

УДК 532.5:519.6

О ПРИМЕНЕНИИ АЛГОРИТМА PISO В ЗАДАЧАХ ДИНАМИКИ МОЛЕКУЛЯРНО НЕСМЕШИВАЮЩИХСЯ ЖИДКОСТЕЙ

С. В. Яцевич, В. В. Курулин, Д. П. Рубцова
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Рассматриваются некоторые варианты конечно-объемной реализации известного алгоритма PISO на эйлеровой совмещенной сетке в применении к задачам динамики молекулярно несмешивающихся жидкостей. Приводятся результаты сравнительных расчетов типовых задач по односкоростной модели, реализованной в пакете прикладных программ ЛОГОС. На основании полученных результатов делается вывод о наиболее приемлемом для рассматриваемого класса задач варианте алгоритма.

Ключевые слова: несмешивающиеся жидкости, односкоростная модель, численное моделирование, контактная граница, PISO, ЛОГОС.

Введение

В современной вычислительной гидромеханике широко применяются различные алгоритмы расщепления, среди которых заслуженной популярностью пользуется алгоритм PISO [1–6]. В оригинальной работе [1] представлен безытеративный алгоритм, хорошо зарекомендовавший себя при численном моделировании течений однородных сред (см. также [2, 5, 6]). Характерной чертой данного алгоритма, как и других SIMPLE-подобных алгоритмов [2, 5, 6], является совместная аппроксимация двух уравнений разного порядка по производным давления¹. При наличии в среде контактных разрывов, что соответствует системе молекулярно несмешивающихся жидкостей, такое различие приводит к возмущению численного решения.

Характерным примером является задача о гидростатическом равновесии системы *воздух–вода* в поле силы тяжести. В данной задаче поле давления, получаемое из уравнения Пуассона, будет сглаживать излом на контактной границе, соответствующий гидростатическому равновесию по уравнению движения, и приводить к возмущению поля скорости в окрестности контактной границы. Результаты, получаемые при

¹Имеются в виду уравнения движения и Пуассона, включающие соответственно первые и вторые производные давления.

численном решении подобных задач с использованием PISO-алгоритма, будут различаться в зависимости от выбранной длины корректора.

При численном моделировании движений систем несмешивающихся жидкостей используют, как правило, итеративный вариант PISO-алгоритма [3, 4], в котором шаг корректора соответствует ограниченному заданной погрешностью итеративный цикл. При этом возможны разные модификации алгоритма, которые, как показывает вычислительная практика, могут приводить на рассматриваемом классе задач к несколько различающимся результатам².

В данной статье сравниваются четыре варианта PISO-алгоритма, которые отличаются друг от друга, во-первых, по способу коррекции потока (объемного расхода), во-вторых, по способу представления конвективного слагаемого в уравнении движения. Для проведения сравнительных расчетов все варианты были реализованы в рамках односкоростной модели в пакете программ ЛОГОС [7, 8]. Численное моделирование переноса пассивного скаляра³ осуществлялось по технологии M-CICSAM [9, 10]. Рассматривались три типовые задачи: коллапс водяного

²Каких-либо данных по развернутому сравнению возможных модификаций PISO-алгоритма на рассматриваемом классе задач авторами данной статьи в доступных источниках не обнаружено.

³В данном случае объемной концентрации жидкости.

столба, колебания жидкости в сосуде и формирование гидравлического прыжка. Постановки задач с исходными данными и результаты для сравнения брались из работы [3]⁴.

1. Варианты PISO-алгоритма

Как уже отмечалось во Введении, далее будут рассматриваться варианты алгоритма, различающиеся способами коррекции потока, а также представлением конвективного слагаемого в уравнении движения. В случае однородной среды обычно используют текущую коррекцию потока с явным выделением потока с предыдущего временного слоя:

$$F_k^{n+1} = A_k^n F_k^j + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{H}_k^n + B_k^{n+1} \quad (1)$$

и представление конвективного слагаемого в виде

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \mathbf{v} \nabla \cdot \rho \mathbf{v}. \quad (2)$$

В формулах (1), (2) и далее используются следующие обозначения: F , ρ и \mathbf{v} — соответственно поток (объемный расход), плотность и скорость; n , k , j — номера коррекции, грани сеточной ячейки и временного слоя соответственно; \mathbf{S} — вектор-площадь грани сеточной ячейки; $A = A(F)$ и $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{v}, F)$ — сеточные скалярный и векторный операторы; B — сеточное влияние полей давления и массовой силы.

В случае системы несмешивающихся жидкостей, например в [3], используется *свернутая* коррекция:

$$F_k^{n+1} = \mathbf{S}_k \cdot \tilde{\mathbf{H}}_k^n + B_k^{n+1}, \quad \tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H} + A \mathbf{v}^j. \quad (3)$$

С точки зрения стандартного PISO-алгоритма для коллокированных переменных (совмещенных сеток) такое свертывание ослабляет защиту алгоритма от "шахматных" осцилляций, обусловленных коротковолновыми возмущениями поля давления. Вычислительная практика же показывает, что использование коррекции потока типа (1) вместо (3) при численном моделировании движений систем молекулярно несмешивающихся жидкостей приводит в одних случаях к ускорению расчетов, в других — к усилению возмущений поля скорости в окрестностях контактных границ. Более устойчивое поведение коррекции (3) в окрестностях контактных границ обусловлено, по-видимому, усилением связи

между полями потока и давления за счет предполагающейся в (3) сеточной интерполяции скорости \mathbf{v}^j , непосредственно связанной с соответствующим градиентом давления.

Помимо представления (2) конвективного слагаемого в уравнении движения, рассматривается также вариант

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \rho \nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{v}) - \rho \mathbf{v} \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (4)$$

Данный вариант обусловлен естественным желанием вынести разрывную функцию (плотность) из-под производной.

Таким образом, имеем четыре варианта PISO-алгоритма, реализующих следующие сочетания из (1)—(4):

- (3), (4) — вариант 1;
- (3), (2) — вариант 2;
- (1), (4) — вариант 3;
- (1), (2) — вариант 4.

Отметим, что используемому в [3] PISO-алгоритму соответствует вариант 2.

2. Результаты расчетов типовых задач

Подробное описание рассматриваемых задач, включающее постановки с исходными данными, приведено в работе [3]. Далее приводятся результаты численного моделирования с использованием четырех вариантов PISO-алгоритма, описанных в разд. 1. Используются обозначения: t [с] — время моделируемого процесса; t_m [с] — машинное время расчета; T [с] — период колебаний основной формы; v_{\max} [м/с] — максимальное значение скорости; g [м/с²] — ускорение свободного падения.

Задача 1. Коллапс водяного столба. На рис. 1—4 представлена эволюция поля скорости и контактной границы, полученная при расчете этой задачи. На рис. 1, 3 можно заметить численные возмущения контактной границы типа ряби, обусловленные выносом плотности из-под производной (4) и приводящие на поздних стадиях к некоторому изменению решения по сравнению с вариантом 2 (см. рис. 2), который соответствует результатам из [3]. Также заметно ускорение расчетов (см. рис. 3, 4) при использовании коррекции потока (1).

⁴Представленные в [3] результаты расчетов считаются правильными в рассматриваемой тематике.

