

УДК 519.6

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ПРОБНОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОТОКЕ ЖИДКОСТИ ИЛИ ГАЗА**К. Н. Волков¹**

Рассматриваются вопросы, связанные с реализацией дискретно-траекторного метода пробных частиц, а также подходы к численному решению задачи Коши для уравнений, описывающих движение и тепломассообмен пробной частицы в потоке жидкости или газа. Разрабатываются разностные схемы, учитывающие особенности движения частиц мелкой и крупной фракции, а также разностные схемы полуаналитического интегрирования для ряда частных задач. Приводятся уравнения движения частицы в произвольной криволинейной системе координат и рассматриваются особенности их интегрирования.

1. Введение. Для описания и прогнозирования свойств газодисперсных систем обычно используются следующие подходы: кинетический, континуальный и траекторный. Практическая реализация того или иного подхода диктуется, прежде всего, границами применимости и возможностью прогнозирования различных характеристик потока [1, 2].

Кинетический подход находит применение в работах, в которых рассматривается построение и обоснование математических моделей дисперсных сред. При решении конкретных задач кинетические модели используются сравнительно редко в связи со сложностью решения соответствующих уравнений. Применение кинетического подхода целесообразно в задачах с достаточно мелкими частицами и в тех случаях, когда становятся существенными поправки, связанные с концентрацией примеси. В других ситуациях использование кинетического подхода представляется неоправданно громоздким и сложным.

В рамках континуального подхода рассматривается взаимопроникающее движение нескольких взаимодействующих континуумов, связанных с газом и частицами. Дисперсная фаза представляется в виде сплошной среды с непрерывно распределенной в пространстве плотностью. Характеристики континуума, связанного с дисперсной фазой, трактуются как местные средние значения параметров частиц. Поведение многоскоростного континуума описывается уравнениями механики сплошной среды в эйлеровых переменных. Привлекательная сторона континуального подхода состоит в принципиальной возможности описания движения газовой и дисперсной фаз с общих позиций. Преемственность моделей позволяет рассчитывать на достаточно универсальное описание ряда сложных процессов.

В траекторном подходе уравнения, описывающие движение примеси, записываются в лагранжевых переменных и интегрируются вдоль траекторий индивидуальных частиц в известном (вычисленном заранее) газодинамическом поле. В ячейках расчетной сетки происходит накопление информации о параметрах дисперсной фазы и взаимодействии частиц с газом. Обратное влияние дисперсной фазы учитывается на основе глобальных итераций [2, 3].

По сравнению с континуальным, траекторный подход нуждается в привлечении простых и физически более корректных замыкающих предположений, позволяющих с высокой степенью детализации выявить структуру течения. При расчете двухфазных течений на основе дискретно-траекторного подхода для имитации движения примеси приходится осуществлять массовые расчеты траекторий пробных частиц. Использование разностных схем, учитывающих особенности движения частиц мелких и крупных фракций, а также другие реалии задачи, позволяет сократить время счета и получить выигрыш в характеристиках точности.

В данной работе рассматриваются вопросы, связанные с численной реализацией дискретно-траекторного метода пробных частиц, а также подходы к решению задачи Коши для уравнений, описывающих движение и тепломассообмен пробной частицы в потоке жидкости или газа. Разрабатываются разностные схемы, учитывающие особенности движения частиц мелкой и крупной фракции, а также разностные схемы полуаналитического интегрирования для ряда частных задач. Приводятся уравнения движения

¹ Балтийский государственный технический университет "Военмех" им. Д.Ф. Устинова, физико-механический факультет, 1-я Красноармейская ул., д. 1, 190005, Санкт-Петербург; e-mail: kvolkov@kv7340.spb.edu

частицы в произвольной криволинейной системе координат и рассматриваются особенности их интегрирования. При этом описание движения примеси рассматривается как самостоятельная задача, в которой решаются вопросы эволюции конденсированных включений в известном газодинамическом поле.

2. Уравнения движения частицы и их интегрирование. Приведем основные уравнения и расчетные соотношения, описывающие движение и тепломассообмен частицы сферической формы.

2.1. Основные уравнения. Уравнение, описывающее поступательное движение пробной частицы сферической формы, имеет вид

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \frac{1}{2} C_D \rho S_m (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) + \mathbf{f}_p. \quad (1)$$

Здесь m_p — масса частицы, S_m — площадь миделевого сечения частицы. Коэффициент сопротивления представляется в виде

$$C_D = \frac{24}{Re_p} f_D(Re_p).$$

Функция сопротивления f_D учитывает поправку на инерционность частицы. Число Рейнольдса в относительном движении частицы и несущего газа находится по формуле

$$Re_p = \frac{2r_p \rho |\mathbf{v} - \mathbf{v}_p|}{\mu}.$$

Здесь r_p — радиус частицы. Слагаемое \mathbf{f}_p в уравнении (2) включает силы различной природы, но отличные от силы сопротивления, учет или неучет которых зависит от конкретной задачи. При $\rho/\rho_p \ll 1$ нестационарные эффекты взаимодействия фаз не учитываются [1].

К уравнению (1) необходимо добавить кинематическое соотношение, позволяющее вычислить радиус-вектор центра масс частицы:

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \mathbf{v}_p. \quad (2)$$

При движении закрученной частицы на нее действует демпфирующий момент, вызывающий релаксацию угловой скорости. Вращение сферической частицы относительно оси, проходящей через центр сферы, описывается при помощи уравнения

$$J_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \frac{1}{2} C_L \rho r_p^5 (\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}_p). \quad (3)$$

Здесь J_p — момент инерции частицы. Коэффициент демпфирующего момента представляется в виде

$$C_L = \frac{16}{Re_{p\omega}} f_L(Re_{p\omega}).$$

Функция f_L учитывает поправку на инерционность частицы. Число Рейнольдса, характеризующее вращение частицы, находится из соотношения

$$Re_{p\omega} = \frac{r_p^2 \rho |\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}_p|}{\mu}.$$

Уравнение изменения температуры, описывающее конвективный теплообмен между сферической частицей и несущим газом, записывается в форме

$$c_p^m m_p \frac{dT_p}{dt} = \frac{Nu_p \lambda}{2r_p} S_p (T - T_p). \quad (4)$$

Здесь c_p^m — теплоемкость материала частицы, S_p — площадь поверхности частицы. Для вычисления числа Нуссельта используется формула [1, 4]

$$Nu_p = Nu_{p0} f_T(Re_p, Pr),$$

где $Nu_{p0} = 2$ (значение, соответствующее ползущему течению около сферы). Функция f_T учитывает поправку на инерционность частицы. Температура частицы влияет на ее движение через поправку к коэффициенту сопротивления. Во многих режимах течения такая поправка мала и может не учитываться.

Не вдаваясь в обсуждение моделей, описывающих горение частицы, учтем лишь сам факт изменения ее массы:

$$\frac{dm_p}{dt} = \dot{m} = -2\pi r_p^2 \rho_p \left| \frac{dr_p}{dt} \right|. \quad (5)$$

Правая часть уравнения (5) определяется на основе данных физического эксперимента или теории диффузионного горения.

Для расчета концентрации примеси используется уравнение неразрывности, записанное в лагранжевых переменных

$$\frac{n_p(\mathbf{r}_{p0}, t)}{n_p(\mathbf{r}_{p0}, 0)} = \|w_{ij}\|^{-1}, \quad \text{где } w_{ij} = \frac{\partial r_{pi}(\mathbf{r}_{p0}, t)}{\partial r_{pj}(\mathbf{r}_{p0}, 0)}. \quad (6)$$

Индекс 0 относится к параметрам частиц в момент времени $t = 0$.

