

УДК 532.529.6

doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.120-136

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ ИНЕРЦИОННОЙ ВЗВЕСИ В ВИХРЕВОМ ТЕЧЕНИИ

А.К. Гильфанов¹, Р.Р. Салахов¹, Т.Ш. Зарипов²

¹*Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, 420008, Россия*

²*Университет Брайтона, г. Брайтон, BN2 4AT, Великобритания*

Аннотация

Квадратурный метод моментов использован для решения задачи моделирования динамики полидисперсных инерционных частиц. Реализованы модели взвешенной фазы, предполагающие произвольное распределение частиц по размерам, осредненную скорость для всех частиц и среднюю скорость, обусловленную размером частицы. Проведено сравнение моделей на примере задачи о движении инерционных испаряющихся частиц в вихревом течении с использованием лагранжева подхода как эталонного. Показано качественное согласие полей концентрации частиц, полученных методами моментов и с помощью лагранжева подхода. Кроме того, показано, что использование моделей с двумя и тремя средними скоростями приводит к качественному согласию полей среднего размера частиц и дисперсии распределения частиц по размерам, полученных методами моментов и с помощью лагранжева подхода.

Ключевые слова: метод моментов, полидисперсный аэрозоль, вихревое течение, инерционные частицы

Введение

Математические модели, описывающие движение взвешенных в газе частиц, имеют научное и практическое значение в машиностроении [4], химической промышленности [5], медицине и других областях. Одним из важных эффектов, который необходимо учитывать при моделировании движения крупных частиц, является инерция, вследствие которой траектории движения частиц могут отклоняться от линий тока несущей среды. Другим эффектом, возникающим при рассмотрении динамики капель, является испарение, приводящее к уменьшению их размеров, что, в свою очередь, влияет на инерционные свойства частиц. На уровне микромасштаба для моделирования динамики частиц используется лагранжев подход [1], в рамках которого решаются обыкновенные дифференциальные уравнения для характеристик отдельных частиц. Для учета межфазного взаимодействия требуется вычислять интегральные характеристики распределения частиц, например их числовую плотность (или концентрацию). Основной сложностью при этом является необходимость рассчитывать траектории большого количества частиц, что может значительно увеличивать время расчета. Особенно затруднительно это становится, если предполагать систему частиц полидисперсной, то есть образующей распределение по размерам. На уровне макромасштаба применяется эйлеров подход, в рамках которого взвешенная фаза описывается как непрерывная среда с осредненными параметрами (общая концентрация, средняя скорость, средний размер). Данный подход, известный как two-fluid [1], может быть недостаточно точным и не отражать эффекты, связанные с полидисперсностью: частицы различных

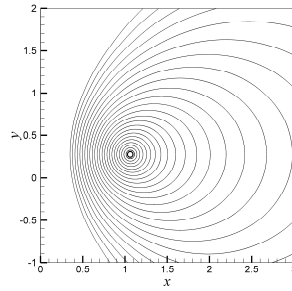


Рис. 1. Линии тока несущей среды

размеров имеют разную скорость испарения и инерцию. В последние десятилетия значительное развитие получили модели мезомасштаба, основанные на решении кинетического уравнения Больцмана с помощью квадратурных методов моментов [10, 12]. В методе моментов происходит переход от кинетического уравнения, записанного для функции плотности распределения частиц по фазовым переменным (размер частицы, компоненты скорости), к эйлеровым уравнениям переноса моментов в предположении некоторой формы функции распределения. Квадратурный метод моментов применялся для функции распределения по размерам в задаче моделирования испаряющегося спрея [7] в предположении осредненной скорости взвешенной фазы. В [3] показано, что использование метода моментов для функции распределения по скоростям позволяет корректно моделировать ситуации пересечения траекторий монодисперсных частиц. В [2] предложена комбинация секционного метода и метода моментов, предполагающая разбиение пространства размеров частиц на секции и использование квадратурного метода моментов для моделирования распределения частиц по скоростям внутри секций. Однако такой подход имеет высокую вычислительную стоимость. Таким образом, остается актуальным развитие экономичных методов для моделирования динамики распределений частиц как по размерам, так и по скоростям. Целью настоящей работы является сравнение квадратурных методов моментов на основе моделей, предполагающих распределение частиц по размерам, осредненную скорость и условные средние скорости взвешенной фазы. В качестве эталонного метода использован лагранжев подход.

1. Модель течения несущей фазы

В качестве модели поля течения несущей среды выбрана аналитическая модель вихревого течения, полученная в работе [8]. Такое течение представляет собой вихревое осесимметричное кольцо, движущееся в пространстве. С целью уменьшения вычислительной стоимости расчеты выполнены в меридиональном сечении на одном из временных срезов течения. Линии тока течения показаны на рис. 1.

2. Модель течения взвешенной фазы

Система частиц, взвешенных в газе, может быть описана с помощью функции плотности $f(t, x, y, s, v_x, v_y)$ распределения частиц по площадям поверхности частиц s и компонентам скорости (v_x, v_y) . Тогда динамика функции f описывается уравнением Больцмана–Уильямса [16]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(v_x f)}{\partial x} + \frac{\partial(v_y f)}{\partial y} + \frac{(A_x f)}{\partial v_x} + \frac{(A_y f)}{\partial v_y} + \frac{\partial(Rf)}{\partial s} = 0, \quad (1)$$

где (A_x, A_y) – компоненты силы сопротивления несущей среды, R – закон испарения частицы. Уравнение (1) записано при условии малой объемной доли частиц, что позволяет пренебречь столкновением частиц. Пусть сила сопротивления описывается законом Стокса

$$A_x = \frac{u_x - v_x}{\text{Stk}}, \quad A_y = \frac{u_y - v_y}{\text{Stk}},$$

где Stk – число Стокса, (u_x, u_y) – компоненты скорости несущей среды, а постоянный закон испарения частиц представим в виде

$$R = \frac{ds}{dt} = \text{const.}$$

3. Метод моментов

Для решения уравнения (1) применяется метод моментов [3, 10, 12]. В рамках метода моментов выполняется переход от задачи (1) к задаче для моментов $M_{k,l,m}$ функции плотности распределения f :

$$M_{k,l,m}(s, v_x, v_y) = \int_{\Omega} s^k v_x^l v_y^m f(s, v_x, v_y) d\Omega.$$

Представим функцию f в виде

$$f(s, v_x, v_y) = n(s) \cdot g(v_x, v_y | s),$$

где n – функция распределения частиц по площадям поверхностей, g – функция распределения по скоростям, обусловленная площадью поверхности частицы.

