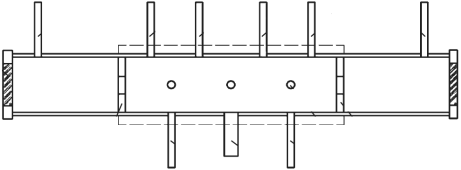
Расчет динамики газопылевых сред на основе метода гидродинамики сглаженных частиц

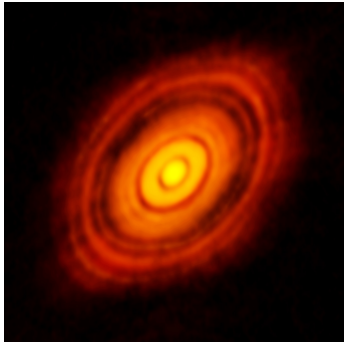
Савватеева Татьяна

27 мая 2023

Приложения динамики газопылевых сред

- **Технологические устройства:** реактора газохимии с мелкодисперсными катализаторами, устройства песко- и дробеструйной обработки поверхностей, пылеуловители (аспираторы) различных типов и др.
- **Природные явления и объекты:** воздушные смерчи, выбросы пепла в атмосферу при извержении вулканов, молекулярные облака, в которых формируются звезды, околозвездные диски, в которых формируются планеты и др.





Смесь газа и пылевых частиц. Основные допущения

- Смесь представляет собой двухфазную монодисперсную среду с общим давлением, в которой несущей фазой является сжимаемый невязкий газ с плотностью ρ, скоростью $\mathbf{v}$ и внутренней энергией e.
- Для пыли выполняется условие применимости гидродинамического описания среды и определены осредненные по пространству величины - $\mathbf{u}$ - скорость, ρ - массовая плотность, t_{stop} - время релаксации скорости частиц к скорости газа.
- Частицы состоят из вещества материальной плотности ρ_{s}, имеют сферическую форму.
- Массообмен и теплообмен между газом и частицами отсутствуют.
- Пыль обменивается импульсом с газом.

Уравнения динамики газопылевой среды

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{g}}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla \rho_{\mathrm{g}}) = -\rho_{\mathrm{g}} \mathrm{div} \mathbf{v},$$

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{d}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\mathrm{d}} \cdot \nabla \rho_{\mathrm{d}}) = -\rho_{\mathrm{d}} \mathrm{div} \mathbf{u}_{\mathrm{d}},$$

$$\rho_{\mathrm{g}} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) \right) = -\nabla p_{\mathrm{g}} + \frac{\rho_{\mathrm{d}}(\mathbf{u}_{\mathrm{d}} - \mathbf{v})}{t_{\mathrm{stop}}},$$

$$\rho_{\mathrm{d}} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_{\mathrm{d}}}{\partial t} + (\mathbf{u}_{\mathrm{d}} \cdot \nabla \mathbf{u}_{\mathrm{d}}) \right) = -\frac{\rho_{\mathrm{d}}(\mathbf{u}_{\mathrm{d}} - \mathbf{v})}{t_{\mathrm{stop}}},$$

$$t_{\mathrm{stop}} = \frac{s \rho_s}{c_{\mathrm{s}} \rho_{\mathrm{g}}}.$$

Здесь ρ_g, ρ_d – плотности газа и пыли, v, u – скорости газа и пыли, p – давление, t_{stop} – время выравнивания скоростей между газом и пылью, s - размер пылинки, c_s - скорость звука в газе. t_{stop} является малым параметром задачи, если радиус пылевых частиц s мал.

Вычислительные проблемы механики ультрадисперсных сред

- Малый шаг по времени **в сеточных методах и методах частиц**:
  – для явных методов временной шаг должен удовлетворять условию устойчивости

$$\tau < t_{\mathrm{stop}},$$

  – неявные методы и методы, основанные на экспоненциальном решении, могут давать низкую точность, если неудачно скомбинированы с методом расщепления по физическим процессам.
- Малый шаг по пространству в методах частиц. Имеет место избыточная диссипация волн **в методах частиц** (Laibe and Price, 2012, Loren-Anguilar and Bate, 2014), если пространственное разрешение не удовлетворяет условию

$$h < c_{\mathrm{s}} t_{\mathrm{stop}}.$$

Цель работы

Цель - создание метода для моделирования динамики среды газ-монодисперсные частицы с интенсивным межфазным взаимодействием на основе метода гидродинамика сглаженных частиц (Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)

- разработка расчетных формул для учета межфазного взаимодействия в среде газ-монодисперсная пыль,
- демонстрация работоспособности нового подхода на ряде тестовых задач, имеющих аналитическое решение (в том числе трехмерных).

