидкости в бассейне.

Ключевые слова: MPS, фрагментация, свободная поверхность, численное моделирование, программный комплекс.

Elaborating a Software Package for Solving Free-surface Hydrodynamic Problems Based on the MPS Method

D.V. Gudemenko, P.S. Klimov, V.I. Melikhov, O.I. Melikhov

Gudemenko Dmitriy V. — Ph.D.-student of Nuclear Power Plants Dept., MPEI, e-mail: gudemenkodv@mail.ru

Klimov Petr S. — Ph.D.-student of Nuclear Power Plants Dept., MPEI, e-mail: peter426@mail.ru

Melikhov Vladimir I. — Dr.Sci. (Techn.), Professor of Nuclear Power Plants Dept., MPEI, e-mail: vladimir.melikhov@erec.ru

Melikhov Oleg I. — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Deputy Director of Scientific Work of «Electrogorsk Research Centre For The Safety of Nuclear Power Plants», Professor of Nuclear Power Plants Dept., MPEI, e-mail: oleg.melikhov@erec.ru

A software package developed for calculating liquid flows with free surface, including fragmentation and coalescence phenomena, is described. The software package is based on the Moving Particle Semi-implicit (MPS) numerical computation method, which uses semi-implicit approximation of motion equations and so-called moving "Lagrangian" particles for describing liquid flows.

The entire liquid residing in the computational area is divided into a multitude of interacting zero-dimensional objects (liquid particles). Each of them is characterized by its own number, mass, volume, and current values of radius vector and hydrodynamic parameters (velocity, density and pressure).

The equations describing the motion of particles are numerically solved in three steps.

(1) For each particle, its motion equation is explicitly approximated with omitting the pressure term, and a preliminary value of the particle's velocity is determined at the new time step. This velocity value is used for calculating the preliminary value of particle coordinates at the new time layer.

(2) To fulfill the continuity equation, the pressure field is calculated at the new time step by solving the Poisson equation, which is obtained by combining the equations of continuity and motion.

(3) The pressure values calculated at the new time layer are used to determine corrections to the preliminary values of liquid particle velocities, which are then used to calculate the coordinates of particles at the new moment of time.

Using the developed software package, the input data for the hydrodynamic model under study can be entered in the online mode with subsequently visualizing the liquid pressure and velocity fields in the course of calculation.

Calculation examples demonstrating the capabilities of the developed software, specifically, transformation of a liquid droplet and collapse of the liquid column in a pool, are given.

Key words: MPS, fragmentation, free surface, numerical simulation, software package.

Введение

Численное моделирование течений со свободной поверхностью традиционными сеточными методами испытывает существенные трудности при воспроизведении границ жидкостей. Для преодоления этих трудностей в рамках стандартного эйлера подхода был разработан так называемый VOF-метод (Volume Of Fluid), в котором специальными процедурами отслеживается перемещение свободных границ. Этот метод позволяет рассчитывать разнообразие течений со свободными границами. К недостаткам метода можно отнести громоздкость процедур трассирования свободных границ и необходимость применения весьма подробной расчетной сетки. Альтернативный подход с использованием лагранжева подхода свободен от этих недостатков и реализован в методе MPS [1].

Этот метод был разработан японскими учеными S. Koshizuka и Y. Oka и опубликован в 1996 г. в [1]. Его название MPS (Moving Particle Semi-implicit) указывает на основные особенности метода:

- использование движущихся «лагранжевых» частиц для описания течения жидкости;
- полунявная аппроксимация основных уравнений, позволяющая построить эффективный алгоритм их решения.

Авторами статьи после детального изучения метода MPS был разработан программный комплекс, который позволяет в режиме реального времени решать разнообразные гидродинамические задачи со свободными границами. В данной статье приведены описания метода MPS, разработанного программного комплекса и примеры его использования.

Описание метода MPS

Основные уравнения

Течение вязкой несжимаемой жидкости в области Ω описывается уравнением неразрывности

$$D\rho/Dt = 0 \quad (1)$$

и уравнением сохранения количества движения

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \gamma\Delta\mathbf{u} + \frac{\sigma\chi\delta(s)\mathbf{n}_s}{\rho} + \mathbf{g}. \quad (2)$$

Здесь u — скорость жидкости; ρ — плотность жидкости; t — время; P — давление; γ — коэффициент кинематической вязкости жидкости; \mathbf{g} — ускорение свободного падения; σ — коэффициент поверхностного натяжения; χ — средняя кривизна свободной поверхности жидкости; $\delta(s)$ — дельта-функция Дирака; s — положение свободной поверхности; \mathbf{n}_s — единичный нормальный вектор к поверхности. В левых частях уравнений (1) и (2) записаны субстанциональные (лагранжевы) производные по времени, описывающие изменения функций вдоль траекторий течения жидкости.