2.2. Уточнение модели межфазного взаимодействия. На вращающуюся частицу действует сила Магнуса, которую принято записывать в следующем виде [4]:

$$\mathbf{f}_M = -\frac{4}{3} \pi C_M \rho r_p^3 (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) \times (\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}_p). \quad (7)$$

При $Re_p \ll 1$ и $Re_{p\omega} \ll 1$ теория ползущего обтекания медленно вращающейся сферы дает значение $C_M = 3/4$ [5]. При $Re_p \gg 1$ и $Re_{p\omega} \gg 1$ применима модель идеальной жидкости. Используя метод плоских сечений и схему потенциального обтекания круга с циркуляцией, можно получить $C_M = 2$ [1]. В промежуточном диапазоне чисел Рейнольдса надежные данные о поведении коэффициента C_M отсутствуют. Обработка экспериментальных данных показывает, что с увеличением числа Рейнольдса величина C_M изменяется немонотонно [6].

При $Re_{p\omega} < 10^3$ коэффициент C_M изменяется весьма слабо ($C_M = 0.53 \dots 0.88$ при $Re_p = 10 \dots 30$), что позволяет при вычислении силы Магнуса использовать предельное значение $C_M = 3/4$. При $Re_{p\omega} \sim 3 \cdot 10^4$ величина C_M составляет примерно 10% от значения, соответствующего ползущему обтеканию вращающейся сферы [7].

В сдвиговом потоке частица испытывает действие поперечной (подъемной) силы Сэффмана. Выражение для расчета составляющей силы Сэффмана имеет вид [8, 9]

$$f_{si} = C_S \rho \nu^{1/2} r_p^2 \frac{e_{ij}}{(e_{kl} e_{lk})^{1/4}} (v_j - v_{pj}), \quad (8)$$

где e_{ij} — компоненты тензора скоростей деформаций. По повторяющимся индексам предполагается суммирование. В течении чистого сдвига соотношение (8) совпадает с выражением, полученным в [10], при этом $C_S = 6.46$.

В пограничном слое коэффициент подъемной силы представляется в следующем виде:

$$C_S(\alpha, \eta) = 6.46 f_S(\alpha, \eta),$$

где $\alpha = Re_p / \sqrt{Re_{pv}}$, $\eta = y \sqrt{Re_\infty}$. Функция f_S учитывает поправки на градиентность потока и близость стенки. Число Рейнольдса, характеризующее степень неравномерности потока, рассчитывается по величине поперечного сдвига скорости du/dy и размеру частицы:

$$Re_{pv} = \frac{r_p^2 \rho}{\mu} \left| \frac{du}{dy} \right|.$$

Координата y отсчитывается по нормали к поверхности. Конкретные зависимости приведены в [11, 12].

2.3. Уравнения и характерные параметры. С учетом соотношений (1)–(5) уравнения, описывающие поступательное и вращательное движение частицы сферической формы, а также изменение ее температуры и массы можно записать в следующем виде:

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \mathbf{v}_p; \quad (9)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \frac{f_D}{\tau_v} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) + \mathbf{f}_p; \quad (10)$$

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \frac{f_L}{\tau_\omega} (\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}_p); \quad (11)$$

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{f_T}{\tau_\vartheta} (T - T_p); \quad (12)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}. \quad (13)$$

Времена релаксации скорости поступательного движения, угловой скорости и температуры частицы находятся из соотношений

$$\tau_v = \frac{2\rho_p r_p^2}{9\mu}, \quad \tau_\omega = \frac{\rho_p r_p^2}{5\mu}, \quad \tau_\vartheta = \frac{c_p^m \rho_p r_p^2}{3\lambda}.$$

Поскольку на практике $\tau_v \sim \tau_\omega \sim \tau_\vartheta$, то в дальнейшем полагается $\tau_v \equiv \tau_\omega \equiv \tau_\vartheta \equiv \tau_p$. В безразмерных переменных движение частицы определяется числом Стокса $\text{Stk} = \tau_p/\tau$, где $\tau = L/V$ — характерное газодинамическое время (L — характерный линейный масштаб, V — характерный масштаб скорости).

Уравнения (9)–(13) интегрируются вдоль траектории индивидуальной частицы и требуют задания только начальных условий — координат, поступательной и угловой скорости, температуры, массы и концентрации частиц в момент времени $t = 0$. Концентрация примеси находится из уравнения (6).

2.4. Векторная форма записи. Вектор переменных, определяющий положение и состояние индивидуальной частицы в некоторый момент времени t , имеет вид $\mathbf{U} = \{r_p, \mathbf{v}_p, \boldsymbol{\omega}_p, T_p, m_p\}'$. Вектор \mathbf{U} удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{U}(t)), \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0. \quad (14)$$

Вид правой части уравнения (14) зависит от принятой модели взаимодействия частицы с несущим потоком.

Решение уравнения (14) существует и единственно тогда и только тогда, когда правая часть $\mathbf{F}(t, \mathbf{U})$ удовлетворяет условию Липшица в равномерной метрике [13]

$$\|\mathbf{F}(t, \mathbf{U}_1) - \mathbf{F}(t, \mathbf{U}_2)\| \leq L \|\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2\|$$

для $\forall t \in [0, \tau]$ и $\forall \mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2 \in D$, где D — область, в которой ищется решение, L — постоянная Липшица.

Один из факторов, осложняющих интегрирование уравнения (14), связан с устойчивостью разностной схемы, что накладывает некоторые ограничения на пороговое значение шага интегрирования по времени.

2.5. Устойчивость вычислительной процедуры. Для частиц малой массы в уравнении (14) присутствует малый параметр при старшей производной — число Стокса, причем $\text{Stk} \sim O(r_p^2)$. При $\text{Stk} \rightarrow 0$ задача становится сингулярно-вырожденной. В размерных переменных числу Стокса соответствует время релаксации частицы τ_p .

Теория устойчивости в чистом виде применима только к линейным задачам [13]. Линеаризуя правую часть уравнения (14) в окрестности некоторого частного решения $\mathbf{U}^n(t)$, получим

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{U}^n(t)) + J(t, \mathbf{U}^n(t)) [\mathbf{U} - \mathbf{U}^n(t)]. \quad (15)$$

Здесь $J(t, \mathbf{U}(t)) = \left\{ \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{U}_j} \right\}_{i,j}$ — матрица Якоби.

Для обеспечения абсолютной устойчивости численного метода необходимо, чтобы $\lambda_i \Delta t \in D$ для $\forall \lambda_i \in \Omega$, где λ_i — собственные числа матрицы Якоби, вычисленные в точке (t, \mathbf{U}^n) , Ω — множество собственных чисел матрицы Якоби, D — область абсолютной устойчивости.

Для методов с ограниченной областью устойчивости величина шага интегрирования по времени ограничивается порядком величины наименьшей временной постоянной системы $\Delta t < 1/\max|\text{Real}(\lambda_i)|$. Поскольку интервал интегрирования может во много раз превышать величину наибольшей временной постоянной, то необходимое число шагов интегрирования по времени оказывается сравнимым с коэффициентом жесткости системы $\varrho(t) = \max \text{Real}(-\lambda_i) / \min \text{Real}(-\lambda_i)$. В интервале $I \subset [0, \tau]$ задача Коши для уравнения (14) становится жесткой, если $\text{Real}(\lambda_i) < 0$ и $\varrho(t) \gg 1$.

Область D имеет, как правило, сложную форму, и нельзя заранее указать, какое из собственных чисел матрицы Якоби является лимитирующим. Для нахождения собственных чисел матрицы Якоби рассматриваются некоторые модельные задачи. Например, при движении стоксовой частицы в равномерном газовом потоке матрица Якоби имеет вид

$$J = \frac{1}{Stk} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ Stk & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Stk & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Нетрудно найти, что $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = \lambda_4 = -Stk$.

Для обеспечения устойчивости численной процедуры необходимо, чтобы шаг интегрирования имел порядок числа Стокса ($\Delta t \sim Stk$).