Для учета динамики распределения частиц по размерам умножим (1) на s^k и проинтегрируем по области возможных значений площади поверхности

$$\begin{aligned} \frac{\partial M_{0,0,0}}{\partial t} + \frac{\partial(M_{0,1,0})}{\partial x} + \frac{\partial(M_{0,0,1})}{\partial y} &= -Rn(s=0), \\ \frac{\partial M_{k,0,0}}{\partial t} + \frac{\partial(M_{k,1,0})}{\partial x} + \frac{\partial(M_{k,0,1})}{\partial y} &= -kRM_{k-1,0,0}, \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2)$$

В уравнении (2) правая часть описывает поток исчезающих частиц в результате испарения. Для учета движения частиц умножим (1) на $s^k v_x^l v_y^m$, $k \geq 1$, $l \geq 1$, $m \geq 1$, и проинтегрируем по области возможных значений

$$\begin{aligned} \frac{\partial M_{k,l,m}}{\partial t} + \frac{\partial(M_{k,l+1,m})}{\partial x} + \frac{\partial(M_{k,l,m+1})}{\partial y} &= \\ = \frac{u_x M_{k,l-1,m} - M_{k,l,m} l \theta(l)}{\text{Stk}} + \frac{u_y M_{k,l,m-1} - M_{k,l,m} m \theta(m)}{\text{Stk}} - kRM_{k-1,l,m}, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Система уравнений (2), (3) является незамкнутой в силу присутствия в левой части (3) неизвестных моментов. Для замыкания системы будем использовать квадратурный метод моментов [12]. Такая форма метода моментов предполагает

приближение для функции плотности распределения по размерам в виде взвешенной суммы дельта-функций

$$n(s) = \sum_{i=1}^N w_i \delta(s - s_i),$$

где s_i – узлы в фазовом пространстве размеров, w_i – веса соответствующих узлов. Квадратурные узлы (s_i, w_i) являются неизвестными величинами и могут быть найдены с помощью алгоритма Уилера [15] или PD-алгоритма [6] с учетом первых $2N$ моментов, имеющих вид

$$M_{k,0,0} = \sum_{i=1}^N w_i s_i^k.$$

Для получения конвективных членов в (3) будем использовать два следующих приближения (А и В) для скорости дисперсной фазы.

А. Все частицы в некоторой точке пространства и некоторый момент времени имеют одну осредненную скорость, тогда функция плотности распределения f по скоростям имеет вид

$$f(s, v_x, v_y) = \sum_{i=1}^N w_i \delta(s - s_i) \delta(v_x - \bar{v}_x) \delta(v_y - \bar{v}_y), \quad (4)$$

где (\bar{v}_x, \bar{v}_y) – средние значения скорости взвешенной фазы, которые рассчитываются по формулам

$$\bar{v}_x = M_{1,1,0}/M_{1,0,0}, \quad \bar{v}_y = M_{1,0,1}/M_{1,0,0}. \quad (5)$$

В рамках этой модели решаются уравнения (2) для первых $2N$ моментов распределения частиц по размерам и два уравнения для количества движения взвешенной фазы: уравнение (3) при $k = 1, l = 1, m = 0$ и $k = 1, l = 0, m = 1$.

В. Все частицы одного размера в некоторой точке пространства и некоторый момент времени имеют одну осредненную скорость, обусловленную этим размером, то есть функция плотности распределения f имеет вид

$$f(s, v_x, v_y) = \sum_{i=1}^N w_i \delta(s - s_i) \delta(v_x - \bar{v}_{x,i}) \delta(v_y - \bar{v}_{y,i}), \quad (6)$$

Чтобы определить компоненты скорости $(\bar{v}_{x,i}, \bar{v}_{y,i})$ для квадратурных узлов (s_i, w_i) , необходимо решить систему линейных уравнений

$$M_{k,1,0} = \sum_{i=1}^N w_i s_i^k \bar{v}_{x,i}, \quad M_{k,0,1} = \sum_{i=1}^N w_i s_i^k \bar{v}_{y,i}, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (7)$$

Решаются уравнения (2) для первых $2N$ моментов распределения частиц по размерам и $2N$ уравнений для количества движения взвешенной фазы: уравнение (3) при $k = 1, 2, \dots, N, l = 1, m = 0$ и $l = 0, m = 1$.

Решение системы уравнений (2), (3) в рамках приближений А и В позволяет моделировать движение испаряющейся инерционной взвеси, но неизвестным по-прежнему является член в правой части уравнения (2). Для учета исчезновения

частиц будем использовать метод наибольшей энтропии [11], предполагающий приближение

$$n^{ME}(s) = \exp\left(-\sum_{i=0}^{2N-1} \xi_i s^i\right), \quad (8)$$

где ξ – множители Лагранжа, получаемые из решения задачи минимизации энтропии Шеннона распределения (8) так, чтобы первые $2N$ моментов распределения были равны данным значениям. Аппроксимация (8) является непрерывной, что позволяет оценить значения моментов около нулевого значения размеров ($s = 0$).

4. Вычислительная схема

Схемы, применяемые в вычислительной гидродинамике для решения уравнений переноса, в традиционной форме не пригодны для решения уравнений переноса моментов (2–3), так как не гарантируют состоятельность множества моментов. В настоящей работе использована схема метода конечных объемов, основанная на идеях из работ [7, 11, 14]. Применена явная схема интегрирования по времени с ограничением на временной шаг [14], что обеспечивает состоятельность множества моментов. Пусть вычислительная область с размерами l_x и l_y разбита на $N_x \times N_y$ вычислительных ячеек (шаг разбиения $\Delta x = l_x/N_x$, $\Delta y = l_y/N_y$). Опишем основные этапы применения вычислительной схемы.

1. Инициализация в узлах сетки начальных значений параметров распределения ($w_i, s_i, v_{x,i}, v_{y,i}$) и моментов распределения

$$\mathbf{M} = (M_{0,0,0}, M_{1,0,0}, \dots, M_{2N,0,0}, M_{1,1,0}, M_{2,1,0}, \dots, M_{N,1,0}, M_{1,0,1}, M_{2,0,1}, \dots, M_{N,0,1}).$$

2. Расчет значений моментов на следующем временном шаге по явной схеме

$$\mathbf{M}_{a,b}^{adv} = \mathbf{M}_{a,b}(t) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{F}_{a+1/2}(t) - \mathbf{F}_{a-1/2}(t)) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (\mathbf{F}_{b+1/2}(t) - \mathbf{F}_{b-1/2}(t)),$$

где a, b – индексы вычислительной ячейки (дробные индексы соответствуют границам вычислительной ячейки), \mathbf{F} – адвективный поток моментов, вычисляемый по схеме квазивторого порядка [14], предполагающей в вычислительной ячейке линейное изменение весов w_i и постоянные значения размеров s_i и компонентов ($v_{x,i}, v_{y,i}$) скорости.

3. Восстановление параметров (w_i, s_i) функции распределения по размерам с использованием алгоритма Уилера или PD-алгоритма и получение компонентов скорости ($v_{x,i}, v_{y,i}$) по формулам (5) или решением системы линейных уравнений (7).