Движущиеся жидкие частицы — основа метода MPS

При численном решении уравнений вязкой несжимаемой фрагментирующей жидкости с помощью метода MPS вся жидкость, находящаяся в расчетной области, разбивается на множество точечных взаимодействующих между собой объектов (жидких частиц), каждый из которых характеризуется своим номером, массой, объемом, а также текущими значениями радиуса-вектора и гидродинамических параметров (скорости, плотности и давления).

Поскольку жидкость несжимаема, то очевидно, что должно быть обеспечено сохранение концентрации этих частиц в рассматриваемой области во время их движения. В методе MPS это реализуется следующим образом. Для произвольной частицы выделяется небольшая круговая область с центром в этой частице (область взаимодействия частиц между собой), причем радиус области (радиус взаимодействия) равен примерно 3–4 расстояниям между соседними частицами в начальный момент времени, и определяется число оказавшихся в ней частиц. Это число должно быть одинаковым для всех частиц в области (за исключением частиц, находящихся вблизи границы жидкости) в любой момент времени. Поскольку число частиц в области взаимодействия невелико (порядка 15–20), то добиться выполнения этого условия в практических расчетах невозможно. Поэтому условия в практических расчетах выполняются с помощью функции $w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|)$, где \mathbf{r}_k — радиус-вектор точки нахождения

рассматриваемой частицы, а \mathbf{r}_j — аналогичная величина для произвольной частицы из области взаимодействия, и определяется «сглаженное» число частиц n_k в области взаимодействия k -й частицы:

$$n_k = \sum_{j \neq k} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|). \quad (3)$$

Обычно в качестве сглаживающей функции используется гиперболическая функция расстояния между частицами g :

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1, & 0 < r \leq r_e; \\ 0, & r_e < r, \end{cases} \quad (4)$$

где r_e — радиус области взаимодействия.

Как видно из формулы (3), величина n_k пропорциональна числу частиц в области взаимодействия, однако ее значение зависит от вида функции w и может существенно отличаться от количества частиц в этой области. В англоязычной литературе эту величину называют *particle number density*. Будем называть эту величину *относительной концентрацией частиц*. Интуитивно понятно, что величина n линейно связана с плотностью жидкости. В методе MPS это положение строго доказано [1]. Поэтому ввиду несжимаемости жидкости должно иметь место $n_k = \text{const} = n_0$, где n_0 — начальная относительная концентрация частиц, определяемая их исходным положением.

Аппроксимации градиента и лапласиана в методе MPS

Для численного решения уравнений (1) и (2) необходимо иметь аппроксимационные формулы для дифференциальных операторов «градиент» и «лапласиан», использующие значения искомого функций в точках расположения движущихся частиц.

Для аппроксимации градиента функции F в точке \mathbf{r}_k сначала приближенно вычисляются производные по направлениям от данной частицы k к остальным частицам j из области взаимодействия:

$$\text{der}\mathbf{F}_{kj} = \frac{F_j - F_k}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k), \quad (5)$$

после чего сам градиент в точке \mathbf{r}_k определяется как среднее взвешенное величин $\text{der}\mathbf{F}_{kj}$ по всем соседним частицам, входящим в область взаимодействия частицы k , умноженное на размерность задачи d [1]. В качестве весовой функции используется сглаживающая функция $w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|)$. Поэтому функцию w также называют *весовой функцией*. В результате градиент функции аппроксимируется следующим образом:

$$\nabla F_k = \frac{d \sum_{j \neq k} \text{der}\mathbf{F}_{kj} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|)}{\sum_{j \neq k} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|)}. \quad (6)$$

В статье рассматриваются плоские течения, для которых $d = 2$.

С учетом (3) и (5) формула (6) примет вид

$$\nabla F_k = \frac{d}{n_0} \sum_{j \neq k} \frac{F_j - F_k}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|). \quad (7)$$

Аппроксимационную формулу для градиента (7) можно вывести достаточно строго для случая относительно однородного расположения частиц в области взаимодействия, однако этот вывод довольно громоздок и здесь не приводится.

