УДК 532.6:51

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СВОБОДНОГО ИСПАРЕНИЯ КАПЛИ ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

В.Г. Речкалов

Приводится математическая модель процессов свободного испарения капли жидкости в воздухе и схема организации вычислительного процесса. Отмечены некоторые сложности реализации предлагаемого алгоритма и предлагаются методы их разрешения.

Ключевые слова: моделирование, метод конечных разностей, капля, жидкость, испарение.

Введение

Методом конечных разностей моделировались процессы испарения капли жидкости в воздушной среде. Процесс предполагался квазистационарным, и целью моделирования считалось нахождение его параметров методом установления. Скоростью движения границы раздела сред вследствие уменьшения объема капли в результате ее испарения мы пренебрегали.

Форма капли определяется из решения уравнения Лапласа для свободной поверхности жидкости.

Все уравнения математической модели приведены для осесимметричной задачи в ортонормированной цилиндрической системе координат.

Уравнения Навье-Стокса для несжимаемой жидкости [1, 2, 3].

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial r}+w\frac{\partial u}{\partial z}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P_{изб}}{\partial r}+\eta\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}-\frac{u}{r^2}\right) \tag{1}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial r}+w\frac{\partial w}{\partial z}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P_{изб}}{\partial z}+\eta\left(\frac{\partial^2 w}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right)+\beta\left(T-T_0\right)g \tag{2}$$

Уравнение неразрывности:

$$\mathrm{div}\bar{V}=\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{u}{r}+\frac{\partial w}{\partial z}=0 \tag{3}$$

Уравнение теплопередачи для стационарного состояния:

$$\theta\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)-\frac{\partial T}{\partial r}u-\frac{\partial T}{\partial z}w=0 \qquad (4)$$

где u и w – проекции скорости; r и z – цилиндрические координаты; $P_{изб}$ – избыточное над гидростатическим давление; η – коэффициент кинематической вязкости жидкости; β – температурный коэффициент объемного расширения жидкости; T – температура; T_0 – температура окружающей среды в удалении от капли; ρ – плотность жидкости; θ – температуропроводность жидкости; g – ускорение свободного падения.

Введем новые переменные:

$$\omega=\left(\frac{\partial w}{\partial r}-\frac{\partial u}{\partial z}\right)$$ – вихрь или ротор, (5)

ψ – функция тока,

$$ru=-\frac{\partial \psi}{\partial z};\quad rw=\frac{\partial \psi}{\partial r} \qquad (6)$$

С учетом введенных переменных первые три уравнения преобразуются к виду:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t}+u\frac{\partial \omega}{\partial r}+w\frac{\partial \omega}{\partial z}-\frac{u\omega}{r}=\eta\left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial \omega}{\partial r}+\frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2}-\frac{\omega}{r^2}\right)-\frac{g}{\rho_0}\frac{\partial \rho}{\partial r} \qquad (7)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}-\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}+\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}=r\omega \qquad (8)$$

Граничные условия для функции тока и ротора

Для функции тока вдоль всей границы принимаем $\psi = 0$.

Ротор на оси симметрии равен нулю. Значения ротора на верхней границу на каждом шаге итерации вычисляется по формуле (5).

На поверхности капли ротор вычисляется по формуле:

$$\omega=\frac{1}{\mu}\frac{\partial \sigma}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial s}+2\frac{V_t}{R} \qquad (9)$$

где μ – коэффициент динамической вязкости жидкости; σ – коэффициент поверхностного натяжения; s – длина дуги контура капли; V_t – скорость жидкости на границе раздела фаз; R – кривизна меридиана капли.

Граничные условия для уравнения теплопередачи

Значение температуры на верхней границе считается заданной и постоянной.

На оси капли $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ (10)

На поверхности капли считается заданным тепловой поток:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} n_r + \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z = -q \tag{11}$$

где λ – коэффициент теплопроводности жидкости; q – удельная плотность теплового потока к поверхности капли; n_1 и n_2 – направляющие векторы цилиндрической системы координат.

Процессы, протекающие в газовой фазе, моделируются теми же уравнениями динамики (7, 8) и уравнением теплопередачи (4). К этим уравнениям добавляется уравнение диффузии пара:

$$D\left(\frac{\partial^2 \rho_n}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \rho_n}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_n}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial \rho_n}{\partial r} u - \frac{\partial \rho_n}{\partial z} w = 0 \tag{12}$$

где D – коэффициент диффузии газа; p_n – плотность пара.

Граничные условия в газовой фазе

Температура на поверхности капли берется из решения задачи для жидкой фазы. Для точек на оси справедливо условие аналогичное условию (10). На всей остальной границе температура принимается равной температуре в лаборатории.

Плотность пара на поверхности капли принимается равной плотности насыщенного пара при соответствующей температуре. Испарение капли в эксперименте происходило в специальной камере с прозрачными непоглощающими боковыми стенками, поэтому на боковой границе должно выполняться условие: $\frac{\partial \rho_n}{\partial r} = 0$. Такое же условие выполняется на оси области. Истечение пара в эксперименте происходило через нижнюю или верхнюю границу камеры. Поэтому на верхней и нижней границе области плотность пара принимается равной плотности пара в лаборатории.

