

А.В. Стрекалов, А.К. Гулевский, И.П. Навинкин

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ИСТЕЧЕНИЯ ЖИДКОСТИ ЧЕРЕЗ ОТВЕРСТИЕ

Целью данной статьи является демонстрация возможности алгоритмизации и свойств простейшей численной молекулярно-динамической модели, которая подтверждается известным физическим экспериментом: безнапорным истечением жидкости из емкости. Предложенная модель показывает отсутствие необходимости учета различного рода тонких физических явлений для обоснования процесса закручивания струй жидкости при истечении через круглое отверстие.

Модель, численный метод, гидродинамика, отверстие.

Интерес к процессам формирования различного рода завихрений существует в гидромеханике и теплофизике давно. К этим процессам относятся явление турбулентности, закручивающиеся области течения, вихри в газе, торнадо и т.п.

В данной статье рассматривается частный случай, наблюдать который мог каждый, кто видел процесс опорожнения раковины или ванной. Всем известно, что данный процесс сопровождается закручиваем струй жидкости вокруг мыслимой оси отверстия, через которое жидкость покидает емкость.

Направление относительно устойчивого вращения может быть различным и в том числе изменяться по мере истечения. В связи с этим объяснение данного явления как результата влияния ускорения Кориолиса представляется безосновательным.

Авторами была создана простейшая субмолекулярная динамическая модель [1], описывающая пространственное движение некоторого множества частиц жидкости. В предлагаемой модели рассматривается движение частиц жидкости — кластеров, т.е. групп молекул, при истечении из емкости через отверстие, находящееся на ее дне (рис. 1). Движение частиц является пространственным и происходит под действием нескольких сил, в том числе силы взаимодействия частиц жидкости между собой — $\alpha(r)$, зависящей только от расстояния между частицами — $r \in [0, \infty]$.

Естественно, значения данной функции при положительных r могут быть как положительными — отталкивание, так и отрицательными — притягивание. Фактически это макроаналог функций сил Ван-дер-Ваальса [2]. В данной статье авторы не преследуют цель максимального точного описания функции $\alpha(r)$. Предлагаемая модель максимально проста и весьма приближенна, так как опирается в основном на аппарат векторной алгебры.

С помощью простейшей компьютерной программы мы можем реализовать такую механистическую модель жидкости, состоящей из m одинаковых частиц. Естественно, чем больше количество частиц, тем более однородная жидкость и, как следствие, более устойчивый результат.

Движение каждой частицы (далее — кластера) будем полагать соответствующим механике Ньютона. То есть любой кластер находится в поле силы гравитации $\vec{G}$, реакции поверхности, окружающей отверстие, — $\vec{N}$ и суммы векторов сил взаимодействия с остальными кластерами

$$\vec{M} = \sum_i^{m-1} \alpha(r_i) \vec{\mu}_i, \quad (1)$$

где суммирование идет по всем остальным кластерам; r_i — расстояние от i -го кластера до данного, который исключается из-под знака суммы (см. $m - 1$); $\vec{\mu}_i$ — единичный вектор, коллинеарный с лучом (отрезком), соединяющим i -й кластер, на который действует сила $\alpha(r_i)$.

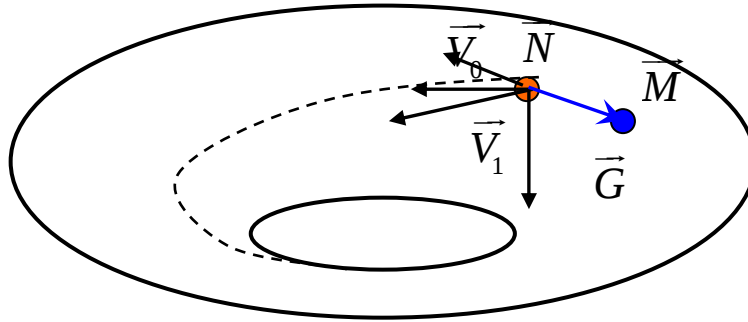


Рис. 1. Схема расчета векторов сил и скоростей кластеров жидкости

Кластеры также могут (по мере сближения с поверхностью дна) находиться под действием силы реакции поверхности $\vec{N}$, направленной по вектору нормали к поверхности дна в том случае, если кластер приближается к поверхности дна на некоторое критическое расстояние r_p . Сила притяжения — $\vec{G}$ действует постоянно, как и силы взаимодействия между кластерами — $\vec{M}$, вызванные силами Ван-дер-Ваальса.