Для аппроксимации лапласиана по значениям гидродинамических величин в жидких частицах в [1] предложена оригинальная формула, основанная на результатах теории диффузии. Как известно, уравнение диффузии некоторой физической величины (например, концентрации выделенного газа в бинарной газовой смеси) использует лапласиан для описания диффузного переноса этой физической величины в пространстве. На основе рассмотрения задачи о диффузии вещества, первоначально сосредоточенного в точке, в [1] получено выражение для аппроксимации лапласиана по значениям функции в точках расположения частиц. Вывод выражения для аппроксимации лапласиана в методе MPS также достаточно громоздок, поэтому просто приведем это выражение:

$$\Delta F_k = \frac{2d}{\lambda_k n_0} \sum_{j \neq k} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) (F_j - F_k), \quad (8)$$

где величина λ_k определяется следующим образом:

$$\lambda_k = \frac{1}{n_0} \sum_{j \neq k} |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|^2 w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|). \quad (9)$$

Алгоритм численного решения уравнений несжимаемой жидкости методом MPS

Численное решение уравнений (1) и (2) производится в три этапа.

1. Для каждой жидкой частицы выполняется явная аппроксимация уравнения движения (2) без учета члена с давлением и определяется предварительное значение скорости этой частицы на новом временном слое \mathbf{u}_k^* . По этому значению скорости вычисляется предварительное значение координат частицы на новом временном слое \mathbf{r}_k^* , а по их координатам находят предварительные значения относительной концентрации частиц n_k^* и плотности ρ_k^* .

2. Вычисленные предварительные значения скоростей и относительных концентраций жидких частиц (плотности жидкости) не удовлетворяют уравнению неразрывности. Чтобы обеспечить его выполнение, рассчитывается поле давления на новом временном слое P_k^{n+1} , в соответствии с которым должным образом будут скорректированы скорости и координаты частиц. Значения давления находят из решения уравнения Пуассона, которое получается путем комбинации уравнений неразрывности и движения

$$(\Delta P^{n+1})_k = \frac{\rho - \rho_k^*}{\Delta t^2}. \quad (10)$$

Полученная при этом система линейных уравнений имеет симметричную матрицу, поскольку силы взаимодействия любых двух частиц друг на друга равны, и решается методом сопряженных градиентов.

3. По вычисленным значениям давления на новом временном слое определяются поправки к предвари-

тельными значениям скоростей жидких частиц, а по ним – координаты частиц в новый момент времени.

Аппроксимация граничных условий в методе MPS

Метод MPS позволяет реализовывать граничные условия следующего вида: условие «прилипания» на твердой стенке, условие скольжения на твердой стенке, условие непроницаемости на твердой стенке, условие постоянства давления на свободной поверхности. Сила поверхностного натяжения на свободной поверхности жидкости может быть учтена согласно уравнению (2). Аппроксимация члена, описывающего силу поверхностного натяжения, и аппроксимации граничных условий представлены в [1, 2].

Описание программного комплекса, реализующего метод MPS

Для практического применения метода MPS авторами разработан программный комплекс, позволяющий решать разнообразные плоские двумерные задачи о течениях несжимаемой жидкости со свободными поверхностями. В качестве языка программирования использован FORTRAN-90, операционная среда — Windows.

Программный комплекс имеет интерфейс общения с пользователем для ввода данных при решении конкретной задачи. Управление программой производится путем ввода команд с клавиатуры компьютера.

Программа состоит из двух блоков: блока задания геометрии задачи и ввода исходных данных; блока выполнения расчета с онлайн визуализацией текущих результатов расчета.

На этапе работы первого блока происходит инициализация всех необходимых данных для расчета: ввод начального расстояния между жидкими частицами, задание расчетной области и геометрии задачи, ввод физических свойств веществ.

Первым шагом работы блока задания геометрии и ввода исходных данных является опция выбора режима ввода. Предусмотрено два варианта: 1) загрузка подготовленного ранее и сохраненного файла конфигурации задачи (описание приведено далее); 2) ручной ввод данных.

При выборе первого варианта требуется ввести имя файла конфигурации, который должен находиться в одной директории с исполняемым файлом программы с расширением exe. После ввода имени файла конфигурации программа производит считывание всех данных из этого файла и переходит в режим готовности к запуску расчетного блока. При выборе ручного ввода данных инициализируется диалог с пользователем для поэтапного построения рабочей области и ввода всех необходимых данных.