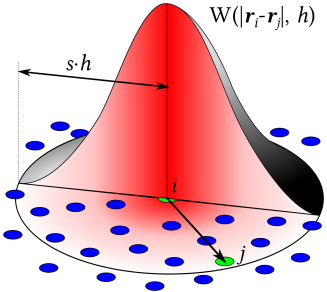
Кроме того, для сравнения был реализован классический для SPH подход к моделированию газопылевой среды.

Гидродинамика сглаженных частиц(SPH)

- бессеточный или свободно-лагранжев метод;
- сплошная среда заменяется набором частиц;
- частицы - носители основных характеристик среды
- вычисление пространственных производных без использования сетки

$$f(x) = \int_\Omega f(x')\delta(x-x')dx' \approx \int_\Omega f(x')W(|x-x'|,h)dx' \approx \sum_{j=1} m_j \frac{f(x_j)}{\rho_j} W(|x-x_j|,h), \qquad (1)$$

$$\rho_i = \sum_j m_j W(|x_i - x_j|,h), \quad \nabla f(x_i) = \sum_j m_j \frac{f(x_j)}{\rho_j} \nabla W(|x_i - x_j|,h) \qquad (2)$$

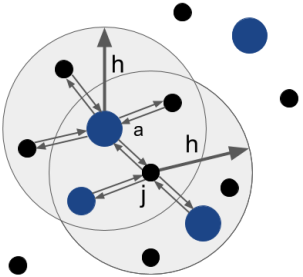


$$W(|x-x_a|,h) = \frac{2}{3h}\begin{cases} 1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3, & \text{если } 0 \le q \le 1, \\ \frac{1}{4}(2-q)^3, & \text{если } 1 \le q \le 2, \\ 0, & \text{иначе;} \end{cases}$$

где h - радиус сглаживания,

$$q = \frac{|x-x_a|}{h} = \frac{\Delta x}{h}.$$

Классический подход: явная схема Монагана-Кочаряна



$$\frac{dv_a^n}{dt} = -\frac{1}{\rho_{\mathrm{g}}^n}\frac{\partial P^n}{\partial x} - \sigma m_{\mathrm{d}} \sum_j \frac{K_{aj}}{\rho_{a,\mathrm{g}}^n \rho_{j,\mathrm{d}}^n} \frac{(v_a^n - u_j^n, r_{ja})}{r_{ja}^2 + \eta^2} r_{ja} W_{ja}^n,$$

$$\frac{du_j^n}{dt} = \sigma m_{\mathrm{g}} \sum_a \frac{K_{aj}}{\rho_{a,\mathrm{g}}^n \rho_{j,\mathrm{d}}^n} \frac{(v_a^n - u_j^n, r_{ja})}{r_{ja}^2 + \eta^2} r_{ja} W_{ja}^n,$$

$$K_{aj} = \frac{\rho_{j,\mathrm{d}}^n \rho_{a,\mathrm{g}}^n c_{a,\mathrm{s}}^n}{s_j^n \rho_{j,\mathrm{s}}^n} = \frac{\rho_{j,\mathrm{d}}^n}{t_{\mathrm{stop}}},$$

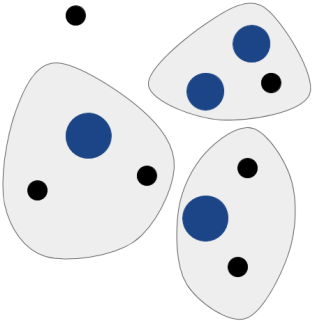
где $r_{ja} = r_j r_a$, $\eta^2 = 0.001h^2$ и σ - параметр размерности; для одномерных задач $\sigma = 1$.