Методы Рунге–Кутты и Адамса соответствующих порядков устойчивы [13], если

$$|1 + \lambda_i \Delta t + 0.5w\lambda_i^2 \Delta t^2| < 1,$$

где w — весовая функция. Для $w = 0.25$ и $w = 1$ имеем $-8 < \lambda_i \Delta t < 0$ и $-2 < \lambda_i \Delta t < 0$. Поскольку для уравнений движения примеси $|\lambda_i| \sim Stk$, то такие ограничения оказываются довольно обременительными на практике, что приводит к необходимости построения численных методов, для которых область устойчивости простирается до бесконечности в полуплоскости $Real(\lambda_i \Delta t) < 0$.

2.6. Особенности решения задачи Коши. При решении задачи Коши для системы уравнений, описывающей движение частицы, необходимо учитывать следующие обстоятельства.

1. Интегрирование уравнения (14) осуществляется, как правило, в известном (вычисленном заранее) газодинамическом поле, поэтому численные методы решения задачи Коши должны быть согласованы с точностью газодинамических расчетов, в связи с чем применять методы высокого порядка точности не имеет смысла.

2. Для интегрирования уравнения (14), в принципе, можно использовать любой из методов численного решения. Основная проблема при реализации таких методов состоит в ограничении на максимально возможный шаг интегрирования по времени, который сравним с числом Стокса.

3. Для частицы малой массы или при движении частицы в низкоградиентной зоне течения уравнение (14) становится жестким, что связано с появлением малого параметра при старшей производной. При $Stk \ll 1$ численный метод должен учитывать быстроменяющиеся компоненты в искомом решении. При $Stk > 1$, когда жесткость слабо влияет на устойчивость вычислительной процедуры, можно использовать традиционные численные методы (например, методы Рунге–Кутты, Адамса и др.).

4. Существуют качественные отличия в движении мелких и крупных частиц: мелкие частицы отслеживают линии тока газа, крупные частицы в значительной мере проявляют свою инерционность.

5. Поскольку скорость газовой фазы вычисляется в точках, лежащих на траектории движения частицы, то дорогостоящая часть любой вычислительной процедуры состоит в установлении ячеек сетки, в которых в данный момент времени находится пробная частица, и выполнении газодинамических параметров несущего потока.

3. Варианты разностных схем. В основе разрабатываемых разностных схем лежит линейризация исходной системы уравнений, реализующая принцип замораживания отдельных членов или частей уравнений, а также их приближенное представление в виде упрощенных функциональных зависимостей, и последующее аналитическое интегрирование приближенного уравнения на каждом временном шаге.

3.1. Методы линейризации. Уравнение (10) является нелинейным, поскольку скорость газа вычисляется в точках, лежащих на траектории движения частицы $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}_p)$. В пределах малого шага интегрирования по времени уравнение (10) можно линейризовать различными способами.

1. Замораживание скорости газа значением, соответствующим началу шага интегрирования:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}_p) = \mathbf{v}^n. \tag{16}$$

2. Разложение скорости газа в ряд Тейлора с точностью до линейных членов разложения:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}_p) = \mathbf{v}^n + \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}_p} \right)^n (\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_p^n). \tag{17}$$

3. В системе отсчета, связанной с движущейся частицей, изменение скорости газа представляется

как функция времени

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}_p) = \mathbf{v}^n + \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}_p} \right)^n \mathbf{v}_p^n (t - t^n). \quad (18)$$

4. При известной скорости потока $\tilde{\mathbf{v}}$ в той точке пространства, где частица будет находиться в конце шага интегрирования, полагается

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}_p) = \mathbf{v}^n + (\tilde{\mathbf{v}} - \mathbf{v}^n) \frac{t - t^n}{\tau}. \quad (19)$$

Соотношение (16) позволяет непосредственно воспользоваться одним из методов численного интегрирования, например методами Эйлера или Рунге–Кутты более высоких порядков.

Линеаризация (17) порождает систему линейных уравнений вида

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_p \\ \mathbf{r}_p \end{pmatrix} = A^n \begin{pmatrix} \mathbf{v}_p \\ \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_p^n \end{pmatrix} + \mathbf{B}^n.$$

В двумерном случае матрица A и вектор \mathbf{B} имеют вид

$$A^n = \frac{1}{\text{Stk}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & w_{11}^n & w_{12}^n \\ 0 & -1 & w_{21}^n & w_{22}^n \\ \text{Stk} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{Stk} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}^n = \frac{1}{\text{Stk}} \begin{pmatrix} u^n \\ v^n \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$w_{ij}^n = \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_{pj}} \right)^n.$$

Линеаризации (18) или (19) приводят к системе уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} &= \frac{1}{\text{Stk}} [\mathbf{v}^n + \mathbf{D}^n (t - t^n) - \mathbf{v}_p]; \\ \frac{d\mathbf{r}_p}{dt} &= \mathbf{v}_p. \end{aligned}$$

Особенность данной системы состоит в возможности независимого интегрирования уравнений в пределах интервала линеаризации. В случае использования формулы (18) вектор \mathbf{D} имеет вид

$$\mathbf{D}^n = \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}_p} \right)^n \mathbf{v}_p^n.$$

При использовании линеаризации (19) для вектора \mathbf{D} имеет место следующее представление:

$$\mathbf{D}^n = \frac{1}{\tau} (\tilde{\mathbf{v}} - \mathbf{v}^n).$$

3.2. Неявная разностная схема. Применение A -устойчивых численных методов позволяет обеспечить абсолютную устойчивость вычислительной процедуры. Размер шага по времени обусловлен не требованиями сходимости итерационного процесса, а необходимой точностью решения.

Максимальный порядок A -устойчивых линейных многошаговых методов равен двум. Среди таких методов наименьшую константу погрешности имеет следующая неявная схема [13]

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t [\theta \mathbf{F}(t^n, \mathbf{U}^n) + (1 - \theta) \mathbf{F}(t^{n+1}, \mathbf{U}^{n+1})],$$

где $\theta \leq 1/2$. Линеаризуя правую часть

$$\mathbf{F}(t^{n+1}, \mathbf{U}^{n+1}) = \mathbf{F}(t^n, \mathbf{U}^n) + J(t^n, \mathbf{U}^n) (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n)$$

и разрешая полученное соотношение относительно \mathbf{U}^{n+1} , получим

$$\mathbf{U}^{n+1} = [E - (1 - \theta)\Delta t J(t^n, \mathbf{U}^n)]^{-1} \times \left\{ \Delta t \mathbf{F}(t^n, \mathbf{U}^n) + [E - (1 - \theta)\Delta t J(t^n, \mathbf{U}^n)] \mathbf{U}^n \right\}.$$

Здесь E — единичная матрица. Матрица Якоби используется для нескольких шагов интегрирования по времени, пока ухудшение скорости сходимости не укажет на необходимость проведения новых вычислений.

Вычислим матрицу Якоби:

$$J(t, \mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{r}_p} \Delta \mathbf{r}_p + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}_p} \Delta \mathbf{v}_p = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}_p} \Delta \mathbf{r}_p + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}_p} \Delta \mathbf{v}_p.$$

Наибольшую трудность представляет вычисление производной $\partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{r}_p$ вдоль траектории частицы. Для мелких частиц можно положить [14]

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{r}_p} = \frac{\mathbf{v}_p}{|\mathbf{v}_p|} \cdot \nabla \mathbf{v}.$$

При учете действия только силы гидродинамического сопротивления матрица Якоби и правая часть системы в двумерном случае имеют вид

$$J^n = \frac{1}{\text{Stk}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & w_{11}^n & w_{12}^n \\ 0 & -1 & w_{21}^n & w_{22}^n \\ \text{Stk} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{Stk} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}^n = \frac{1}{\text{Stk}} \begin{pmatrix} u^n - u_p^n \\ v^n - v_p^n \\ \text{Stk} u^n \\ \text{Stk} v^n \end{pmatrix}.$$

Учет дополнительных силовых факторов не приводит к принципиальным трудностям.

Неявная разностная схема находит широкое применение для решения задач разного класса [13]. Расчеты двухфазных течений, выполненные на ее основе в [15], демонстрируют хорошие показатели производительности и возможность моделирования течений с мелкими частицами.

