

*А. Г. Гирин**Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова*

Численная схема для расчёта двухфазных дисперсных течений

Предлагается методика для расчёта одномерных неустановившихся течений двухфазной смеси с относительно небольшой объёмной концентрацией дисперсной фазы, когда в качестве первого приближения для газовой фазы можно взять значения её параметров, вычисленные при отсутствии действия со стороны частиц, с последующим учётом влияния дисперсной фазы. Применяются консервативные разностные схемы для уравнений механики гетерогенных сред в почти дивергентной форме. Для нахождения первого приближения параметров газовой фазы на новом временном слое применяется схема Годунова, позволяющая производить выделение лагранжевых ячеек в газовой фазе, а также выделение фронта ударной волны.

Введение

Воздействия ударных и детонационных волн на гетерогенные смеси являются сильными и вызывают течения, которые в значительной степени осложняются протеканием физико-химических процессов, вызванных интенсивными взаимодействиями между фазами — механическим разрушением частиц дисперсной фазы, испарением жидких капелек, смешением паров с газообразной несущей фазой и протеканием возможных химических реакций. Проблема расчёта таких течений связана с применением адекватных математических моделей и численных методов, способных отразить все основные особенности этих процессов. Имеется сравнительно небольшое количество работ, посвящённых построению численных схем для расчёта двухфазных течений. Чаще всего используются конечно-разностные схемы общего характера, применяемые и к уравнениям движения гомогенных сред, например, конечно-разностные [1], в том числе схемы Лакса — Вендроффа и Мак-Кормака [2], метод крупных частиц [3,4]. В то же время очевидно, что это оправдано только в случае простейших двухскоростных течений, не осложнённых интенсивными межфазными переходами, как в случае течений с твёрдыми частицами в соплах [1, 2]. В работе [4] метод крупных частиц был модифицирован применительно к расчёту двухфазных течений и применён к расчёту одномерных неустановившихся течений газа с твёрдыми частицами. Дальнейшее развитие этой модификации для течений с интенсивными межфазными взаимодействиями, сопровождающихся дроблением частиц,

испарением капелек, смешением компонент и наличием химических реакций в газовой фазе не проводилось.

В настоящей работе предлагается методика для расчёта одномерных неустановившихся течений двухфазной смеси с небольшой объёмной концентрацией дисперсной фазы, когда в качестве первого приближения для газовой фазы можно взять значения её параметров, вычисленные при замороженном воздействии со стороны дисперсной, с последующим учётом влияния дисперсной фазы. Применяются консервативные разностные схемы для системы уравнений механики гетерогенных сред в почти дивергентной форме [3, стр. 349]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_1 x^{v-1})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 V_1 x^{v-1})}{\partial x} = -n \dot{J}_{12} x^{v-1}; \\ \frac{\partial(\rho_1 V_1 x^{v-1})}{\partial x} + \frac{\partial((\rho_1 V_1^2 + p)x^{v-1})}{\partial x} - (v-1) p x^{v-2} = F_1 x^{v-1} + \frac{3}{2} \alpha_2 x^{v-1} \frac{\partial p}{\partial x}; \\ \frac{\partial(\rho_1 E_1 x^{v-1})}{\partial t} + \frac{\partial((\rho_1 V_1 E_1 + p V_1)x^{v-1})}{\partial x} = -Q_2 x^{v-1} - V_2 F_2 x^{v-1} + \\ + \frac{3}{2} \alpha_2 x^{v-1} V_2 \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial(\alpha_2 p (V_1 - V_2)x^{v-1})}{\partial x} + \frac{1}{2} n V_2^2 \dot{J}_{12} x^{v-1}; \end{array} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_2 x^{v-1})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 V_2 x^{v-1})}{\partial x} = n \dot{J}_{12} x^{v-1}; \\ \frac{\partial(\rho_2 V_2 x^{v-1})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 V_2^2 x^{v-1})}{\partial x} = F_2 x^{v-1} - \frac{3}{2} \alpha_2 x^{v-1} \frac{\partial p}{\partial x}; \\ \frac{\partial(\rho_2 u_2 x^{v-1})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2 V_2 x^{v-1})}{\partial x} = Q_2 x^{v-1}; \\ \frac{\partial(n x^{v-1})}{\partial t} + \frac{\partial(n V_2 x^{v-1})}{\partial x} = -\dot{N} x^{v-1}; \end{array} \right. \quad (2)$$