4. Значения компонентов скорости на следующем шаге по времени получаются по формулам, учитывающим силу сопротивления

$$\begin{aligned} v_x(t + \Delta t) &= u_x - (u_x - v_x(t)) \exp(-\Delta t/Stk), \\ v_y(t + \Delta t) &= u_y - (u_y - v_y(t)) \exp(-\Delta t/Stk). \end{aligned}$$

5. Испарение учитывается в два шага. В первую очередь необходимо рассчитать потери моментов вследствие исчезновения частиц. Для этого оценивается максимальный размер s_1 частицы, которая испарится полностью за время Δt (для постоянного закона испарения $s_1 = R \cdot \Delta t$). Тогда с помощью приближения (8) потери моментов рассчитываются по формуле

$$M_k^{evap} = \int_0^{s_1} s^k n(t, s) ds,$$

На втором шаге вычисляются значения моментов для следующего временного шага. Для постоянного закона распределения это можно сделать, используя полученное в [11] аналитическое решение

$$\mathbf{M}(t + \Delta t) = \exp(-\Delta t A) \mathbf{M}^{\text{adv}} - \exp(-\Delta t A) \mathbf{M}^{\text{evap}},$$

где

$$\exp(\Delta t A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \Delta t & 1 & 0 & \dots & 0 \\ (\Delta t)^2 & 2\Delta t & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\Delta t)^N & C_N^1 (\Delta t)^{N-1} & C_N^2 (\Delta t)^{N-2} & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

6. Восстановление параметров (w_i, s_i) функции распределения по размерам с использованием моментов, полученных на этапе 5.

7. Расчет с учетом граничных условий значений моментов по значениям параметров (w_i, s_i) , полученным на этапе 6, и значениям компонент скорости (v_x, v_y) , полученным на этапе 4. Далее выполняется переход на этап 2.

5. Лагранжев подход

В рамках лагранжева подхода решаются обыкновенные дифференциальные уравнения динамики характеристик отдельных частиц

$$\frac{dx}{dt} = v_x, \quad \frac{dy}{dt} = v_y, \quad \frac{dv_x}{dt} = \frac{u_x - v_x}{\text{Stk}}, \quad \frac{dv_y}{dt} = \frac{u_y - v_y}{\text{Stk}}, \quad \frac{ds}{dt} = R.$$

Для вычисления моментов распределения f необходимо наличие большого числа частиц, аппроксимирующих распределение, а также расчет интегральных характеристик в ячейках сетки. Опишем основные этапы применения лагранжева подхода для вычислительной области, разбитой на $N_x \times N_y$ ячеек.

1. Область $[s_{\min}; s_{\max}]$, являющая носителем функции распределения по размерам $n(s)$, разбивается на N_s секций. Каждая секция характеризуется весом $w_{s,k}$.

2. Для секции k , $k = 1, 2, \dots, N_s$, в каждой ячейке с ненулевой концентрацией инициализируется $N_p \times N_p$ частиц. Далее производится расчет траектории каждой частицы.

3. Для вычисления какого-либо момента распределения в ячейках производится подсчет числа частиц (умноженного на вес секции, размер и компоненты скорости) и нормализация в соответствии с начальным числом частиц в ячейке $N_p \times N_p$.

При достаточно больших значениях N_p и N_s лагранжев подход обеспечивает высокую точность и в настоящей работе будет использован как эталонный.

6. Результаты моделирования

Описанные методы были применены для моделирования динамики инерционных частиц с учетом и без учета испарения в вихревом течении (рис. 1). Расчеты произведены в безразмерном виде в области $[0; 8] \times [-8; 8]$. Облако частиц инициализировано в области $[0.4; 1.4] \times [-0.5; 0.5]$ согласно заданной функции распределения частиц по размерам: $n(s) = \pi \sin(\pi s)/2$. Данное распределение лежит в $s \in [0; 1]$ и является симметричным относительно среднего размера $s_m = 0.5$. Начальная скорость частиц полагалась равной нулю. Так как размер частицы s в нашем случае имеет смысл площади поверхности, то в качестве зависимости

числа Стокса от размера была выбрана линейная функция $Stk = 2s$. Вычислительная область была составлена из $N_x \times N_y = 512 \times 1024$ ячеек. В методе моментов была использована явная схема первого порядка по времени и схема квазिवторого порядка по пространству [14]. В рамках лагранжева подхода расчет интегральных характеристик выполнялся на той же вычислительной сетке, что и для метода моментов. Было взято $N_s = 100$ секций в области возможных размеров $s \in [0; 1]$. Начальное значение количества частиц в ячейках с ненулевой концентрацией $N_p \times N_p = 128 \times 128 = 16384$. В следующих разделах представлены результаты расчетов в случае наличия и отсутствия испарения.

6.1. Динамика частиц без учета испарения. Рассмотрим случай отсутствия испарения ($R = 0$). В этом случае частицы сохраняют свой первоначальный размер, и изменение функции распределения частиц f в вычислительных ячейках происходит только вследствие движения в пространстве. Для метода моментов было реализовано три модели: модель в предположении средней скорости (4) (далее – модель ММ1), модели в предположении условной средней скорости (6) с использованием $N = 2$ и 3 квадратурных узлов (далее – модели ММ2 и ММ3 соответственно). Основной интерес представляет динамика характеристик распределения: общая концентрация M_0 , средний размер ($s_m = M_1/M_0$) и дисперсия распределения частиц по размерам ($\sigma^2 = (M_0M_2 - M_1M_1)/M_0^2$).

Поля концентрации частиц в различные моменты времени показаны на рис. 2. Облако частиц, изначально представляющее собой квадрат, начинает деформироваться при $t = 1$ (вращение происходит по часовой стрелке). Внутри квадрата образуется зона пониженной концентрации в области максимальной скорости несущей среды. Далее зона пониженной концентрации расширяется, и квадрат имеет тенденцию преобразоваться в кольцо (рис. 2, в) (внутри зона очень низкой, но ненулевой концентрации). Все три подхода демонстрируют схожую картину поведения облака частиц, показывая положение максимума концентрации примерно в одной области. Однако поля концентрации, полученные лагранжевым подходом, являются наиболее размытыми. Это связано с тем, что в рамках этого подхода наиболее точно учитывается инерция частиц различных размеров ($N_s = 100$ секций). В рамках подхода с осредненной для всех частиц скоростью (ММ-1) все частицы движутся как один континуум, что приводит к образованию четко выделенных границ облака (рис. 2, г, д, е). Подходы ММ-2 и ММ-3 учитывают силу сопротивления для двух и трех квадратурных узлов в пространстве размеров, что приводит к более размытым границам облака. Заметим, что для $N = 2$ проявляется тенденция к образованию двух максимумов при $t = 10$. При $N = 3$ также можно видеть формирование трех максимумов: один ярко выраженный (центральный квадратурный узел), совпадающий по положению с максимумом для ММ-1, и два менее выраженных (левый и правый квадратурные узлы). Может показаться, что методы моментов с $N > 1$ эквивалентны секционному методу с соответствующим количеством секций, но это не так, поскольку в каждой вычислительной ячейке квадратурные узлы могут отличаться. Сравнивая значения концентрации частиц, заметим, что при $t = 1$ максимальная концентрация очень близка для различных методов, при $t = 5$ методы моментов недооценивают максимальное значение концентрации, а при $t = 10$ уже показывают более высокие значения максимума. Обычно в рамках лагранжева подхода максимум концентрации бывает выше в силу проявления численной диффузии в эйлеровых подходах. Данный эффект наблюдается при $t = 5$. Однако при $t = 10$ уже сказывается описанный выше эффект размытия концентрации частиц при использовании лагранжева подхода (для метода моментов максимумы локализованы).