4. Разностные схемы, учитывающие размер частицы. Помимо устойчивости разностной схемы, необходимо учитывать качественные отличия в характере движения частиц мелких и крупных фракций. Хотя четкой границы между такими фракциями не существует, применение разностных схем, учитывающих размер частицы, позволяет получить выигрыш как в объеме и скорости вычислений, так и в характеристиках точности.

4.1. Метод расчета для частиц мелкодисперсной фракции. Мелкодисперсные частицы следуют вдоль линий тока несущего газа, поэтому разумно построить метод расчета движения таких частиц как возмущение соответствующих параметров транспортирующего газа (возмущения рассматриваются в пределах временного шага). Для реализации вычислительной процедуры получим зависимости для перемещения жидкой частицы (порции среды) и относительного смещения пробной частицы.

Ниже предлагаются разностные схемы, ориентированные на расчет течений с гидродинамически мелкими ($\text{Stk} \ll 1$) и гидродинамически крупными ($\text{Stk} \gg 1$) частицами.

Перемещение порции среды. Пусть в момент времени t^n , соответствующий началу шага интегрирования, пробная частица и порция среды находятся в точке с координатами $\{x_p^n, y_p^n\}$ и имеют составляющие скорости $\{u_p^n, v_p^n\}$ и $\{u^n, v^n\}$. Определим величину и направление скорости порции среды в этой точке:

$$|\mathbf{v}^n| = \sqrt{(u^n)^2 + (v^n)^2}, \quad \alpha^n = \arctg \frac{v^n}{u^n}.$$

Свяжем с точкой $\{x_p^n, y_p^n\}$ начало локальной системы координат, ось X которой совпадает по направлению с вектором скорости газа в этой точке \mathbf{v}^n . Составляющие скорости в новой системе координат имеют вид

$$U^n = |\mathbf{v}^n|; \quad V^n = 0.$$

За время τ порция среды переместится в направлении оси X на расстояние Δs , оценка которого дается соотношением

$$\Delta s = |\mathbf{v}^n| \tau = U^n \tau.$$

Новое положение порции среды к концу временного шага находится из соотношений

$$\tilde{x} = x_p^n + \Delta s (\cos \alpha)^n; \quad \tilde{y} = y_p^n + \Delta s (\sin \alpha)^n.$$

Для оценки расстояния Δs используется размер ячейки сетки газодинамического расчета.

Проекция вектора скорости на оси локальной системы координат, связанной с точкой $\{\tilde{x}, \tilde{y}\}$, вычисляются по формулам

$$\tilde{U} = |\tilde{\mathbf{v}}| \cos(\beta - \alpha^n); \quad \tilde{V} = |\tilde{\mathbf{v}}| \sin(\beta - \alpha^n).$$

Здесь $|\tilde{\mathbf{v}}| = \sqrt{\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2}$, $\beta = \arctg \frac{\tilde{v}}{\tilde{u}}$.

Составляющие скорости $\{\tilde{u}, \tilde{v}\}$ в точке $\{\tilde{x}, \tilde{y}\}$ находятся при помощи интерполяции поля скорости газовой фазы. Используя линейную интерполяцию, получим

$$U = U^n + (\tilde{U} - U^n) \frac{X}{\Delta s}; \quad V = \tilde{V} \frac{X}{\Delta s}.$$

Кинематические уравнения перемещения порции среды в новой системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= U^n + (\tilde{U} - U^n) \frac{X}{\Delta s}; \\ \frac{dY}{dt} &= \tilde{V} \frac{X}{\Delta s}. \end{aligned}$$

Приведенные уравнения допускают точное решение

$$\begin{aligned} X^{n+1} &= \Delta s; \\ Y^{n+1} &= \frac{\tilde{V} \Delta s}{(\tilde{U} - U^n)^2} \left[\tilde{U} - U^n \left(1 + \ln \left| \frac{\tilde{U}}{U^n} \right| \right) \right]. \end{aligned}$$

Временной шаг, обеспечивающий заданное перемещение порции среды, вычисляется по формуле

$$\tau = \frac{\Delta s}{|\tilde{U} - U^n|} \ln \left| \frac{\tilde{U}}{U^n} \right|.$$

Перемещение частицы. Пусть в момент времени t^n порция среды и частица находятся в одной и той же точке с координатами $\{x_p^n, y_p^n\}$. Свяжем с порцией среды подвижную систему координат и рассмотрим относительное движение частицы и жидкости. Уравнение относительного движения частицы имеет вид

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}) = \frac{1}{Stk} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) - \frac{d\mathbf{v}_0}{dt}.$$

Здесь \mathbf{v}_0 — скорость той точки среды, которая в начальный момент времени совпадает с положением пробной частицы.

Для определения переносного ускорения воспользуемся линейной интерполяцией. В подвижной системе координат имеем

$$U = U^n + (U^{n+1} - U^n) \frac{t}{\tau}; \quad V = V^{n+1} \frac{t}{\tau}.$$

Уравнения, описывающие относительное движение частицы, примут вид

$$\begin{aligned} \frac{dU_r}{dt} &= -\frac{U_r}{Stk} - \frac{U^{n+1} - U^n}{\tau}; \\ \frac{dV_r}{dt} &= -\frac{V_r}{Stk} - \frac{V^{n+1}}{\tau}. \end{aligned}$$

К приведенным уравнениям необходимо добавить кинематические соотношения, позволяющие вычислить координаты частицы:

$$\begin{aligned} \frac{dX_p}{dt} &= U_r = U_p - U; \\ \frac{dY_p}{dt} &= V_r = V_p - V. \end{aligned}$$

Составляющие скорости относительного движения в конце шага интегрирования вычисляются по формулам

$$U_r^{n+1} = U_r^n \exp(-\tau/\text{Stk}) - \frac{\tilde{U} - U^n}{\tau/\text{Stk}} [1 - \exp(-\tau/\text{Stk})];$$

$$V_r^{n+1} = V_r^n \exp(-\tau/\text{Stk}) - \frac{\tilde{V}}{\tau/\text{Stk}} [1 - \exp(-\tau/\text{Stk})].$$

Вычислим составляющие скорости частицы:

$$U_p^{n+1} = U_r^{n+1} + \tilde{U}; \quad V_p^{n+1} = V_r^{n+1} + \tilde{V}.$$

Координаты, соответствующие новому положению частицы, находятся из соотношений

$$X_p^{n+1} = X^{n+1} \frac{\tau}{2} (U_r^n + U_r^{n+1}); \quad Y_p^{n+1} = Y^{n+1} \frac{\tau}{2} (V_r^n + V_r^{n+1}).$$

Переходя от системы координат (x, y) к локальной системе координат (X, Y) , получим

$$u_p^{n+1} = |\mathbf{V}_p^{n+1}| \cos(\alpha^n + \delta^{n+1}); \quad v_p^{n+1} = |\mathbf{V}_p^{n+1}| \sin(\alpha^n + \delta^{n+1});$$

$$x_p^{n+1} = X^{n+1} + X^{n+1} (\cos \alpha)^n - Y^{n+1} (\sin \alpha)^n; \quad y_p^{n+1} = Y^{n+1} + Y^{n+1} (\sin \alpha)^n + X^{n+1} (\cos \alpha)^n.$$

Здесь $|\mathbf{V}_p| = \sqrt{U_p^2 + V_p^2}$, $\delta = \arctg \frac{V_p}{U_p}$.

Данный подход допускает обобщение и на трехмерный случай, однако расчетные соотношения из-за их громоздкости здесь не приводятся.

4.2. Метод расчета для частиц крупнодисперсной фракции. Для расчета движения частиц крупной фракции используется двухшаговая вычислительная процедура типа предиктор-корректор. На шаге предиктор скорость газа полагается постоянной и выражение для скорости частицы получается в конечном виде. Полученный результат используется для уточнения скорости частицы на шаге корректор. Для радиус-вектора центра масс частицы на шаге корректор применяется формула Симпсона.