$$F_1 = -F_2 = -(1-1,5\alpha_2)n f'_\mu - n \dot{J}_{12} V_1 + (1-1,5\alpha_2)n \dot{J}_{12} (V_1 - V_2); \quad Q_2 = n(q + \dot{J}_{12} u_2).$$

Здесь ρ, V, u, E, p — среднеобъёмная плотность, скорость, внутренняя энергия, полная энергия и давление; $i = 1, 2$ относится к газовой (несущей) и дисперсной фазам; α_2, n — объёмная концентрация и количество частичек в единице объёма; $\dot{J}_{12}$ — масса, переходящая из первой во вторую фазу в результате фазовых переходов для одной частички в еди-

ницу времени; F_i — сила, действующая на i -ю фазу со стороны другой фазы в единице объёма; f_μ — сила трения, действующая на частичку со стороны газа, Q_2 — энергия, передаваемая частичкам в результате фазового перехода и теплопередачи q ; $\dot{N}_{21}$ — количество частичек, исчезающих в единице объёма в единицу времени, $\nu = 1, 2, 3$ — параметр симметрии одномерного течения.

Эти уравнения описывают движение смеси на уровне макромасштаба — масштаба, большого по сравнению с размерами частичек и малого по сравнению с характерным размером задачи в целом. На этом уровне каждая фаза считается сплошной средой. Для описания межфазных взаимодействий необходимо перейти на уровень микромасштаба, на котором происходят взаимодействия несущей фазы с каждой индивидуальной частичкой и который имеет характерный размер порядка нескольких диаметров частичек. Именно на уровне микромасштаба производится расчёт функций взаимодействия фаз J_{12} , f_μ , q , $\dot{N}_{21}$. В случае, когда таковые интенсивны и имеется довольно большая масса горючего, переходящая в газовую фазу, необходимость вычисления кинетики процессов между компонентами в газовой фазе делает удобным применение лагранжевого подхода в описании движения газовой фазы, проводя счёт с выделением лагранжевых частичек в газовой фазе, которые удобно отождествить со счётными ячейками. Для этого при счёте в эйлеровых переменных необходимо в каждый момент времени совмещать каждую границу счётной ячейки с контактным разрывом в газовой фазе. Естественным образом такое выделение позволяет сделать, например, метод Годунова, в котором траектория контактного разрыва определяется в результате решения задачи о распаде произвольного разрыва на границе каждой ячейки. Применение метода Годунова оправдано ещё тем, что он даёт возможность проводить выделение фронта ведущей ударной волны, что позволяет более точно определить параметры газовой фазы непосредственно за фронтом, в области наиболее интенсивной неравновесности и фазовых взаимодействий, где решается вопрос о существовании гетерогенной детонационной волны. Целесообразность применения метода Годунова связана с его достаточной устойчивостью и монотонностью разностной схемы, что является важным в случае протекания разнообразных физико-химических превращений, ведущих к появлению интенсивных возмущений в газовой фазе в каждой счётной ячейке. Наличие таких возмущений заставляет отдать предпочтение грубым схемам первого порядка аппроксимации, при этом надо учесть, что сама кинетика указанных процессов моделируется обычно достаточно грубо, в первом приближении.

Однако, как известно, решение задачи о распаде произвольного разрыва в двухфазной среде неавтоматически, что не позволяет прямо применить метод Годунова к системе уравнений (1,2). Поэтому в настоящей работе пред-

лагается методика расчёта, сочетающая возможности метода Годунова для газовой фазы и простых консервативных схем для уравнений дисперсной фазы. Расчёт проводится в три этапа.

