

УДК 519.5

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ ДИСПЕРСНЫХ СРЕД НА ЛАГРАНЖЕВО-ЭЙЛЕРОВЫХ РАСЧЕТНЫХ СЕТКАХ

М. С. Самигулин, В. Ф. Спиридонов, О. А. Воронова, Ю. Ф. Данилов,
В. В. Шкарубский, А. Н. Тарасова, П. А. Авдеев, М. В. Артамонов, С. В. Величко
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

В основу предлагаемой методики положена модель дисперсной среды, в которой динамика несущего компонента среды описывается в континуальном (эйлеровом), а динамика дисперсного компонента — в дискретном (лагранжевом) приближении. В качестве условия совместного деформирования компонентов среды используется условие равенства давлений в компонентах среды или несжимаемости дисперсного компонента. При численном решении дисперсный компонент разбивается на квазичастицы — группы частиц, имеющих одинаковый размер, массу, скорость и температуру. Система разностных уравнений решается расщеплением по физическим процессам на лагранжево-эйлеровой расчетной сетке. Приведены результаты расчетов трех тестовых задач с точными решениями.

Ключевые слова: динамика дисперсных сред, численное моделирование, математическая модель, метод решения, верификация.

Введение

Течения дисперсных сред в виде смеси капель или твердых частиц с газом или твердых частиц с жидкостью весьма распространены в природе и практической деятельности человека. По-видимому, по этой причине первые работы, посвященные численному моделированию многомерных течений дисперсных сред [1, 2], появились по сути сразу с появлением ЭВМ, обладающих достаточными для этого возможностями. В работах использовались математические модели двух типов: эйлера и эйлераво-лагранжева¹.

В моделях первого типа компоненты среды (и сплошные, и дисперсные) описываются в приближении взаимопроникающих континуумов [3, 4] со своими полями плотности, скорости и температуры. При этом дисперсные компоненты могут делиться на отдельные группы (*фракции*) частиц, отличающихся размерами, материалом или другими свойствами, которые представляются в виде отдельных континуумов. Такое разделение позволяет в некоторой степени учесть скоростную неравновесность, вызванную различием размеров или свойств.

В моделях второго типа динамика сплошных компонентов описывается в континуальном приближении, а динамика дисперсного компонента — в лагранжевом приближении. Формально каждая частица дисперсного компонента может моделироваться индивидуально, однако в практически важных случаях возможностей современных ЭВМ для этого недостаточно. Поэтому множество частиц дисперсного компонента делится на группы (*облака* [5]) частиц, близких по размерам и свойствам, и вводится предположение о том, что все частицы облака ведут себя тождественным образом. Здесь эти группы называются *квазичастицами*.

¹Для моделей первого типа также используются названия *континуальные, многожидкостные, многопоточные*, а для моделей второго типа — *континуально-дискретные*. Здесь, чтобы избежать путаницы в типах моделей и расчетных сеток, для моделей будут использоваться термины *континуальная* и *континуально-дискретная*.

Континуальные модели имеют преимущество при описании течений фракций, в которых число частиц велико, фракции распределены в объеме, близком к характерному объему течения, и достаточно однородны по размерам и свойствам частиц. В случае, когда число частиц относительно невелико или частицы существенно отличаются размерами, материалом и др., континуальный подход уступает дискретному по точности. В промежуточных случаях результаты моделирования по разным моделям близки (см., например, [6]). Для методов моделирования течений дисперсных сред на основе континуальных моделей характерна высокая численная диффузия дисперсного компонента, что в ряде случаев ограничивает возможности использования континуальных моделей.

Целью авторов было создание методики для моделирования процессов, при которых происходят существенные деформации начальной геометрии моделируемой системы, например, взрывов или соударений различной природы с диспергированием части материалов и последующим движением и взаимодействием сплошных и диспергированных частей. При моделировании таких течений часто важно исключить численную диффузию дисперсного компонента. Поэтому в основу методики положена континуально-дискретная модель дисперсной среды.

В дисперсных средах объемы компонентов среды должны меняться согласованно — в соответствии с так называемым условием совместного деформирования [4]. В упомянутых выше и других известных из публикаций методах используется предположение о несжимаемости дисперсного компонента. Такое приближение допустимо в случае низких давлений. Предлагаемый метод предназначен для моделирования течений при динамичных давлениях, достигающих больших значений. То есть плотность дисперсного компонента может зависеть от текущего давления, и соответственно от давления зависят размеры частиц. Вследствие этого наряду с условием несжимаемости дисперсного компонента в методе может использоваться условие равенства давлений несущего и дисперсного компонентов.

Интенсивность межфазных взаимодействий в дисперсных средах существенно зависит от удельной межфазной поверхности и характерных величин дисперсного компонента. Поэтому процессы, приводящие к заметным их изменениям, должны учитываться. В рассматриваемом случае важным является процесс дробления жидких капель. Для моделирования этого процесса разработан метод на основе критерия Вебера [4].

Как и при моделировании течений без взаимопроникновения компонентов среды, важной характеристикой метода для моделирования дисперсных течений являются используемые в нем расчетные сетки. В большинстве подобных методов (см., например, работы, упомянутые выше) используются неподвижные сетки. Такой выбор в основном связан с тем, что чаще всего моделируемые технологические процессы протекают в замкнутых неподвижных системах. Есть редкие примеры использования сеток другого типа с континуальными моделями. Например, в работе [7] используется подвижная эйлерова сетка, общая для всех взаимопроникающих компонентов, а в работе [8] предложен многосеточный лагранжево-эйлеров метод, в котором на лагранжевом этапе динамика каждого компонента среды рассчитывается на своей лагранжевой сетке, а на эйлеровом этапе на основе индивидуальных сеток строится общая для всех компонентов сетка и на ней рассчитываются межкомпонентные взаимодействия.