1. Предиктор:

$$\tilde{\mathbf{v}}_p = \mathbf{v}^n - (\mathbf{v}^n - \mathbf{v}_p^n) \exp\left(-\frac{\tau}{2\text{Stk}}\right); \quad \tilde{\mathbf{r}}_p = \mathbf{r}_p^n + \frac{\tau}{4} (\mathbf{v}_p^n + \tilde{\mathbf{v}}_p).$$

2. Корректор:

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = \mathbf{v}_p^n + \frac{\tau}{\text{Stk}} (\mathbf{v}^n - \tilde{\mathbf{v}}_p); \quad \mathbf{r}_p^{n+1} = \mathbf{r}_p^n + \frac{\tau}{6} (\mathbf{v}_p^n + 4\tilde{\mathbf{v}}_p + \mathbf{v}_p^{n+1}).$$

Скорость несущего потока $\tilde{\mathbf{v}}$ в точке $\tilde{\mathbf{r}}_p$ получается при помощи интерполяции поля скорости газовой фазы.

Шаг интегрирования по времени выбирается таким образом, чтобы на участке перемещения частицы за время τ скорость газа можно было бы считать с заданной степенью точности постоянной:

$$\tau = \min\{\tau_1, \tau_2, \tau_3\}.$$

Величины τ_1, τ_2, τ_3 оцениваются по значению скорости частицы, относительной скорости частицы и газа и времени релаксации частицы:

$$\tau_1 = \frac{\Delta s}{|\mathbf{v}_p^n|}; \quad \tau_2 = \min\left\{\text{Stk} \left[\frac{|(1 + \sigma)v_{pi}^n - v_i^n|}{|v_{pi}^n - v_i^n|} \right]\right\}; \quad \tau_3 = \text{Stk}.$$

Под Δs понимается оценка расстояния, на которое переместится частица за один шаг интегрирования (величину Δs можно положить равной размеру ячейки сетки газодинамического расчета). Параметр σ показывает, во сколько раз скорость частицы в конце временного шага \mathbf{v}_p^{n+1} отличается от скорости частицы в его начальной точке \mathbf{v}_p^n , и выбирается, исходя из условий конкретной задачи (например, для ускоряющихся потоков можно положить $\sigma = 0.5$).

5. Разностные схемы для частных задач. В решении уравнений, описывающих движение частицы, присутствуют быстро- и медленнозатухающие компоненты, которые определяют условие устойчивости вычислительной процедуры и общее время процесса. Линеаризация исходной системы уравнений с ее последующим аналитическим интегрированием позволяет выделить быстро- и медленнозатухающие компоненты решения в явном виде и уменьшить ограничения, накладываемые на шаг интегрирования по времени.

5.1. Движение частицы под действием силы сопротивления. Рассмотрим движение пробной частицы под действием силы сопротивления. Полагая в пределах малого временного шага $\mathbf{v} = \text{const}$, получим

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = \mathbf{v}_p^n \exp(-\tau/\text{Stk}) + \mathbf{v}^n [1 - \exp(-\tau/\text{Stk})].$$

Радиус-вектор частицы находится по формуле

$$\mathbf{r}_p^{n+1} = \mathbf{r}_p^n + \mathbf{v}^n t - \text{Stk} (\mathbf{v}^n - \mathbf{v}_p^n) [1 - \exp(-\tau/\text{Stk})].$$

При $\text{Stk} \rightarrow 0$ получим $\mathbf{v}_p^{n+1} = \mathbf{v}^n$. Скорость частицы отстает от скорости газа на временной шаг интегрирования.

Для уточнения решения предположим, что скорость газа в пределах двух последовательных шагов интегрирования по времени изменяется по закону [9]

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}^n + \mathbf{A}t + \mathbf{B}t^2.$$

Полагая смежные шаги интегрирования равными, имеем

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^{n-1}}{2\tau}; \quad \mathbf{B} = \frac{\mathbf{v}^{n+1} - 2\mathbf{v}^n + \mathbf{v}^{n-1}}{2\tau^2}.$$

В данном случае при $\text{Stk} \rightarrow 0$ получим $\mathbf{v}_p^{n+1} = \mathbf{v}^{n+1}$.

Приведенная разностная схема полуаналитического интегрирования используется во многих работах [8, 9], в частности, для моделирования турбулентных течений газозвеси при помощи стохастического варианта дискретно-траекторного подхода [15].

5.2. Учет вращения частицы. Рассмотрим способы построения разностных схем для уравнения (14) на примере модельной задачи. Предположим, что угловая скорость вращения частицы имеет только одну компоненту, перпендикулярную плоскости, в которой частица совершает поступательное движение.

Основные уравнения. Учитывая в силе воздействия газового потока на пробную частицу stokсову силу сопротивления и силу Магнуса, запишем правую часть уравнения (14) в виде

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u_p \\ v_p \\ (u - u_p)/\text{Stk} - C(v - v_p)(\omega - \omega_p) \\ (v - v_p)/\text{Stk} + C(u - u_p)(\omega - \omega_p) \\ (\omega - \omega_p)/\text{Stk} \end{pmatrix}.$$

Здесь $C = C_M \rho / \rho_p = 3\rho/4\rho_p$.

Пусть частица движется в равномерном газовом потоке $u = \text{const}$, $v = \text{const}$, $\omega = \text{const}$ (такое допущение вполне приемлемо в пределах малого временного шага). Тогда уравнения, описывающие движение частицы, допускают интегрирование в конечном виде.

Приводимые ниже разностные схемы различаются подходом к линеаризации уравнений движения пробной частицы и представляют собой обобщение разностной схемы, рассмотренной в разделе 5.1, на случай вращающейся частицы (учитывается действие силы Магнуса).

Схема полуаналитического интегрирования. Для удобства обозначим $u_r = u - u_p$, $v_r = v - v_p$, $\omega_r = \omega - \omega_p$. Представим уравнения, описывающие движение частицы относительно газа, в следующем виде:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u_r \\ v_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_r \\ v_r \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$F_{11} = F_{22} = -1/\text{Stk}, \quad F_{21} = -F_{12} = C \omega_p.$$

Для прямоугольной декартовой системы координат $G_1 = G_2 = 0$.

Пусть $F_{12} \neq 0$. Исключим поперечную составляющую скорости

$$v_r = \frac{1}{F_{12}} \left(\frac{du_r}{dt} - F_{11}u - G_1 \right).$$

После подстановки получим

$$\frac{d^2 u_r}{dt^2} - (F_{11} + F_{22}) \frac{du_r}{dt} - (F_{12}F_{21} - F_{11}F_{22})u_r = F_{12}G_2 - F_{22}G_1.$$

Общее решение неоднородного уравнения представляется в виде суммы общего решения соответствующего однородного уравнения \hat{u}_r и частного решения исходного неоднородного уравнения \tilde{u}_r , а именно $u_r = \hat{u}_r + \tilde{u}_r$. Составим характеристическое уравнение

$$\lambda^2 - (F_{11} + F_{22})\lambda - (F_{12}F_{21} - F_{11}F_{22}) = 0,$$

разрешая которое, получим

$$\lambda_{\pm} = \frac{F_{11} + F_{22}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(F_{11} - F_{22})^2 + 4F_{12}F_{21}} = -i \frac{C}{\text{Stk}} |\omega_p|.$$

Вид общего решения однородного уравнения зависит от знака дискриминанта $\Delta = (F_{11} - F_{22})^2 + 4F_{12}F_{21}$.

