

Научная статья

Применение метода сквозного счета для моделирования несмешивающихся жидкостей с большим поверхностным натяжением

Т.П. Любимова, А.О. Иванцов, О.А. Хлыбов

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Российская Федерация

Одно из самых важных преимуществ метода сквозного счета заключается в его способности естественным образом обрабатывать топологические изменения. Вместо явного отслеживания поведения границы раздела сред вводится изоповерхность функции уровня и изучается ее динамика. Это позволяет проводить численное моделирование динамики многофазной жидкости как одной среды с изменяющимися параметрами. Известно, что недостатком метода сквозного счета является возможность появления нефизичных колебаний поля скорости вблизи поверхности раздела сред, возникающих при больших поверхностных силах вследствие погрешности вычисления кривизны поверхности раздела и высоких градиентов других функций в переходном слое. Другой недостаток метода состоит в том, что в ходе моделирования за счет погрешности вычислений масса среды в расчетной области не постоянна. В настоящей работе апробируется несколько модификаций метода сквозного счета, дающих возможность снизить потери масс жидкостей, улучшить сходимость при неявном решении уравнения переноса и уменьшить колебания скорости вблизи границы раздела жидкостей в случае больших значений коэффициента поверхностного натяжения. Предложенные подходы испытаны на решении стандартной тестовой задачи динамики двух несмешивающихся жидкостей.

Ключевые слова: метод функции уровня, несмешивающиеся жидкости, численное моделирование, поверхностное натяжение, метод конечных объемов

Получение: 08.11.2024 / *Публикация онлайн:* 30.12.2024

УДК 519.632.4; 004.02; 532.6

1. Введение

При численном моделировании поведения двух несмешивающихся сред (жидких, газообразных) возникает необходимость отслеживать динамику их поверхности раздела, топологию которой значительно осложняют процессы образования и слияния пузырей и капель. В [1, 2] авторами предложен метод сквозного счета, в котором двухслойная система полагается одной средой с параметрами, зависящими от функции маркера. В рамках данного подхода поверхность раздела представляется в виде переходного слоя, в котором плотность и вязкость объединенной среды резко изменяются: с одной стороны переходного слоя они соответствуют первой жидкости, с другой стороны — второй. При этом поверхностные капиллярные силы рассматриваются как объемные, действующие внутри переходного слоя. В [1] в качестве маркерной функции выступает плотность, в [2] — цветовая функция. Одним из самых значительных преимуществ метода сквозного счета является возможность естественным образом отслеживать топологические изменения дискретной расчетной области без специальной обработки или повторного создания аппроксимирующей сетки.

В [3] для описания динамики границы раздела сред предложено использовать функцию уровня (level set function), положительную в одной среде и отрицательную в другой. Нулевое значение функции уровня соответствует положению границы раздела, а ее модуль — расстоянию до границы раздела. При этом моделирование включает проведение процедуры повторной инициализации функции уровня. В [4] показано, что в ходе процедуры повторной инициализации функции уровня нарушается баланс массы жидкостей, и поэтому реализован алгоритм дополнительной корректировки масс.

Проблема сохранения масс жидкостей — одна из основных трудностей при использовании метода сквозного счета. Для минимизации вариаций массы в работах [4–6] при решении уравнений переноса и повторной инициализации применялась комбинация пространственных дискретизаций по схемам WENO высокого порядка точности [7]. Кроме того, в работах [8] и [6] авторы обращаются к временным схемам Рунге–Кутты, соответственно, 2-го и 3-го порядков точности для повторной инициализации функции уровня. Однако даже такая численная реализация не всегда гарантирует сохранение массы, что показано в работе [9]. К тому же схемы WENO при неструктурированных расчетных сетках остаются сложными для промышленного применения [10]. Другим подходом к уменьшению изменения масс жидкостей является использование неравномерной вычислительной сетки, адаптирующейся в ходе моделирования таким образом, чтобы обеспечить высокую плотность узлов вблизи границы раздела фаз [5, 11]

Еще один недостаток метода сквозного счета — это вероятность появления нефизичных колебаний поля скорости вблизи поверхности раздела сред, возникающих при больших поверхностных силах вследствие значительной погрешности вычисления кривизны поверхности раздела и больших градиентов других функций в переходном слое. Для снижения подобных колебаний в [12–15] разработан метод призрачной жидкости (GFM method), являющийся модификацией метода сквозного счета.

В настоящей работе предлагается несколько модификаций метода сквозного счета, позволяющих уменьшить потери масс жидкостей, улучшить сходимость при неявном решении уравнения переноса и снизить колебания скорости вблизи границы раздела сред.

2. Уравнения движения

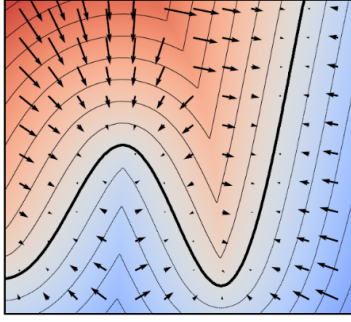


Рис. 1. Изолинии дистанционной функции (сплошная линия – граница раздела жидкостей)

Рассмотрим поведение в поле силы тяжести двухслойной системы несмешивающихся жидкостей с различающимися плотностями — ρ_1, ρ_2 , и вязкостями — η_1, η_2 (индексы 1 и 2 относятся к нижней и верхней жидкостям соответственно), и деформируемой границей раздела. Численное моделирование проведем методом сквозного счета (методом функции уровня), который основан на представлении двухслойной системы как одной среды с параметрами, зависящими от дистанционной функции (функции уровня) φ . Данная функция положительна в одной жидкости и отрицательна в другой. Поверхность, отвечающая нулю дистанционной функции, совпадает с границей раздела жидкостей, а расстояние до границы раздела жидкостей измеряется модулем дистанционной функции (Рис. 1). Поверхность раздела «размывается» в переходный слой с резко меняющимися параметрами и толщиной, которая является параметром модели и поддерживается постоянной с помощью процедуры уточнения

дистанционной функции. Поверхностные капиллярные силы аппроксимируются объемными, зависящими от дистанционной функции.