Первый этап

На первом этапе по схеме Годунова [5] производится расчёт параметров только газовой (несущей) фазы при замороженном воздействии дисперсной, т.е. решается подсистема уравнений для газовой фазы (1) без правых частей. В результате этого определяются предварительные значения параметров газовой фазы f_m^* в m -й счётной ячейке на новом временном слое (рис. 1) и положения границ ячеек (рассматриваемых как лагранжевы частицы газовой фазы) x_m^* в новый момент времени $t = t_0 + \tau$, а также средние между двумя временными слоями значения параметров газа в центре каждой ячейки S , необходимые для определения правых частей уравнений (1,2). Счётная ячейка подвижной сетки является единой для обеих фаз.

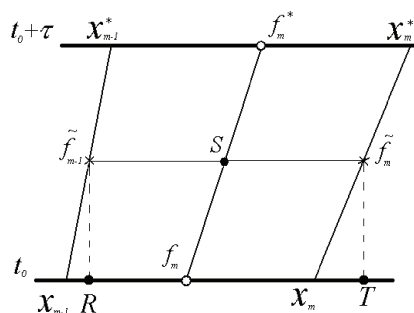


Рис. 1. Шаблон расчётной схемы

Для определения вспомогательных значений на боковых сторонах ячеек (в “крестиках”, рис. 1) на шаге “предиктор” используется решение задачи о распаде произвольного разрыва, возникающего на каждом временном слое t_0 на каждой границе x_m между m -й и $m+1$ -й ячейками (рис. 1). Для выделения m -й лагранжевой ячейки достаточно её границу $x_m \longrightarrow x_m^*$ двигать со скоростью контактной поверхности, которая определяется при решении задачи о распаде разрыва в m -м узле. На этапе “корректор” используется консервативная схема, порождаемая уравнениями (1).

Второй этап

На втором этапе рассчитываются значения параметров дисперсной фазы, т.е. решается подсистема уравнений (2), каждое уравнение которой можно в общем виде записать так:

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial b}{\partial x} = c, \quad (3)$$

где a, b, c — функции решения. Уравнение (3), записанное в “почти” дивергентной форме, на гладких решениях эквивалентно “закону сохранения”

$$\oint_{\Gamma} (-a \, dx + b \, dt) = \iint_D c \, dx dt \quad (4)$$

где Γ — контур, замыкающий область D в плоскости $x-t$. Применительно к счётной ячейке, изображённой на рис. 1, это соотношение можно записать так:

$$\begin{aligned} & a_m^* (x_m^* - x_{m-1}^*) - a_m (x_m - x_{m-1}) - \tilde{a}_m (x_m^* - x_m) + \\ & + \tilde{a}_{m-1} (x_{m-1}^* - x_{m-1}) + (\tilde{b}_m - \tilde{b}_{m-1}) \, \tau = c_S \frac{x_m - x_{m-1} + x_m^* - x_{m-1}^*}{2} \tau \end{aligned} \quad (5)$$

где значения величин считаются постоянными вдоль каждой стороны ячейки, а тильдой отмечены значения в “крестиках”. Соотношения (5) представляют собой расчётные формулы для вычисления решения a_m^* на втором шаге “корректор” консервативной схемы. Средние значения величин c_S , стоящих в правых частях уравнений (1,2), рассчитываются по уравнениям процессов межфазного взаимодействия и относятся к середине ячейки (т. S). Поэтому для вычисления средних по ячейке значений параметров состояния газовой фазы используется полученное на первом этапе методом Годунова первое приближение для значений на новом слое $t = t_0 + \tau$, а дисперсной фазы — значения в “крестиках”.