Текущее положение кластеров относительно предыдущего положения определяется известной зависимостью для каждого кластера:

$$\begin{aligned} s_x^{(t)} &= s_x^{(t-1)} + v_x^{(t)} \Delta t, \\ s_y^{(t)} &= s_y^{(t-1)} + v_y^{(t)} \Delta t, \\ s_z^{(t)} &= s_z^{(t-1)} + v_z^{(t)} \Delta t \end{aligned} \quad (2)$$

где Δt — приращение времени, принятое для численного решения поставленной задачи равным 1 нс; $s_x^{(t)}$, $s_y^{(t)}$, $s_z^{(t)}$ — искомые координаты на момент времени t ; $s_x^{(t-1)}$, $s_y^{(t-1)}$, $s_z^{(t-1)}$ — известные координаты на предыдущий момент времени $t - 1$; $v_x^{(t)}$, $v_y^{(t)}$, $v_z^{(t)}$ — компоненты вектора скорости на время t .

Как видно из (2), для определения новых координат кластеров в пространстве необходимо вычисление компонентов вектора скорости относительно ранее найденных (или начальных) скоростей и ускорений для каждого кластера:

$$\begin{aligned}
v_x^{(t)} &= v_x^{(t-1)} + a_x^{(t)} \Delta t, \\
v_y^{(t)} &= v_y^{(t-1)} + a_y^{(t)} \Delta t, \\
v_z^{(t)} &= v_z^{(t-1)} + a_z^{(t)} \Delta t
\end{aligned} \tag{3}$$

где $a_x^{(t)}$, $a_y^{(t)}$, $a_z^{(t)}$ — компоненты вектора ускорения на время t .

Для нахождения ускорений кластеров необходимо вычислить вектора всех сил, действующих на кластеры к текущему моменту времени:

$$\vec{R} = \vec{N} + \vec{G} + \sum_{i=1}^N \vec{M}_i, \tag{4}$$

где $\vec{N} = n \times |\vec{G}|$ — сила реакции поверхности дна, равная произведению вектора нормали n на модуль вектора силы тяжести; $\vec{M}_i$ — вектор силы притяжения/отталкивания для данного кластера со стороны всех остальных.

Вектор $\vec{M}_i$ вычисляется из формулы (1):

$$\vec{M}_i = \alpha \sqrt{(S_x - S_{x_i})^2 + (S_y - S_{y_i})^2 + (S_z - S_{z_i})^2} \times \vec{\mu}_i \tag{5}$$

где

$$\begin{aligned}
\mu_{i_x} &= \frac{S_x - S_{x_i}}{\sqrt{(S_x - S_{x_i})^2 + (S_y - S_{y_i})^2 + (S_z - S_{z_i})^2}}; \\
\mu_{i_y} &= \frac{S_y - S_{y_i}}{\sqrt{(S_x - S_{x_i})^2 + (S_y - S_{y_i})^2 + (S_z - S_{z_i})^2}}; \\
\mu_{i_z} &= \frac{S_z - S_{z_i}}{\sqrt{(S_x - S_{x_i})^2 + (S_y - S_{y_i})^2 + (S_z - S_{z_i})^2}}.
\end{aligned}$$

Функция $\alpha(r)$, принятая для вычислительных экспериментов, имеет вид, показанный на рис. 2. По графику, при расстояниях ниже критического происходит отталкивание кластеров, а при больших расстояниях — притягивание. В этом заключается отличительная особенность моделирования течения жидкостей по отношению к газодинамике.

Как видно из рис. 2, $\alpha(r)$ это функция молекулярной энергии, выраженная через силу взаимодействия и объединяющая группу молекул.

Для рассматриваемой модели было взято всего 300 кластеров, которые выбрасывались над отверстием с нормальным случайным распределением координат относительно оси симметрии отверстия. По мере покидания кластерами пространства емкости под отверстием, они принудительно возвращались в область над отверстием. Так как предлагаемая модель является «предельно дискретной», описание граничных условий в классическом понимании и записи системы дифференциальных уравнений здесь не представляется возможным.