В соответствии с идеями метода функции уровня [4, 5], двухслойную систему жидкостей считаем одной жидкостью с плотностью и вязкостью, меняющимися в переходном слое вблизи границы раздела. Уравнения динамики такой среды содержат объемную силу \mathbf{F}_{st} , описывающую поверхностные капиллярные силы. В результате уравнения движения запишутся в виде:

$$\rho(\varphi) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\varphi) \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\text{Re}} + \frac{\rho(\varphi) \boldsymbol{\gamma}}{\text{Fr}} + \frac{\mathbf{F}_{st}}{\text{We}}, \quad (1)$$

$$\text{div} \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{u} — вектор скорости, p — давление, $\boldsymbol{\gamma}$ — единичный вектор, направленный вертикально вниз, $\rho(\varphi)$ — плотность жидкости, зависящая от дистанционной функции φ , $\boldsymbol{\tau}$ — тензор вязких напряжений:

$$\tau_{ij} = \eta(\varphi) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3)$$

где $\eta(\varphi)$ — динамическая вязкость.

Уравнения (1)–(3) записаны в безразмерной форме, в качестве единиц измерения длины, скорости, времени, плотности, вязкости, давления использованы следующие величины:

$$L, U, L/U, \rho_1, \eta_1, \rho_1 U^2,$$

где L, U — характерные линейный размер задачи и скорость жидкости. Также уравнения содержат безразмерные комплексы: число Рейнольдса $\text{Re} = \rho_1 L U / \eta_1$, число Фруда $\text{Fr} = U^2 / (gL)$, число Вебера $\text{We} = \rho_1 L U^2 / \alpha$, в которых g — ускорение свободного падения, α — коэффициент поверхностного натяжения на границе раздела сред.

Плотности и вязкости определяются по дистанционной функции следующими формулами:

$$\begin{aligned} \rho(\varphi) &= \lambda + (1 - \lambda) H(\varphi), \\ \eta(\varphi) &= \mu + (1 - \mu) H(\varphi). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\lambda = \rho_2 / \rho_1$; $\mu = \eta_2 / \eta_1$; $H(\varphi)$ — функция Хевисайда, описывающая изменение свойств в переходном слое на границе раздела фаз:

$$H_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi < -\varepsilon, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varphi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon}\right) \right], & |\varphi| \leq \varepsilon, \\ 1, & \varphi > \varepsilon, \end{cases} \quad (5)$$

где ε — полутолщина переходного слоя. Объемная сила, описывающая поверхностное натяжение, вычисляется по формуле [11]:

$$\mathbf{F}_{st} = -k(\varphi) \nabla H_\varepsilon, \quad (6)$$

при этом $k(\varphi)$ — кривизна поверхности раздела сред.

При расчете динамики поверхности раздела сред обычно решается уравнение переноса для дистанционной функции: [3, 5, 11]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \varphi = 0. \quad (7)$$

Однако в настоящей работе предлагается решать это уравнение переноса для модифицированной функции, описывающей движение границы раздела сред. Преимущества данного подхода оцениваются ниже (см. раздел 7).

3. Методика расчета поверхностных сил

Основная сложность вычисления объемной силы, моделирующей поверхностные эффекты, связана с численными трудностями, возникающими вследствие малости толщины переходного слоя на границе раздела сред. Поэтому при использовании сеточных методов возрастает погрешность численной аппроксимации производных. Однако погрешность расчета производных функции Хевисайда можно существенно снизить, если переписать формулу (6) в виде:

$$\mathbf{F}_{st} = -k(\varphi)H'_\varepsilon \nabla \varphi, \quad (8)$$

где

$$H'_\varepsilon(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi < -\varepsilon, \\ \frac{1}{\varepsilon} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon}\right) \right], & |\varphi| \leq \varepsilon, \\ 0, & \varphi > \varepsilon. \end{cases} \quad (9)$$

Таким образом, вместо вычисления градиента функции Хевисайда требуется найти градиент дистанционной функции, которая линейна вблизи границы раздела сред. Поэтому ее аппроксимация даже простой центральной разностью будет давать результат, близкий к точному решению.

Как известно, кривизна поверхности раздела равна дивергенции вектора нормали к ней, который в свою очередь может быть определен по дистанционной функции:

$$k(\varphi) = \operatorname{div}(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}. \quad (10)$$

При расчете кривизны необходимо вычислять вторые производные дистанционной функции, поэтому переходный слой на границе раздела сред следует аппроксимировать сеткой с достаточным числом узлов (обычно не менее 6). Данное требование приводит к существенному увеличению размера расчетной сетки, так как переходный слой при отыскании плотности и вязкости должен оставаться тонким, чтобы динамика системы моделировалась корректно. В настоящей работе предлагается при расчете поверхностных сил расширять переходный слой. В частности, в реализованном алгоритме поверхностные силы находятся по следующей формуле:

$$\mathbf{F}_{st} = -f \nabla \varphi, \quad f = k(\varphi)H'_{2\varepsilon} \frac{\rho_\varepsilon}{\rho_{2\varepsilon}}, \quad (11)$$

где переменные с индексом 2ε отвечают переходному слою толщиной, увеличенной в 2 раза.

На рисунке 2 показан пример расчета объемной силы \mathbf{F}_{st} по формулам (6) и (11). Из рисунка видно, что при использовании расширенного переходного слоя удастся значительно снизить градиенты поверхностных сил вблизи границы раздела сред. Данный подход позволяет уменьшить базовую ширину переходного слоя, что значительно повышает точность вычислений без увеличения размера расчетной сетки. В настоящей работе вычисления выполнены при $\varepsilon = 2h$, где h — шаг сетки.