Поскольку счётная ячейка движется произвольно по отношению к дисперсной фазе и положение “крестиков” произвольно по отношению к серединам ячеек, где хранятся значения решения, для определения вспомогательных значений на боковых её сторонах (первый шаг “предиктор”) используется простейшая явная конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений (2), с использованием интерполяции на известном слое t_0 для вычисления значений во вспомогательных точках R и T :

$$\frac{\tilde{a}_m - (l_{m+1} a_m + l_m a_{m+1}) / (l_m + l_{m+1})}{\tau / 2} + \frac{b_{m+1} - b_m}{(x_{m+1} - x_{m-1}) / 2} = \frac{c_{m+1} l_m + c_m l_{m+1}}{l_m + l_{m+1}}, \quad (6)$$

где $l_m = (x_m^* + x_m) / 2 - (x_m + x_{m-1}) / 2$, $l_{m+1} = (x_{m+1} + x_m) / 2 - (x_m^* + x_m) / 2$ — расстояния от середин ячеек, где хранятся значения неизвестных функций на “старом” слое t_0 , до точки T , в которой аппроксимируется частная про-

изводная по t . Явный характер конечно-разностной схемы, применяемой для расчёта параметров дисперсной фазы (уравнения (6)) ведёт к появлению небольших осцилляций плотности дисперсной фазы. Для их подавления было достаточно простейшего трёхточечного сглаживания со значением весового коэффициента в опорном узле, равным 0,99.

Третий этап

На третьем этапе по вычисленным значениям функций межфазного взаимодействия для середин ячеек определяются правые части уравнений (1) и добавочные значения для потоков массы, импульса и энергии, по которым производится уточнение значений параметров газовой фазы, а также положения контактных поверхностей в новый момент времени. При этом такое уточнение не требует дополнительно решения трудоёмкой задачи о распаде произвольного разрыва.

Тестирование

Эта методика была протестирована на примере задачи о распаде плоского ($\nu = 1$) произвольного разрыва в двухфазной среде, причём из-за её неавтономности сравнение проводилось с известным численным решением, полученным модифицированным методом крупных частиц [3, стр. 351]. В расчётах производилось выделение ведущей ударной волны (которая и служила правой границей расчётной области), контактной поверхности между гомогенной средой и газовой фазой дисперсной смеси, а также выделение лагранжевых ячеек в газовой фазе. Последнее потребовало алгоритма добавления новых ячеек, по мере увеличения массы газа, вовлечённого в движение ударной волной, в результате количество ячеек увеличилось со 100 в начале счёта до 165, когда фронт волны прошёл расстояние 3,23 м. Выделение границы двухфазной среды не проводилось.

Пусть при $t = 0$ в области $0 < x < 1$, ограниченной слева жёсткой стенкой, находится сжатый покоящийся воздух с параметрами: $p_0 = 5 \cdot 10^5 \text{ Па}$, $\rho_{10} = 5,95 \text{ кг/м}^3$, $T_0 = 293,12^\circ \text{К}$, $\gamma = 1,4$, а область $x > 1$ занимает монодисперсная смесь воздуха с частицами кварцевого песка: $p_0 = 10^5 \text{ Па}$, $\rho_{10} = 1,19 \text{ кг/м}^3$, $\rho_{20} = 2,499 \text{ кг/м}^3$, $\rho_2^0 = 2500 \text{ кг/м}^3$, $\alpha_{20} = 0,001$. При $t = 0$ диафрагма, разделявшая воздух и двухфазную смесь, убирается, и начинается взаимодействие сред. Предположим, что обмен массой между фазами отсутствует ($\dot{J}_{12} = 0$), частички не разрушаются и их радиус $a = 3 \cdot 10^{-5} \text{ м}$ неизменен. Несущая фаза считается идеальным нетеплопроводным совершенным газом, а эффекты неидеальности учитываются только при его взаимодействии с частичками. В частности, для силы вязкого межфазного трения f_μ и интенсивности теплообмена q использовались выражения:

$$f_{\mu} = \pi a^2 C_d \rho_1^0 (V_1 - V_2) |V_1 - V_2| / 2, \quad q = 2\pi a \text{Nu} \lambda_1 (T_1 - T_2), \quad (7)$$