Для функции тока также вдоль всей границы принимаем $\psi = 0$.

Для ротора граничные значения для всей границы, за исключением криволинейной поверхности капли, вычисляются по формуле (5). Вдоль оси симметрии ротор равен нулю.

На криволинейной поверхности ротор вычисляется по формуле:

$$\mathrm{rot}\overline{V} = \omega = \frac{\partial V_t}{\partial r} - \frac{V_t}{R} \tag{13}$$

Схема алгоритма

Решение выполняется отдельно для жидкой и газовой фазы.

Шаг 1. Решение задачи для жидкой фазы при заданной постоянной плотности теплового потока на поверхности капли. Начальное значение плотности теплового потока назначается на основе экспериментальных данных или произвольно.

Шаг 2. Решение задачи для газовой фазы при заданных значениях температуры и скорости течения на поверхности капли. Значение температуры и скорости течения берется из решения для жидкой фазы. При этом воздух и пар считались смесью идеальных газов. При расчетах учитывалась зависимость теплоемкости, теплопроводности и вязкости от температуры и состава смеси на основе эмпирических данных.

Шаг 3. Решение задачи для жидкой фазы при заданных значениях плотности теплового потока и силах вязкого трения на границе раздела фаз.

Пункты 2 и 3 повторяются. Если расчетные значения на границе раздела фаз для двух последовательных повторений отличаются на малую величину, то решение считается найденным.

При реализации данного алгоритма мы столкнулись с целым рядом затруднений, разрешению которых и посвящена данная статья.

Особенности реализации

Первая проблема, с которой пришлось столкнуться – необходимость аппроксимации функции температуры на поверхности капли гладкой функцией. Основной причиной возникновения конвекции в испаряющейся жидкости является зависимость поверхностного натяжения жидкости от температуры. Касательные напряжения на поверхности рассчитываются по формуле:

$$\mathrm{rot}\overline{V} = \omega = \frac{\partial V_t}{\partial r} - \frac{V_t}{R}, \qquad (14)$$

где σ – поверхностное натяжение; T – температура на поверхности; s – длина дуги образующей поверхности капли; B – температурный коэффициент поверхностного натяжения.

Формула (14) предполагает вычисление производной от температуры по длине дуги на каждом шаге итерации.

Характерные особенности температурной зависимости хорошо аппроксимируется двумя кубическими параболами на двух интервалах (простейший сплайн).

$$T_{аппр} = \begin{cases} a_1x^3 + b_1x^2 + c_1x; при x \in [0,a] \\ a_2x^3 + b_2x^2 + c_2x + d_2; при x \in (a,L] \end{cases}$$

Коэффициенты уравнений и величины интервалов определяются из условия минимума суммы квадратов отклонений аппроксимирующей кривой от расчетной.

Среднеквадратичная относительная ошибка аппроксимации температуры 0,07 %

Следующая проблема, с которой пришлось столкнуться – это проблема запуска процесса вычислений. В самом начале работы программы наблюдается резкий рост значений функций ротора и тока в нескольких особенно «плохих» нерегулярных узлах вблизи криволинейной границы капли. Это приводит к неограниченному росту скоростей и появлению особенностей у температурного поля. В некоторых случаях проблему удается решить уменьшением шага итерации по времени. Изменением шага удается уменьшить количество «плохих» точек, но полностью избавиться от них невозможно. Особенно много плохих точек возникает при использовании мелких сеток: 200×200 и 300×300.

Наиболее радикальным средством решения этой проблемы является плавное приложение нагрузки. Мы использовали два варианта этого метода. В первом случае мы постепенно увеличивали величину плотности теплового потока к поверхности капли, начиная с некоторой малой величины, до достижения требуемого значения. Во втором случае мы поступали аналогичным образом с температурным коэффициентом поверхностного натяжения. Оба метода эффективно работают и приводят к одному и тому же решению в установившемся режиме. Важно, что подобную процедуру достаточно выполнить один раз. Если в дальнейшем понадобится выполнить расчет при других граничных условиях, достаточно использовать одно из уже имеющихся решений в качестве начального состояния капли, чтобы избежать приграничного расхождения функций.

После решения задачи для жидкой фазы мы получаем значения температуры и скорости в узлах на поверхности границы раздела фаз. Эти значения используются при расчетах в газовой фазе в качестве граничных условий. Для переноса этих значений на другую сетку, которая используется в дальнейших расчетах мы использовали степенную аппроксимацию с определением коэффициентов по методу наименьших квадратов.

Расчеты в газовой сфере (шаг 2), обладая собственной спецификой, выполняются в два этапа. На первом этапе выполняется предварительный расчет с использованием блочно-регулярной сетки. На втором этапе производится более подробный расчет на мелкой равномерной сетке в относительно малой области, окружающей каплю.

Одной из проблем, связанных с расчетами в газовой фазе, является проблема граничных условий. Естественно считать состояние атмосферы вдали от испаряющейся капли невозмущенным. В этом случае предполагается, что движение газа на границах области отсутствует а плотность пара испаряющейся жидкости равна среднему значению этой величины в лаборатории. Температура на границе области также может считаться равной температуре в лаборатории.