1. $\Delta > 0$, $\lambda_- = \lambda_1$, $\lambda_+ = \lambda_2 \in \mathbb{R}$:

$$\hat{u}_r = C_1^u \exp(\lambda_1 t) + C_2^u \exp(\lambda_2 t);$$

2. $\Delta = 0$, $\lambda_+ = \lambda_- = \lambda \in \mathbb{R}$:

$$\hat{u}_r = C_1^u \exp(\lambda t) + C_2^u t \exp(\lambda t);$$

3. $\Delta < 0$, $\lambda_{\pm} = \lambda_1 \pm i\lambda_2 \in \mathbb{C}$:

$$\hat{u}_r = C_1^u \exp(\lambda_1 t) \sin(\lambda_2 t + C_2^u).$$

Частное решение неоднородного уравнения имеет вид

$$\tilde{u}_r = \frac{F_{22}G_1 - F_{12}G_2}{F_{12}F_{21} - F_{11}F_{22}}.$$

Поперечная составляющая скорости вычисляется при помощи дифференцирования распределения продольной составляющей скорости или решения соответствующего уравнения. Общее решение однородного уравнения \hat{v}_r выражается приведенными выше соотношениями, а частное решение неоднородного уравнения имеет вид

$$\tilde{v}_r = \frac{F_{21}G_1 - F_{11}G_2}{F_{12}F_{21} - F_{11}F_{22}}.$$

Кинематические соотношения представим в форме

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ H_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u - u_r \\ v - v_r \end{pmatrix}.$$

Для прямоугольной декартовой системы координат $H_1 = H_2 = 1$.

Изменение относительной угловой скорости вращения описывается уравнением

$$\frac{d\omega_r}{dt} = F_3 \omega_r,$$

откуда $\omega = C_3 \exp(F_3 t)$, где $F_3 = -1/\text{Stk}$.

Приведем формулы, реализующие один шаг интегрирования по времени.

1. $\Delta > 0$:

$$\begin{aligned}x_p^{n+1} &= x_p^n + H_1 \left[u^n \Delta t - \frac{C_1^u}{\lambda_1} (e^{\lambda_1 \Delta t} - 1) - \frac{C_2^u}{\lambda_2} (e^{\lambda_2 \Delta t} - 1) - \tilde{u}_r \Delta t \right]; \\y_p^{n+1} &= y_p^n + H_2 \left[v^n \Delta t - \frac{C_1^v}{\lambda_1} (e^{\lambda_1 \Delta t} - 1) - \frac{C_2^v}{\lambda_2} (e^{\lambda_2 \Delta t} - 1) - \tilde{v}_r \Delta t \right]; \\u_p^{n+1} &= u^n - C_1^u e^{\lambda_1 \Delta t} - C_2^u e^{\lambda_2 \Delta t} - \tilde{u}_r; \\v_p^{n+1} &= v^n - C_1^v e^{\lambda_1 \Delta t} - C_2^v e^{\lambda_2 \Delta t} - \tilde{v}_r; \\C_1^u &= \frac{-1}{\lambda_2 - \lambda_1} [(v^n - v_p^n) F_{12} + (u^n - u_p^n)(F_{11} - \lambda_2) + \tilde{v}_r F_{12} - \tilde{u}_r (F_{11} - \lambda_2)]; \\C_2^u &= \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} [(v^n - v_p^n) F_{12} + (u^n - u_p^n)(F_{11} - \lambda_1) + \tilde{v}_r F_{12} - \tilde{u}_r (F_{11} - \lambda_1)]; \\C_1^v &= -\frac{C_1^u}{F_{12}} (F_{11} - \lambda_1); \\C_2^v &= -\frac{C_2^u}{F_{12}} (F_{11} - \lambda_2).\end{aligned}$$

2. $\Delta = 0$:

$$\begin{aligned}x_p^{n+1} &= x_p^n + H_1 \left\{ u^n \Delta t - \frac{C_1^u}{\lambda} e^{\lambda \Delta t} - \frac{C_2^u}{\lambda} \left[\Delta t e^{\lambda \Delta t} - \frac{1}{\lambda} (e^{\lambda \Delta t} - 1) \right] - \tilde{u}_r \Delta t \right\}; \\y_p^{n+1} &= y_p^n + H_2 \left\{ v^n \Delta t - \frac{C_1^v}{\lambda} e^{\lambda \Delta t} - \frac{C_2^v}{\lambda} \left[\Delta t e^{\lambda \Delta t} - \frac{1}{\lambda} (e^{\lambda \Delta t} - 1) \right] - \tilde{v}_r \Delta t \right\}; \\u_p^{n+1} &= u^n - C_1^u e^{\lambda \Delta t} - C_2^u \Delta t e^{\lambda \Delta t} - \tilde{u}_r; \\v_p^{n+1} &= v^n - C_1^v e^{\lambda \Delta t} - C_2^v \Delta t e^{\lambda \Delta t} - \tilde{v}_r; \\C_1^u &= u^n - u_p^n - \tilde{u}_r; \\C_1^v &= v^n - v_p^n - \tilde{v}_r; \\C_2^u &= C_1^v F_{12} + C_1^u (F_{11} - \lambda); \\C_2^v &= C_1^u F_{21} + C_1^v (F_{22} - \lambda).\end{aligned}$$

3. $\Delta < 0$:

$$\begin{aligned}x_p^{n+1} &= x_p^n + H_1 \left\{ u^n \Delta t - \frac{C_1^u}{|\lambda|^2} \left[e^{\lambda_1 \Delta t} (\lambda_1 \sin(\lambda_2 \Delta t + C_2^u) - \lambda_2 \cos(\lambda_2 \Delta t + C_2^u)) \times \right. \right. \\&\quad \left. \left. \times (\lambda_1 \sin C_2^u - \lambda_2 \cos C_2^u) \right] - \tilde{u}_r \Delta t \right\}; \\y_p^{n+1} &= y_p^n + H_2 \left\{ v^n \Delta t - \frac{C_1^v}{|\lambda|^2} \left[e^{\lambda_1 \Delta t} (\lambda_1 \sin(\lambda_2 \Delta t + C_2^v) - \lambda_2 \cos(\lambda_2 \Delta t + C_2^v)) \times \right. \right. \\&\quad \left. \left. \times (\lambda_1 \sin C_2^v - \lambda_2 \cos C_2^v) \right] - \tilde{v}_r \Delta t \right\}; \\u_p^{n+1} &= u^n - C_1^u e^{\lambda_1 \Delta t} \sin(\lambda_2 \Delta t + C_2^u) - \tilde{u}_r; \\v_p^{n+1} &= v^n - C_1^v e^{\lambda_1 \Delta t} \sin(\lambda_2 \Delta t + C_2^v) - \tilde{v}_r; \\C_1^u \sin C_2^u &= u^n - u_p^n - \tilde{u}_r; \\C_1^v \sin C_2^v &= v^n - v_p^n - \tilde{v}_r; \\C_1^u \cos C_2^u &= \frac{1}{\lambda_2} [(v^n - v_p^n - \tilde{v}_r) F_{12} + (u^n - u_p^n - \tilde{u}_r)(F_{11} - \lambda_1)]; \\C_1^v \cos C_2^v &= \frac{1}{\lambda_2} [(u^n - u_p^n - \tilde{u}_r) F_{21} + (v^n - v_p^n - \tilde{v}_r)(F_{22} - \lambda_1)].\end{aligned}$$

4. $\forall \Delta$:

$$\omega_p^{n+1} = \omega^n - C_3 e^{F_3 \Delta t}; \quad C_3 = \omega^n - \omega_p^n.$$

Метод замороженных коэффициентов. При использовании для линеаризации уравнений движения частицы метода замороженных коэффициентов уравнения на каждом временном шаге решаются независимо друг от друга. Уравнения движения частицы имеют вид

$$\begin{aligned}\frac{du_r}{dt} &= F_{11}u_r + F_{12}; \\ \frac{dv_r}{dt} &= F_{21}v_r + F_{22}.\end{aligned}$$

Приведенные уравнения необходимо дополнить кинематическими соотношениями, позволяющими вычислить координаты частицы:

$$\begin{aligned}\frac{dx_p}{dt} &= H_1(u - u_r); \\ \frac{dy_p}{dt} &= H_2(v - v_r).\end{aligned}$$

Изменение относительной угловой скорости вращения описывается уравнением

$$\frac{d\omega_r}{dt} = F_3 \omega_r.$$

Здесь

$$F_{12} = -C v \omega_p, \quad F_{22} = C u \omega_p.$$

Для прямоугольной декартовой системы координат $H_1 = 1, H_2 = 1$.