где C_d — коэффициент аэродинамического сопротивления для частичек, Nu — число Нуссельта, T — температура. Зависимость коэффициентов сопротивления и теплообмена от режима обтекания частичек даётся эмпирическими соотношениями [4]:

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}} + \frac{4}{(\text{Re})^{0.33}}, & 0 < \text{Re} < 700; \\ \frac{4,3}{(\lg \text{Re})^2}, & 700 < \text{Re} < 2000; \end{cases} \quad \text{Nu} = 2 + 0,6 \text{Re}^{0.5} \text{Pr}^{0.33}, \quad (8)$$

где $\text{Re} = 2a\rho_1^0 |V_1 - V_2| / \mu_1$ — число Рейнольдса относительного движения фаз, $\text{Pr} = c_{p1}\mu_1 / \lambda_1$ — число Прандтля. Для коэффициентов вязкости и теплопроводности воздуха были использованы значения: $\mu_1 = 1,85 \cdot 10^{-5} \text{ кг} / \text{м} \cdot \text{сек}$, $\lambda_1 = 0,025 \text{ кг} \cdot \text{м} / \text{сек}^3 \cdot \text{град}$, для коэффициентов теплоёмкости фаз — $c_{v1} = 716 \text{ м}^2 / \text{сек}^2 \cdot \text{град}$, $c_2 = 710 \text{ м}^2 / \text{сек}^2 \cdot \text{град}$.

С газодинамической точки зрения в начальный момент времени в положении $x = 1$ имеем произвольный разрыв [6], который в силу своей неэволюционности распадается, образуя ударную волну, распространяющуюся в дисперсную смесь, и волну разрежения, идущую в сжатый воздух. Действие частичек на газовую фазу приводит к её непрерывному торможению за фронтом и довольно сильному затуханию ударной волны, скорость фронта которой стремится к скорости звука в невозмущённой смеси (рис. 2, аналогично выглядит график давления на фронте), а также к искажению распределений искомых функций, по сравнению с автомоделными [6].

Сравнение полученных по предложенной методике распределений параметров показало их хорошее качественное согласование с результатами работы [3]. К примеру на рис. 3–6 приведены распределения давления, температур, скоростей и плотностей фаз, соответствующие моменту времени $t = 8 \text{ msec}$. Наибольшие отличия полученных распределений от таковых работы [3] имеют место вблизи границы двухфазной среды, которая при $t = 8 \text{ msec}$ занимает положение $x \approx 1,78 \text{ м}$. Эти отличия связаны с тем, что выделение указанной границы в данных расчётах не проводилось и она размывалась счётной схемой.

В то же время распределение среднеобъёмной плотности дисперсной фазы, в отличие от результатов работы [3], отличается немонотонностью (кривая 1, рис. 6), которая не имеет осцилляционной природы, в частности, эта кривая мало меняется при изменении значения коэффициента сглаживания в

диапазоне $0,900 \div 0,995$, и на протяжении всего времени счёта не меняет своего характера (ср. с рис. 10).

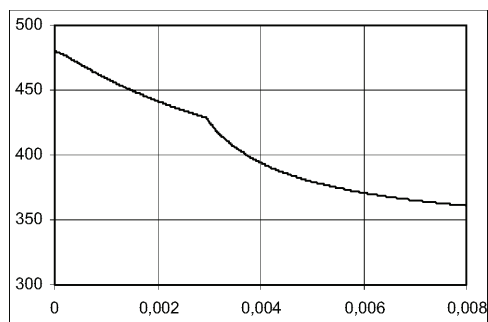


Рис. 2. Зависимость скорости фронта ударной волны D (м/сек) от времени t (сек).

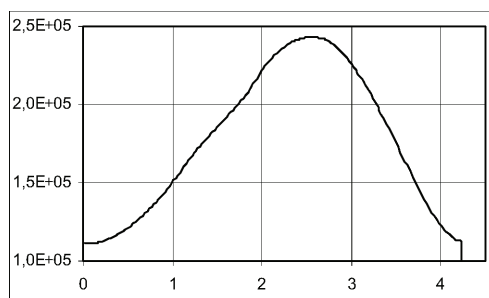


Рис. 3. Распределение давления в области движения (p — в Па, x — в м).