Первый требуемый для ввода параметр при ручном вводе данных — начальное расстояние между частицами. После ввода данной величины предусмотрена возможность изменить введенное значение.

Затем начинается диалог с пользователем для задания расчетной области, состоящей из жидкости и твердых сте-

нок. Геометрия начального положения жидкости и твердых стенок задается поэлементно методом конструктора.

Начальное положение жидкости создается из произвольного количества прямоугольных «жидких» объектов произвольных размеров. При задании каждого из таких объектов предусмотрена возможность его перемещения по экрану монитора для задания желаемого положения в расчетной области. Также предусмотрена возможность изменения геометрических размеров каждого размещаемого «жидкого» объекта и возможность его скругления дугой произвольного радиуса. После этого задаются теплофизические свойства жидкости. Для возможности одновременного моделирования различных жидкостей (например, воды и расплава металла) предусмотрено задание различных физических свойств каждого из жидких объектов.

Твердые стенки образуются из произвольного количества прямоугольных горизонтальных и вертикальных объектов произвольной длины и высоты соответственно. При размещении каждого объекта-стенки предусмотрена возможность изменения его положения и геометрических размеров. Кроме того, возможна реализация движущейся с постоянной скоростью твердой стенки (поршня). Процесс построения расчетной области приведен на рис. 1, 2.

В конце работы блока происходит сохранение всей введенной информации в специальный файл конфигурации (имя файла задается пользователем), для того чтобы избежать повторного ручного ввода параметров задачи в последующих расчетах. Загрузка файла конфигурации возможна в диалоговом режиме в начале работы блока задания расчетной геометрии до начала ручного ввода данных, как упоминалось ранее.

Далее начинает работать блок выполнения расчета. Во время работы этого блока на каждом временном шаге происходит визуализация полученных результатов. Графическая визуализация возможна в трех вариантах: 1) конфигурация жидких частиц в текущий момент времени (характеризует положение жидкости); 2) поле векторов скоростей частиц (характеризует поле скорости жидкости); 3) поле давления жидких частиц (характеризует распределение давления жидкости).

Программный комплекс для работы использует файл входных данных mps.inp, расположенный в одной директории с исполняемым файлом, в котором содержатся физические константы, параметры построения графики, параметры метода MPS и параметры решателя уравнения Пуассона.

Примеры расчетов программным комплексом

Трансформация капли

Была рассмотрена задача о трансформации первоначально квадратной капли этанола под действием поверхностного натяжения. Длина стороны капли равна 3 мм. Плотность этанола — 797,88 кг/м³, коэффициент поверхностного натяжения — 0,02361 Н/м.

В результате действия силы поверхностного натяжения квадратная капля начинает менять свою форму и к моменту времени 0,016 с приобретает форму ромба. Эволюция формы капли показана на рис. 3.