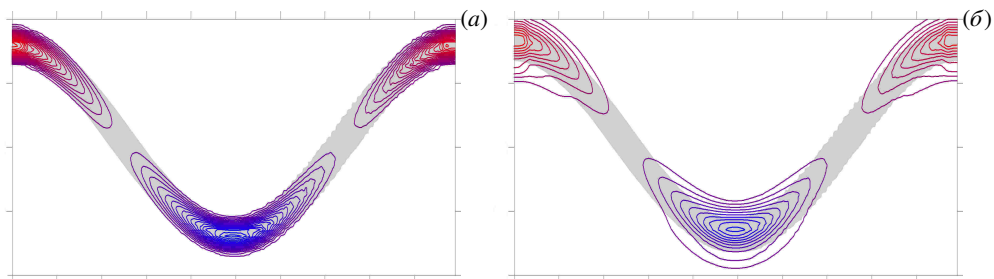


Рис. 2. Изолинии амплитуды объемной силы f , рассчитанной в соответствии со стандартным подходом (а) и при расширенном переходном слое (б)

4. Временная дискретизация уравнения Навье–Стокса

Другим важным аспектом реализации метода сквозного счета является применение схемы 2-го порядка по времени. Кроме известного факта, что 2-й порядок по времени рекомендуется применять для решения любых нестационарных задач, использование данной схемы позволило снизить «нефизические» колебания поля скорости вблизи границы раздела сред. Далее приводится краткое описание пространственной и временной дискретизации уравнений движения.

Уравнение Навье–Стокса (1) может быть записано в виде:

$$\rho(\varphi) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{P} + \mathbf{Conv} + \mathbf{F} + \mathbf{D}, \quad (12)$$

где $\mathbf{P} = -\nabla p + \rho(\varphi)\boldsymbol{\gamma}/Fr$ содержит давление и гравитационное слагаемое, $\mathbf{Conv} = -\rho(\varphi)(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ — конвективное слагаемое, \mathbf{F} — сила поверхностного натяжения, $\mathbf{D} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}/Re$ — диффузия импульса.

Временная дискретизация уравнений проводилась методами 2-го порядка точности. При этом, с целью повышения устойчивости алгоритма, для дискретизации разных слагаемых можно применять разные временные схемы [16]. Для аппроксимации производной по времени в уравнении переноса дистанционной функции и в уравнении Навье–Стокса для слагаемого, описывающего диффузию импульса, использовалась неявная схема Кранка–Николсон. Уравнение (12) записывалось в виде:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \delta t (\mathbf{D}^{n+1} + \mathbf{D}^n) + \mathbf{R}, \quad (13)$$

где \mathbf{u}^n , \mathbf{D}^n — поле скорости и вязкое слагаемое на текущем шаге по времени, \mathbf{u}^{n+1} , \mathbf{D}^{n+1} — соответствующие поля на новом шаге по времени, \mathbf{R} — остальные слагаемые уравнения (12).

Для временной аппроксимации поверхностных сил выбрана явная схема Рунге–Кутты 2-го порядка точности (схема предиктор–корректор). Применение явной схемы объясняется нелинейностью формул для вычисления кривизны поверхности раздела сред. Таким образом, слагаемое \mathbf{F} в уравнении (12) рассчитывалось в два этапа:

а) оценивались поверхностные силы

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \delta t (\mathbf{F}^n); \quad (14)$$

б) осуществлялась корректировка поверхностных сил для достижения 2-го порядка точности

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \delta t (\mathbf{F}(\mathbf{u}^*) + \mathbf{F}^n). \quad (15)$$

Конвективное слагаемое аппроксимировалось в конечных разностях по явной двухслойной схеме Адамса–Башфорта 2-го порядка точности:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{3}{2} \mathbf{Conv}^n - \frac{1}{2} \mathbf{Conv}^{n-1} + \mathbf{R}. \quad (16)$$

Применение явной схемы для конвективных слагаемых позволило реализовать пространственную дискретизацию с помощью разностей против потоков со стабилизацией.

5. Пространственная дискретизация уравнения Навье–Стокса и метод искусственной сжимаемости

Пространственная дискретизация уравнений проводилась методом конечных объемов. Согласно методу, расчетная область делилась на конечное число контрольных объемов. В центре каждого контрольного объема на основе уравнений сохранения, записанных в интегральной форме, вычислялось значение переменной. Поверхностные и объемные интегралы аппроксимировались посредством конечных разностей 2-го порядка точности.

Применение метода конечных объемов позволило построить консервативную схему решения и минимизировать изменение массы жидкостей, вызванное погрешностями численных методов и вычислительными погрешностями. Для повышения точности метода конечных объемов расчеты проводились на разнесенной сетке. В центрах контрольных объемов вычислялось давление, дистанционная функция (а также другие вспомогательные поля, такие как поле кривизны). На гранях контрольного объема рассчитывались компоненты скорости. При этом для обеспечения устойчивости счета дискретный аналог конвективного слагаемого уравнения Навье–Стокса получен на основе формул разностей против потоков со стабилизацией (алгоритм ENO [17]).

Решение уравнения Навье–Стокса (12) осуществлялось с помощью метода искусственной сжимаемости. Его основная идея заключается в добавлении фиктивной производной давления: $\beta \partial \rho / \partial \tau$ — фиктивное время в уравнении неразрывности (2). Здесь β — коэффициент, характеризующий искусственную сжимаемость (в расчетах принято $\beta = 1$). В результате ненулевая невязка уравнения неразрывности приводит к возмущению поля давления, которое в свою очередь через уравнения движения воздействует на поле скорости. На каждом шаге по времени проводится интегрирование по фиктивному времени τ . При $\partial \rho / \partial \tau$ вклад искусственно введенной поправки исчезает и выполняется исходное уравнение неразрывности.

6. Решение уравнения переноса

В методе сквозного счета динамика поверхности раздела описывается с помощью решения уравнения переноса для дистанционной функции. Однако при консервативной схеме решения, основанной на методе конечных объемов, уравнение переноса, записанное относительно функции уровня, может приводить к нарушению баланса массы. Данный эффект объясняется тем, что функция уровня не является консервативной, так как она по

определению описывает расстояние до границы. Интеграл от функции уровня по объему расчетной области может меняться в ходе моделирования в очень значительных пределах. Несмотря на это использование функции уровня при вычислении поля скорости с высокой точностью не приводит к существенным потерям массы. Однако в ходе моделирования могут возникать ситуации, когда поле скорости не полностью соленоидально. В таком случае становится оправданным применение другой функции при решении уравнения переноса.