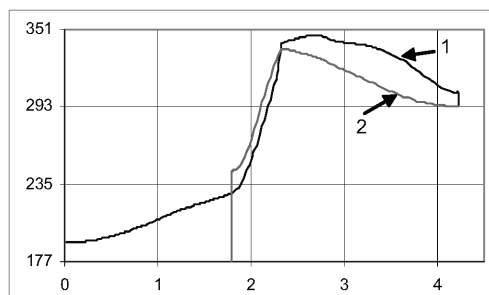


Рис. 4. Распределения температур газа (кривая 1) и частичек (кривая 2); T — в $^{\circ}K$, x — в м.

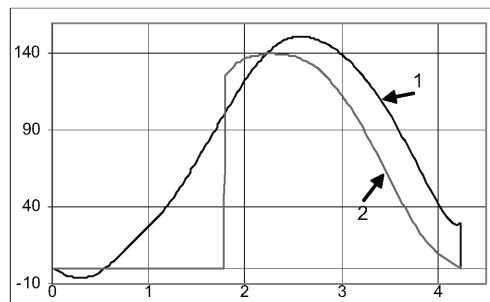


Рис. 5. Распределения скоростей (в $м/сек$) несущей (кривая 1) и дисперсионной (кривая 2) фаз.

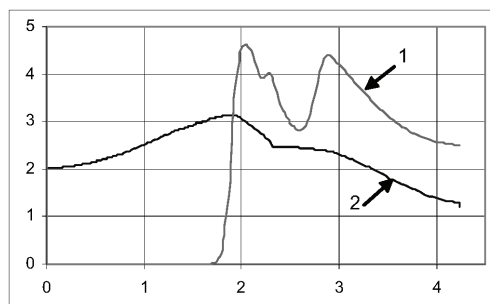


Рис. 6. Распределения плотностей дисперсионной (кривая 1) и несущей (кривая 2) фаз (в $кг/м^3$).

В дальнейшем распределения несколько видоизменяются. Ударная волна отделяется от области наиболее интенсивного движения, и поэтому, потеряв поддержку сзади, вырождается в звуковое возмущение и перестаёт быть причиной движения. Течение напоминает уединённую волну, движение в которой затухает вследствие диссипативных процессов межфазного взаимодействия (трение, теплообмен), аналогично распаду вихревого слоя в вязкой жидкости. Его импульс и энергия сосредоточены в расширяющейся области, где распределения имеют холмообразный вид. Распределения параметров при $t = 30,7 \text{ msec}$, иллюстрирующие эту заключительную стадию движения, приведены на рис. 7-10.

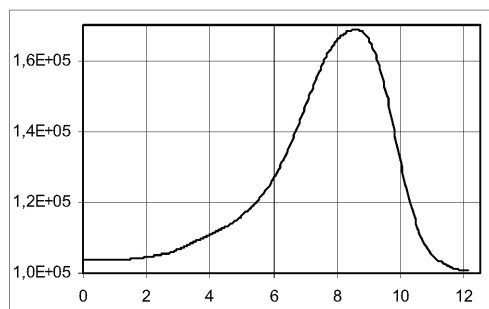


Рис. 7. Распределение давления в области движения (p — в Па , x — в м).

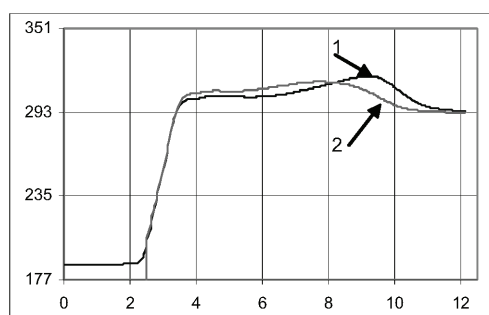


Рис. 8. Распределения температур газа (кривая 1) и частиц (кривая 2);
 T — в $^{\circ}\text{K}$, x — в м .