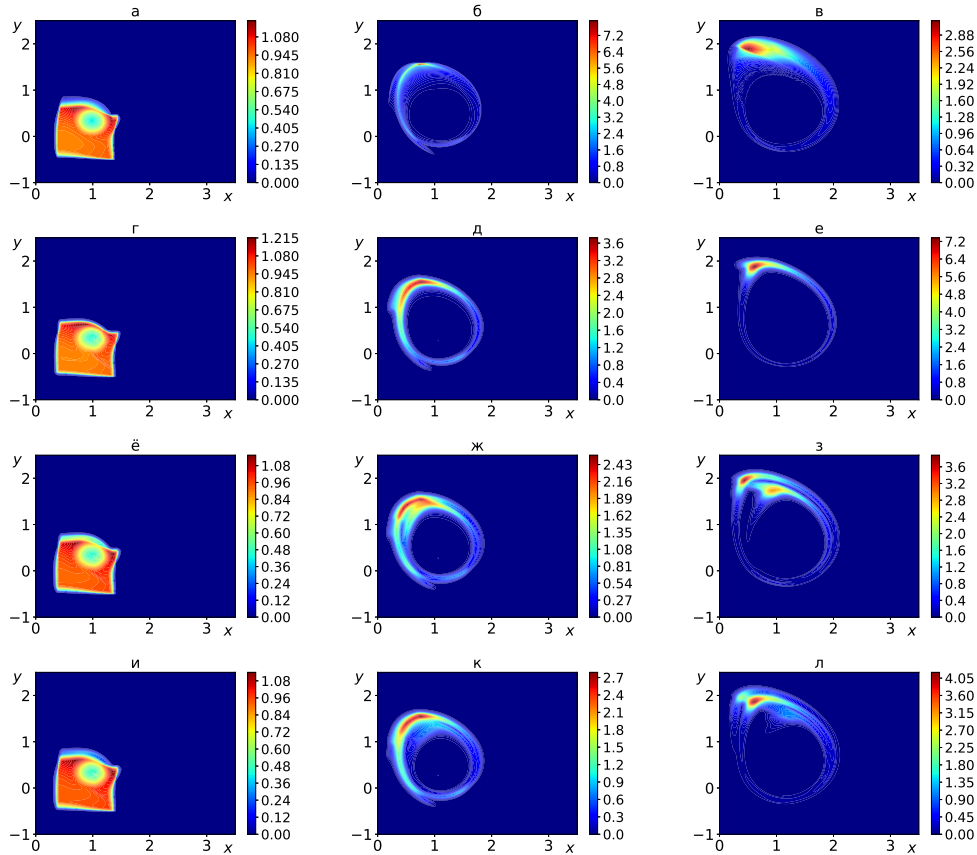


Рис. 2. Поля концентрации частиц, полученные с помощью лагранжева подхода (а, б, в) и подходов ММ-1 (г, д, е), ММ-2 (ё, ж, з) и ММ-3 (и, к, л) при $t = 1$ (а, г, ё, и), 5 (б, д, ж, к), 10 (в, е, з, л)

Поля среднего размера частицы в различные моменты времени показаны на рис. 3. Рассмотрим поведение пространственных распределений среднего размера, полученных в рамках лагранжева подхода. При $t = 1$, когда облако частиц только начинает вращение, поле в целом является однородным со средним размером $s_m = 0.5$. Однако на верхней границе преобладают мелкие частицы (они быстрее реагируют на движение несущей среды), а на нижней и правой боковой границы преобладают крупные частицы, слабо реагирующие на движение несущей среды. При $t = 5$ возникает тенденция аккумуляции более крупных частиц на границе облака. В центре вихря также присутствуют частицы среднего размера, однако их концентрация очень мала (рис. 2, б). Аккумуляция частиц по размеру отчетливо заметна при $t = 10$: чем дальше от центра вихря, тем крупнее частицы. При использовании метода моментов ММ-1 частицы любого размера имеют одну скорость, и поле среднего размера сохраняет однородность в любой момент времени (рис. 3, г, д, е). Использование методов ММ-2 и ММ-3 приводит к результатам, качественно близким к результатам лагранжева подхода, показывая формирование групп частиц разных размеров. Заметим, что результаты подхода ММ-3 лучше согласуются с лагранжевым подходом по сравнению с методом ММ-2.

Поля дисперсии распределения частиц по размерам σ^2 в различные моменты времени показаны на рис. 4. Рассмотрим поведение пространственных распределе-

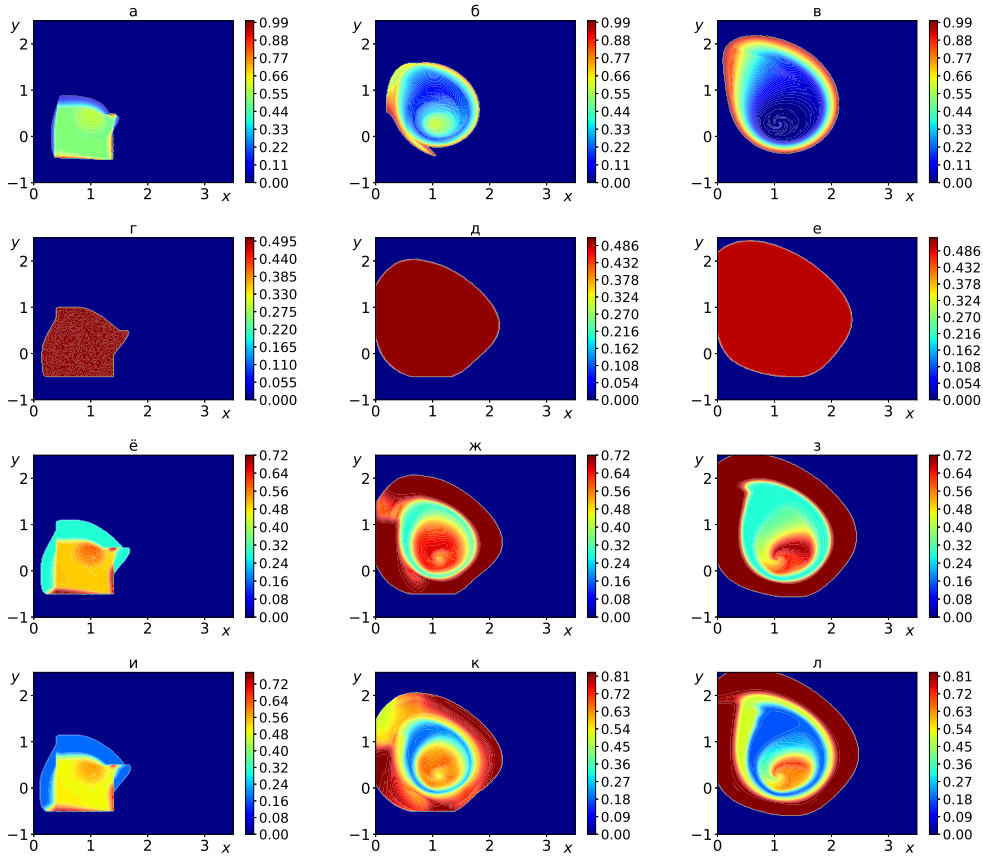


Рис. 3. Поля среднего размера частиц, полученные с помощью лагранжева подхода (а, б, в) и подходов ММ-1 (г, д, е), ММ-2 (ё, ж, з) и ММ-3 (и, к, л) при $t = 1$ (а, г, ё, и), 5 (б, д, ж, к), 10 (в, е, з, л)

