

УДК 519.6

В.Н. ФЕНЧЕНКО, канд. физ.-мат. наук; с.н.с. Физико-технического института низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины, Харьков;
О.В. КРАВЧЕНКО, канд. техн. наук; с.н.с. Института проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины, Харьков;
В.И. МОМОТ, ведущий инженер Института проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины, Харьков

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕЧЕНИЙ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ С ВЯЗКОЙ ДИСПЕРСИОННОЙ СРЕДОЙ И ТВЕРДОЙ, СИЛЬНО НЕОДНОРОДНОЙ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗОЙ, НЕСУЩЕЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЗАРЯД

Предложен метод численного решения системы уравнений Навье-Стокса-Пуассона-Фоккера-Планка, описывающей нестационарные течения дисперсной системы с вязкой дисперсионной средой и твердой сильно неоднородной дисперсной фазой, несущей электрический заряд под действием гравитационного и электростатического полей.

Запропоновано метод чисельного розв'язку системи рівнянь Навье-Стокса-Пуассона-Фоккера-Планка, що описує нестационарні течії дисперсної системи з в'язким дисперсійним середовищем і твердою дуже неоднорідною дисперсною фазою, яка несе електричний заряд під дією гравітаційного і електростатичного полів.

The method for the numerical solution of the Navier-Stokes-Poisson-Fokker-Planck equations describing the unsteady flow of a dispersed system with a viscous dispersion medium and a solid with strongly inhomogeneous dispersed phase, which carries an electrical charge under the influence of gravitational and electrostatic fields is proposed.

Введение. Во многих технологических процессах, в частности, при производстве и классификации порошковых материалов самого различного назначения (машиностроение, фармацевтика, медицина, химия наноматериалов и т.п.), при производстве композиционных топлив, лакокрасочных покрытий, наполненных полимеров, смазочных материалов с твердыми присадками, все большее значение приобретает учет особенностей течения дисперсных систем с вязкой дисперсионной средой и твердой сильно неоднородной дисперсной фазой, несущей электрический заряд [1, 2].

Когда твердые частицы имеют близкие размеры, их движение может быть описано в рамках так называемой «двухфазной модели». Однако, эта модель не применима для сильно неоднородных дисперсных систем, образованных частицами, имеющими значительный разброс по размерам. Так как в этом случае скорости движения разных по размеру частиц могут сильно различаться, то для описания их движения необходимо использовать функцию распределения, характеризующую среднее количество частиц с определенным разбросом по размерам и скоростям в элементе пространства. Таким образом, в отличие от классической системы уравнений Навье-Стокса, система уравнений, описывающая нестационарное течение вязкой сильно неоднородной дисперсной системы, содержит дополнительный интегральный член в уравнении движения, учитывающий влияние частиц на движение несущей дисперсионной среды, а для расчета функции распределения частиц используется уравнение Фоккера-Планка. Кроме того, для электрически заряженных частиц система

уравнений должна быть дополнена еще и уравнением Пуассона для потенциала поля [3–5].

В [6] предложен метод численного решения начально-краевой задачи, описывающей нестационарные течения электрически нейтральной дисперсной системы, основанный на схеме расщепления по физическим факторам для уравнения движения жидкой дисперсионной среды и использовании метода статистического моделирования при решении уравнения Фоккера-Планка для функции распределения. В данной работе этот метод распространен на случай, когда частицы дисперсной фазы несут электрический заряд и, следовательно, появляются дополнительные Кулоновские силы взаимодействия частиц между собой.

Вопросы глобальной разрешимости подобных начально-краевых задач рассматривались, в частности, в [5, 7, 8].