В рассматриваемом случае характер моделируемых течений делает более предпочтительным использование лагранжево-эйлеровой (для несущего компонента среды) расчетной сетки. Метод реализован в рамках комплекса программ ЛЭГАК [9], в котором такие сетки широко используются. Кроме того, в комплексе ЛЭГАК контактные границы выделяются методом концентраций [10] и не всегда совпадают с линиями сетки, что дает возможность применять методику для моделирования течений дисперсных сред в областях, границы которых могут существенно деформироваться.

Первый раздел статьи посвящен модели течения, во втором разделе описана аппроксимация и методы решения, а в третьем приводятся постановка и основные результаты трех верификационных расчетов.

В работе используются следующие обозначения:

- a — скорость звука в газе;
- C — коэффициент сопротивления, удельная теплоемкость;
- d — диаметр частиц;
- f — сила взаимодействия частица — несущая фаза;

F — сила взаимодействия *частицы — несущая фаза*, отнесенная к единице объема;
 n — число частиц в квазичастице;
 m — масса частицы;
 P — давление;
 q — интенсивность теплообмена *частица — несущая фаза*;
 \vec{r} — радиус-вектор;
 S — площадь поверхности частицы;
 T — температура;
 \vec{V} — скорость среды;
 \vec{V}_ω — скорость объема интегрирования;
 α — массовая концентрация;
 β — объемная концентрация;
 χ — коэффициент теплообмена *частица — несущая среда*;
 ε — удельная внутренняя энергия;
 κ — параметр, определяющий долю кинетической энергии, диссипирующей за счет межфазного трения в частице или несущем компоненте;
 λ — коэффициент теплопроводности;
 μ — динамический коэффициент вязкости;
 ρ — распределенная (парциальная) плотность;
 $\bar{\rho}$ — истинная плотность;
 τ — временной шаг;
 ω — объем;
 σ — поверхность объема интегрирования.

Нижние индексы служат для обозначения:

c — континуального (сплошного) компонента среды;
 s — отдельных веществ в составе сплошного компонента;
 p — частиц дискретного компонента среды;
 cp — межфазных взаимодействий.

1. Континуально-дискретная модель течения дисперсной среды

В предлагаемом методе в общем случае *несущий* компонент (газ или жидкость), содержащий дисперсный компонент (жидкость или твердое вещество), может входить в *сплошной* компонент — систему из разных веществ, описываемых в континуальном приближении. В случае, когда сплошной компонент состоит только из несущего вещества, часто используются термины *несущая фаза* и *дисперсная фаза*. Течение сплошной фазы описывается в континуальном приближении системой уравнений Эйлера, а дисперсной фазы представляется дискретными частицами, динамика которых описывается уравнениями Лагранжа.

Законы сохранения. В основу модели течения сплошного компонента положены следующие предположения: вязкость существенна только в межфазных взаимодействиях, теплопроводностью можно пренебречь, массообмен между дисперсной и несущей фазами отсутствует. Ниже приведена система законов сохранения для несущей фазы в удобной для численной реализации интегральной форме [4] для объема, движущегося со скоростью \vec{V}_ω :

— закон сохранения массы

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} d\omega = \int_{\sigma} \beta_{c,s} \rho_{c,s} (\vec{V}_c - \vec{V}_\omega) d\vec{\sigma}; \quad (1)$$

— закон сохранения импульса

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \vec{V}_c d\omega = \int_{\sigma} \nabla P d\vec{\sigma} + \int_{\sigma} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \vec{V}_c (\vec{V}_c - \vec{V}_\omega) d\vec{\sigma} - \sum_{p \in \omega} \vec{f}_{cp}; \quad (2)$$

– закон сохранения внутренней энергии

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \varepsilon_{c,s} d\omega = P \int_{\sigma} \vec{V}_c d\vec{\sigma} + \int_{\sigma} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \varepsilon_{c,s} (\vec{V}_c - \vec{V}_\omega) d\vec{\sigma} + \sum_{p \in \omega} \left[\kappa_{cp} \vec{f}_{cp} (\vec{V}_c - \vec{V}_p) - q_{cp} \right]. \quad (3)$$

Последний член в уравнении (2) описывает трение между фазами. В уравнении (3) первое слагаемое последнего члена представляет собой диссипацию кинетической энергии за счет межфазного трения, а второе слагаемое описывает теплообмен между фазами. Суммирование производится по частицам, входящим в объем интегрирования.

Дисперсная фаза полагается разреженной настолько, что взаимодействием частиц друг с другом можно пренебречь. Поведение частиц описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{d}{dt} \vec{r}_p = \vec{V}_p; \quad m_p \frac{d\vec{V}_p}{dt} = \vec{f}_{cp}; \quad m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = \kappa_{pc} \vec{f}_{cp} (\vec{V}_p - \vec{V}_c) + q_{cp}. \quad (4)$$

Коэффициент κ_{pc} определяет долю внутренней энергии в частицах, выделенной при диссипации кинетической энергии за счет сил трения ($\kappa_{pc} + \kappa_{cp} = 1$).

Замыкающие соотношения. Системы законов сохранения для несущей фазы и частиц связаны замыкающими соотношениями: условием совместного деформирования и соотношениями межкомпонентного (межфазного) взаимодействия — трения и теплообмена. Межфазные взаимодействия зависят от размеров частиц, поэтому замыкающие соотношения включают также модель, определяющую размеры частиц.

Совместное деформирование. Объемы компонентов многокомпонентной среды для сохранения сплошности должны меняться согласованным образом — в соответствии с условием совместного деформирования

$$\beta_c + \beta_p = 1, \quad \beta_p = \frac{\pi}{6\omega} \sum_{p \in \omega} n_p d_p^3.$$

Для дисперсных сред используется либо условие несжимаемости частиц дисперсной фазы, либо условие равенства давлений в несущей и дисперсной фазах: $P(\rho_c, \varepsilon_c) = P_p(\rho_p, T_p)$ [4]. В предлагаемом методе, предназначенном для моделирования дисперсных сред при больших давлениях, когда деформации частиц значительны, может использоваться любое из этих условий. При использовании второго условия диаметр частиц зависит от давления.