В настоящей работе уравнение переноса (7) решается для расширенной функции Хевисайда, вычисляемой по формуле:

$$H_w(\varphi) = \begin{cases} 0, & \varphi < -\epsilon, \\ \frac{1}{2} + \frac{\varphi}{\epsilon} \left[\frac{3}{4} - \left(\frac{\varphi}{2\epsilon} \right)^2 \right], & |\varphi| \leq \epsilon, \\ 1, & \varphi > \epsilon, \end{cases} \quad (17)$$

где ϵ — полутолщина расширенного переходного слоя. Расчеты проводятся при $\epsilon = 6\epsilon$. Преимуществом данного варианта функции Хевисайда является то, что существует обратное преобразование:

$$\varphi(H_w) = \begin{cases} -\epsilon, & H_w \leq 0, \\ \epsilon \left[\frac{\sqrt{3}}{2} I \left(\frac{1-\Theta}{\Theta} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1+\Theta}{\Theta} \right) \right], & \left| H_w - \frac{1}{2} \right| < \frac{1}{2}, \\ \epsilon, & H_w \geq 1. \end{cases} \quad (18)$$

Здесь $\Theta = \left(1 - 2H_w + 2\sqrt{H_w^2 - H_w} \right)^{1/3}$ — функция комплексного переменного. Таким образом, после решения уравнения переноса для функции H_w можно легко восстановить дистанционную функцию по (18).

На рисунке 3 показаны графики функций H_ϵ и H_w и их производных. Видно, что расширенная функция Хевисайда H_w более плавно меняется в переходном слое. Необходимо отметить, что функция H_w может быть пригодной для расчета поверхностных сил (11), несмотря на то, что ее вторая производная на границе переходного слоя не обнуляется (см., Рис. 3в). Следует отметить, что в задачах механики сплошных сред для сглаживания скачка функции часто употребляется функция ошибок [18], которая не является кусочно-заданной. Данная функция также может быть использована для расчета поверхностных сил. Однако эффективность ее применения требует дополнительного анализа.

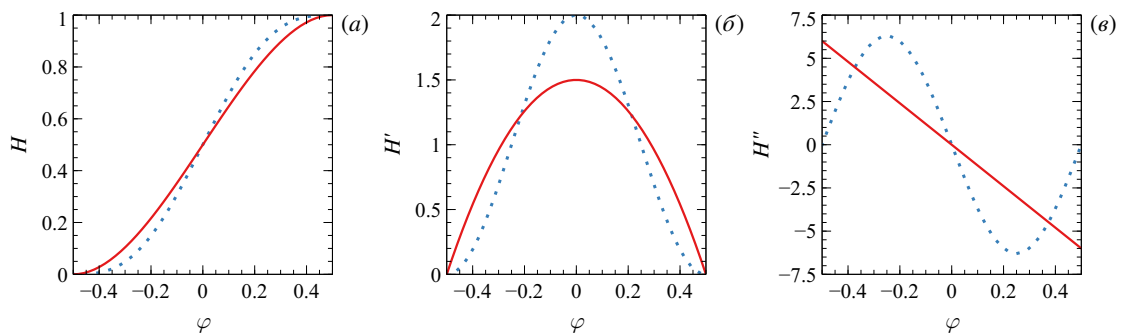


Рис. 3. Функции Хевисайда H (точечная линия) и H_w (сплошная линия) (а), их первые (б) и вторые (в) производные при $\epsilon = \epsilon = 0.5$

7. Процедура уточнения дистанционной функции

В ходе расчетов на каждом шаге по времени проводится коррекция нулевого уровня дистанционной функции и толщины переходного слоя, размеры которого должны поддерживаться постоянными. Данная процедура позволяет, не изменяя положения границы раздела сред, свести к минимуму сеточную диффузию и размывание переходного слоя на границе раздела сред. Теоретическое обоснование и основные уравнения, используемые для уточнения дистанционной функции, представлены в работе [11] и здесь не приводятся, описывается лишь численный алгоритм данной процедуры.

Во всей расчетной области решается уравнение

$$\frac{\partial \xi_{ij}}{\partial \tau} = \text{sign}(\varphi)(1 - |\nabla \xi_{ij}|) \quad (19)$$

для некоторой вспомогательной функции $\xi_{ij}(\tau)$ с начальным условием $\xi_{ij}(0) = \varphi^{n+1}$. Здесь $\text{sign}(\varphi) = H_\epsilon - 0.5$ — сглаженная знаковая функция, рассчитываемая с помощью формулы (5) при $\epsilon = 0.5$; φ^{n+1} — значение дистанционной

функции на $(n + 1)$ -м шаге по времени; τ — внутреннее время процедуры уточнения; (i, j) — подстрочные индексы, которыми нумеруются узлы пространственной сетки. Уравнение (19) решаем для $\tau = 0 \dots \varepsilon$, при этом значение функции $\xi_{ij}(\varepsilon)$ будет являться новым — уточненным — значением дистанционной функции.

Опишем основные этапы решения уравнения (19), обозначая надстрочным индексом k номер шага по внутреннему времени τ процедуры уточнения. Интегрирование по времени проведем по схеме Рунге–Кутты 2-го порядка точности.

Этап 1. Рассчитываем значение $|\nabla \xi_{ij}^k|$ и вычисляем

$$L(\varphi, \xi_{ij}^k) = \text{sign}_h(\varphi)(1 - |\nabla \xi_{ij}^k|), \quad (20)$$

где $\text{sign}_h(\varphi) = 2(H_h(\varphi) - 1/2)$, $H_h(\varphi)$ определяется формулой (4) при ε , равном шагу сетки.

Этап 2. Находим

$$\xi_{ij}^{k+1/2} = \xi_{ij}^k + \Delta\tau [L(\varphi, \xi_{ij}^k)], \quad (21)$$

где $\Delta\tau$ — шаг по внутреннему времени процедуры.

Этап 3. Имея из (20) значение $L(\varphi, \xi_{ij}^{k+1/2})$, рассчитываем $|\nabla \xi_{ij}^{k+1/2}|$.