1 Уравнения, граничные и начальные условия. Исходная система уравнений, описывающих нестационарные движения дисперсной системы с вязкой несжимаемой дисперсионной средой и твердой дисперсной фазой (мелкими твердыми частицами) в области $\bar{x} \in \Omega$, имеет вид [3]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u}, \nabla_x) \bar{u} - \nu \Delta \bar{u} + 6\pi\nu \int \int_{r, w} r(\bar{u}(\bar{x}, t) - \bar{w}) f(\bar{x}, \bar{w}, r, t) dw dr + \frac{\nabla_x p}{\rho_f} &= g; \\ \operatorname{div} \bar{u} &= 0; \\ \Delta \varphi &= -q \int \int_{r, w} r f(\bar{x}, \bar{w}, r, t) dw dr; \\ \frac{\partial f}{\partial t} + (\bar{w}, \nabla_x) f + \left(\nabla_w, \left[\frac{9\nu}{2r^2} [\bar{u}(\bar{x}, t) - \bar{w}] - \frac{3}{4\pi\rho_p r^2} \nabla_x \varphi + \bar{g} \right] f \right) &= D \Delta_w f, \end{aligned}$$

где ν – кинематическая вязкость дисперсионной среды; ρ_f – ее плотность; $\bar{u} = \bar{u}(\bar{x}, t)$ – поле скоростей; $p = p(\bar{x}, t)$ – поле давления; ρ_p – плотность частиц твердой дисперсной фазы; q – объемная плотность заряда частиц; \bar{g} – внешняя массовая сила, действующая на единицу объема; $\varphi = \varphi(\bar{x}, t)$ – потенциал электрического поля частиц; D – коэффициент диффузии, а $f = f(\bar{x}, \bar{w}, r, t)$ – функция распределения частиц дисперсной фазы в пространстве по скоростям и радиусам.

На участке, где дисперсная система поступает в расчетную область, задаем поле скоростей среды, объемную плотность частиц в потоке, их заряд и функцию распределения по радиусам, полагая, что скорости частиц на входе соответствуют скорости потока, а там, где она покидает расчетную область, ставим условие свободного вытекания, на твердой стенке – условия не протекания и прилипания, а на свободной границе – условие не протекания и скольжения.

Для функции распределения ставим условия поглощения частиц границей, зеркального или диффузного отражения.

Для потенциала электрического поля задаем условия убывания на бесконечности и условие Дирихле на проводящей части границы расчетной области.

В начальный момент задаем распределение скорости, удовлетворяющее уравнению неразрывности и граничным условиям, а также начальное значение функции распределения, удовлетворяющее граничным условиям.

2 Численная реализация. Для дискретизации уравнений движения дисперсионной среды используем метод конечных разностей на прямоугольной сетке с шахматным расположением узлов (сетка *MAC*-типа) – давление вычисляем в центрах ячеек, а составляющие скорости на их гранях. При этом строим разностную сетку так, чтобы граница расчетной области проходила через точки, в которых вычисляется нормальная составляющая скорости, а для задания узловых значений касательной составляющей скорости используем линейную интерполяцию [9]. В центрах ячеек вычисляем также и потенциал электрического поля. На разнесенной сетке поле скоростей и давления аппроксимируется со вторым порядком точности с использованием значений составляющих скорости и значений давления в соседних точках. Такая сетка, как замечено в [10], позволяет связать значения скорости и давления в соседних узлах и избежать появления осцилляций в решении, которые возникают при использовании центральных разностей на неразнесенной сетке.

Для интегрирования по времени уравнений движения жидкой дисперсионной среды используем схему типа «предиктор-корректор». На первом этапе считаем, что перенос количества движения в жидкости осуществляется за счет конвекции, диффузии, а также увлечения жидкости движущимися частицами твердой дисперсной фазы и определим промежуточное поле скоростей \tilde{u}

$$\frac{\tilde{u} - \bar{u}^{(n)}}{\Delta t} + (\bar{u}^{(n)}, \nabla_x) \bar{u}^{(n)} - \nu \Delta \bar{u}^{(n)} + 6\pi\nu \int \int_{r w} r (\bar{u}^{(n)} - \bar{w}) f^{(n)} dw dr = \bar{g},$$

которое сохраняет во внутренних точках вихревые характеристики, но не удовлетворяет условию неразрывности. Будем использовать явную схему Адамса-Башфорта второго порядка точности. Хотя эта схема имеет нестандартное начало счета и определенные сложности при необходимости изменить шаг в процессе счета, но обладает лучшей устойчивостью по сравнению, например, с методами Рунге-Кутты и, что важно, отличается меньшей трудоемкостью вычислений [11, 12].