Межфазное трение. Сила трения между несущей и дисперсной фазами определяется соотношением

$$\vec{f}_{cp} = 0,5 A_p C_{cp} \rho_c \left| \vec{V}_c - \vec{V}_p \right| (\vec{V}_c - \vec{V}_p).$$

Коэффициент сопротивления в широком диапазоне изменения параметров описывается формулой [11]

$$C_{cp} = 0,42 + \frac{24}{\text{Re}_{cp}}, \quad \text{Re}_{cp} = \frac{d_p \rho_c}{\mu_c} \left| \vec{V}_c - \vec{V}_p \right|, \quad d_p = \left(\frac{6m_p}{\pi \rho_p} \right)^{1/3}.$$

Сечение миделя A_p в общем случае может задаваться для каждой частицы, в случае сферических частиц $A_p = \pi d_p^2/4$.

Межфазный теплообмен. Конвективный теплообмен сферической частицы с несущей фазой описывается соотношением

$$q_{cp} = \frac{S_p \lambda_c \text{Nu}_{cp}}{d_p} (T_c - T_p) = \chi_{cp} (T_c - T_p).$$

Число Нуссельта (для $Re_{cp} > 0,1$ и $M_p < 2$) определяется формулой [11]

$$Nu_{cp} = \frac{Nu_0}{1 + \frac{3,42 M_p Nu_0}{Pr_c Re_{cp}}}, \quad Nu_0 = 2 + 0,459 Re_{cp}^{0,55} Pr_c^{0,33},$$

где $Pr_c = C_c \mu_c / \lambda_c$ — число Прандтля для несущей фазы; $M_p = |\vec{V}_p| / a$ — число Маха для частицы.

Дробление частиц. Жидкие частицы при определенной скоростной неравновесности между частицами и газом дробятся на более мелкие. По экспериментальным данным (например, [4]) дробление частицы (капли) в потоке несущей среды происходит следующим образом. При попадании частицы в условия, где число Вебера превышает некоторое критическое значение: $We_p = d_p \rho_c (\vec{V}_p - \vec{V}_c)^2 / \sigma_p > We_{cr}$, на границе капли начинается рост возмущений, и в течение некоторого времени t_{br} капля дробится на ряд более мелких капель. Характерное безразмерное время дробления

$$\theta_{br} = \frac{t_{br} |\vec{V}_p - \vec{V}_c|}{d_p} \sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_p}}.$$

Для определения безразмерного времени дробления могут использоваться разные модели, например, с $\theta_{br} = 5$ [4] или $\theta_{br} = 1,66 / We_p^{1/4}$ [11]. Конечный размер капель определяется критическим числом Вебера:

$d_{cr} = \max \left(\frac{We_{cr} \sigma_p}{\rho_c (\vec{V}_p - \vec{V}_c)^2}, d_{\min} \right)$. Такая модель используется для учета дробления капель в предлагаемом методе.

Граничные условия. Граничные условия для несущей фазы определяются возможностями комплекса программ ЛЭГАК; задаются граница с другим веществом (контактная граница), скорость (в частном случае нулевая), давление.

Для частиц возможны граничные условия типа *отражение от поверхности* и *прилипание к поверхности*. Условие первого типа наряду с моделированием реального отражения частиц от жесткой поверхности моделирует условие симметрии на оси или плоскости симметрии. Предполагается, что соударение упругое, а масса границы существенно больше массы частицы, т. е. скорость стенки после соударения не меняется, а нормальная составляющая скорости частицы после столкновения $\hat{V}_{pn} = 2V_{wn} - V_{pn}$, где V_{wn} — нормальная составляющая скорости границы. Касательная составляющая скорости частиц не меняется. Условие прилипания реализовано только для случая, когда материалы частиц и стенки одинаковые.

2. Метод решения

Модель дисперсной фазы. Система уравнений динамики частиц может решаться для каждой частицы дисперсной фазы. Но, с одной стороны, из-за большого количества частиц такой подход практически невозможен из-за недостаточной мощности современных ЭВМ. С другой стороны, в двумерных течениях для обеспечения симметрии необходимо усреднение по одной из координат. По этим причинам используется объединение относительно большого количества полностью идентичных частиц в образования, которые здесь называются квазичастицами. В осесимметричном случае квазичастицу можно представить как тор (рис. 1). На плоскости симметрии квазичастицу представляет одна частица, для которой решаются уравнения (4).

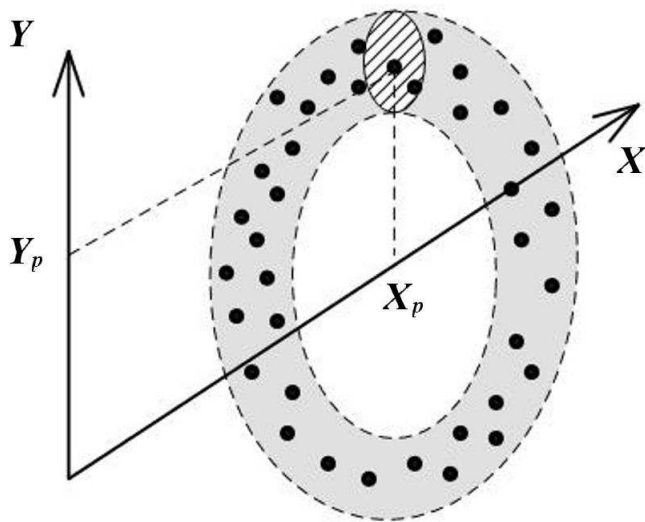


Рис. 1. Схема квазичастицы

Схема расщепления. Система уравнений (1)–(4) решается методом расщепления по физическим процессам [12] на следующие этапы:

- 1) лагранжев этап для несущей фазы;
- 2) этап учета межфазных взаимодействий и переноса частиц;
- 3) эйлеров этап.