Этап 4. Вычисляем вспомогательную функцию на новом временном шаге:

$$\tilde{\xi}_{ij}^{k+1} = \xi_{ij}^k + \frac{\Delta\tau}{2} [L(\varphi, \xi_{ij}^k) + L(\varphi, \xi_{ij}^{k+1/2})]. \quad (22)$$

Этап 5. Проводим коррекцию значений дистанционной функции вблизи поверхности раздела с целью минимизации изменения объемов сред:

$$\xi_{ij}^{k+1} = \tilde{\xi}_{ij}^{k+1} + \lambda_{ij} (\tilde{\xi}_{ij}^{k+1}) H'(\varphi), \quad (23)$$

где $H'(\varphi) = \partial H / \partial \varphi$. Константа λ_{ij} для каждого узла расчетной области V_{ij} находится по формуле:

$$\lambda_{ij} = \frac{\int_{V_{ij}} H'(\varphi)(\varphi - \xi_{ij}(\tau)) dV}{\int_{V_{ij}} (H'(\varphi))^2 dV}. \quad (24)$$

Для расчета модуля $|\nabla \xi_{ij}^k|$ использовалось выражение:

$$|\nabla \xi_{ij}^k| = \sqrt{(\partial \xi / \partial x)^2 + (\partial \xi / \partial y)^2}. \quad (25)$$

Аппроксимация пространственных производных в (25) производилась по схеме 2-го порядка точности со стабилизацией (алгоритм ENO [9]). Интеграл в (24) вычислялся по 9-точечной схеме:

$$\int_{V_{ij}} f dV \approx \left(\left(\sum_{m=-1}^1 \sum_{n=-1}^1 f_{i+m, j+n} \right) + 15f_{ij} \right) \frac{h^2}{24}. \quad (26)$$

Для определения пространственных производных на границах применялись односторонние разностные схемы с отступом внутрь расчетной области.

8. Итерационный алгоритм численного решения

Опишем процедуру нахождения полей скорости, давления и дистанционной функции на новом шаге по времени. Предполагаем, что на предыдущем шаге решение получено с требуемой точностью для всех переменных. На каждой итерации по времени выполняем необходимую последовательность действий.

Шаг 1. Совершаем первый шаг метода Рунге–Кутты для вычисления предиктора поля скорости и предиктора дистанционной функции. По дистанционной функции устанавливаем кривизну и делаем прогноз поверхностных сил. Как отмечено выше, решение уравнений Навье–Стокса и неразрывности находим с помощью метода искусственной сжимаемости, при этом вязкое слагаемое в уравнении Навье–Стокса дискретизируем неявно, по схеме Кранка–Николсон, а нелинейное слагаемое — по явной схеме Адамса–Башфорта.

Шаг 2. Вычисляем поле скорости и давление с использованием схемы 2-го порядка точности по времени, то есть совершаем второй шаг метода Рунге–Кутты. На данном шаге повторяем вычисления, сделанные на Шаге 1, но с использованием скорректированных поверхностных сил.

Шаг 3. По формуле (17) рассчитываем расширенную функцию Хевисайда H_w и решаем уравнение переноса с полученным на предыдущем шаге полем скорости.

Шаг 4. Восстанавливаем по формулам (18) дистанционную функцию и осуществляем процедуру повторной

инициализации с коррекцией объема.

Шаг 5. Обновляем поля плотности и вязкости. Вычисляем кривизну поверхности раздела и готовим исходную информацию для следующей итерации. Оцениваем выполнение критериев устойчивости и, при необходимости, выводим результаты.

9. Тестирование описанных методов и подходов

В качестве тестовой использовалась задача неустойчивости Релея–Тейлора. Рассматривалась находящаяся в поле силы тяжести система из двух жидкостей, сверху располагалась более плотная жидкость. В такой системе при достаточно малых значениях поверхностного натяжения наблюдается нарушение механического равновесия. Более тяжелая жидкость начинает проваливаться через границу раздела, что приводит к перемешиванию жидкостей.

Расчеты поведения такой системы проводились для прямоугольной ячейки с отношением сторон 1/4, ширина ячейки равнялась 1. На вертикальных границах ставились условия периодичности, а на горизонтальных — условия прилипания. В начальный момент времени на границе раздела задавалось возмущение поверхности раздела сред в виде:

$$\varphi = y - 0.05 \cos(2\pi x), \quad (27)$$

где y — вертикальная координата, изменяющаяся от -2 до 2 . Вычисления выполнялись при тех же параметрах, что и в [10, 19, 20]: $We = \infty$, $Fr = 0.102$, $Re = 391.4$, $\lambda = 0.13$, $\mu = 1$. На рисунке 4 показана форма границы раздела жидкостей в разные моменты времени. Моделирование осуществлялось на сетке 100×400 . Полученные данные хорошо согласуются с результатами, приведенными в [10, 19, 20].

На рисунке 5 представлена эволюция изменения объема верхней жидкости в ходе моделирования неустойчивости Релея–Тейлора описанным в настоящей статье методом, а также при отключении процедуры