ний дисперсии, полученных в рамках лагранжева подхода (рис. 4, а, б, в). При $t = 1$ распределение преимущественно однородно, при этом сохраняется начальное значения дисперсии $\sigma^2 = 0.045$. При $t = 5$ лагранжев подход показывает образование зон с высокой дисперсией, но концентрация частиц в этих областях мала. В областях с высокой концентрацией дисперсия остается приблизительно равной исходному значению (0.045). При $t = 10$ в областях с высокой концентрацией частиц происходит уменьшение дисперсии, возникающее вследствие аккумуляции в одних и тех же зонах близких по размеру частиц. Так же, как и для распределений среднего размера, поля дисперсии, полученные с помощью подхода ММ-1, сохраняют однородность (рис. 4, г, д, е). Использование методов ММ-2 и ММ-3 приводит к неоднородным пространственным распределениям дисперсии. В целом поля дисперсии, полученные методами ММ-2 и ММ-3, качественно схожи с полями, полученными с помощью лагранжева подхода, показывая максимальные значения σ^2 в центре вихря. Заметим, что результаты, полученные методом моментов с тремя квадратурными точками, ближе к результатам, полученным с помощью лагранжева подхода: дисперсия максимальна в центре вихря, но уменьшается к краям облака частиц.

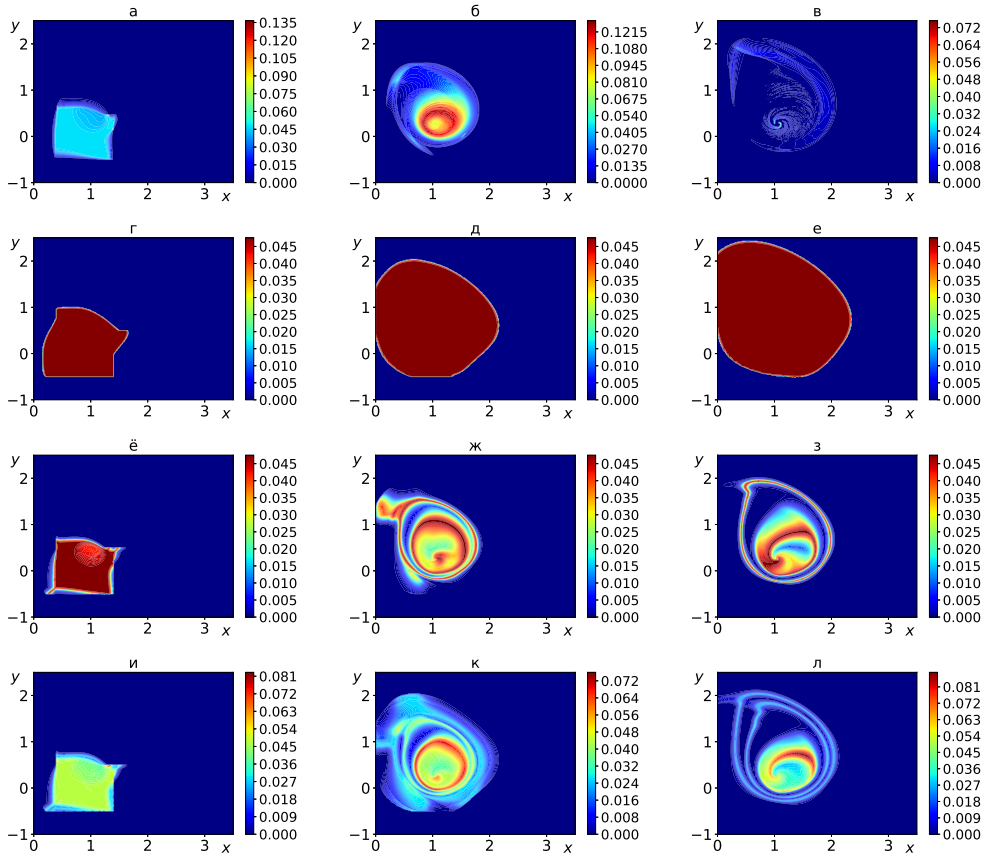


Рис. 4. Поля дисперсии распределения частиц по размерам, полученные с помощью лагранжева подхода (а, б, в) и подходов ММ-1 (г, д, е), ММ-2 (ё, ж, з) и ММ-3 (и, к, л) при $t = 1$ (а, г, ё, и), 5 (б, д, ж, к), 10 (в, е, з, л)

6.2. Динамика частиц с учетом испарения. Рассмотрим случай динамики испаряющихся частиц ($R = 0.05$). При наличии испарения функция плотности распределения f в вычислительных ячейках изменяется вследствие двух эффектов: уменьшения размера частиц и их движения. При этом испарение непосредственно влияет на движение, так как уменьшение размера частиц приводит к уменьшению их инерции. Для метода моментов было реализовано две модели: модель в предположении средней скорости (4) (модель ММ1) и модели в предположении условной средней скорости (6) с использованием $N = 2$ квадратурных точек. Подход с тремя квадратурными точками не использовался, так как показал неустойчивость при учете исчезновения частиц.

Поля концентрации частиц в различные моменты времени показаны на рис. 5. В целом динамика концентрации качественно схожа с результатами, полученными при отсутствии испарения (рис. 2), но в данном случае заметно уменьшение концентрации вследствие исчезновения частиц. Так же, как и в случае отсутствия испарения, по сравнению с лагранжевым подходом методы моментов недооценивают максимум концентрации (кроме подхода ММ-1 при $t = 6$). Аналогично случаю $R = 0$ использование подхода ММ-2 приводит также к более размытым полям концентрации и образованию двух выраженных максимумов.