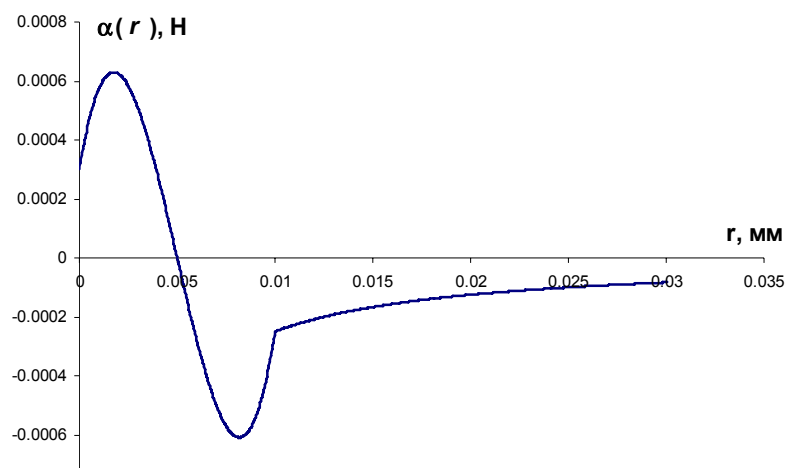


Рис. 2. Вид функции $\alpha(r)$

В результате вычислительных экспериментов были получены следующие результаты (рис. 3, 4).

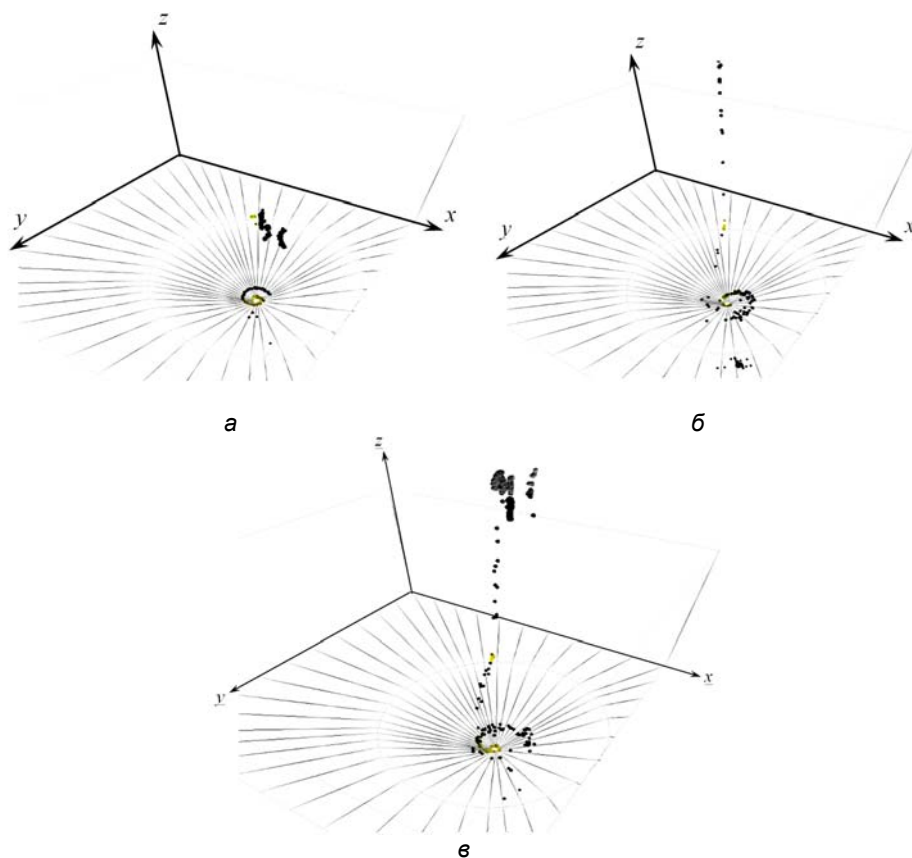


Рис. 3. Динамика движения кластеров, падающих в зону сливного отверстия:
а — время 10 с; б — 30 с; в — 1,5 мин

Ввиду отсутствия возможности продемонстрировать видеоматериал, данные фрагменты (кадры) динамики движения кластеров требуют комментариев. Из полученных результатов вычислительных экспериментов интересно отметить ряд фактов.

1. С течением времени и по мере падения выброшенных случайным образом кластеров над емкостью наблюдается сужение струй, образованных кластерами. Данное явление подтверждается опытами гидравлики при ламинарном истечении из отверстий. Затем, после соударения кластеров о дно емкости, цельные струи распадаются на отдельные кластеры или группы кластеров. После чего вовлекаются в дальнейшее движение под действием силы реакции дна и гравитации.

2. По мере приближения к центру отверстия в дне и с течением сравнительно непродолжительного времени (10–30 с) кластеры группируются вследствие межмолекулярного притягивания и образуют цепочки, совершающие вращательное движение. Зародившись, такая цепочка (струя) вовлекает в движение другие (менее упорядоченные) кластеры, ускоряя процесс формирования других цепочек кластеров (струй) и вовлекая их во вращательное движение. Причем, что интересно, в сформировавшихся струях кластеры из одной цепочки в другие не переходят в течение определенного времени (10–15 с).