Формулы, реализующие один шаг интегрирования по времени, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}x_p^{n+1} &= x_p^n + H_1 \left[\left(u^n + \frac{F_{12}}{F_{11}} \right) \Delta t + \frac{1}{F_{11}} \left(u^n - u_p^n - \frac{F_{12}}{F_{11}} \right) (1 - e^{F_{11} \Delta t}) \right]; \\ y_p^{n+1} &= y_p^n + H_2 \left[\left(v^n + \frac{F_{22}}{F_{21}} \right) \Delta t + \frac{1}{F_{21}} \left(v^n - v_p^n - \frac{F_{22}}{F_{21}} \right) (1 - e^{F_{21} \Delta t}) \right]; \\ u_p^{n+1} &= u^n + \frac{F_{12}}{F_{11}} - \left(u^n - u_p^n - \frac{F_{12}}{F_{11}} \right) e^{F_{11} \Delta t}; \\ v_p^{n+1} &= v^n + \frac{F_{22}}{F_{21}} - \left(v^n - v_p^n - \frac{F_{22}}{F_{21}} \right) e^{F_{21} \Delta t}; \\ \omega_p^{n+1} &= \omega^n - (\omega^n - \omega_p^n) e^{F_3 \Delta t}.\end{aligned}$$

5.3. Движение частицы в сдвиговом потоке. Уравнение движения частицы с учетом действия подъемной силы Сэффмана имеет вид

$$\frac{dv_{pi}}{dt} = \frac{1}{Stk} (v_i - v_{pi}) + L_{ij} (v_j - v_{pj}).$$

Здесь

$$L_{ij} = C_s \rho \nu^{1/2} r_p^2 \frac{\epsilon_{ij}}{(\epsilon_{kl} \epsilon_{lk})^{1/4}}.$$

Применяя для дискретизации неявный метод Эйлера, получим

$$\frac{v_{pi}^{n+1} - v_{pi}^n}{\Delta t} = \frac{1}{Stk} (v_i^n - v_{pi}^{n+1}) + L_{ij} (v_j^n - v_{pj}^{n+1}).$$

Приведенные уравнения допускают решение в конечном виде:

$$\begin{aligned}v_{p1}^{n+1} &= \frac{1}{\Lambda} [(a_2 a_3 - \lambda_{23}^2) b_1 + (\lambda_{31} \lambda_{23} - a_3 \lambda_{12}) b_2 + (\lambda_{12} \lambda_{23} - a_2 \lambda_{31}) b_3]; \\ v_{p2}^{n+1} &= \frac{1}{\Lambda} [(a_3 a_1 - \lambda_{31}^2) b_2 + (\lambda_{12} \lambda_{31} - a_1 \lambda_{23}) b_3 + (\lambda_{23} \lambda_{31} - a_3 \lambda_{12}) b_1]; \\ v_{p3}^{n+1} &= \frac{1}{\Lambda} [(a_1 a_2 - \lambda_{12}^2) b_3 + (\lambda_{23} \lambda_{12} - a_2 \lambda_{31}) b_1 + (\lambda_{31} \lambda_{12} - a_1 \lambda_{23}) b_2].\end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned} \lambda_{ij} &= L_{ij}\Delta t; & a_i &= 1 + \frac{\Delta t}{Stk} + L_{ij}\Delta t; \\ b_i &= u_{pi}^n + \frac{\Delta t}{Stk} u_i^n + L_{ij}\Delta t u_j^n; & \Lambda &= a_1 a_2 a_3 - a_1 \lambda_{23}^2 - a_2 \lambda_{31}^2 - a_3 \lambda_{12}^2 + 2\lambda_{12}\lambda_{23}\lambda_{31}. \end{aligned}$$

Данная разностная схема приводится в работе [9], но содержит некорректную запись выражения для силы Сэффмана (ошибочное значение коэффициента C_s). Проведенные расчеты трехмерных внутренних течений показывают широкие возможности использования этой разностной схемы в тех случаях, когда на движение примеси оказывает существенное влияние пограничный слой [15].

6. Уравнения в криволинейной системе координат. Во многих задачах удобно использовать криволинейную систему координат, согласованную с границами области в физическом пространстве.

6.1. Ускорение частицы. Представим ускорение частицы в произвольной криволинейной ортогональной системе координат.

Раскладывая вектор скорости частицы \mathbf{v} по базису $\{\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2, \mathbf{i}_3\}$ прямоугольной декартовой системы координат $\{x_1, x_2, x_3\}$ и по базису $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ произвольной криволинейной ортогональной системы координат $\{q_1, q_2, q_3\}$, получим

$$\mathbf{v} = \sum_k v_k \mathbf{i}_k = \sum_k V_k \mathbf{e}_k.$$

Разложение дифференциала радиус-вектора \mathbf{r} по базису имеет вид

$$d\mathbf{r} = \sum_k dx_k \mathbf{i}_k = \sum_k H_k dq_k \mathbf{e}_k.$$

Здесь v_k и V_k — составляющие скорости в системе координат $\{x_1, x_2, x_3\}$ и системе координат $\{q_1, q_2, q_3\}$ соответственно. Коэффициенты $H_i dq_i$ представляют собой дифференциалы дуг координатных линий q_i , соответствующие приращениям координат dq_i . Коэффициенты Ламе находятся из соотношений

$$H_i^2 = \sum_k \left(\frac{\partial x_k}{\partial q_i} \right)^2.$$

Связь между ускорением частицы в прямоугольной декартовой системе координат и произвольной криволинейной ортогональной системе координат дается соотношением

$$\frac{dv_k}{dt} = \frac{dV_k}{dt} + \sum_i \left(\frac{V_k V_i}{H_i H_k} \frac{\partial H_k}{\partial q_i} - \frac{V_i V_i}{H_i H_k} \frac{\partial H_i}{\partial q_k} \right).$$

Кинематическое соотношение, позволяющее вычислить координаты частицы, имеет вид

$$\frac{dq_k}{dt} = \frac{V_k}{H_k}.$$

6.2. Восполнение параметров газовой фазы. Корректность решения задачи о движении примеси зависит от точности задания параметров газовой фазы, входящих в уравнение движения индивидуальной частицы. Для построения гладких восполнений газодинамических параметров в точках, лежащих на траектории движения частицы, по их сеточным значениям используются различные методы интерполяции.

В случае, если в вычислительной процедуре отсутствует механизм адаптации сетки к решению, то использование гладкой интерполяции (например, полиномов третьего или четвертого порядков) может приводить к нежелательным осцилляциям и даже потере физической корректности решения. Применение линейной интерполяции исключает появление отмеченных эффектов, а сама задача в двумерном случае сводится к построению в каждой ячейке расчетной сетки системы двух билинейных уравнений, решение которой получается в конечном виде. Если к способу восполнения не предъявляются высокие требования к гладкости, то основным недостатком такого подхода является невысокая точность. Однако практика численных расчетов показывает, что основные погрешности связаны не с низким порядком интерполяции, а с сильной скошенностью ячеек расчетной сетки, в связи с чем восполнение газодинамических параметров имеет смысл производить в вычислительном пространстве [15].

Применение кубической сплайн-интерполяции позволяет, помимо вычисления составляющих скорости, практически без дополнительных временных затрат вычислить значения производных от компонент вектора скорости (при использовании линейной интерполяции для этого требуется специальная процедура), которые необходимы для расчета компонент матрицы Якоби. Большая часть расчетного времени тратится не на восполнение газодинамических параметров несущего потока, а на установление ячеек расчетной сетки, в которой в данный момент времени находится пробная частица.