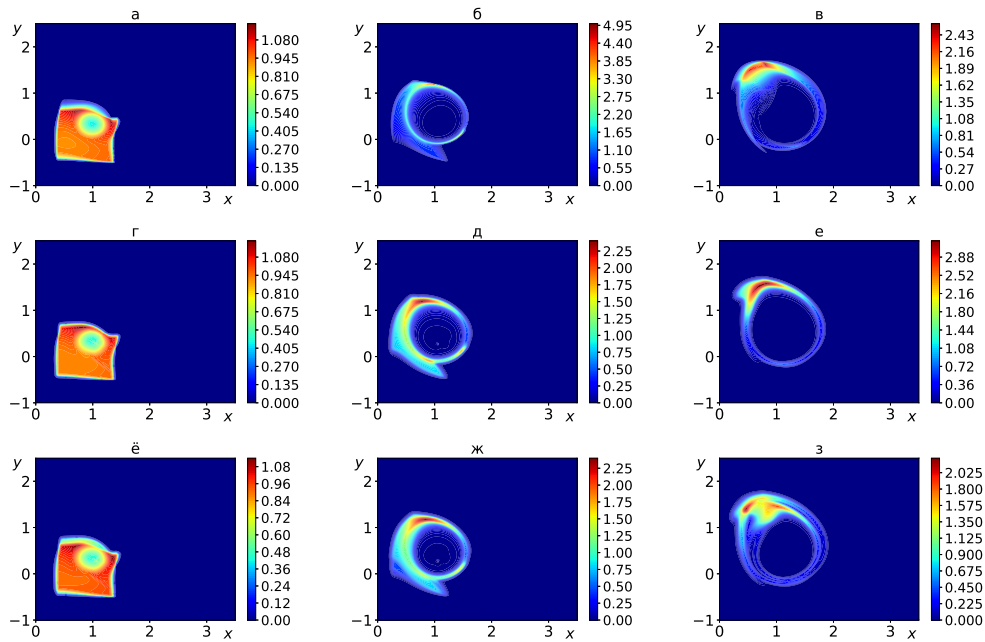


Рис. 5. Поля концентрации частиц, полученные с помощью лагранжева подхода (а, б, в) и подходов ММ-1 (г, д, е) и ММ-2 (ё, ж, з) при $t = 1$ (а, г, ё), 3 (б, д, ж), 6 (в, е, з)

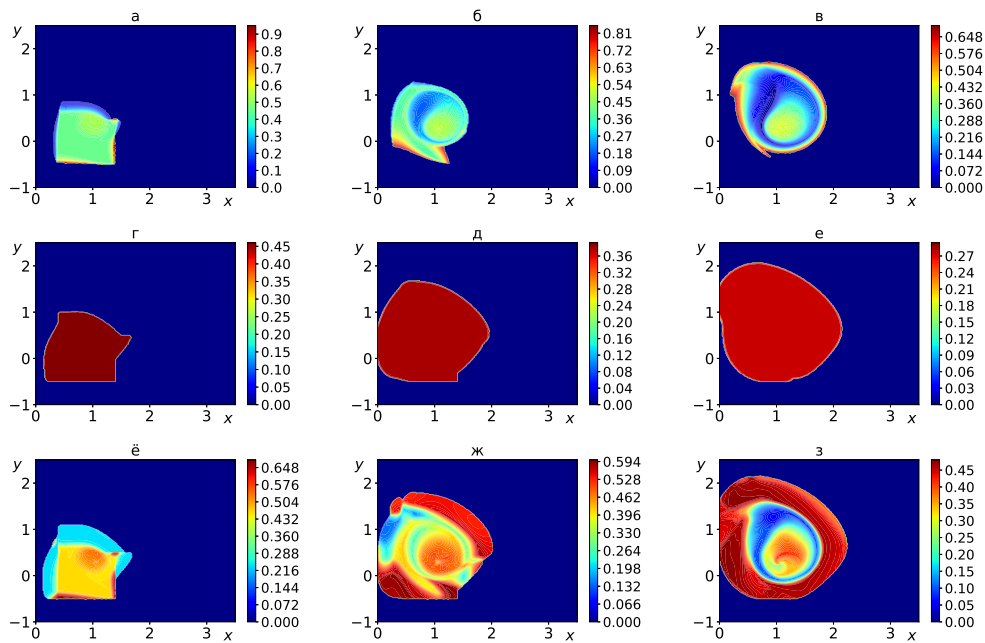


Рис. 6. Поля среднего размера частиц, полученные с помощью лагранжева подхода (а, б, в) и подходов ММ-1 (г, д, е) и ММ-2 (ё, ж, з) при $t = 1$ (а, г, ё), 3 (б, д, ж), 6 (в, е, з).

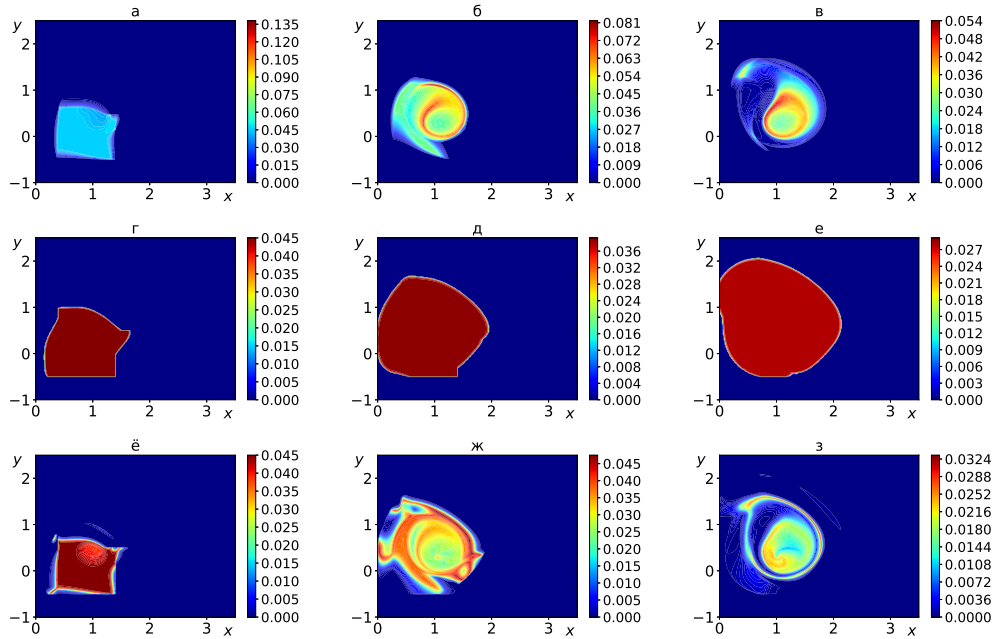


Рис. 7. Поля дисперсии распределения частиц по размерам, полученные с помощью лагранжева подхода (а, б, в) и подходов ММ-1 (г, д, е) и ММ-2 (ё, ж, з) при $t = 1$ (а, г, ё), 3 (б, д, ж), 6 (в, е, з).

Поля среднего размера частиц в различные моменты времени показаны на рис. 6. Как можно видеть из рис. 6, в целом временная динамика полей среднего размера частиц имеет такой же характер, как и в случае отсутствия испарения ($R = 0$): крупные частицы аккумулируются по границам облака и в центре облака (с малой концентрацией). Данная тенденция моделируется в рамках подхода ММ-2. Использование метода моментов с одной квадратурной точкой приводит к однородным полям среднего размера. По сравнению со случаем $R = 0$ заметной является тенденция к уменьшению среднего размера, которая демонстрируется всеми подходами.