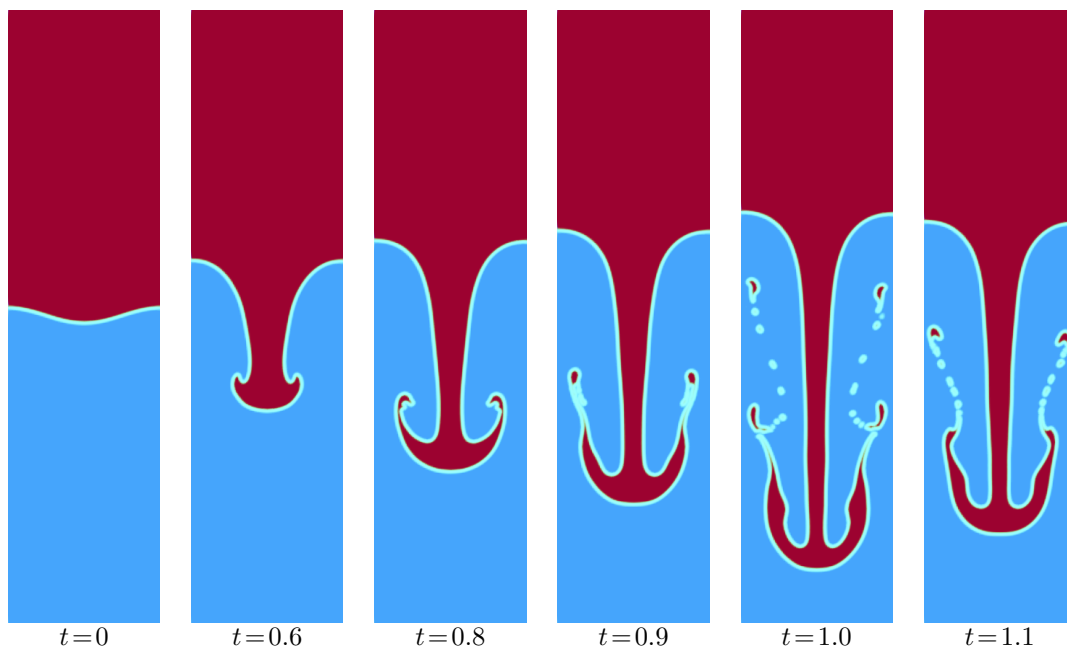


Рис. 4. Развитие во времени неустойчивости Релея–Тейлора при $We = \infty$, $Fr = 0.102$, $Re = 391.4$, $\lambda = 0.13$, $\mu = 1$

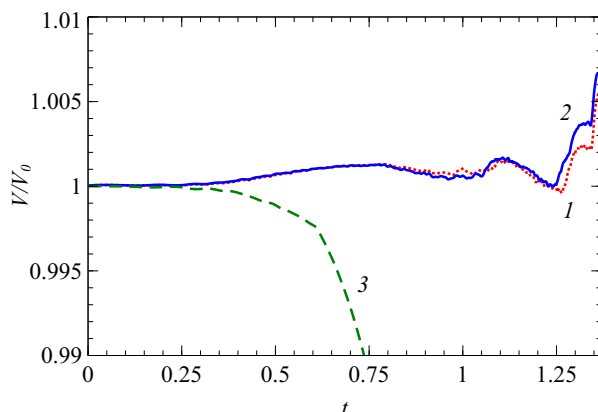


Рис. 5. Относительное изменение во времени объема верхней жидкости в ходе расчета различными подходами: с использованием описанного в настоящей статье подхода (кривая 1), при решении уравнения переноса (7) для стандартной дистанционной функции (2), без коррекции давления при повторной инициализации дистанционной функции (3)

коррекции объема после повторной инициализации дистанционной функции и без применения расширенной функции Хевисайда для решения уравнения переноса. Как видно из графиков, используемый в настоящей статье подход дает наименьшую численную погрешность.

При большом поверхностном натяжении возмущение, задаваемое формулой (27), затухает, и граница раздела фаз остается устойчивой. На рисунке 6 показано развитие неустойчивости Релея–Тейлора при $We = 5$ (данное значение соответствует поверхностному натяжению, близкому к критическому). Как видно, при сильном поверхностном натяжении тяжелая жидкость проваливается в легкую заметно медленнее, при этом поверхностные силы подавляют образование мелких капель на начальных этапах развития неустойчивости.

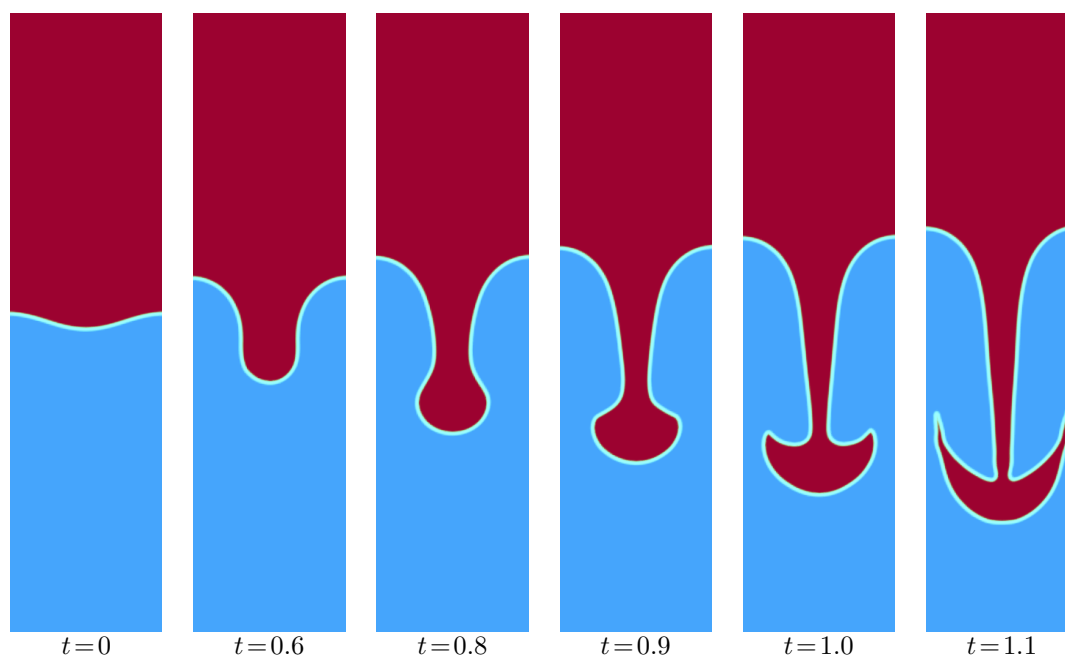


Рис. 6. Развитие неустойчивости Релея–Тейлора при $We = 5$, $Fr = 0.102$, $Re = 391.4$, $\lambda = 0.13$, $\mu = 1$

10. Заключение

Одним из самых важных преимуществ метода сквозного счета является его способность естественным образом обрабатывать топологические изменения. Вместо явного отслеживания границы раздела сред метод сквозного счета представляет их как нулевую изоповерхность функции уровня. Это позволяет проводить численное моделирование динамики многофазной жидкости как одной среды с изменяющимися параметрами.