Однако это допущение тем точнее, чем больше размеры области по сравнению с размерами испаряющейся капли. С другой стороны, чем большую мы выбираем область для расчетов, тем больше получаем неизвестных. С другой стороны наиболее точные и подробные значения расчетных величин в данной задаче нас интересуют в основном на поверхности капли и вблизи нее.

Данная проблема частично решается за счет использования при расчетах блочно-регулярных сеток. Ячейки самой мелкой сетки вблизи поверхности капли неразличимы. Использование блочно-регулярной сетки позволило существенно сократить количество неизвестных при расчетах в газовой фазе.

Скорость расчетов при использовании блочно-регулярной сетки была достаточно большой для того, чтобы визуально наблюдать развитие конвективных процессов во времени. Для капли воды были выполнены расчеты при различной влажности воздуха в лаборатории. Обнаружено различное направление конвективных вихрей при низкой и высокой влажности воздуха.

Вычисления первого шага моделирования в газообразной среде заканчиваются определением значений температуры, функции тока и плотности пара вдоль прямоугольной границы.

Дальнейшие расчеты выполняются в малой области на равномерной мелкой сетке, что позволяет получить детальный характер функций массового и теплового потоков на поверхности раздела фаз.

Заключение

Особенности моделирования процессов испарения капли жидкости методом конечных разностей в большой степени определяются важной ролью в этих процессах явлений на криволинейной границе раздела фаз с одной стороны, и нерегулярным характером расположения узлов сетки вдоль этой границы с другой стороны. На поверхности протекают процессы испарения жидкости, поглощения тепла, возникают поверхностные силы, ответственные за конвективные течения внутри жидкости. В то же время нерегулярный характер расположения узлов сетки на границе раздела затрудняет, а в некоторых случаях даже делает невозможным расчет значений некоторых величин (поверхностный градиент температуры) на поверхности. Для решения данной проблемы в нашей работе использовалась аппроксимация гладкими функциями. Поскольку при решении задачи приходилось использовать последовательно три различные сетки, для переноса информации с одной сетки на другую также использовалась аппроксимация.

Отличительной чертой нашей работы является и то, что широко использовались эмпирические зависимости поверхностного натяжения от температуры для жидкости и коэффициента теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности и вязкости от температуры и состава газа для газовой фазы. Для использования этих зависимостей, большая часть которых представлена в табличной форме, мы также использовали аппроксимацию.

Выбор аппроксимирующей функции для каждого случая определялся индивидуально.

Особенности расчетов в газообразной фазе проистекали из противоречия между необходимостью рассматривать процессы в достаточно большой области и потребностью иметь наиболее точные и подробные значения выходных функций на границе раздела фаз. Для разрешения данного противоречия мы разделили процедуру вычисления параметров на два этапа. На первом этапе, используя блочно-регулярную сетку, мы получили общую картину в большой области. На втором этапе эту картину детализировали в области непосредственно прилегающей к границе раздела фаз.

Конечно, нельзя здесь не сказать и процедуре начального запуска процесса вычислений. Особенность, с которой мы столкнулись, конечно имеет общий характер для всех динамических моделей. Наличие «плохих» нерегулярных точек на криволинейной поверхности и вблизи нее, характерных для метода конечных разностей, еще более затрудняет успешный старт программы вычислений. Задание мягкого постепенного приложения в нашем случае тепловой нагрузки может считаться общим методом решения подобных проблем.

На основе выполненных расчетов для воды и толуола были получены значения температуры и давления на поверхности жидкости и произведена оценка искажения формы испаряющейся капли в соответствие с методикой, описанной в [6]. Сравнение расчетных искажений с экспериментальными данными, полученными в соответствии с методиками, приведенными в статьях [4, 5], дали удовлетворительные результаты.

Для толуола и воды были определены погрешности в определении поверхностного натяжения, связанные с искажением формы капли, которые оцениваются соответственно в 2,5 % и 0,5 %.

Библиографический список

1. Седов, Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. / Л.И. Седов. – М: Наука, 1983. – 528 с.

2. Бараш, Л.Ю. Испарение и динамика лежащей на подложке капли: дис. … канд. ф.-мат. наук. – М., 2009.

3. Берковский Б.М. Вычислительный эксперимент в конвекции / Б.М. Берковский, В.К. Полевиков. – Мн.: Университетское, 1988. – 167 с.

4. Речкалов, В.Г. Определение радиуса кривизны в вершине лежащей капли по наблюдениям картин интерференции / Г.П. Пызин, В.Л.Ушаков, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22 (155) – С. 91–96.

5. Речкалов, В.Г. Компьютерная обработка изображения в методе определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости по форме поверхности капли / В.Г. Речкалов, В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2010. – Вып. 3. – № 30(206) – С. 83–88.

6. Речкалов, В.Г. Моделирование процесса измерения поверхностного натяжения по форме поверхности капли при наличии погрешностей формы и положения державки капли / В.Г. Речкалов // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Том. 5. – №1 – С. 88–94

К содержанию