3. Завихрение устанавливается через некоторое время в зависимости от фазы выброса кластеров над отверстиями и некоторых недетерминированных факторов.

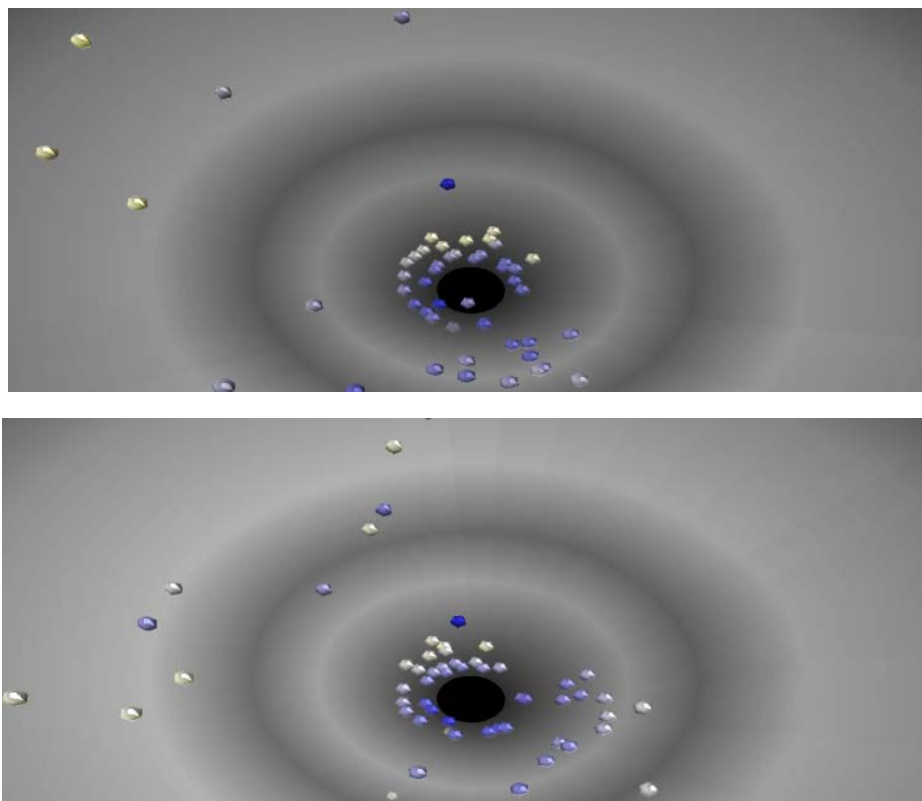


Рис. 4. Динамика движения кластеров, падающих в зону сливного отверстия с увеличением

В заключение стоит отметить следующее. Заложенные в основу модели функции взаимодействия между кластерами отражают одномерное (по расстоянию) дифференцирование сил. Однако при переходе к трехмерному пространству выявляются новые закономерности движения: периодическое упорядоченное закручивание (вращения) струй, состоящих из нескольких десятков кластеров. Струи до определенной фазы перемещения остаются целостными и не смешиваются.

Предложенная модель показывает, что нет необходимости учитывать различного рода тонкие физические явления, такие как форма молекул, вращение молекул вокруг центра масс и т.п., для обоснования процесса закручивания струй жидкости при истечении через круглое отверстие.

Для получения более точной и достоверной модели следует увеличить количество кластеров до нескольких миллионов и соответственно потребуются применение параллельных вычислений на специальных ЭВМ [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Kuksin A.Yu., Norman G.E., Stegailov V.V., Yanilkin A.V. Molecular simulation as a scientific base of nanotechnologies in power engineering // Journ. of Engineering Thermophysics. 2009. 18. 197–226.

2. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.

3. Янилкин А.В., Жиляев П.А., Куксин А.Ю. и др. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование. М.: Научно-исслед. ВЦ МГУ, 2010. Т. 11.

A.V. Strekalov, A.K. Gulevsky, I.P. Navinkin

A COMPUTATIONAL MODEL REGARDING FLUID FLOWING THROUGH AN OPENING

The article aims at demonstrating a potential of algorithmization and properties of a simple computational molecular and dynamic model, confirmed by a famous physical experiment, i.e. free fluid flowing from a reservoir. The suggested model demonstrates absence of necessity to allow for different fine physical phenomena for substantiating a spiral effect of fluid jets under flowing through a round opening.

Model, computational method, hydrodynamics, opening.