В настоящей работе предлагается несколько новых методик вычисления кривизны поверхности раздела и применение новой функции при решении уравнения переноса, описывающего динамику границы раздела сред. В частности, для расчета функции кривизны, необходимой для нахождения силы поверхностного натяжения, расширяется серая зона (см. (11)), в то время как ее ширина остается неизменной при определении других функций. Применение функции Хевисайда (17) при решении уравнения переноса позволяет уменьшить потерю масс жидкостей. Кроме того, при неявном решении уравнения переноса использование функции Хевисайда ускоряет сходимость решателя системы дискретизированных уравнений вследствие того, что функция Хевисайда изменяется только вблизи границы раздела, а дистанционная функция — во всей расчетной области.

На основе разработанного подхода проведено численное моделирование развития неустойчивости Релея–Тейлора. Данные вычислений хорошо согласуются с известными из литературы результатами как численного моделирования, так и установленными экспериментально, при этом предложенный метод дает наименьшую вычислительную погрешность.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 24-11-00269.

Литература

1. Любимов Д.В., Любимова Т.П. Об одном методе сквозного счета для решения задач с деформируемой поверхностью раздела // Моделирование в механике. 1990. Т. 4, № 21. С. 136–140.
2. Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C. A continuum method for modeling surface tension // Journal of Computational Physics. 1992. Vol. 100, no. 2. P. 335–354. DOI: 10.1016/0021-9991(92)90240-Y
3. Sussman M., Smereka P., Osher S. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow // Journal of Computational Physics. 1994. Vol. 114, no. 1. P. 146–159. DOI: 10.1006/jcph.1994.1155

4. Sussman M., Fatemi E., Smereka P., Osher S. An improved level set method for incompressible two-phase flows // *Computers & Fluids*. 1998. Vol. 27, no. 5/6. P. 663–680. DOI: 10.1016/S0045-7930(97)00053-4
5. Любимов Д.В., Любимова Т.П., Иванцов А.О., Черепанова А.А. Использование метода сквозного счета для моделирования динамики систем с поверхностями раздела // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2008. Т. 1, № 2. С. 53–62. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.2.15
6. Lalanne B., Villegas L.R., Tanguy S., Risso F. On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with Level Set/Ghost Fluid Method // *Journal of Computational Physics*. 2015. Vol. 301. P. 289–307. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.08.036
7. Liu X.-D., Osher S., Chan T. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes // *Journal of Computational Physics*. 1994. Vol. 115, no. 1. P. 200–212. DOI: 10.1006/jcph.1994.1187
8. Huang J., Carrica P.M., Stern F. Coupled ghost fluid/two-phase level set method for curvilinear body-fitted grids // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2007. Vol. 55, no. 9. P. 867–897. DOI: 10.1002/fld.1499
9. Gärtner J.W., Kronenburg A., Martin T. Efficient WENO library for OpenFOAM // *SoftwareX*. 2020. Vol. 12. 100611. DOI: 10.1016/j.softx.2020.100611
10. Ferro P., Landel P., Landrodie C., Guillot S., Pescheux M. Optimized reinitialization based level-set method within industrial context. 2024. arXiv: 2405.20958 [physics.flu-dyn]. URL: <https://arxiv.org/abs/2405.20958>
11. Sussman M., Almgren A.S., Bell J.B., Colella P., Howell L.H., Welcome M.L. An Adaptive Level Set Approach for Incompressible Two-Phase Flows // *Journal of Computational Physics*. 1999. Vol. 148, no. 1. P. 81–124. DOI: 10.1006/jcph.1998.6106
12. Fedkiw R.P., Aslam T., Xu S. The Ghost Fluid Method for Deflagration and Detonation Discontinuities // *Journal of Computational Physics*. 1999. Vol. 154, no. 2. P. 393–427. DOI: 10.1006/jcph.1999.6320
13. Terashima H., Tryggvason G. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows // *Journal of Computational Physics*. 2009. Vol. 228, no. 11. P. 4012–4037. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.02.023
14. Liu W., Yuan L., Shu C.-W. A Conservative Modification to the Ghost Fluid Method for Compressible Multiphase Flows // *Communications in Computational Physics*. 2011. Vol. 10, no. 4. P. 785–806. DOI: 10.4208/cicp.201209.161010a
15. Vukčević V., Jasak H., Gatin I. Implementation of the Ghost Fluid Method for free surface flows in polyhedral Finite Volume framework // *Computers & Fluids*. 2017. Vol. 153. P. 1–19. DOI: 10.1016/j.compfluid.2017.05.003
16. Voroshilov E.S., Mosina R.M., Gruzd S.A., Ivantsov A.O., Khlybov O.A., Lyubimova T.P., Krivilyov M.D. Capillary effects and consolidation kinetics during selective laser melting of 316L powder // *Physics of Fluids*. 2024. Vol. 36, no. 4. DOI: 10.1063/5.0195071
17. Zhang Y.-T., Shu C.-W. Chapter 5 - ENO and WENO Schemes // *Handbook of Numerical Methods for Hyperbolic Problems*. Vol. 17 / ed. by R. Abgrall, C.-W. Shu. Elsevier, 2016. P. 103–122. *Handbook of Numerical Analysis*. DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.hna.2016.09.009>
18. Demin V., Petukhov M., Shmyrov A., Shmyrova A. Nonlinear dynamics of the film of an insoluble surfactant during the relaxation to equilibrium // *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*. 2020. Jan. Vol. 8. P. 261–271. DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2020035273
19. Popinet S., Zaleski S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 1999. Vol. 30, no. 6. P. 775–793. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0363(19990730)30:6<775::AID-FLD864>3.0.CO;2-#
20. Talat N., Mavrič B., Hatic V., Bajt S., Šarler B. Phase field simulation of Rayleigh–Taylor instability with a meshless method // *Engineering Analysis with Boundary Elements*. 2018. Vol. 87. P. 78–89. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2017.11.015>

Сведения об авторах:

Любимова Татьяна Петровна (корр.), дфмн, зав. лаб., Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; e-mail: lyubimovat@mail.ru; ORCID: 0000-0002-8212-2890

Иванцов Андрей Олегович, кфмн, нс, ИМСС УрО РАН; e-mail: aivantsov@icmm.ru; ORCID: 0000-0002-5703-3247