Дискретизация уравнения изменения количества движения дисперсионной среды проводим так, чтобы разностные операторы наследовали основные свойства исходных дифференциальных операторов. Для обеспечения свойства транспортности и консервативности при дискретизации конвективных членов используем схему с разностями против потока, направление которого определяется средними значениями скоростей на границах ячейки [10, 11]. Для дискретизации диффузных потоков используем обычную схему с центральными разностями [10], а интегральный член в уравнении движения, учитывающий влияние частиц на жидкость, заменим соответствующей интегральной суммой.

Далее предполагаем, что перенос количества движения осуществляется за счет градиента давления, и определяем новое поле скоростей дисперсионной среды $\bar{u}^{(n+1)}$

$$\frac{\bar{u}^{(n+1)} - \tilde{u}}{\Delta t} = -\frac{\nabla \tilde{p}}{\rho_f}.$$

Так как вектор скорости $\bar{u}^{(n+1)}$ должен быть соленоидальным, то из уравнения изменения количества движения для давления получим уравнение Пуассона

$$\Delta \tilde{p} = \rho_f \frac{\nabla \tilde{u}}{\Delta t}.$$

Однако граничные условия для давления отсутствуют в физической постановке задачи, поэтому для их задания используем уравнение изменения количества движения в проекции на нормаль к границе расчетной области [9].

Для дискретизации оператора Лапласа используем обычные схемы с центральными разностями, а решение проводим итерационным методом последовательной верхней релаксации. При этом нужно, иметь в виду, что для сходимости итераций градиентные условия должны быть непосредственно подставлены в разностную схему при расчете внутренних точек, смежных с граничными [10]. И, разумеется, необходимо согласование градиента давления на границе с источником членом в уравнении Пуассона, т.е.

$$\int_{\partial\Omega} \frac{\partial p}{\partial n} ds = \int_{\Omega} \Delta p d\omega = \frac{\rho_f}{\Delta t} \int_{\Omega} \nabla \tilde{u} d\omega,$$

так как невыполнение этого условия (из-за ошибок аппроксимации) приводит к расходимости или к сильному замедлению сходимости итераций [10].

Потенциал электрического поля, создаваемого частицами дисперсной фазы, определяем из уравнения Пуассона

$$\Delta \varphi^{(n+1)} = -q \int \int_{r, w} r f^{(n)} dw dr.$$

Для дискретизации оператора Лапласа используем обычную схему с центральными разностями, а интеграл в правой части заменяем соответствующей интегральной суммой. Так как источники зарядов сосредоточены в ограниченной области Ω , то находить решение во всем пространстве нет необходимости. Это позволяет заменить исходную задачу задачей во вспомогательной области, содержащей Ω , на границе которой поставлены искусственные граничные условия, выбираемые так, чтобы решение задачи в области Ω было близко к решению исходной задачи.