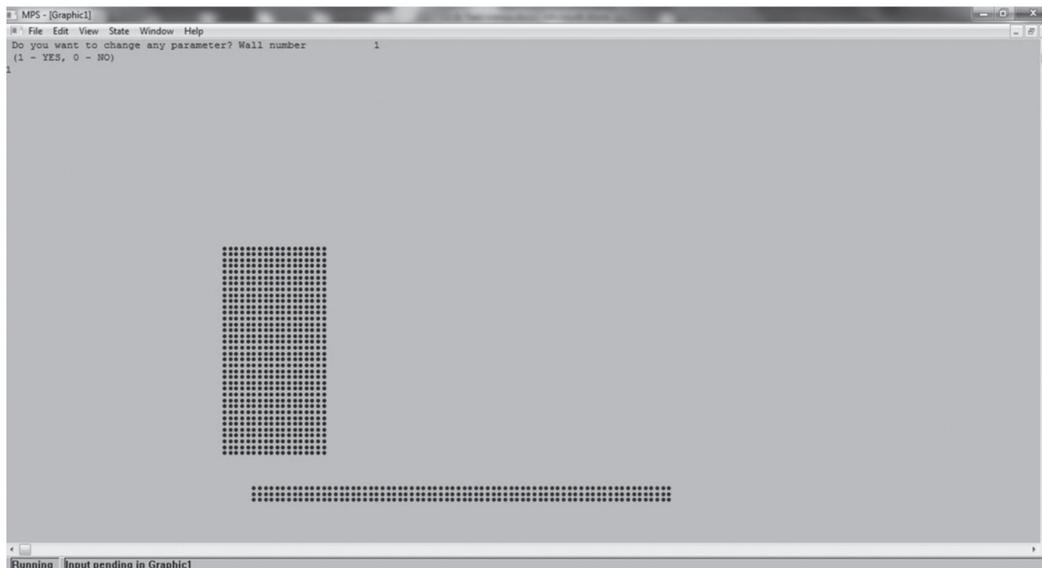


Рис. 1. Процесс размещения нижней стенки

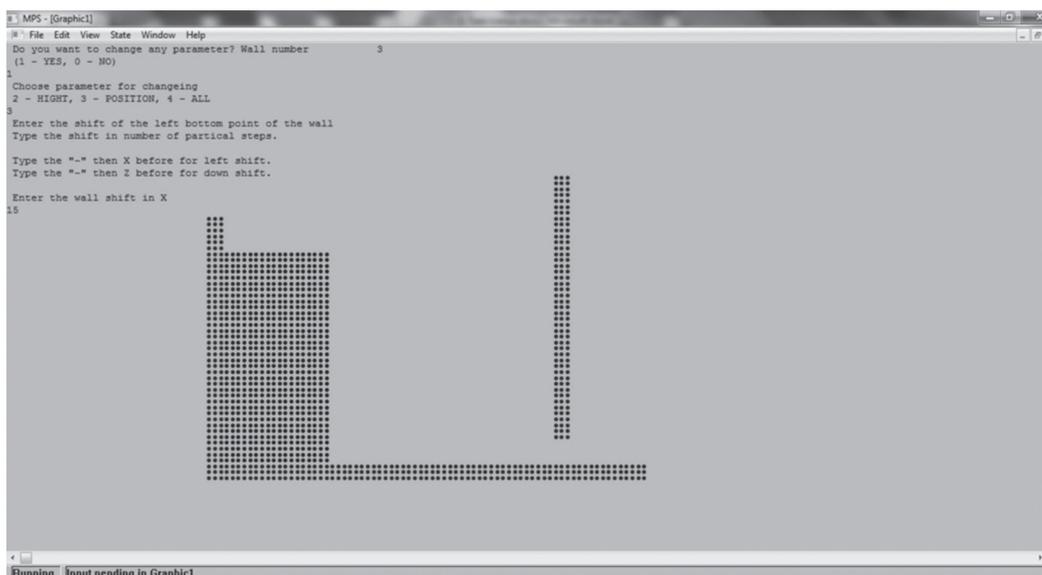


Рис. 2. Процесс размещения правой стенки

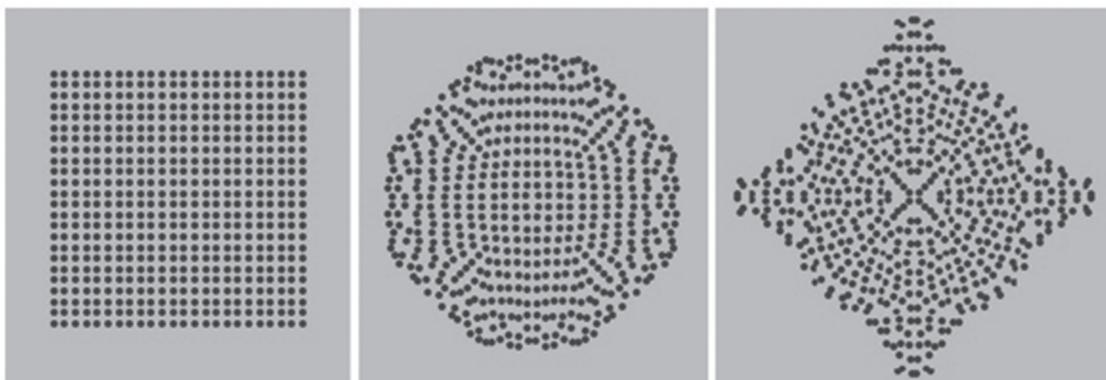


Рис. 3. Колебания капли этанола в моменты времени 0; 0,008; 0,016 с

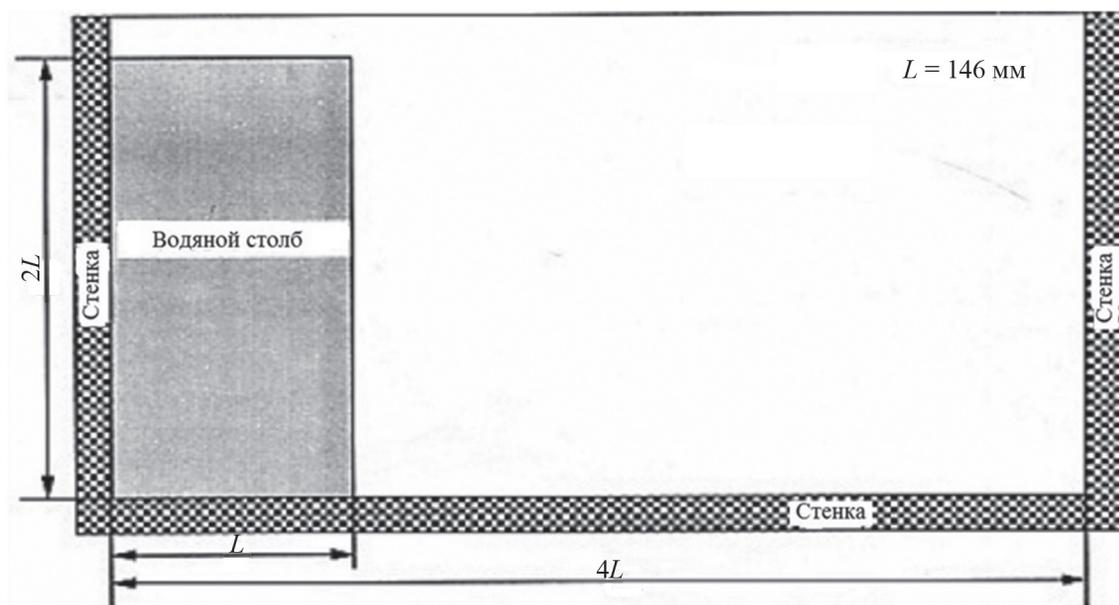


Рис. 4. Геометрия задачи об обрушении столба жидкости

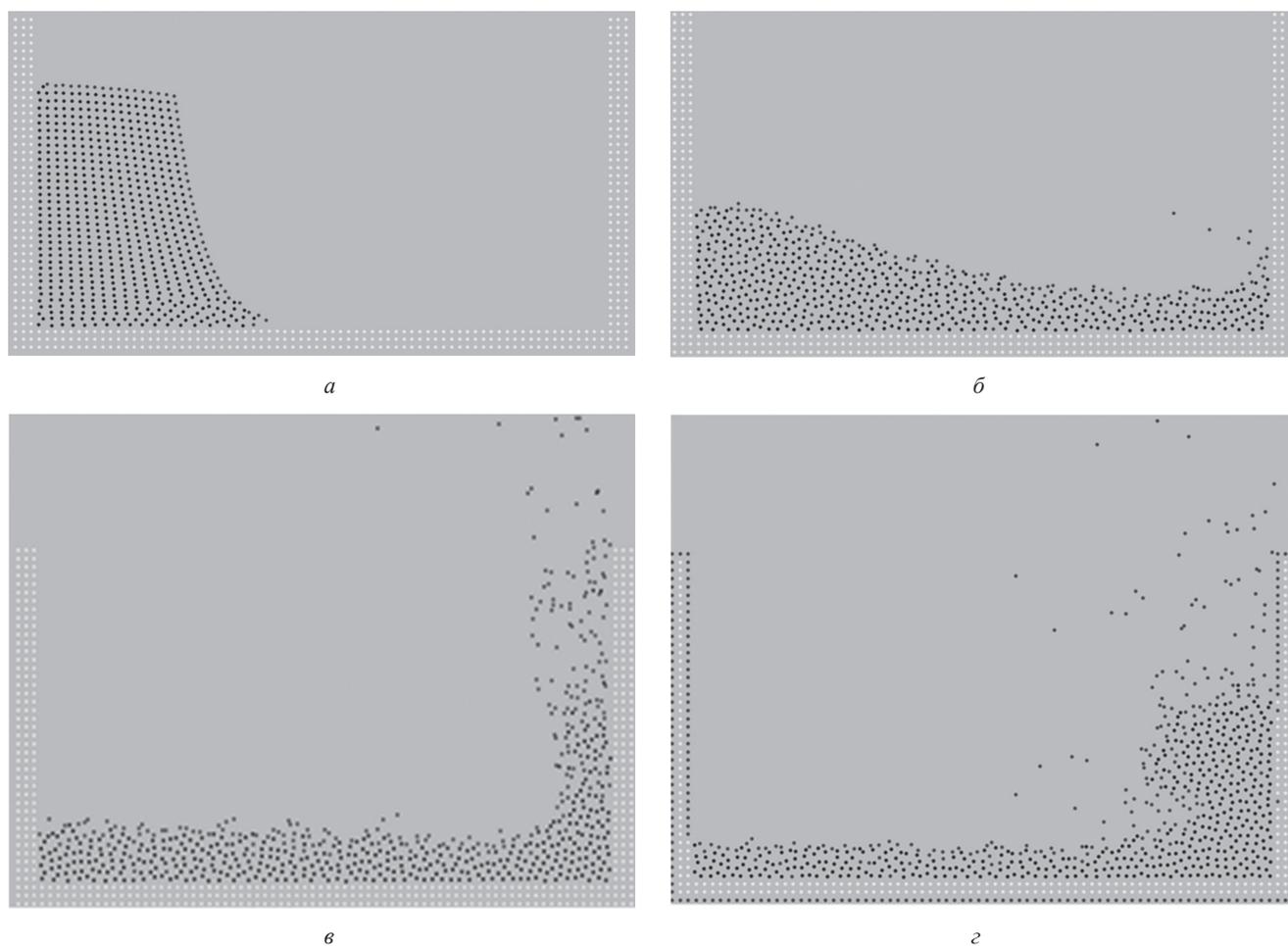


Рис. 5. Конфигурация жидкости в последовательные моменты времени:

$a - t = 0,1 \text{ с}; б - 0,3 \text{ с}; в - 0,5 \text{ с}; г - 0,7 \text{ с}$

Результаты, полученные с помощью разработанного программного комплекса на основе метода MPS, достаточно хорошо совпадают как с результатами, приведенными в [2], так и с теоретически определенным временем трансформации капли этанола для данных условий [2].

Обрушение столба жидкости

С помощью разработанного программного комплекса было смоделировано обрушение столба жидкости, находящегося в начальный момент около боковой стенки сосуда прямоугольного сечения (рис. 4).