Хлыбов Олег Анатольевич, кфмн, нс, ИМСС УрО РАН; e-mail: okhlybov@yandex.ru; ORCID: 0009-0007-3262-2938

Research article

Application of level set method for modeling of immiscible liquids with large surface tension

T.P. Lyubimova, A.O. Ivantsov, O.A. Khlybov

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation

One of the most important advantages of the level set method is its ability to automatically handle topological changes. Instead of explicitly tracking the interface between the media, the level set method describes them as a zero isosurface of the level set function. This allows numerical modeling of the dynamics of a multiphase fluid as a single medium with varying parameters. It is known that a disadvantage of this approach is the possibility of non-physical oscillations of the velocity field near the interface, which occur at high surface forces due to the error in calculating the curvature of the interface and high gradients of other functions in the transition

layer. Another disadvantage of the method is the problem of preserving the masses of liquids during the simulation. In this paper, several modifications of the level set method are described that allow reducing the mass loss of liquids, improving the convergence in the implicit solution of the transport equation, and reducing velocity oscillations near the interface in the case of high values of the surface tension coefficient. The proposed approaches were tested on a standard test problem of the dynamics of two immiscible liquids.

Keywords: level set method, immiscible liquids, numerical modeling, surface tension, finite volume method

Received: 08.11.2024 / **Published online:** 30.12.2024

References

1. Lyubimov D.V., Lyubimova T.P. One method for numerical modelling in the problems with deformable fluids interfaces. *Modelling in Mechanics*. 1990. Vol. 4, no. 21. P. 136–140.
2. Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*. 1992. Vol. 100, no. 2. P. 335–354. DOI: 10.1016/0021-9991(92)90240-Y
3. Sussman M., Smereka P., Osher S. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*. 1994. Vol. 114, no. 1. P. 146–159. DOI: 10.1006/jcph.1994.1155
4. Sussman M., Fatemi E., Smereka P., Osher S. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*. 1998. Vol. 27, no. 5/6. P. 663–680. DOI: 10.1016/S0045-7930(97)00053-4
5. Lyubimov D.V., Lyubimova T.P., Ivantsov A.O., Cherepanova A.A. Implementation of the level set method for modeling the dynamics of systems with fluid interfaces. *Computational Continuum Mechanics*. 2008. Vol. 1, no. 2. P. 53–62. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.2.15
6. Lalanne B., Villegas L.R., Tanguy S., Risso F. On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with Level Set/Ghost Fluid Method. *Journal of Computational Physics*. 2015. Vol. 301. P. 289–307. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.08.036
7. Liu X.-D., Osher S., Chan T. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics*. 1994. Vol. 115, no. 1. P. 200–212. DOI: 10.1006/jcph.1994.1187
8. Huang J., Carrica P.M., Stern F. Coupled ghost fluid/two-phase level set method for curvilinear body-fitted grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2007. Vol. 55, no. 9. P. 867–897. DOI: 10.1002/flid.1499
9. Gärtner J.W., Kronenburg A., Martin T. Efficient WENO library for OpenFOAM. *SoftwareX*. 2020. Vol. 12. 100611. DOI: 10.1016/j.softx.2020.100611
10. Ferro P., Landel P., Landrodie C., Guillot S., Pescheux M. Optimized reinitialization based level-set method within industrial context. 2024. arXiv: 2405.20958 [physics.flu-dyn]. URL: <https://arxiv.org/abs/2405.20958>
11. Sussman M., Almgren A.S., Bell J.B., Colella P., Howell L.H., Welcome M.L. An Adaptive Level Set Approach for Incompressible Two-Phase Flows. *Journal of Computational Physics*. 1999. Vol. 148, no. 1. P. 81–124. DOI: 10.1006/jcph.1998.6106
12. Fedkiw R.P., Aslam T., Xu S. The Ghost Fluid Method for Deflagration and Detonation Discontinuities. *Journal of Computational Physics*. 1999. Vol. 154, no. 2. P. 393–427. DOI: 10.1006/jcph.1999.6320
13. Terashima H., Tryggvason G. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *Journal of Computational Physics*. 2009. Vol. 228, no. 11. P. 4012–4037. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.02.023
14. Liu W., Yuan L., Shu C.-W. A Conservative Modification to the Ghost Fluid Method for Compressible Multiphase Flows. *Communications in Computational Physics*. 2011. Vol. 10, no. 4. P. 785–806. DOI: 10.4208/cicp.201209.161010a
15. Vukčević V., Jasak H., Gatin I. Implementation of the Ghost Fluid Method for free surface flows in polyhedral Finite Volume framework. *Computers & Fluids*. 2017. Vol. 153. P. 1–19. DOI: 10.1016/j.compfluid.2017.05.003
16. Voroshilov E.S., Mosina R.M., Gruzd S.A., Ivantsov A.O., Khlybov O.A., Lyubimova T.P., Krivilyov M.D. Capillary effects and consolidation kinetics during selective laser melting of 316L powder. *Physics of Fluids*. 2024. Vol. 36, no. 4. DOI: 10.1063/5.0195071
17. Zhang Y.-T., Shu C.-W. Chapter 5 - ENO and WENO Schemes. *Handbook of Numerical Methods for Hyperbolic Problems*. Vol. 17 / ed. by R. Abgrall, C.-W. Shu. Elsevier, 2016. P. 103–122. *Handbook of Numerical Analysis*. DOI: <https://doi.org/10.1016/bs.hna.2016.09.009>
18. Demin V., Petukhov M., Shmyrov A., Shmyrova A. Nonlinear dynamics of the film of an insoluble surfactant during the relaxation to equilibrium. *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*. 2020. Jan. Vol. 8. P. 261–271. DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2020035273
19. Popinet S., Zaleski S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 1999. Vol. 30, no. 6. P. 775–793. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0363(19990730)30:6<775::AID-FLD864>3.0.CO;2-#
20. Talat N., Mavrič B., Hatič V., Bajt S., Šarler B. Phase field simulation of Rayleigh–Taylor instability with a meshless method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*. 2018. Vol. 87. P. 78–89. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2017.11.015>