Уравнение Фоккера-Планка описывает эволюцию во времени плотности распределения в фазовом пространстве частиц твердой дисперсной фазы в вязкой дисперсионной среде (объемная плотность частиц при этом предполагается незначительной, так что их столкновениями можно пренебречь). Для его решения формируем в соответствии с начальным значением функции распределения ансамбль модельных частиц, имеющих индивидуальные радиусы, координаты и скорости (выбор числа модельных частиц зависит от решаемой задачи и должен быть достаточным для расчета значений функции распределения с допустимой погрешностью). Эти частицы перемещаются в соответствии со своими скоростями и действующими на них силами

$$\frac{\bar{x}_s^{(n+1)} - \bar{x}_s^{(n)}}{\Delta t} = \bar{w}_s^{(n)};$$

$$\frac{\bar{w}_{s,i}^{(n+1)} - \bar{w}_{s,i}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{3}{4\pi\rho_p r_{s,i}^2} \left\{ 6\pi\nu [\bar{u}^{(n+1)}(\bar{x}_{s,i}^{(n)}) - \bar{w}_{s,i}^{(n)}] - \nabla_x \varphi^{(n+1)}(\bar{x}_{s,i}^{(n)}) \right\} + \bar{g} + \bar{\xi}_i,$$

где $r_{s,i}$ – радиус i -ой частицы ($i = 1, 2, \dots, N_s$); $\bar{x}_{s,i}$ – ее координаты; $\bar{w}_{s,i}$ – скорости; $\bar{\xi}_i$ – N_s независимых винеровских процессов ($\sigma = \sqrt{2D \cdot \Delta t}$).

Если частица достигла границы расчетной области, то в зависимости от граничного условия, она должна быть исключена из дальнейшего рассмотрения или продолжить движение после зеркального или диффузного отражения. При этом если частицы не вносятся потоком в расчетную область, то, естественно, их количество в расчетной области со временем будет уменьшаться. Однако ситуация меняется, если поток вносит частицы в расчетную область. Для моделирования этого процесса необходимо по мере того, как те или иные модельные частицы покидают соответствующие приграничные ячейки сетки, вводить в рассмотрение новые частицы. Их количество в расчетной области при этом может, со временем недопустимо возрасти, тогда из рассмотрения приходится исключать частицы, переместившиеся в потоке на наибольшее расстояние (из-за чего некоторая часть расчетной области может остаться без рассмотрения).

Для вычисления функции распределения разбиваем фазовое пространство на ячейки. Это не представляет сложности, так как после проведения расчетов диапазон скоростей частиц известен, а дискретизация пространства координат уже задана. Заметим, что в большинстве случаев интерес представляет только плотность распределения частиц, радиусы которых лежат в заданном диапазоне, в той или иной зоне расчетной области. Значения сеточной аппроксимации этой функции распределения определяются как отношение числа модельных частиц, находящихся в соответствующей ячейке расчетной области (т.е. учитываются частицы с любыми скоростями), к суммарному числу модельных частиц.

3 Вычислительный эксперимент. В [6] рассмотрена задача о течении вязкой несжимаемой жидкости, содержащей множество, оседающих под действием силы тяжести разнородных частиц, в канале с уступом (аналогичная задача для чистой жидкости относится к классическим [13]). Наличие уступа, как известно, приводит к возникновению за ним зоны вихревого движения жидкости. На рис. 1 показаны рассчитанные в [6] типичные линии тока чистой жидкости в канале с уступом при $Re \approx 1$. Оседающие частицы, увлекают жидкость, что изменяет картину линий тока – они «прижимаются» ко дну канала и зона вихревого движения уменьшается. На рис. 2 показаны типичные линии тока суспензии металлической пыли с частицами диаметрами 0,1–1 мм в вязком масле при объемной концентрации частиц на входе в канал 10 %.