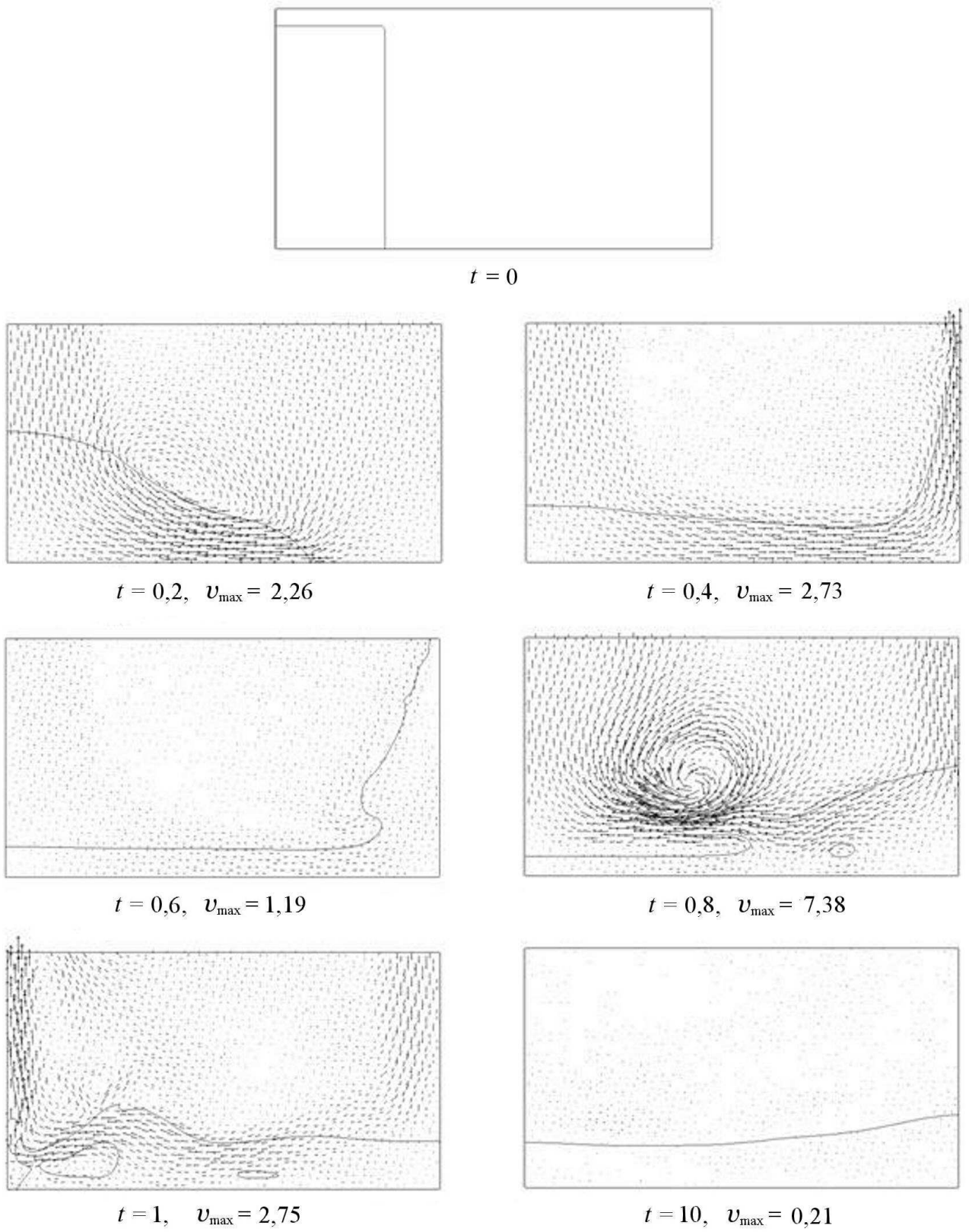
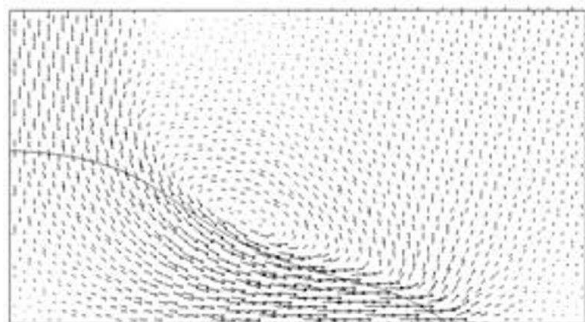


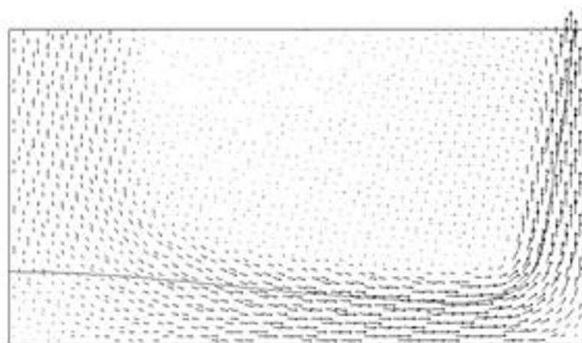
Рис. 1. Задача 1. Вариант 1, $t_m = 970,76$