Были приняты следующие значения параметров задачи: плотность воды — 1000 кг/м^3 ; поверхностное натяжение — $0,07225 \text{ Н/м}$; динамическая вязкость — $0,001 \text{ Па}\cdot\text{с}$; число жидких частиц — 1122.

В начальный момент неподвижный столб жидкости находится у левой вертикальной стенки. Затем под действием силы тяжести он начинает обрушаться, двигаясь по направлению к правой стенке и ударяясь о нее. В процессе движения водяного столба происходит как фрагментация жидкости на отдельные брызги, так и их слияние. Результаты численного моделирования обрушения столба жидкости приведены на рис. 5.

Полученные результаты численного моделирования соответствуют результатам, приведенным в [1].

Заключение

Выполнена разработка программного комплекса, основанного на методе MPS, который позволяет в онлайн режиме решать разнообразные гидродинамические задачи со свободными границами.

Приведены описания метода MPS и разработанного программного комплекса, представлены примеры его использования для решения конкретных задач со свободными границами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 14-08-00393, № 16-38-00151 мол_а, № 16-08-00239; при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Государственное задание № 13.1544.2014/К).

Литература

1. **S. Koshizuka, Y. Oka.** Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid // Nuclear Science and Engineering. 1996. Vol. 123. P. 421—434.
2. **Ri-Qiang Duan, S. Koshizuka, Y. Oka.** Two-Dimensional Simulation of Drop Deformation and Breakup at Around the Critical Weber Number // Nuclear Engineering and Design. 2003. Vol. 225. Issue 1. P. 37—48.

References

1. **Koshizuka S., Oka Y.** Moving-particle semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid. Nuclear Science and Engineering. 1996;123:421—434.
2. **Duan Ri-Qiang, Koshizuka S., Oka Y.** Two-Dimensional Simulation of Drop Deformation and Breakup at Around the Critical Weber Number. Nuclear Engineering and Design. 2003;225(1):37—48.

Статья поступила в редакцию 25.05.2016