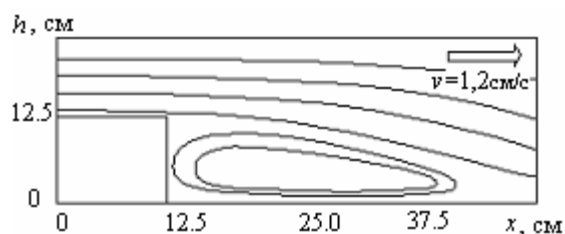


Рис. 1. Линии тока чистой жидкости

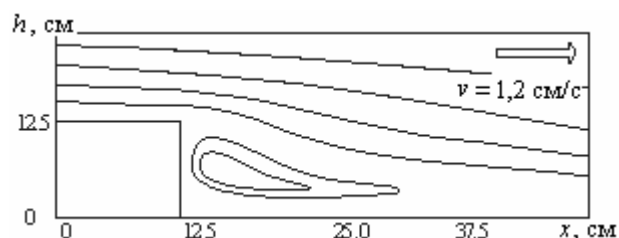


Рис. 2. Линии тока жидкости, несущей частицы

Таким образом, наличие уступа может существенно изменить распределение выпавших на дно частиц по длине канала – за уступом возникает «тень», где на дне осевших частиц, особенно крупных, будет немного. С другой стороны, вихревое

движение жидкости за уступом приведет к тому, что легкие частицы будут увлекаться противотоком и перемещаться к краю уступа, а более крупные в той или иной мере теряют горизонтальную составляющую скорости и оседают почти вертикально (на рис. 3, 4 показаны типичные траектории оседания крупных и мелких частиц).

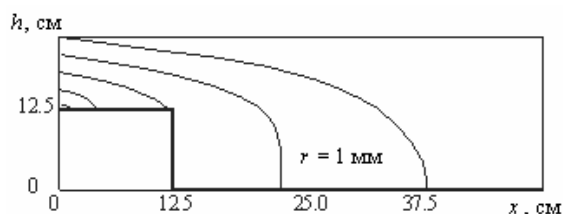


Рис. 3. Траектории оседания крупных частиц

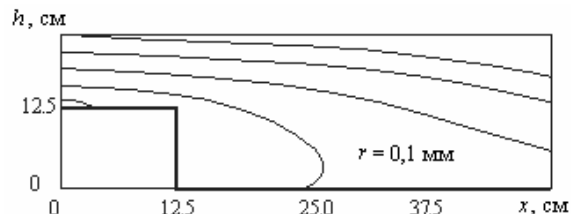


Рис. 4. Траектории оседания мелких частиц

Если частицы несут электрический заряд, то на них дополнительно действуют Кулоновские силы, частицы отталкиваются друг от друга и область их оседания расширяется – крупных в меньшей мере, мелких в значительно большей. При этом сразу после уступа крупные частицы, опускающиеся быстрее под действием силы тяжести, оказываются ниже мелких и из-за наличия электрических сил, отталкивающих частицы друг от друга, оседание мелких частиц замедляется. Это приводит к дополнительному сносу мелких частиц вдоль канала и соответствующему смещению области их оседания рис. 5, 6.

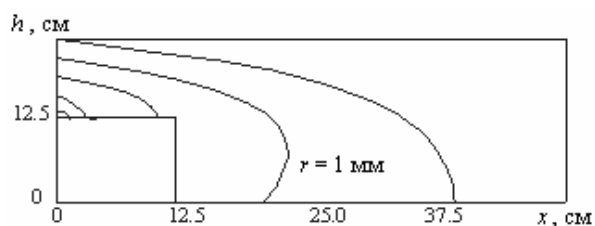


Рис. 5. Траектории оседания крупных заряженных частиц

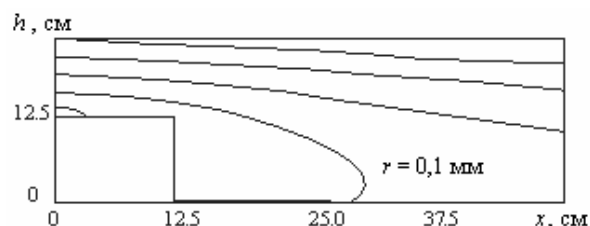


Рис. 6. Траектории оседания мелких заряженных частиц

Заметим, что, приведенные выше описания моделируемых процессов носят чисто качественный, иллюстративный характер – их реальное протекание существенно зависит от диаметров частиц, их масс, концентрации в потоке, скорости и вязкости среды и т.п.