На первом этапе на лагранжевой расчетной сетке решаются уравнения для несущей фазы

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} d\omega = 0;$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \vec{V}_c d\omega = \int_{\sigma} \nabla P d\vec{\sigma};$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \varepsilon_{c,s} d\omega = P \int_{\sigma} \vec{V}_c d\vec{\sigma},$$

а расчетная сетка передвигается со скоростью несущей фазы $\frac{d\vec{r}_{\omega}}{dt} = \vec{V}_c$.

На втором этапе последовательно учитываются:

- 1) взаимодействие частиц с границами несущей фазы, которые на лагранжевом этапе "наезжают" на частицы. Возможные граничные условия для частиц описаны ниже;
- 2) дробление частиц;
- 3) взаимодействия (трение и теплообмен) между несущей и дисперсной фазами и перенос частиц.

При этом решается следующая система уравнений:

$$m_p \frac{d\vec{V}_p}{dt} = \vec{f}_{cp}; \quad (5)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_c \rho_c \vec{V}_c d\omega = - \sum_{p \in \omega} \vec{f}_{cp}; \quad (6)$$

$$m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = \kappa_{pc} \vec{f}_{cp} (\vec{V}_p - \vec{V}_c) + q_{cp}; \quad (7)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_c \rho_c \varepsilon_c d\omega = \sum_{p \in \omega} [\kappa_{cp} \vec{f}_{cp} (\vec{V}_c - \vec{V}_p) - q_{cp}]; \quad (8)$$

$$\frac{d\vec{r}_p}{dt} = \vec{V}_p;$$

- 4) взаимодействие летящих частиц с неподвижными на этом этапе границами несущей фазы.

Расчетная сетка на втором этапе неподвижна: $\frac{d\vec{r}_{\omega}}{dt} = 0$.

На последнем (эйлеровом) этапе происходит перестроение счетной сетки по заданным правилам $\frac{d\vec{r}_{\omega}}{dt} = \vec{V}_{\omega}$ и учитываются конвективные потоки величин за счет движения сетки. То есть в уравнениях (1)–(3) учитываются только члены, содержащие разность $\vec{V}_c - \vec{V}_{\omega}$ скорости несущей фазы и скорости объема интегрирования (сетки):

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} d\omega = \int_{\sigma} \beta_{c,s} \rho_{c,s} (\vec{V}_c - \vec{V}_{\omega}) d\vec{\sigma};$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \vec{V}_c d\omega = \int_{\sigma} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \vec{V}_c (\vec{V}_c - \vec{V}_{\omega}) d\vec{\sigma};$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \varepsilon_{c,s} d\omega = \int_{\sigma} \beta_{c,s} \rho_{c,s} \varepsilon_{c,s} (\vec{V}_c - \vec{V}_{\omega}) d\vec{\sigma}.$$

Для расчета лагранжева и эйлера этапов используются (с незначительной модификацией) стандартные модули комплекса программ ЛЭГАК [9]. Аппроксимация и алгоритмы реализации этапа 2 описаны ниже. Межфазные взаимодействия рассчитываются по неявной схеме [8] — *равновесной* в терминах работы [13]. То есть численное решение сходится к равновесному решению при временном шаге, стремящемся к бесконечности, и временной шаг не ограничивается условиями устойчивости.

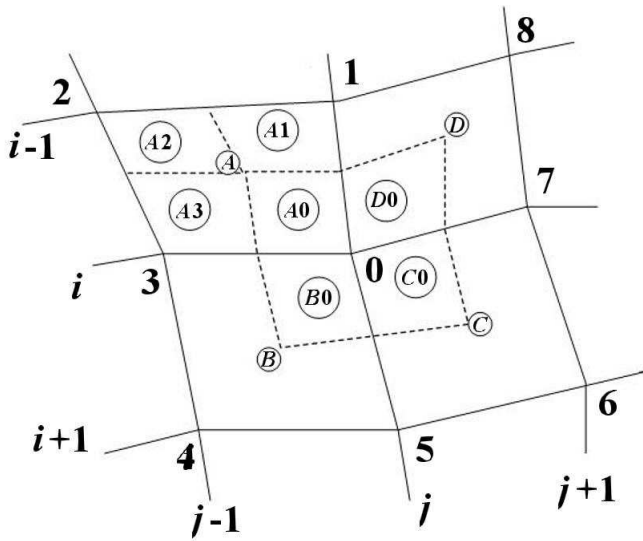


Рис. 2. Фрагмент расчетной сетки

Аппроксимация межфазных взаимодействий. Система уравнений, описывающая межфазные взаимодействия, как и уравнения остальных этапов, аппроксимируется на произвольной четырехугольной расчетной сетке (рис. 2). Скалярные величины несущей фазы определены в ячейках сетки, а скорость — в узлах. Разностные уравнения для скалярных величин получаются интегрированием по объему ячеек сетки, а для скорости — интегрированием по объему с контуром, обозначенным на рис. 2 как $ABCD$ (далее это *ячейка векторов* — ЯВ).