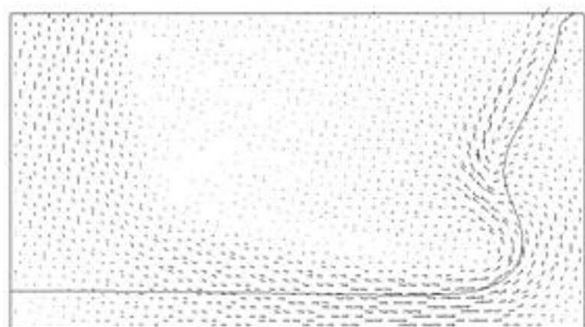
$t = 0$



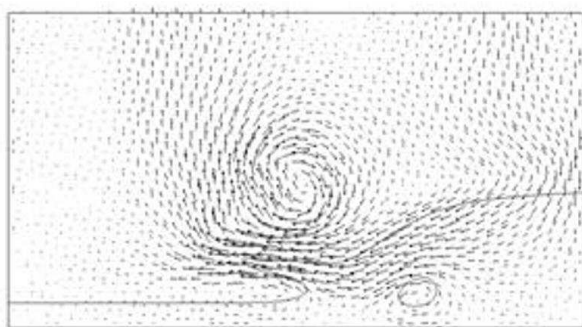
$t = 0,2, \quad v_{\max} = 2,31$



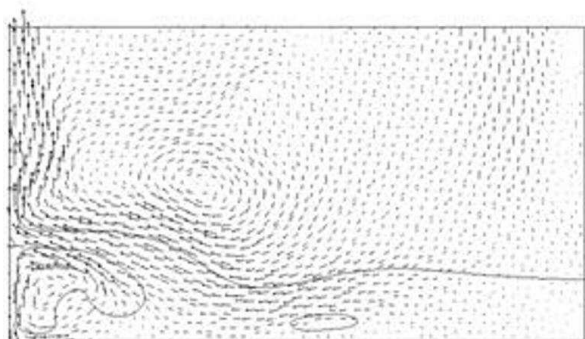
$t = 0,4, \quad v_{\max} = 2,32$



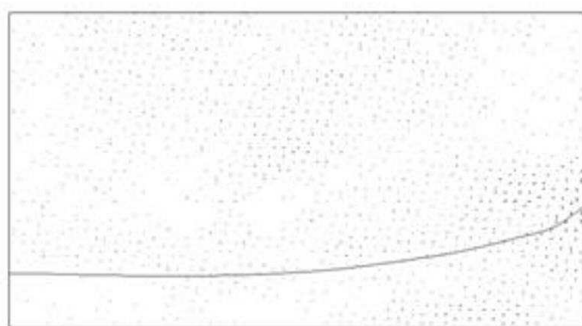
$t = 0,6, \quad v_{\max} = 1,15$



$t = 0,8, \quad v_{\max} = 3,39$



$t = 1, \quad v_{\max} = 2,76$

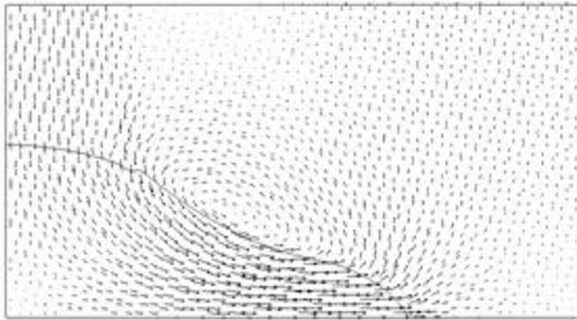


$t = 10, \quad v_{\max} = 0,52$

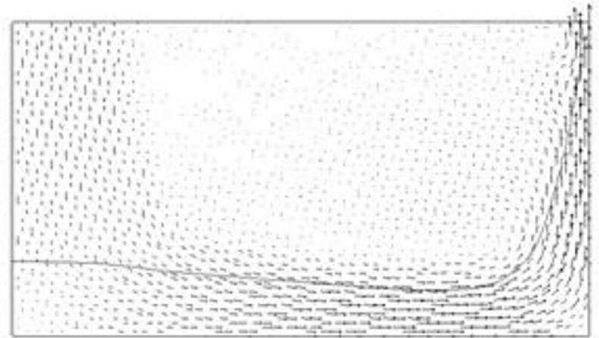
Рис. 2. Задача 1. Вариант 2, $t_m = 962,45$



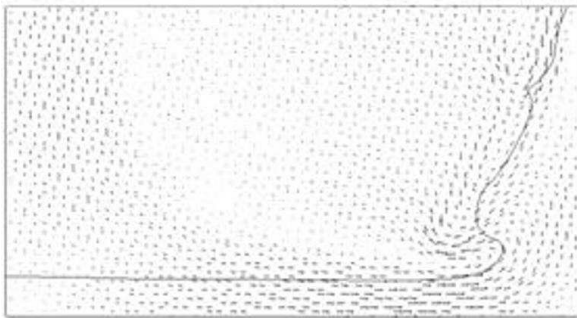
$t = 0$



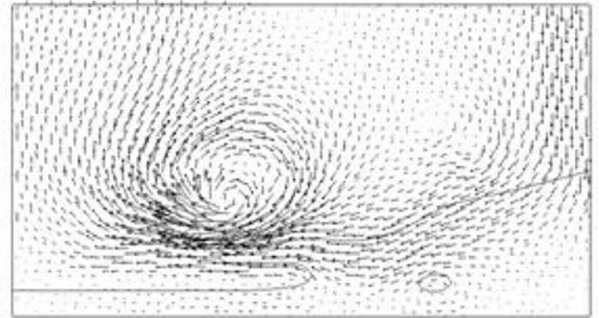
$t = 0,2, v_{\max} = 2,26$



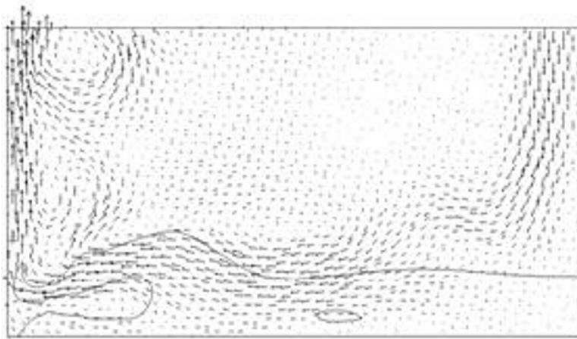
$t = 0,4, v_{\max} = 2,70$



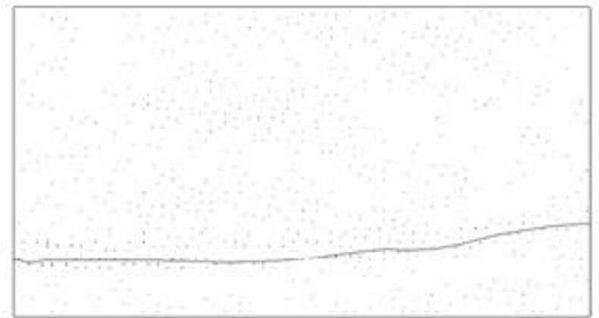
$t = 0,6, v_{\max} = 1,23$



$t = 0,8, v_{\max} = 8,21$



$t = 1, v_{\max} = 3,34$



$t = 10, v_{\max} = 0,54$

Рис. 3. Задача 1. Вариант 3, $t_m = 869,59$

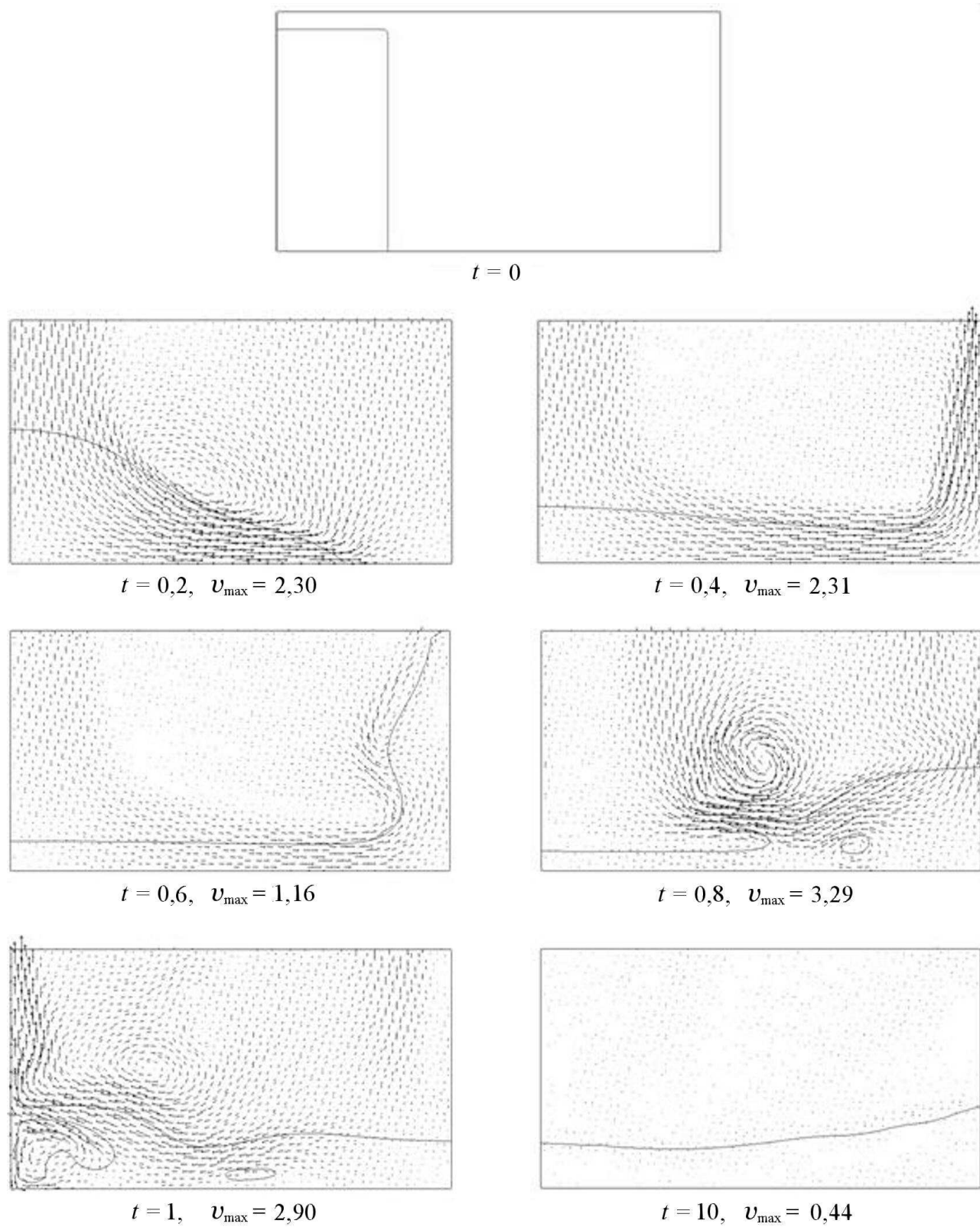
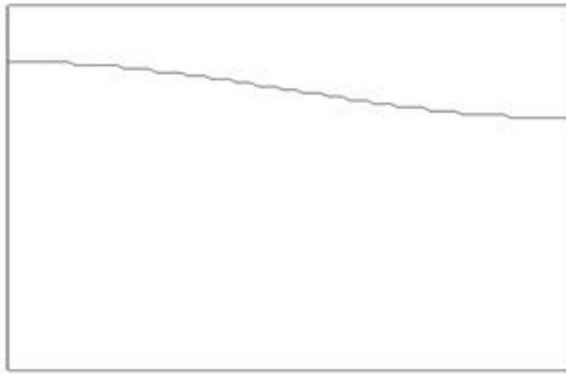