Вывод. Предложен метод численного решения системы уравнений Навье-Стокса-Пуассона-Фоккера-Планка, описывающей нестационарное течение дисперсной системы с вязкой дисперсионной средой и твердой сильно неоднородной дисперсной фазой, несущей электрический заряд под действием гравитационного и электростатического полей. Метод основан на схеме расщепления по физическим факторам и использовании конечных разностей на прямоугольной сетке с шахматным расположением узлов для дискретизации уравнений Навье-Стокса и моделировании процесса движения частиц методом Монте-Карло.

Выполнено моделирование процесса оседания сильно разнородных заряженных частиц, вносимых потоком вязкой жидкости в канал с уступом. Полученные результаты позволяют количественно описать известные, наблюдаемые в экспериментах, эффекты, подтверждают работоспособность алгоритма и дают основание рассчитывать на

моделирование достаточно сложных технологических процессов, в частности, процесса электроклассификации нанодисперсных частиц.

Список литературы: 1. Криогенная технология производства ультрадисперсных композиционных добавок к смазочным материалам [Текст] / О.В. Кравченко, И.Г. Суворова, В.И. Момот, Д.А. Велигоцкий // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. Современные технологии в газотурбостроении. – 2010. – Ч. I, 3/2 (45). – С. 55-59. 2. *Кравченко, О.В.* Энергетические и экологические аспекты использования фенольных сточных вод в качестве водоугольных топлив [Текст] / О.В. Кравченко, Е.Ю. Андриенко // Экология и промышленность. – 2011. – № 3. – С. 67-71. 3. *Caflisch, R.* Dynamic theory of suspensions with Brownian effects [Text] / R. Caflisch, G.C. Papanicolau // SIAM J. Appl. Math. – 1983. – 43 (4). – P. 885-906. 4. *Williams, F.A.* Combustion Theory: The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems – 2nd ed. [Text] / F.A. Williams. – Menlo Park, CA: Benjamin / Cummings Publishing, 1985. – 699 p. 5. *Анощенко, О.* Глобальные слабые решения системы Навье-Стокса-Власова-Пуассона [Текст] / О. Анощенко, Е. Хруслов, Х. Стефан // Журн. матем. физ., анал., геом. – 2010. – С. 143-182. 6. *Фенченко, В.Н.* Моделирование нестационарных течений взвеси мелких твердых частиц в вязкой несжимаемой жидкости [Текст] / В.Н. Фенченко // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2010. – Вип. 11. – С. 189-199. 7. *Hamdache, K.* Global Existence and Large Time Behaviour for the Vlasov-Stokes Equations [Text] / K. Hamdache // Japan J. Indust. Appl. Math., 15. – 1998. – P. 51-74. 8. *Anoschenko, O.* Global existence of a generalized solution of a system of equations of motion of a suspension [Text] / O. Anoschenko // Dynamical systems and complex analysis. – Kiev. – 1992. – С. 112-119. 9. *Волков, К.Н.* Реализация схемы расщепления на разнесенной сетке для расчета нестационарных течений вязкой несжимаемой жидкости [Текст] / К.Н. Волков // Вычислительные методы и программирование. – 2005. – Т. 6. – С. 269-281. 10. *Роуч, А.* Вычислительная гидродинамика [Текст] / А. Роуч. – М.: Мир. – 1980. – 616 с. 11. *Андерсон, Д.* Вычислительная гидродинамика и теплообмен. Т. 2. [Текст] / Д. Андерсон. – М.: Мир, 1990. – 392 с. 12. *Ортега, Дж.* Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений [Текст] / Дж. Ортега, У. Пул. – М.: Наука. – 1986. – 288 с. 13. *Лаврентьев, М.А.* Проблемы гидродинамики и их математические модели [Текст] / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат. – М.: Наука, 1977. – 407 с.

© Фенченко В.Н., Кравченко О.В., Момот В.И., 2012
Поступила в редколлегию 23.02.12