Пространственная аппроксимация членов, определяющих обмен импульсом (5), (6), получена интегрированием уравнения движения по объему ЯВ, а для аппроксимации по времени использована схема [8]

$$\left(\vec{V}_{c,0}^n - \vec{V}_{c,0} \right) \sum_{k=A0,B0,C0,D0} \omega_k \rho_{c,k} = -\tau \sum_{p \in \omega_{ЯВ}} n_p \varphi_p \left(\vec{V}_{c,0}^n - \vec{V}_p^n \right), \quad (9)$$

$$m_p \left(\vec{V}_p^n - \vec{V}_p \right) = \tau \varphi_p \left(\vec{V}_{c,0}^n - \vec{V}_p^n \right), \quad \varphi_p = \frac{\pi}{8} d_p^2 C_{sp} \rho_c \left| \vec{V}_{c,0} - \vec{V}_p \right|. \quad (10)$$

Здесь и далее значение величины на верхнем временном слое обозначается переменной с верхним индексом n , на нижнем временном слое — переменной без индекса; в качестве второго нижнего индекса используется идентификатор узла (ячейки) сетки, откуда берется значение. Суммирование в правой части уравнения (9) выполняется по объемам подъячеек, составляющим ЯВ (см. рис. 2); значения C_{sp} , ρ_c и, соответственно, φ_p в этих объемах отличаются². В [8] показано, что схема консервативна и абсолютно устойчива.

Аппроксимация уравнения энергии несущей фазы (8) получена интегрированием уравнения по времени и объему ячейки A (см. рис. 2):

$$M_{c,A} C_c (T_{c,A}^n - T_{c,A}) = \tau \sum_{k=A0,A1,A2,A3} \sum_{p \in \omega_k} n_p (1 - \kappa_p) \vartheta_{p,k} - \sum_{p \in \omega_A} n_p \chi_p (T_{c,A}^n - T_p^n). \quad (11)$$

Здесь использована замена $\Delta \varepsilon_c = \left. \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial T_c} \right|_{\omega} \Delta T_c = C_c \Delta T_c$.

²Если подходить формально, то $\sum_{p \in \omega_{ЯВ}} n_p \varphi_p \left(\vec{V}_{c,0}^n - \vec{V}_p^n \right) \equiv \sum_{k=A0,B0,C0,D0} \sum_{p \in \omega_k} n_p \varphi_{p,k} \left(\vec{V}_{c,0}^n - \vec{V}_p^n \right)$. Однако для краткости в аналогичных случаях будем использовать сумму $\sum_{p \in \omega_{ЯВ}}$ с соответствующей заменой $\varphi_{p,k}$ на φ_p .

Уравнение (11) решается совместно с уравнениями энергии (7) для частиц, входящих в объем ячейки A :

$$m_p C_p (T_p^n - T_p) = \tau \kappa_p \vartheta_{p,k} + \tau \chi_p (T_c^n - T_p^n). \quad (12)$$

Для аппроксимации члена, описывающего диссипацию энергии за счет сил трения, используется консервативная и абсолютно устойчивая схема [8]

$$\vartheta_{p,k} = \varphi_{p,k} \left(\vec{V}_{c,\tilde{k}}^n - \vec{V}_p^n \right) \left(\frac{\vec{V}_{c,\tilde{k}}^n + \vec{V}_{c,\tilde{k}}}{2} - \frac{\vec{V}_p^n + \vec{V}_p}{2} \right). \quad (13)$$

Здесь k — идентификатор подъячейки ячейки A ($k = A0, A1, A2, A3$); $\tilde{k} = 0, 1, 2, 3$ — номер узла, прилегающего к ячейке k .

Расчет межфазных взаимодействий. Система уравнений (9), (10), описывающих межфазное трение в ЯВ, может быть записана в виде $A\vec{U}^n = \vec{B}$. Здесь $\vec{U}^n = \left(\vec{V}_{c,0}^n, \vec{V}_1^n, \vec{V}_2^n, \dots, \vec{V}_{N_p, \text{ЯВ}}^n \right)$; матрица системы

$$A = \begin{pmatrix} M_{c, \text{ЯВ}} + \sum_{p \in \omega_{\text{ЯВ}}} n_p \varphi_p & -\tau n_1 \varphi_1 & -\tau n_2 \varphi_2 & \cdots & -\tau n_{N_p, \text{ЯВ}} \varphi_{N_p, \text{ЯВ}} \\ -\tau \varphi_1 & m_1 + \tau \varphi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\tau \varphi_2 & 0 & m_2 + \tau \varphi_2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\tau \varphi_{N_p, \text{ЯВ}} & 0 & 0 & \cdots & m_{N_p, \text{ЯВ}} + \tau \varphi_{N_p, \text{ЯВ}} \end{pmatrix};$$

вектор правой части $\vec{B} = \left(M_{c, \text{ЯВ}} \vec{V}_{c,0}, m_1 \vec{V}_1, m_2 \vec{V}_2, \dots, m_{N_p, \text{ЯВ}} \vec{V}_{N_p, \text{ЯВ}} \right)$; $N_p, \text{ЯВ}$ — число квазичастиц в объеме ЯВ.

Эту систему можно решить [14] путем приведения к нижнему треугольному виду. Для этого нужно умножить каждую строку i , начиная со второй, на $\tau n_{i-1} \varphi_{i-1} / (m_{i-1} + \tau \varphi_{i-1})$ и сложить с первой строкой. В полученной матрице

$$\tilde{A}_{11} = M_{c, \text{ЯВ}} + \sum_{p \in \omega_{\text{ЯВ}}} n_p \left(\tau \varphi_p - \frac{\tau^2 \varphi_p^2}{m_p + \tau \varphi_p} \right) = M_{c, \text{ЯВ}} + \tau \sum_{p \in \omega_{\text{ЯВ}}} \frac{m_p n_p \varphi_p}{m_p + \tau \varphi_p},$$

а остальные члены первой строки равны нулю. Первый элемент вектора \vec{B} после преобразования равен

$$\tilde{B}_1 = M_{c, \text{ЯВ}} \vec{V}_{c,0} + \tau \sum_{p \in \omega_{\text{ЯВ}}} \frac{\vec{V}_p m_p n_p \varphi_p}{m_p + \tau \varphi_p}.$$

Далее с учетом треугольного вида матрицы \tilde{A}

$$\vec{V}_{c,0}^n = \frac{\tilde{B}_1}{\tilde{A}_{11}}; \quad \vec{V}_p^n = \frac{m_p \vec{V}_p + \tau \varphi_p \vec{V}_{c,0}^n}{m_p + \tau \varphi_p}.$$