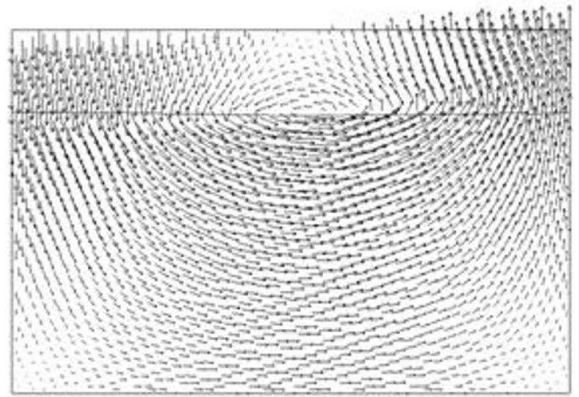
Рис. 4. Задача 1. Вариант 4, $t_m = 906,92$

Задача 2. Колебания жидкости в со-
суде. Результаты расчета этой задачи (колеба-

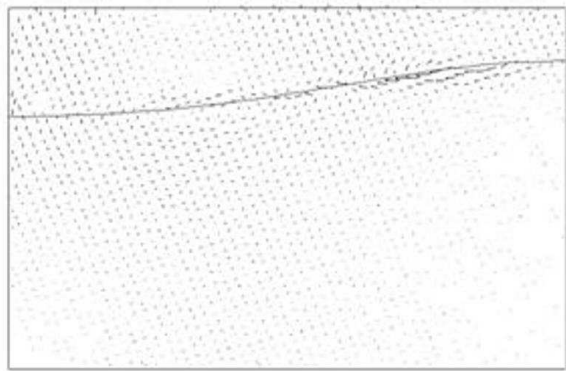
ния поля скорости и контактной границы с $T =$
 $= 0,3739$) приведены на рис. 5–8. На рис. 7, 8



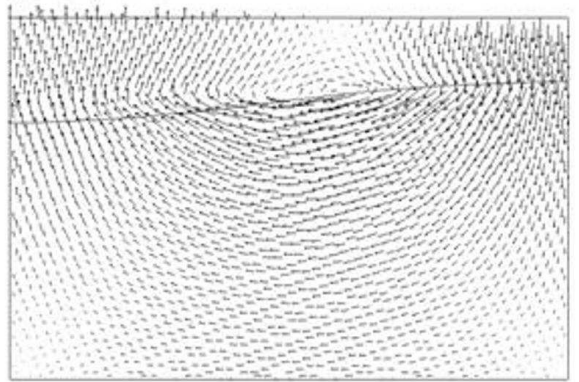
$$t = 0$$



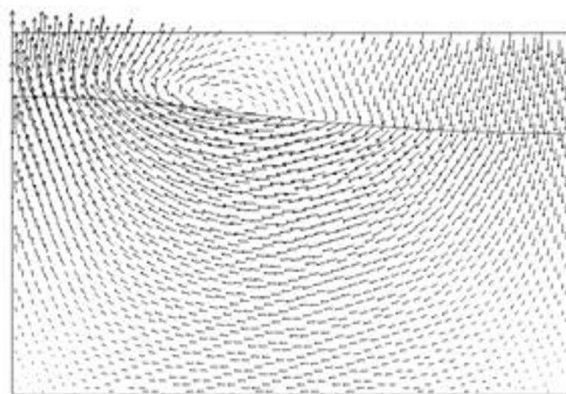
$$t = \frac{1}{4} T, \quad v_{\max} = 0,10$$



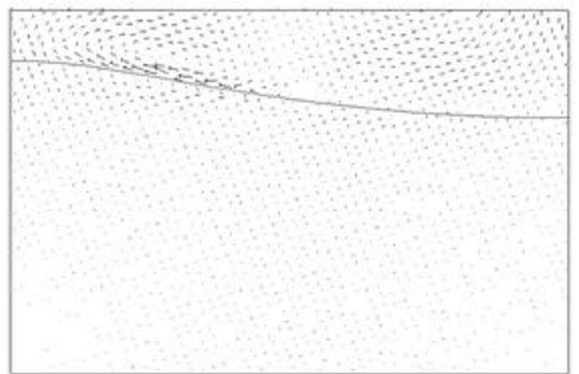
$$t = \frac{1}{2} T, \quad v_{\max} = 0,06$$



$$t = \frac{5}{8} T, \quad v_{\max} = 0,12$$



$$t = \frac{7}{8} T, \quad v_{\max} = 0,09$$

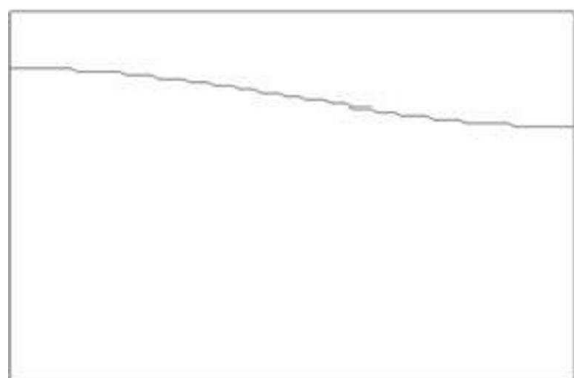


$$t = T, \quad v_{\max} = 0,06$$

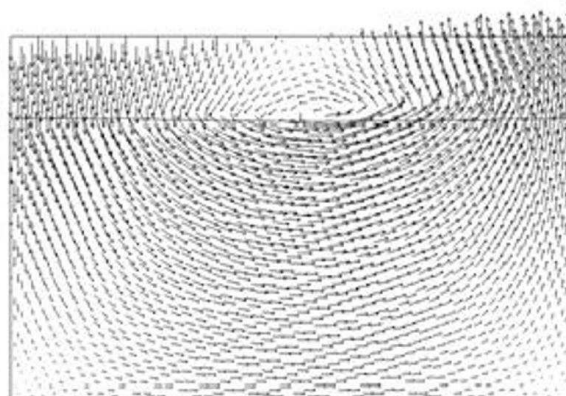
Рис. 5. Задача 2. Вариант 1, $t_m = 810,1$

хорошо видно усиление⁵ численного возмущения поля скорости в окрестности контактной границы, обусловленное использованием коррекции

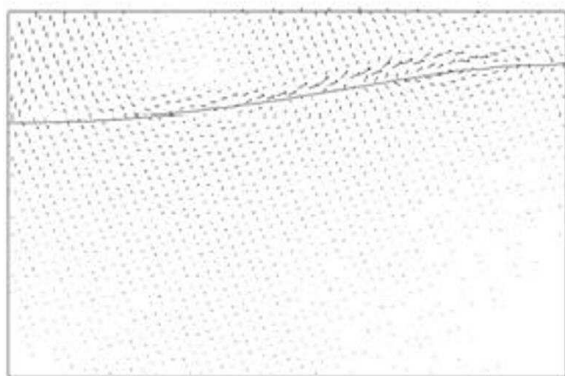
потока (1). Существенного ускорения расчетов при этом не наблюдается.