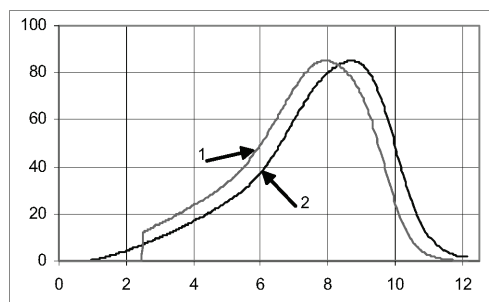


Рис. 9. Распределения скоростей (в м/сек) дисперсионной (кривая 1) и несущей (кривая 2) фаз.

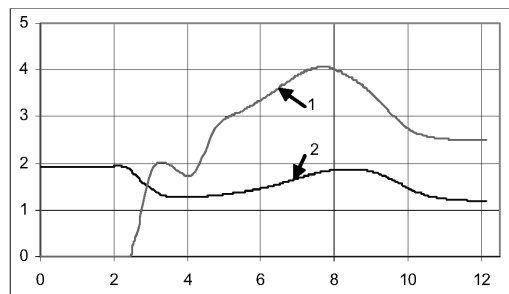


Рис. 10. Распределения плотностей дисперсионной (кривая 1) и несущей (кривая 2) фаз (в $\text{кг} / \text{м}^3$).

Выводы

Тестирование расчётной программы показывает достаточно хорошее согласование результатов с известным численным решением. Возможности данной методики связываются с дальнейшим учётом процессов межфазного обмена массой, испарения, смешения различных компонент в газовой фазе, протекания химических реакций.

Литература.

1. Дэш С.М., Торп Р.Д. Метод сквозного счёта для одно- и двухфазных течений в сверхзвуковых выхлопных струях. // Ракетн. техн. и косм. 1981. т. 19, № 9. Стр. 12 — 25.
2. Чэнг Иши. Трёхмерные двухфазные сверхзвуковые течения в соплах. // Аэрокосмическая техника. Т. 2, № 2, Стр. 39-48, 1984.
3. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. — М.: Наука. 1987. — 464 с.
4. Губайдуллин А.А., Ивандаев А.И., Нигматулин Р.И. Некоторые результаты численного исследования нестационарных волн в газовзвесах. // Изв. АН СССР. Сер. МЖГ. 1976, № 5. Стр. 64 — 69.
5. Годунов С. К. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука. 1976. — 400 с.
6. Овсянников Л.В. Лекции по основам газовой динамики. М.: Наука. 1981. — 368 с.

О. Г. Гірін

Чисельна схема для розрахунку двофазових дисперсних течій

АНОТАЦІЯ

Пропонується методика для розрахунку одновимірних неусталених рухів двофазової суміші з відносно невеликою об'ємною концентрацією дисперсної фази, коли у якості першого наближення для газової фази можна взяти значення її параметрів, обчислені за відсутності впливу з боку частинок, з наступним урахуванням впливу дисперсної фази. Застосовуються консервативні різницеві схеми для рівнянь механіки гетерогенних середовищ у майже дивергентній формі. Для обчислення першого наближення параметрів газової фази на новому часовому шарі застосовується схема Годунова, що дозволяє робити виділення лагранжових комірок у газовій фазі, а також виділення фронту ударної хвилі.

Girin A. G.

Computational routine for the calculation of two-phase dispersed flows.

SUMMARY

The routine is proposed for computation of 1-D non-stationary flows of two-phase mixtures with relatively low volume concentration of dispersed phase, when the values of gas phase parameters, which are calculated without particles action, may be taken as first-order approximation, with further account for influence of dispersed phase. The conservative finite-difference schemes are used for equations of motion of heterogeneous media in an almost divergent form. To find the first-order approximation for gas-phase parameters on new time level the Godunov method is used, which allows to distinguish the lagrangian grid in gas phase, as well as to fit front of the shock wave.