Разностные уравнения (11), (12), описывающие изменения внутренней энергии за счет межфазного трения и теплообмена, а также диссипации кинетической энергии, представляют собой систему линейных уравнений

$$C\vec{T}^n = \vec{D}, \quad \vec{T}^n = \left(T, T_1^n, T_2^n, \dots, T_{N_p, A}^n \right)$$

с матрицей

$$C = \begin{pmatrix} M_{c,A}C_{c,A} + \tau \sum_{p \in \omega_A} n_p \chi_p & -\tau n_1 \chi_1 & -\tau n_2 \chi_2 & \cdots & -\tau n_{N_{p,A}} \chi_{N_{p,A}} \\ -\tau \chi_1 & m_1 C_1 + \tau \chi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\tau \chi_2 & 0 & m_2 C_2 + \tau \chi_2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\tau \chi_{N_{p,A}} & 0 & 0 & \cdots & m_{N_{p,A}} C_{N_{p,A}} + \tau \chi_{N_{p,A}} \end{pmatrix}$$

и вектором-функцией правой части

$$\vec{D} = \begin{pmatrix} T_{c,A}C_{c,A}M_{c,A} + \tau \sum_{k=A0,A1,A2,A3} \sum_{p \in \omega_k} n_p (1 - \kappa_p) \vartheta_{p,k}, m_1 T_1 C_1 + \tau \kappa_p \vartheta_{1,k}, \dots \\ \dots, m_{N_{p,A}} T_{N_{p,A}} C_{N_{p,A}} + \tau \kappa_p \vartheta_{N_{p,A}} \end{pmatrix},$$

где $N_{p,A} = N_{p,A0} + N_{p,A1} + N_{p,A2} + N_{p,A3}$ — число частиц в объеме A .

Систему можно преобразовать, как систему уравнений движения, к нижнему треугольному виду. Для этого нужно умножить каждую строку i , начиная со второй, на $\frac{\tau n_{i-1} \chi_{i-1}}{m_{i-1} C_{i-1} + \tau \chi_{i-1}}$. Левый верхний элемент матрицы преобразуется к виду

$$\tilde{C}_{11} = M_{c,A}C_{c,A} + \sum_{p \in \omega_A} \left(\tau n_p \chi_p - \frac{\tau^2 \chi_p^2 n_p}{m_p C_p + \tau \chi_p} \right) = M_c C_c + \tau \sum_{p \in \omega_A} \frac{m_p C_p n_p \chi_p}{m_p C_p + \tau \chi_p},$$

а первый элемент вектора-функции \vec{D} будет равен

$$\tilde{D}_1 = M_{c,A}C_{c,A}T_{c,A} + \tau \sum_{k=A0,A1,A2,A3} \sum_{p \in \omega_k} \frac{n_p m_p \chi_p C_p T_p + n_p \vartheta_{p,k} [(1 - \kappa_p)(m_p C_p + \tau \chi_p) + \tau \kappa_p \chi_p]}{m_p C_p + \tau \chi_p}.$$

Новые значения температуры определяются по формулам

$$T^n = \frac{\tilde{D}_1}{\tilde{C}_{11}}; \quad T_p^n = \frac{m_p C_p T_p + \tau \kappa_p \vartheta_{p,k} + \tau \chi_p T^n}{m_p C_p + \tau \chi_p},$$

а $\vartheta_{p,k}$ — по формуле (13). Далее определяется новая внутренняя энергия несущей фазы: $\varepsilon^n = \varepsilon(T^n, \rho^n)$. Новые координаты частиц вычисляются по формуле $\vec{r}_p^n = \vec{r}_p + 0,5\tau (\vec{V}_p + \vec{V}_p^n)$.

Расчет дробления частиц. Для численной реализации удобно реальный *ступенчатый* процесс дробления представить в виде процесса непрерывного изменения размеров капель при их нахождении в критических условиях ($We_p > We_{cr}$).

Если ввести безразмерное время нахождения капли в критических условиях $\theta_p = \int_0^t \frac{|\vec{V}_p - \vec{V}_c|}{d_p} \sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_p}} dt$,

то текущий диаметр капли можно определить через вероятность целостности капли: $d_p = d_p^0 \times \exp(-\lambda \theta_p)$, где d_p^0 — начальный диаметр капли. Значение λ находится из условия $d_{cr} = d_p^0 \times \exp(-\lambda \theta_{br})$. Тогда $d_p = d_p^0 (d_{cr}/d_p^0)^{\theta_p/\theta_{br}}$. При уменьшении диаметра капли до текущего критического значения дробление прекращается.

Эта модель дробления реализована следующим образом. Для каждой квазичастицы определяется приращение безразмерного времени нахождения в критических (по дроблению) условиях:

$$\Delta\theta_p = \begin{cases} \tau \frac{|\vec{V}_p - \vec{V}_c|}{d_p} \sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_p}}, & \text{если } We_p > We_{cr} \text{ и } d_p > d_{cr}; \\ 0, & \text{если } We_p \leq We_{cr} \text{ и } d_p \leq d_{cr}. \end{cases}$$

Новый диаметр каплей находится по формуле $d_p^n = d_p (d_{cr}/d_p)^{\Delta\theta_p/\theta_{br}}$. Предполагается, что все капли, входящие в квазичастицу, дробятся одинаковым образом. Новое число частиц в квазичастице определяется из условия сохранения массы: $n^n = (d_p/d_p^n)^3 n$.

3. Верификационные расчеты

Для проверки адекватности численной реализации исходных математических моделей использовались три одномерные задачи с точным решением из работы [15]. Во всех задачах несущая фаза (идеальный газ) имела следующие параметры: $\rho = 1 \text{ кг/м}^3$, $\varepsilon = 144 \text{ кДж/кг}$; $\gamma = 5/3$, $\mu = 2 \cdot 10^{-5} \text{ кг/(м} \cdot \text{с)}$; плотность материала частиц $\rho = 1000 \text{ кг/м}^3$. Предполагалось отсутствие влияния частиц на состояние газа.