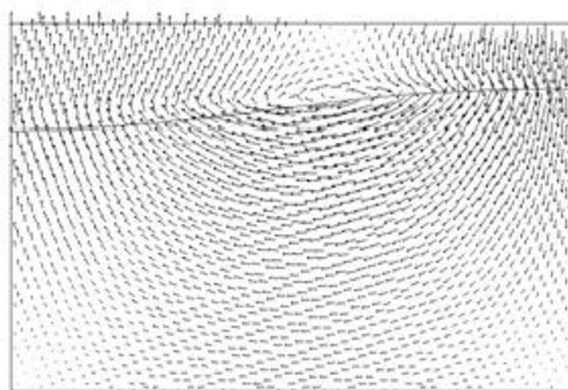
$$t = 0$$



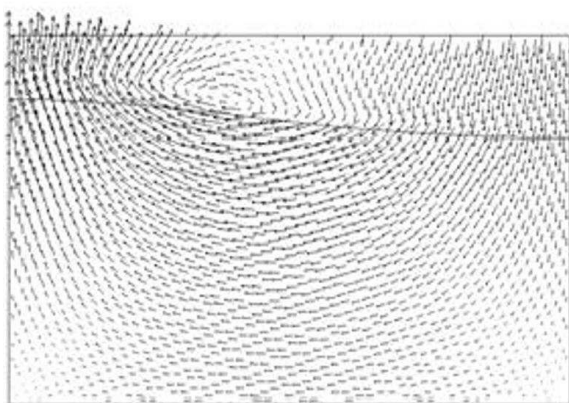
$$t = \frac{1}{4} T, \quad v_{\max} = 0,11$$



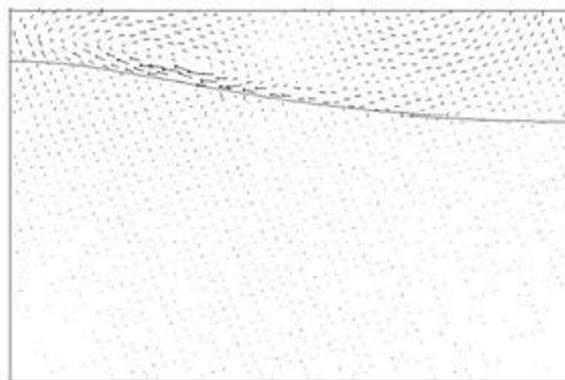
$$t = \frac{1}{2} T, \quad v_{\max} = 0,05$$



$$t = \frac{5}{8} T, \quad v_{\max} = 0,09$$



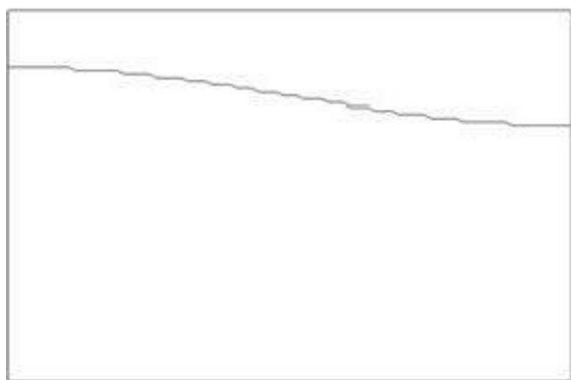
$$t = \frac{7}{8} T, \quad v_{\max} = 0,10$$



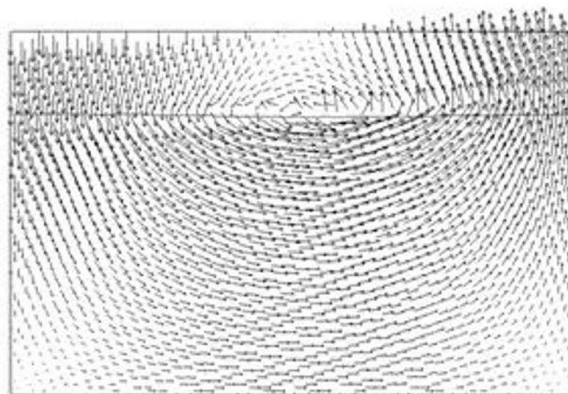
$$t = T, \quad v_{\max} = 0,07$$

Рис. 6. Задача 2. Вариант 2, $t_m = 813,32$

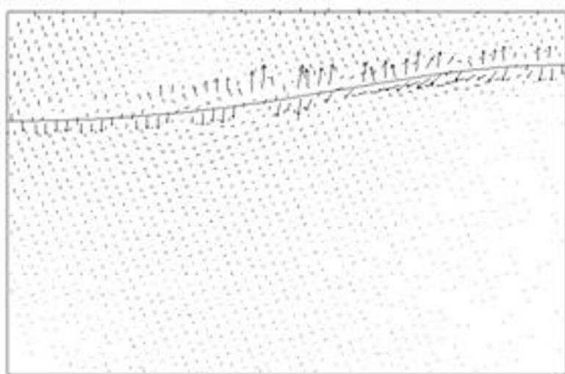
⁵По техническим причинам данное усиление несколько завышено.