- вычисление взаимодействия между каждой парой частиц газа и пыли

SPH-IDIC: неявное “трение в ячейке”

Разобъем область на непересекающиеся объемы. В каждом - N газовых частиц с массой m_g и L пылевых с массой m_d.

$$\varepsilon^* = \frac{m_\mathrm{d} L}{m_\mathrm{g} N}, \quad K^* = \frac{\rho_\mathrm{d}^*}{t_\mathrm{stop}^*}, \quad \rho_\mathrm{g}^* = \frac{\rho_\mathrm{d}^*}{\varepsilon^*}.$$



$$v_* = \frac{\sum_{i=1}^{N} v_a}{N}, \quad u_* = \frac{\sum_{j=1}^{L} u_j}{L}.$$

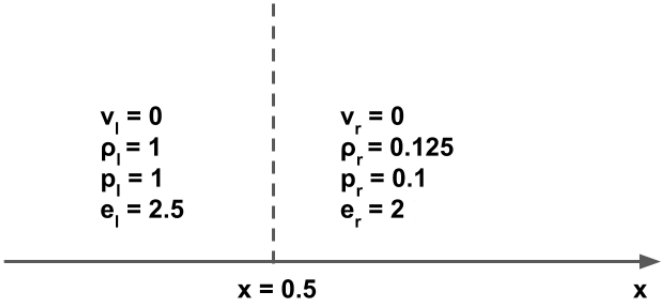
$$\frac{dv_a^n}{dt} = -\frac{1}{\rho_\mathrm{g}^n}\frac{\partial P^n}{\partial x} - \frac{K^*}{\rho_\mathrm{g}^*}(v_a^{n+1} - u_*^{n+1}),$$

$$\frac{du_j^n}{dt} = \frac{K^*}{\rho_\mathrm{d}^*}(v_*^{n+1} - u_j^{n+1}),$$

1. Вычисление средних скоростей в ячейках на текущем шаге по времени.
2. Вычисление скоростей в ячейках на следующем шаге по времени путем решения системы из двух линейных алгебраических уравнений.
3. Вычисление скоростей частиц на следующем шаге по времени.

Задача о распаде разрыва в газопылевой среде. DustyShock

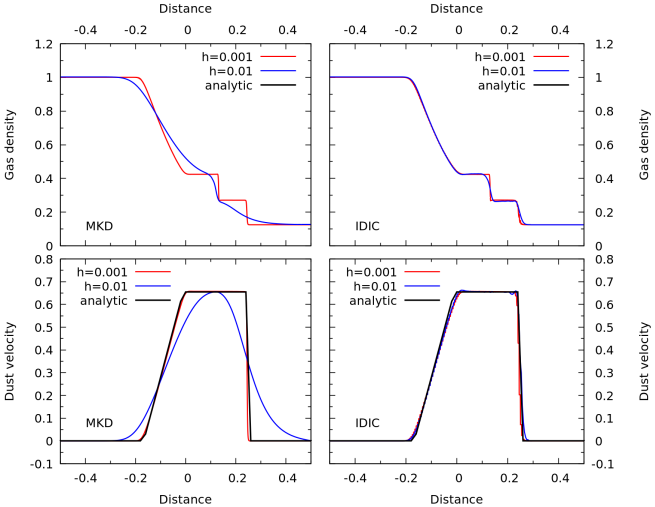
$$
\begin{cases}
\dfrac{d\rho_{\mathrm{g}}}{dt} = -\rho_{\mathrm{g}}\nabla v, \\
\dfrac{d\rho_{\mathrm{d}}}{dt} = -\rho_{\mathrm{d}}\nabla u, \\
\dfrac{dv}{dt} = -\dfrac{1}{\rho_{\mathrm{g}}}\nabla P - \varepsilon\dfrac{(v-u)}{t_{stop}}, \\
\dfrac{du}{dt} = \dfrac{(v-u)}{t_{stop}}, \\
\dfrac{de}{dt} = \dfrac{P}{\rho_{\mathrm{g}}^2}\dfrac{d\rho_{\mathrm{g}}}{dt}, \\
P = \rho_{\mathrm{g}} e(\gamma - 1).
\end{cases}
$$



$$\gamma = 1.4.$$

Имеем эталонное решение в случае $t_{stop} \ll t$
если $t_{\mathrm{stop}} \cdot \max(c_s, u, v) \ll l$,
где l-линейный размер расчетной области.