Задача 1. Разгон частиц на плоской волне разрежения. В начальный момент времени газ заполняет полупространство с нулевым давлением на границе. На расстояниях $-0,0002$; $-0,2$; -1 ; -2 м от границы в газе расставлены жесткие частицы диаметром $d = 2 \cdot 10^{-5} \text{ м}$. Волна разрежения, которая распространяется от границы вглубь полупространства, вовлекает частицы в движение.

Задача решалась на лагранжевой сетке с ячейками размером $0,025 \text{ м}$.

На рис. 3 приводится сравнение расчетных траекторий частиц с точным решением, которое свидетельствует об их хорошем совпадении.

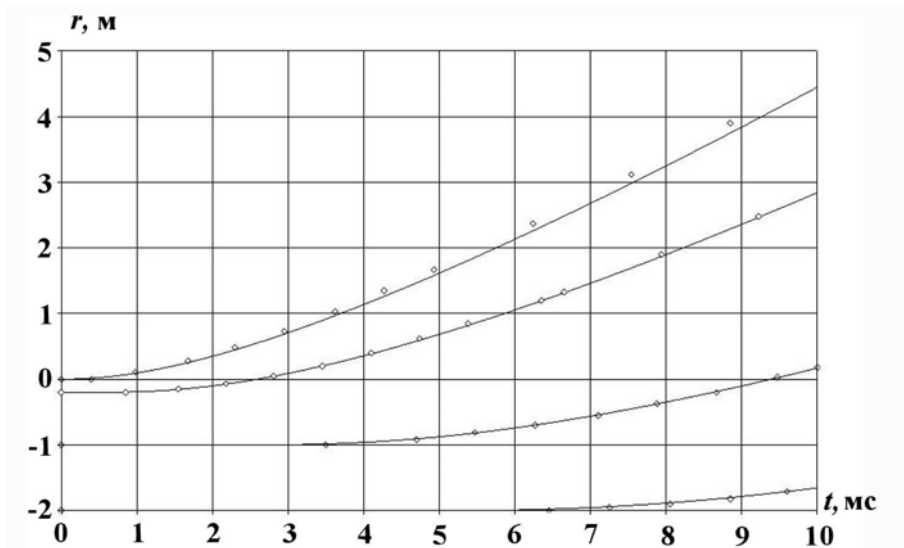


Рис. 3. Задача 1. Точные (\diamond) и расчетные (—) координаты частиц

Задача 2. Торможение частицы в неподвижном газе. В начальный момент частица диаметром 10^{-4} м начинает двигаться в газе со скоростью 4000 м/с . Коэффициент сопротивления частицы $C = 24/\text{Re} + 0,42$.

Задача решалась на неподвижной расчетной сетке с ячейками размером $0,025 \text{ м}$.

На рис. 4, 5 расчетные зависимости скорости и положения частицы от времени сравниваются с аналитическим решением. Видно хорошее совпадение численного и аналитического решений.