Поля дисперсии распределения по размерам в различные моменты времени показаны на рис. 7. По сравнению со случаем отсутствия испарения в этом режиме заметна тенденция к общему уменьшению дисперсии, связанная с исчезновением мелких частиц, изначально близких к левой границе распределения по размерам. Однако, как и в случае $R = 0$, частицы близких размеров аккумулируются в одних и тех же областях, что приводит к уменьшению дисперсии на краях облака. Данный эффект не выявляется при моделировании методами моментов, однако результаты метода ММ-2 качественно схожи с результатами лагранжева подхода.

Заключение

Проведено сравнение метода моментов и лагранжева подхода в задаче моделирования движения инерционных частиц в вихревом течении с учетом полидисперсности взвешенной фазы. Использован квадратурный метод моментов, предполагающий аппроксимацию функцию распределения частиц по размерам в виде взвешенной суммы дельта-функций. Для моделирования движения частиц использовано три модели: модель в предположении средней скорости для частиц любого

размера (подход ММ-1), модели в предположении средней скорости, обусловленной размером частиц в случае двух и трех квадратурных точек (подход ММ-2 и подход ММ-3 соответственно). При отсутствии испарения все три модели показали устойчивые результаты, тогда как при наличии испарения только подход ММ-1 показал устойчивость на всем временном промежутке моделирования. В рамках подхода ММ-2 стабильные результаты получились только в начальной стадии моделирования, когда большая часть частиц не исчезла вследствие испарения. Показано, что поля концентрации, полученные в рамках методов моментов, качественно близки к результатам лагранжева подхода, но подходы ММ-2 и ММ-3 приводят к образованию 2 и 3 локальных максимумов соответственно. Поля среднего размера частиц и дисперсии распределения по размерам, полученные с помощью подхода ММ-1, являются однородными, тогда как предположение условных средних скоростей для взвешенной фазы (подходы ММ-2 и ММ-3) приводит к неоднородным полям, качественно близким к результатам лагранжева подхода. Лагранжев подход, ММ-2 и ММ-3 демонстрируют тенденцию к аккумуляции частиц близких по размеру в одних и тех же областях (крупные частицы накапливаются на границе облака частиц).

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-31-00387).

Литература

1. *Crowe C.T.* Review–numerical models for dilute gas-particle flows // *J. Fluids Eng.* – 1982. – V. 104, No 3. – P. 297–303. – doi: 10.1115/1.3241835.
2. *De Chaisemartin S., Freret L., Kah D., Laurent F., Fox R.O., Reveillon J., Massot M.* Turbulent combustion of polydisperse evaporating sprays with droplet crossing: Eulerian modeling and validation in the infinite Knudsen limit // *Proceedings of the 2008 Summer Program, Center for Turbulence Research.* – Stanford, CA, 2008. – P. 265–276.
3. *Desjardins O., Fox R.O., Villedieu P.* A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows // *J. Comput. Phys.* – 2008. – V. 227, No 4. – P. 2514–2539. – doi: 10.1016/j.jcp.2007.10.026.
4. *Emre O., Kah D., Jay S., Tran Q.-H., Velghe A., De Chaisemartin S., Fox R.O., Laurent F., Massot M.* Eulerian moment methods for automotive sprays // *Atomization Sprays.* – 2015. – V. 25, No 3. – P. 189–254. – doi: 10.1615/AtomizSpr.2015011204ff.
5. *Fan R., Marchisio D.L., Fox R.O.* Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidized beds // *Powder Technol.* – 2004. – V. 139, No 1. – P. 7–20. – doi: 10.1016/j.powtec.2003.10.005.
6. *Gordon R.G.* Error bounds in equilibrium statistical mechanics // *J. Math. Phys.* – 1968. – V. 9, No 5. – P. 655–663. – doi: 10.1063/1.1664624.
7. *Kah D., Laurent F., Massot M., Jay S.* A high order moment method simulating evaporation and advection of a polydisperse liquid spray // *J. Comput. Phys.* – 2012. – V. 231, No 2. – P. 394–422. – doi: 10.1016/j.jcp.2011.08.032.
8. *Kaplanski F.B., Rudi Y.A.* A model for the formation of “optimal” vortex rings taking into account viscosity // *Phys. Fluids.* – 2005. – V. 17, No 8. – P. 087101-1-087101-7. – doi: 10.1063/1.1996928.
9. *Kaplanski F.B., Sazhin S.S., Fukumoto Y., Begg S., Heikal M.* A generalized vortex ring model // *J. Fluid Mech.* – 2009. – V. 622. – P. 233–258. – doi: 10.1017/S0022112008005168.

10. *Marchisio D.L., Fox R.O.* Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2013. – 544 p. – doi: 10.1017/CBO9781139016599.
11. *Massot M., Laurent F., Kah D., De Chaisemartin S.* A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays // *SIAM J. Appl. Math.* – 2010. – V. 70, No 8. – P. 3203–3234. – doi: 10.1137/080740027.
12. *McGraw R.* Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments // *Aerosol Sci. Technol.* – 1997. – V. 27, No 2. – P. 255–265. – doi: 10.1080/02786829708965471.
13. *Rybdylova O., Sazhin S.S., Osiptsov A.N., Kaplanski F.B., Begg S., Heikal M.* Modelling of a two-phase vortex-ring flow using an analytical solution for the carrier phase // *Appl. Math. Comput.* – 2018. – V. 326. – P. 159–169. – doi: 10.1016/j.amc.2017.12.044.
14. *Vikas V., Wang Z.J., Passalacqua A., Fox R.O.* Realizable high-order finite-volume schemes for quadrature-based moment methods // *J. Comput. Phys.* – 2011. – V. 230, No 13. – P. 5328–5352. – doi: 10.1016/j.jcp.2011.03.038.
15. *Wheeler J.C.* Modified moments and Gaussian quadratures // *Rocky Mt. J. Math.* – 1974. – V. 4, No 2. – P. 287–296.
16. *Williams F.A.* Spray combustion and atomization // *Phys. Fluids.* – 1965. – V. 1, No 6. – P. 541–545. – doi: 10.1063/1.1724379.