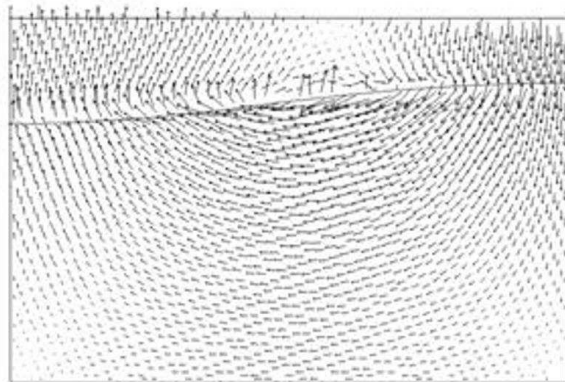
$t = 0$



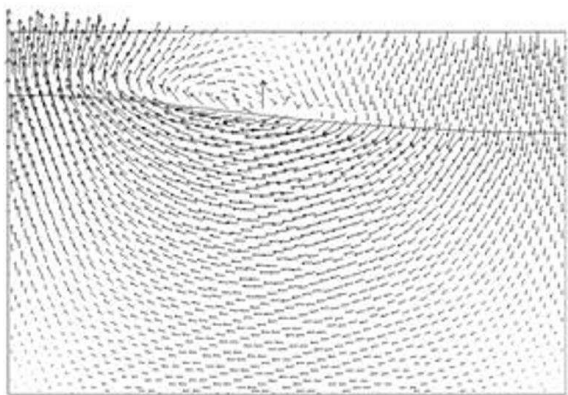
$t = \frac{1}{4} T, v_{\max} = 0,20$



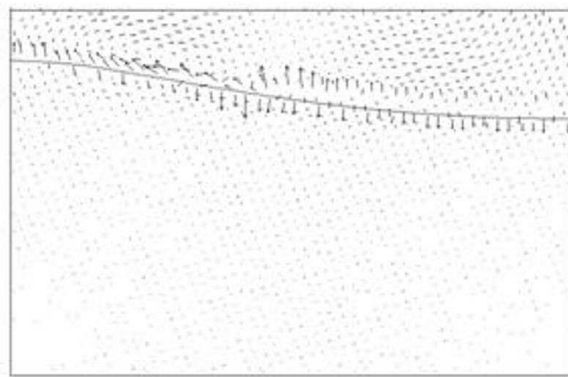
$t = \frac{1}{2} T, v_{\max} = 0,24$



$t = \frac{5}{8} T, v_{\max} = 0,13$

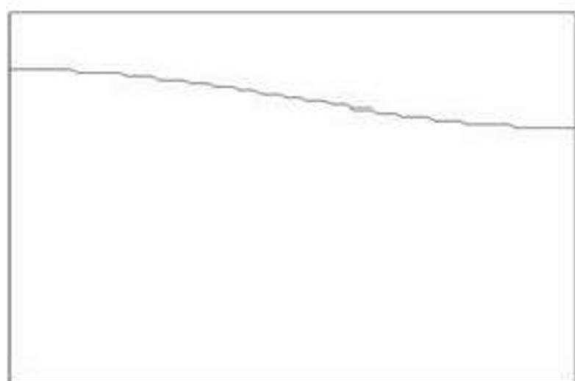


$t = \frac{7}{8} T, v_{\max} = 0,13$

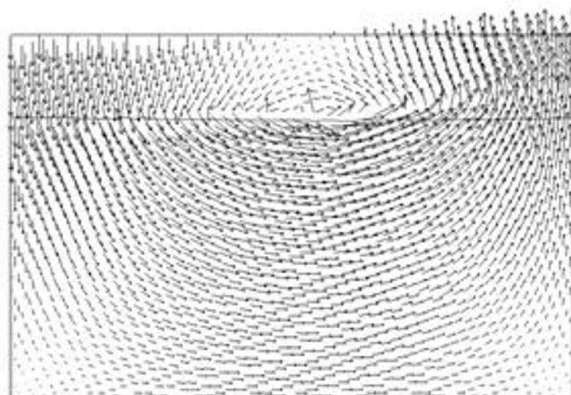


$t = T, v_{\max} = 0,15$

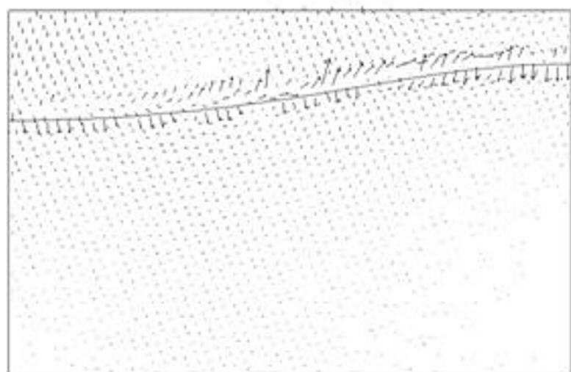
Рис. 7. Задача 2. Вариант 3, $t_m = 818,01$



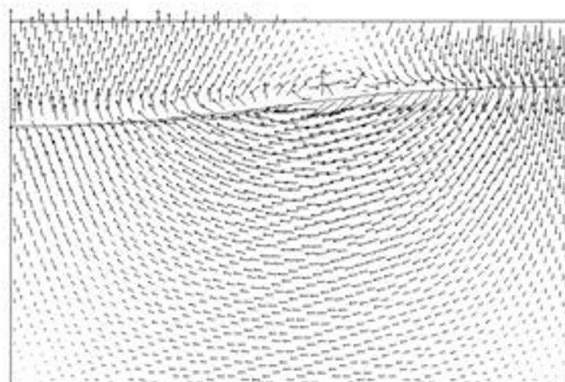
$t = 0$



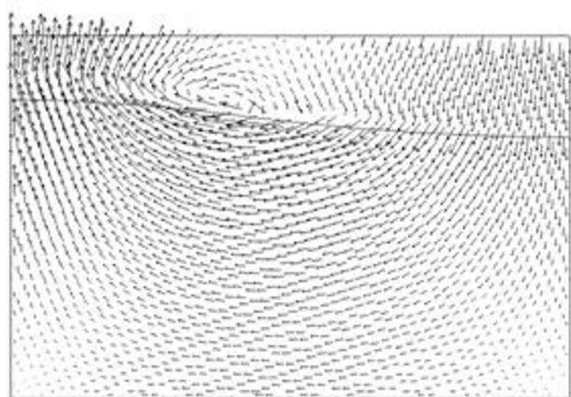
$t = \frac{1}{4} T, v_{\max} = 0,19$



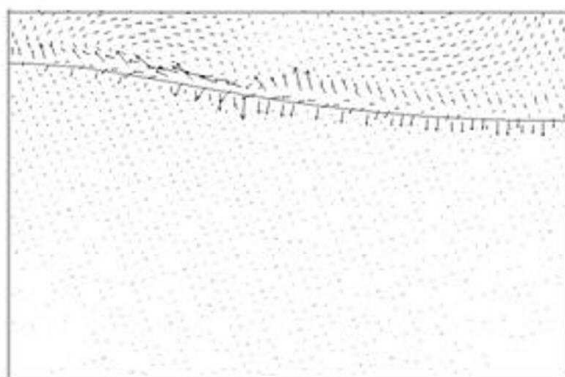
$t = \frac{1}{2} T, v_{\max} = 0,18$



$t = \frac{5}{8} T, v_{\max} = 0,20$



$t = \frac{7}{8} T, v_{\max} = 0,11$



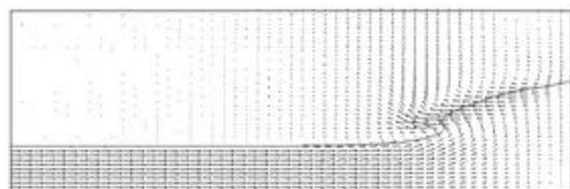
$t = T, v_{\max} = 0,16$

Рис. 8. Задача 2. Вариант 4, $t_m = 808,32$

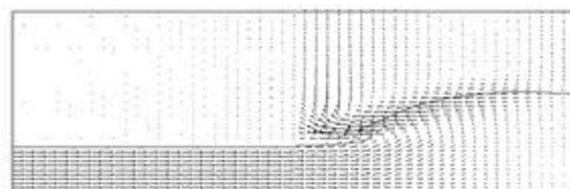
Задача 3. Формирование гидравлического прыжка. Данная задача рассчитывалась при $g = 1$ (рис. 9–12) и $g = 0,4548$ (рис. 13–16). Согласно рисункам численное формирование гидравлического прыжка существенно зависит от используемого варианта PISO-алгоритма. Особенно это заметно для $g = 0,4548$ при сравнении начальных стадий на рис. 13, 14 с начальными стадиями на рис. 15, 16. Некоторое ускорение расчетов в данной задаче наблюдается при использовании вариантов 1 (см. рис. 9, 13) и 3 (см. рис. 11, 15) PISO-алгоритма.