Задача о распаде разрыва в газопылевой среде. DustyShock



$$t = 0.2$$

$$t_{stop} = 0.002$$

$$\varepsilon = 1$$

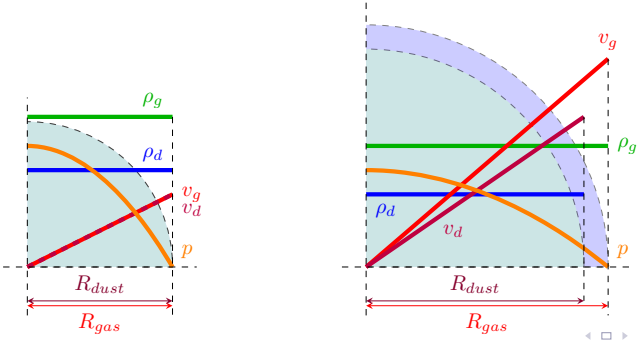
$$N = 2\times990; 2\times9900$$

$$\tau = 0.1h$$

Задача о разлете газопылевого шара в вакуум в коде Gadget-2

- Плотности зависят от времени, но не от радиуса;
- Скорости - линейные функции от радиуса;
- Давление газа квадратично зависит от радиуса, имеет масимальное значение в центре шара и образается в нуль на границе.
- Решение сферически-симметрично; численно задача решается в трехмерной постановке в декартовой системе координат.

В расчетах бралось $R_{0,\mathrm{g}} = R_{0,\mathrm{d}} = 1, \quad v_{0,\mathrm{g}} = v_{0,\mathrm{d}} = 1, \quad M_{\mathrm{g}} = 1000, M_{\mathrm{d}} = 800, \gamma = \frac{4}{3}, \quad e_0 = 18.61.$



Задача о разлете газопылевого шара в вакуум в коде Gadget-2

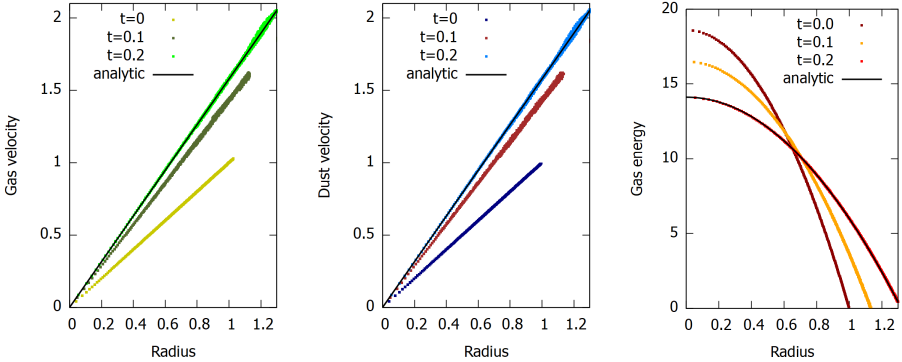


Рис.: $t_{\rm stop} = 10^{-3}$, $t = 0.2$. $h = 0.15$, $\tau = 0.005$, $N_{\rm g} = N_{\rm d} = 65752$.

Задача о разлете газопылевого шара в вакуум

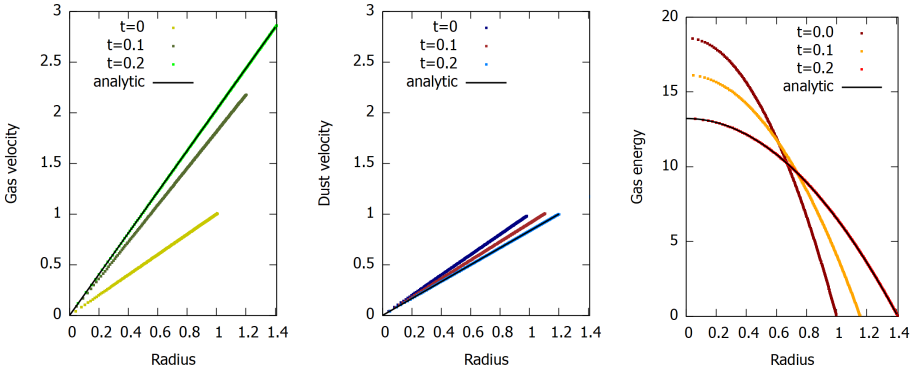


Рис.: $t_{\mathrm{stop}} = 10^3$, $t = 0.2$. $h = 0.15$, $\tau = 0.005$, $N_{\mathrm{g}} = N_{\mathrm{d}} = 65752$.

Заключение

Для гидродинамики сглаженных частиц предложен алгоритм расчёта обмена импульсом между твердой фазой и газом. При этом:

- пыль считается монодисперсной, то есть представленной одним характерным размером;
- сила трения линейно зависит от относительной скорости между газом и телами;
- газ и твердая фаза обмениваются импульсом, но не энергией.

Следующий шаг - учет теплообмена между газом и пылью.

Спасибо за внимание!