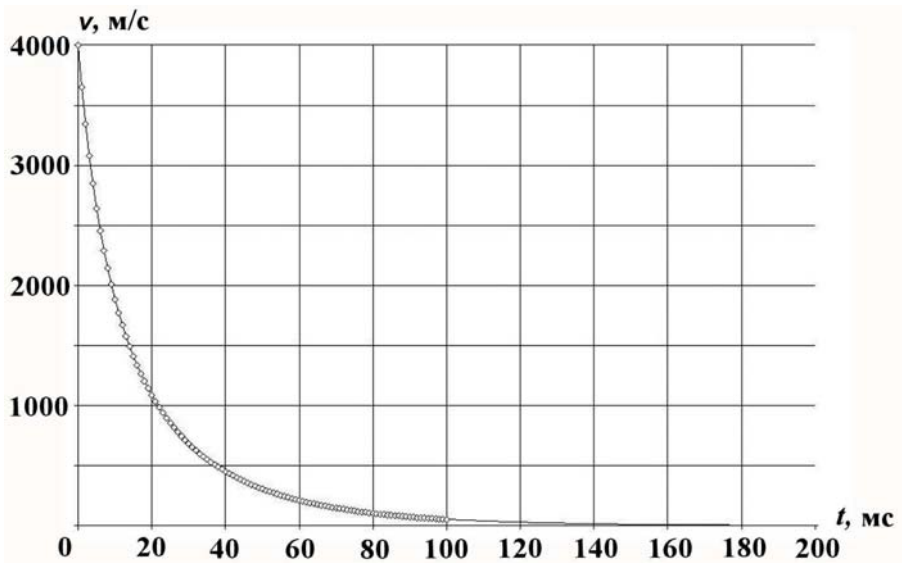


Рис. 4. Задача 2. Точная (\diamond) и расчетная (—) скорости частицы

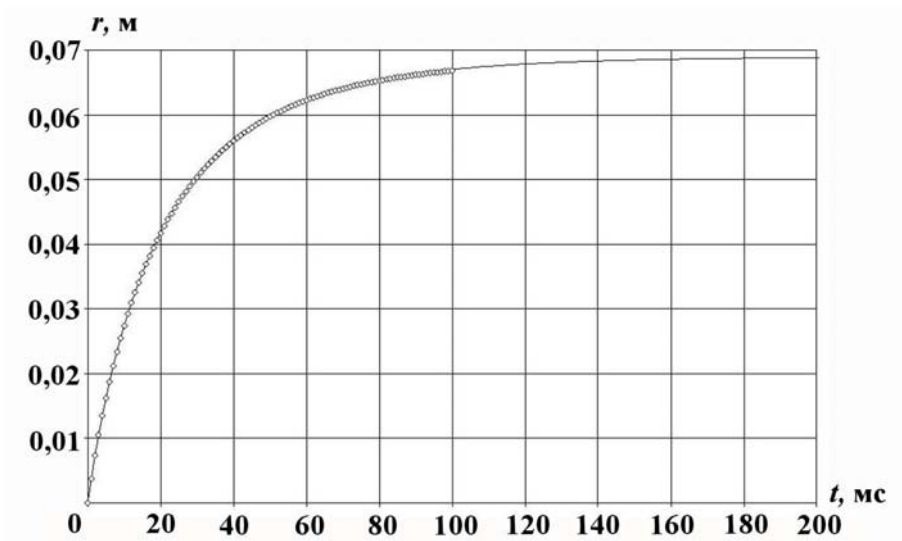


Рис. 5. Задача 2. Точная (\diamond) и расчетная (—) координаты частицы

Задача 3. Разгон частиц плоской ударной волной. В полупространстве, ограниченном с одной стороны поршнем и заполненным газом, на разных расстояниях от поршня расставлены частицы диаметром $2 \cdot 10^{-5}$ м. Коэффициент сопротивления частиц $C = 24/Re$. В начальный момент поршень начинает вдвигаться в газ с постоянной скоростью 1000 м/с.

Задача решалась на лагранжевой расчетной сетке с начальными размерами ячеек 0,01 м.

На рис. 6 приведены точная и расчетная траектории частицы с начальной координатой 0,04 м. Наблюдается их хорошее совпадение.

Заключение

Создана методика численного моделирования двумерных течений дисперсных сред на лагранжево-эйлеровых расчетных сетках. Использование таких сеток наряду с методом концентраций для выделения контактных границ сплошного компонента дает возможность моделировать течения многокомпонентных сплошных сред с большими деформациями среды, с диспергированием некоторых

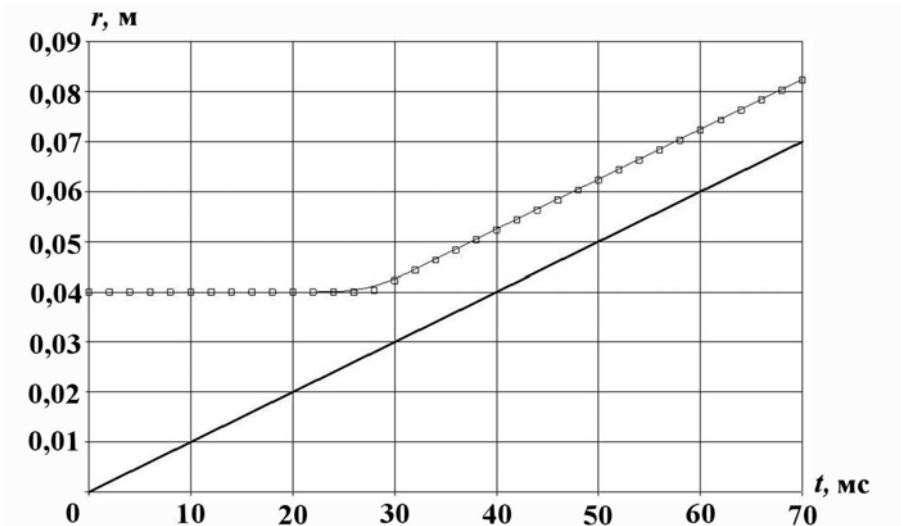


Рис. 6. Задача 3. Точная (\square) и расчетная (—) координаты частицы и траектория поршня (—)

компонентов и взаимодействием дисперсного и сплошных компонентов среды. Результаты трех верификационных расчетов демонстрируют адекватность численной реализации модели течения.

Список литературы

1. Harlow F. Y., Amsden A. A. Numerical calculation of multiphase fluid flow // J. Comp. Phys. 1975. Vol. 17. P. 19—52.
2. Dukowich J. K. A particle-fluid numerical model for liquid sprays // Ibid. 1980. Vol. 35. P. 229—235.
3. Рахматуллин Х. А. Основы газовой динамики взаимопроникающих движений сплошных сред // ПММ. 1958. Т. 20, № 2. P. 184—195.
4. Нугматуллин Р. И. Динамика многофазных сред. Т. 1. М.: Наука, 1987.
5. Ishii R., Umera Y., Yuhi M. Numerical analysis of gas-particle two-phase flows // J. Fluid Mech. 1989. Vol. 203. P. 475—515.
6. Mostafa A. A., Mongia H. C. On the modeling of turbulent evaporating sprays: Eulerian versus Lagrangian approach // Int. J. Heat and Mass Transfer. 1987. Vol. 30, No 12. P. 2583—2595.
7. Коробейников В. П., Марков В. В., Меньшов И. С. Численное моделирование распространения ударных волн по неоднородной пылегазовой смеси // Докл. АН СССР. 1986. Т. 290, № 4. С. 816—819.
8. Самигулин М. С. Метод численного моделирования двумерных течений дисперсных сред в континуальном многоскоростном приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 1. С. 3—8.
9. Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бахрах С. М. и др. Комплекс программ ЛЭГАК для расчета нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы реализации комплекса на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Там же. 2001. Вып. 3. С. 14—18.
10. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С. и др. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566—569.
11. Стернин Л. Е., Шрайбер А. А. Многофазные течения газа с частицами. М.: Машиностроение, 1994.
12. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.

13. *Загускин В. Л.* Численные методы решения плохо обусловленных задач. Ростов: Изд-во Ростовского университета, 1976.
14. *Самигулин М. С., Янилкин Ю. В., Гаврилова Е. С., Шанин А. А.* Метод численного моделирования двумерных нестационарных течений полидисперсных сред // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1995. Вып. 1—2. С. 3—8.
15. *Пискунов В. Н.* Физические процессы в дисперсных системах. М.: МИФИ, 1991.

Статья поступила в редакцию 02.04.13.