Заключение

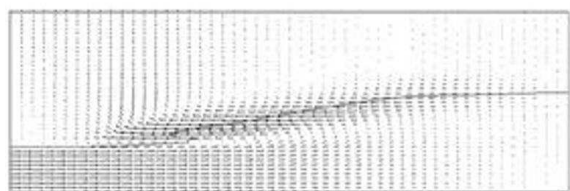
Рассмотрены четыре варианта конечно-объемной реализации известного алгоритма PISO на эйлеровой совмещенной сетке в применении к задачам динамики молекулярно несмешивающихся жидкостей. Варианты различаются способами коррекции потока (объемного расхода) и представления конвективного слагаемого в уравнении движения. Приведены результаты сравнительных расчетов трех типовых задач [3]: коллапс водяного столба, колебания жидкости в



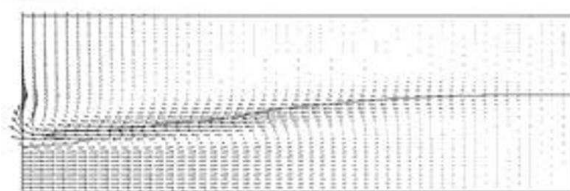
$t = 3,5, v_{\max} = 1,56$



$t = 4,9, v_{\max} = 2,53$

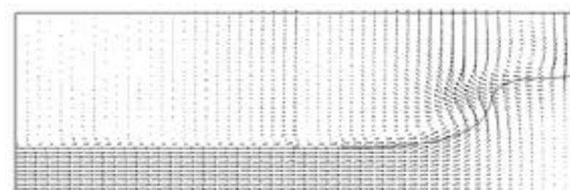


$t = 7,94, v_{\max} = 1,65$

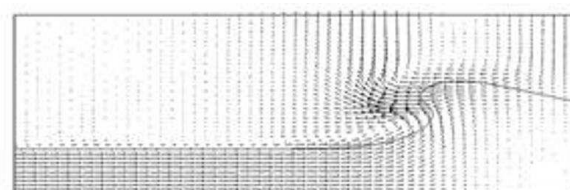


$t = 9,88, v_{\max} = 1,75$

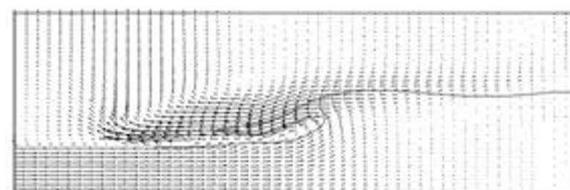
Рис. 9. Задача 3, $g = 1$. Вариант 1, $t_m = 8,73$



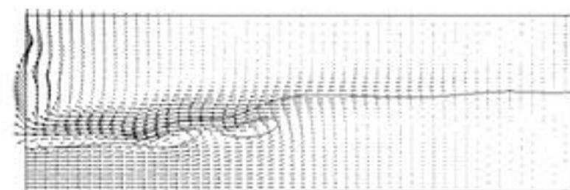
$t = 3,5, v_{\max} = 1,26$



$t = 4,9, v_{\max} = 2,52$

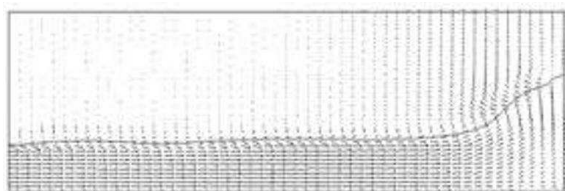


$t = 7,94, v_{\max} = 2,64$

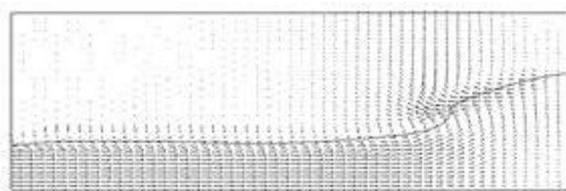


$t = 9,88, v_{\max} = 2,05$

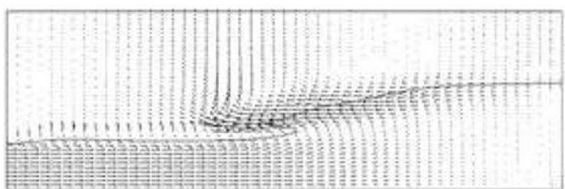
Рис. 10. Задача 3, $g = 1$. Вариант 2, $t_m = 14,95$



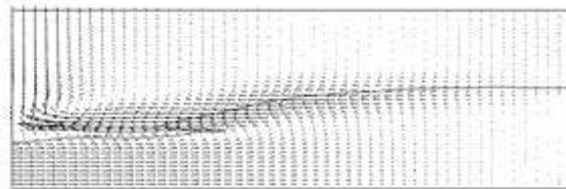
$t = 3,5, v_{\max} = 1,06$



$t = 4,9, v_{\max} = 1,25$

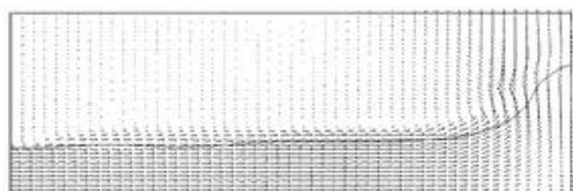


$t = 7,94, v_{\max} = 3,13$

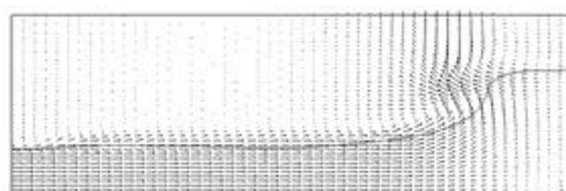


$t = 9,88, v_{\max} = 3,98$

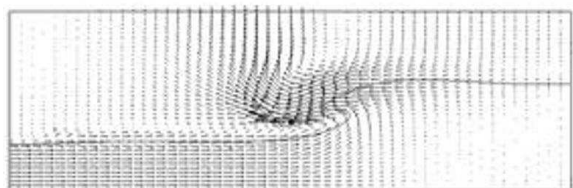
Рис. 11. Задача 3, $g = 1$. Вариант 3, $t_m = 9,6$



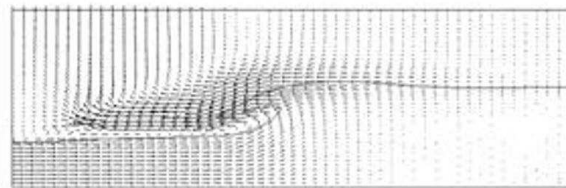
$t = 3,5, v_{\max} = 1,27$



$t = 4,9, v_{\max} = 1,57$



$t = 7,94, v_{\max} = 4,05$

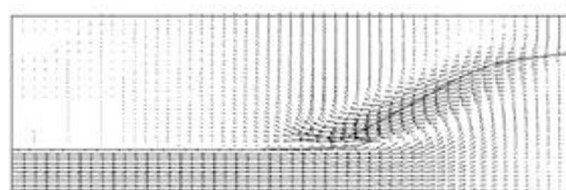


$t = 9,88, v_{\max} = 2,94$

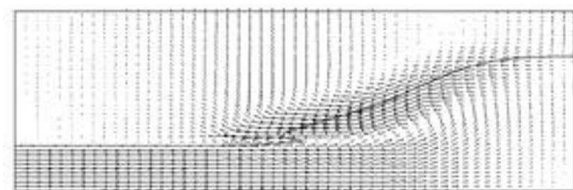
Рис. 12. Задача 3, $g = 1$. Вариант 4, $t_m = 13,04$



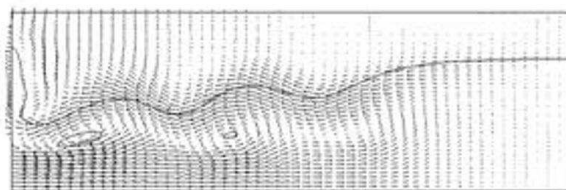
$t = 0,97, v_{\max} = 1,27$



$t = 7,10, v_{\max} = 1,67$



$t = 8,42, v_{\max} = 1,61$

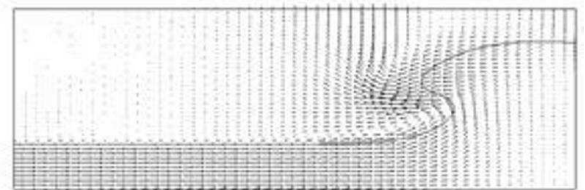


$t = 15,89, v_{\max} = 1,31$

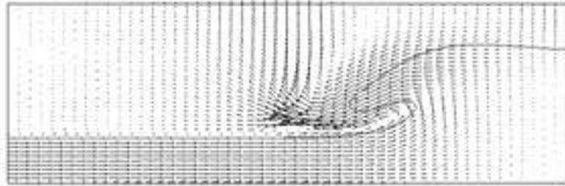
Рис. 13. Задача 3, $g = 0,4548$. Вариант 1, $t_m = 12,38$