Поступила в редакцию
23.03.2020

Гильфанов Артур Камилевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры моделирования экологических систем

Казанский (Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
E-mail: artur.gilfanov@kpfu.ru

Салахов Руслан Радикович, аспирант кафедры аэрогидромеханики

Казанский (Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
E-mail: ramms_92@mail.ru

Зарипов Тимур Шамилович, кандидат физико-математических наук, преподаватель Университет Брайтон

Митрэс Хаус, Льюис Роуд, г. Брайтон, BN2 4AT, Великобритания
E-mail: T.Zaripov2@brighton.ac.uk

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
 SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
 (Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)
 2020, vol. 162, no. 2, pp. 120–136

doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.120-136

**Mathematical Modeling
 of the Dynamics of Inertial Polydisperse Particles
 in a Vortex Flow**

A.K. Gilfanov^{a}, R.R. Salakhov^{a**}, T.S. Zaripov^{b***}*

^a*Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia*

^b*University of Brighton, Brighton, BN2 4AT England*

E-mail: ^{*}*artur.gilfanov@kpfu.ru*, ^{**}*ramms_92@mail.ru*, ^{***}*T.Zaripov2@brighton.ac.uk*

Received March 23, 2020

Abstract

The quadrature method of moments was used for solving the problem of modeling the dynamics of inertial polydisperse particles. Dispersed phase models that assumed particle distribution over size, mean velocity for all particles, and mean velocity conditioned by particle size were implemented. The comparison of the models was performed in the problem of moving evaporating particles in the vortex flow with using the Lagrangian approach as a reference method. The qualitative agreement of particle number density fields obtained by the methods of moments and the Lagrangian approach was demonstrated. It was shown that using models with two and three conditioned mean velocities results in the qualitative agreement of the mean size and variance fields obtained by the methods of moments and the Lagrangian approach.

Keywords: method of moments, polydisperse aerosol, vortex flow, inertial particles

Acknowledgments. The study was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 18-31-00387).

Figure Captions

Fig. 1. Lines of carrier medium flow.

Fig. 2. Particle number density fields obtained using the Lagrangian approach (a, b, c), as well as MM-1 (d, e, f), MM-2 (g, h, i), and MM-3 (j, k, l) approaches at $t = 1$ (a, d, g, j), 5 (b, e, h, k), and 10 (c, f, i, l).

Fig. 3. Mean particle size fields obtained using the Lagrangian approach (a, b, c), as well as MM-1 (d, e, f), MM-2 (g, h, i), and MM-3 (j, k, l) approaches at $t = 1$ (a, d, g, j), 5 (b, e, h, k), and 10 (c, f, i, l).

Fig. 4. Variance fields of particle distribution over size obtained using the Lagrangian approach (a, b, c), as well as MM-1 (d, e, f), MM-2 (g, h, i), and MM-3 (j, k, l) approaches at $t = 1$ (a, d, g, j), 5 (b, e, h, k), and 10 (c, f, i, l).

Fig. 5. Particle number density fields obtained using the Lagrangian approach (a, b, c), as well as MM-1 (d, e, f) and MM-2 (g, h, i) approaches at $t = 1$ (a, d, g), 3 (b, e, h), and 6 (c, f, i).

Fig. 6. Mean particle size fields obtained using the Lagrangian approach (a, b, c), as well as MM-1 (d, e, f) and MM-2 (g, h, i) approaches at $t = 1$ (a, d, g), 3 (b, e, h), and 6 (c, f, i).

Fig. 7. Variance fields of particle distribution over size obtained using the Lagrangian approach (a, b, c), as well as MM-1 (d, e, f) and MM-2 (g, h, i) approaches at $t = 1$ (a, d, g), 3 (b, e, h), and 6 (c, f, i).

References

1. Crowe C.T. Review—numerical models for dilute gas-particle flows. *J. Fluids Eng.*, 1982, vol. 104, no. 3, pp. 297–303. doi: 10.1115/1.3241835.
2. De Chaisemartin S., Freret L., Kah D., Laurent F., Fox R.O., Reveillon J., Massot M. Turbulent combustion of polydisperse evaporating sprays with droplet crossing: Eulerian modeling and validation in the infinite Knudsen limit. *Proc. 2008 Summer Program, Center for Turbulence Research*. Stanford, Calif., 2008, pp. 265–276.
3. Desjardins O., Fox R.O., Villedieu P. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *J. Comput. Phys.*, 2008, vol. 227, no. 4, pp. 2514–2539. doi: 10.1016/j.jcp.2007.10.026.
4. Emre O., Kah D., Jay S., Tran Q.-H., Velghe A., De Chaisemartin S., Fox R.O., Laurent F., Massot M. Eulerian moment methods for automotive sprays. *Atomization Sprays*, 2015, vol. 25, no. 3, pp. 189–254. doi: 10.1615/AtomizSpr.2015011204ff.
5. Fan R., Marchisio D.L., Fox R.O. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidized beds. *Powder Technol.*, 2004, vol. 139, no. 1, pp. 7–20. doi: 10.1016/j.powtec.2003.10.005.
6. Gordon R.G. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *J. Math. Phys.*, 1968, vol. 9, no. 5, pp. 655–663. doi: 10.1063/1.1664624.
7. Kah D., Laurent F., Massot M., Jay S. A high order moment method simulating evaporation and advection of a polydisperse liquid spray. *J. Comput. Phys.*, 2012, vol. 231, no. 2, pp. 394–422. doi: 10.1016/j.jcp.2011.08.032.
8. Kaplanski F.B., Rudi Y.A. A model for the formation of “optimal” vortex rings taking into account viscosity. *Phys. Fluids*, 2005, vol. 17, no. 8, pp. 087101-1-087101-7. doi: 10.1063/1.1996928.
9. Kaplanski F.B., Sazhin S.S., Fukumoto Y., Begg S., Heikal M. A generalized vortex ring model. *J. Fluid Mech.*, 2009, vol. 622, pp. 233–258. doi: 10.1017/S0022112008005168.
10. Marchisio D.L., Fox R.O. *Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems*. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 2013. 544 p. doi: 10.1017/CBO9781139016599.
11. Massot M., Laurent F., Kah D., De Chaisemartin S. A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays. *SIAM J. Appl. Math.*, 2010, vol. 70, no. 8, pp. 3203–3234. doi: 10.1137/080740027.
12. McGraw R. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Sci. Technol.*, 1997, vol. 27, no. 2, pp. 255–265. doi: 10.1080/02786829708965471.
13. Rybdylova O., Sazhin S.S., Osipov A.N., Kaplanski F.B., Begg S., Heikal M. Modelling of a two-phase vortex-ring flow using an analytical solution for the carrier phase. *Appl. Math. Comput.*, 2018, vol. 326, pp. 159–169. doi: 10.1016/j.amc.2017.12.044.
14. Vikas V., Wang Z.J., Passalacqua A., Fox R.O. Realizable high-order finite-volume schemes for quadrature-based moment methods. *J. Comput. Phys.*, 2011, vol. 230, no. 13, pp. 5328–5352. doi: 10.1016/j.jcp.2011.03.038.
15. Wheeler J.C. Modified moments and Gaussian quadratures. *Rocky Mt. J. Math.*, 1974, vol. 4, no. 2, pp. 287–296.

-
16. Williams F.A. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1965, vol. 1, no. 6, pp. 541–545. doi: 10.1063/1.1724379.
-

Для цитирования: Гильфанов А.К., Салахов Р.Р., Зарипов Т.Ш. Математическое моделирование динамики полидисперсной инерционной взвеси в вихревом течении // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2020. – Т. 162, кн. 2. – С. 120–136. – doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.120-136.

For citation: Gilfanov A.K., Salakhov R.R., Zaripov T.S. Mathematical modeling of the dynamics of inertial polydisperse particles in a vortex flow. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2020, vol. 162, no. 2, pp. 120–136. doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.120-136. (In Russian)