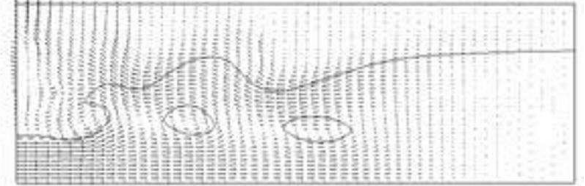
$$t = 0,97, \quad v_{\max} = 1,53$$



$$t = 7,10, \quad v_{\max} = 2,04$$

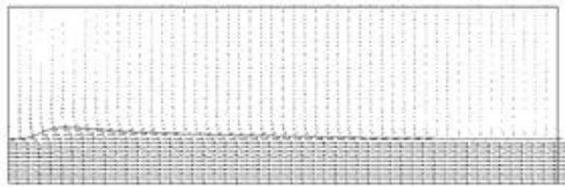


$$t = 8,42, \quad v_{\max} = 5,21$$

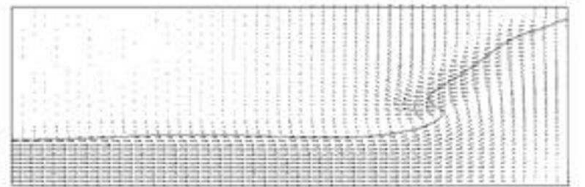


$$t = 15,89, \quad v_{\max} = 1,29$$

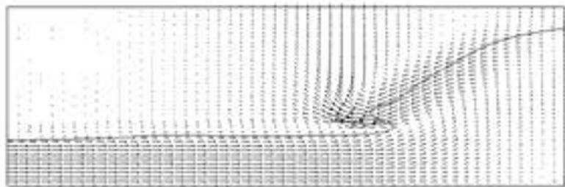
Рис. 14. Задача 3, $g = 0,4548$. Вариант 2, $t_m = 18,83$



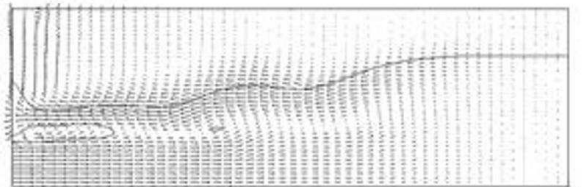
$$t = 0,97, \quad v_{\max} = 1,09$$



$$t = 7,10, \quad v_{\max} = 1,15$$

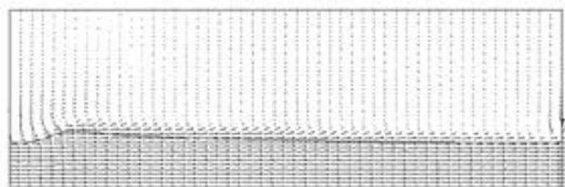


$$t = 8,42, \quad v_{\max} = 3,18$$

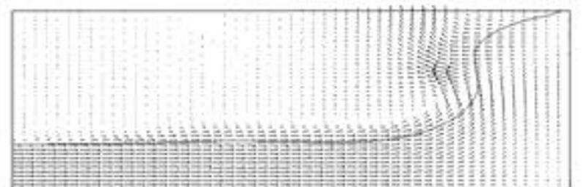


$$t = 15,89, \quad v_{\max} = 1,25$$

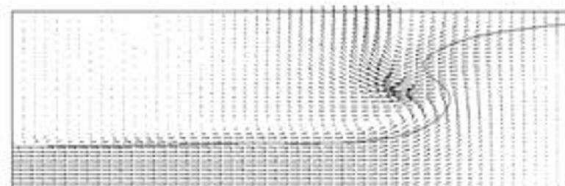
Рис. 15. Задача 3, $g = 0,4548$. Вариант 3, $t_m = 14,04$



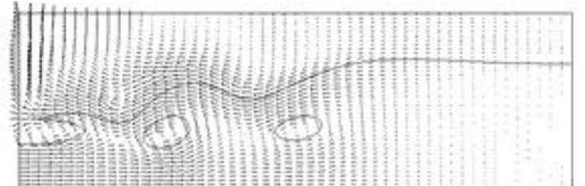
$$t = 0,97, \quad v_{\max} = 1,55$$



$$t = 7,10, \quad v_{\max} = 1,90$$



$$t = 8,42, \quad v_{\max} = 2,81$$



$$t = 15,89, \quad v_{\max} = 1,69$$

Рис. 16. Задача 3, $g = 0,4548$. Вариант 4, $t_m = 19,26$

сосуде и формирование гидравлического прыжка.

Полученные результаты показали, что использование модификаций PISO-алгоритма типа вариантов 1, 3, 4 (см. разд. 1) в рассматриваемом классе задач может приводить, с одной стороны, к ускорению расчетов, с другой, — к искажению решений. Таким образом, предпочтительным является вариант 2 (см. разд. 1), соответствующий описанному в [3] PISO-алгоритму.

Список литературы

1. *Issa R. I.* Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting // *J. Comp. Phys.* 1985. Vol. 62. P. 40—65.
2. *Tannehill J. C., Anderson D. A., Pletcher R. H.* Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. Washington: Taylor & Francis, 1997.
3. *Ubbink O.* Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces. PhD thesis. Imperial College, University of London, 1997.
4. *Rusche H.* Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions. PhD thesis. Imperial College, University of London, 2002.
5. *Ferziger J. H., Peric M.* Computational Methods for Fluid Dynamics. New York: Springer-Verlag, 2002.
6. *Chung T. J.* Computational Fluid Dynamics. Cambridge University Press, 2002.
7. *Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К. и др.* Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на многопроцессорных ЭВМ: базовые технологии и алгоритмы // Тр. XII Межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 11—15 октября 2010 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 215—230.
8. *Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К. и др.* Многофункциональный пакет программ ЛОГОС: Физико-математические модели расчета задач аэро-, гидродинамики и теплопереноса: Препринт № 111. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013.
9. *Waclawczyk T., Koronowicz T.* Remarks on prediction of wave drag using VOF method with interface capturing approach // *Archives of Civil and Mechanical Engineering.* 2008. Vol. 8. P. 5—14.
10. *Khrabry A. I., Smirnov E. M., Zaytsev D. K.* Solving the convective transport equation with several high-resolution finite volume schemes. Test computations // *Proc. 6th Int. Conf. on Computational Fluid Dynamics (ICCFD-6).* July 12—16, 2010. St. Petersburg, Russia / Ed. by A. Kuzmin. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. P. 535—540.

Статья поступила в редакцию 19.05.14.

APPLICATION OF THE PISO ALGORITHM TO MOLECULAR-IMMISCIBLE FLUID DYNAMICS SIMULATIONS / S. V. Yatsevich, V. V. Kurulin, D. P. Rubtsova (FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, Nizhny Novgorod region).

The paper considers some modifications of the finite-volume implementation of the known PISO algorithm on Eulerian combined grids as applied to molecular-immiscible fluid dynamics simulations. Results of comparative benchmark simulations for the one-velocity model implemented in the LOGOS application package are reported. Based on the results obtained, the most acceptable algorithm modification for the given class of problems is identified.

Keywords: immiscible fluids, one-velocity model, numerical simulations, interface, PISO, LOGOS.