6.3. Особенности интегрирования. Расчет траекторий движения частицы может выполняться как в физическом пространстве (x, y) , так в параметрическом прямоугольнике (ξ, η) . Организация вычислений в пространстве (ξ, η) проще, поскольку при этом отпадает необходимость в выявлении следующей по ходу движения частицы ячейки сеточной структуры. Однако в данном случае снижается точность интегрирования ввиду того, что метрические параметры сеточного шаблона не являются, строго говоря, аналитическими функциями. Такой прием может также привести к неприемлемым искажениям результата в области с сильно искривленными координатными линиями.

Основная трудность интегрирования уравнений движения частицы в криволинейной системе координат связана с интерполяцией сеточных значений параметров несущего потока. Значения составляющих скорости хранятся в узлах криволинейной сетки. Зная положение частицы в физической плоскости, можно определить, в какой ячейке криволинейной сетки она находится, и взять соответствующее значение скорости для интерполяции. Однако при этом возникают трудности с фиксацией момента выпадения частицы на стенку или вылета частицы из выходного сечения расчетной области.

В связи с этим интегрирование производится одновременно в двух пространствах — физическом и вычислительном. Поскольку уравнения для координат не связаны с уравнениями для скорости, то интегрирование уравнений для составляющих скорости производится в физическом пространстве, а уравнений для координат — в вычислительной плоскости.

Уравнения для координат частицы имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{dt} &= u_\xi = \frac{1}{J} (u_x y_\eta - u_y x_\eta); \\ \frac{d\eta}{dt} &= u_\eta = \frac{1}{J} (u_y x_\xi - u_x y_\xi). \end{aligned}$$

Якобиан преобразования координат находится из соотношения

$$J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi.$$

При интегрировании уравнений для координат используется двухшаговый метод предиктор-корректор. После этого вопросы интерполяции и фиксации момента времени выхода траектории на границу области решаются достаточно просто. Формулы, обеспечивающие непрерывность интерполируемой величины при переходе из частицы от одной ячейки сетки в другую, строятся на основе метода взвешенных площадей:

$$x = \sum_{i=1}^4 A_i x_i / \sum_{i=1}^4 A_i,$$

где A_i — площадь соответствующего прямоугольника (см. рисунок).

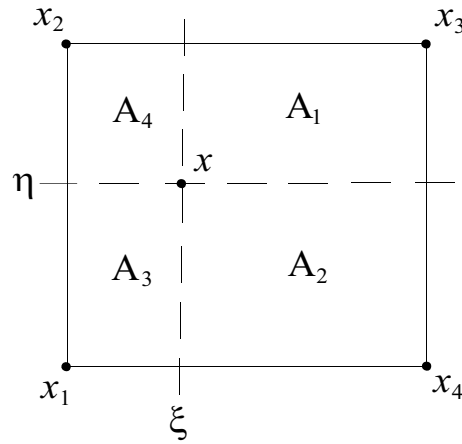
Шаг интегрирования выбирается исходя из потребностей точности пространственной привязки частицы (величина Δs).

7. Метод трубок тока частиц. Для расчета концентрации примеси требуется решить уравнение неразрывности (6), записанное в лагранжевых переменных. Вместе с тем, для расчета концентрации дисперсной фазы можно применить приближенный подход, основанный на методе трубок тока частиц.

Предположим, что распределения параметров несущего потока известны. Выделим в начальном сечении три частицы, представляющие вершины треугольника. Для стационарного движения выделенные траектории представляют собой линии тока частиц выбранного размера. В сечении траекторий плоскостью также можно выделить треугольник. Полагается, что все частицы, поступившие в расчетную область внутри начального контура, остаются внутри трубки тока треугольного сечения, ограниченной траекториями частиц-представительниц.

В этом случае задача расчета течения двухфазной среды заменяется задачей расчета трубок тока частиц с последующим исследованием их поведения в расчетной области.

Дисперсная фаза представляется в виде M фракций частиц. Из каждого начального сечения треугольной формы исходит M трубок тока частиц. Обозначим через N_i количество частиц фракции i ,



Метод взвешенных площадей

поступающих по нормали в трубку тока через единицу площади за единицу времени. Условие постоянства расхода частиц внутри трубки тока имеет вид

$$N_{i0} S_{i0} \cos(\mathbf{n}_0, \mathbf{v}_{i0}) = N_i S_i \cos(\mathbf{n}, \mathbf{v}_i).$$

Площадь сечения трубки тока частиц находится из соотношения

$$S^2 = \frac{1}{4} \left\{ \left| \begin{array}{ccc} y_1 & z_1 & 1 \\ y_2 & z_2 & 1 \\ y_3 & z_3 & 1 \end{array} \right|^2 + \left| \begin{array}{ccc} z_1 & x_1 & 1 \\ z_2 & x_2 & 1 \\ z_3 & x_3 & 1 \end{array} \right|^2 + \left| \begin{array}{ccc} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{array} \right|^2 \right\}.$$

Вектор единичной нормали вычисляется следующим образом:

$$\mathbf{n} = \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)}{|(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)|}.$$

В результате, получим счетную концентрацию частиц в точке, которую охватывает трубка тока:

$$n_i = \frac{N_{i0} S_{i0} \cos(\mathbf{n}_0, \mathbf{v}_{i0})}{\tilde{V}_{ni} S_i \cos(\mathbf{n}, \mathbf{v}_i)}.$$

Средняя по сечению скорость частиц определяется из соотношения

$$\tilde{V}_n = \frac{1}{3} (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3) \cdot \mathbf{n}.$$

Когда одна и та же точка пространства находится внутри нескольких трубок тока, оценки потоков и концентраций суммируются.

Данный подход используется и для оценки обратного влияния дисперсной фазы. Для этого необходимо при интегрировании уравнений движения частицы запоминать силу сопротивления частицы и, просуммировав ее по ансамблю находящихся в единице объема частиц, приложить ее (с обратным знаком) к единице объема газа.

8. Заключение. Рассмотрены различные моменты, связанные с численной реализацией дискретно-траекторного метода пробных частиц, и подходы к численному решению задачи Коши для уравнений, описывающих движение и тепломассообмен пробной частицы в потоке жидкости или газа. Разработан ряд разностных схем, учитывающих особенности движения частиц мелкой и крупной фракции, а также разностных схем полуаналитического интегрирования для нескольких частных задач. Приведены уравнения движения частицы в произвольной криволинейной системе координат и рассмотрены особенности их интегрирования. Разработан метод трубок тока частиц, позволяющий рассчитать концентрацию примеси и учесть обратное влияние дисперсной фазы на несущий поток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Низматулин Р.И.* Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука, 1987.
2. *Crowe C.T., Troutt T.R., Chung J.N.* Numerical models for two-phase turbulent flows // Annual Review on Fluid Mechanics. 1996. **28**. 11–43.
3. *Crowe C.T., Sharma M.P., Stock D.E.* The particle-source-in cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows // Journal of Basic Engineering. 1977. **99**, N 2. 325–331.
4. *Стернин Л.Е., Шрайбер А.А.* Многофазные течения газа с частицами. М.: Машиностроение, 1994.
5. *Rubinow S.I., Keller J.B.* The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid // Journal of Fluid Mechanics. 1961. **11**, N 3. 447–459.
6. *Tsuji Y., Morikawa Y., Mizuno O.* Experimental measurement of the Magnus force on a rotating sphere at low Reynolds numbers // Journal of Fluids Engineering. 1985. N 4. 484–488.
7. *Наумов В.А., Соломенко А.Д., Яценко В.П.* Влияние силы Магнуса на движение сферического твердого тела при большой угловой скорости // ИФЖ. 1993. **65**, № 3. 287–290.
8. *Li A., Ahmadi G.* Deposition of aerosols on surfaces in a turbulent channel flow // International Journal of Engineering Science. 1993. **31**. 435–451.
9. *Morgan A.J., Barton I.E.* Investigation of small numerical instabilities generated by the Lagrangian tracking scheme // Proceedings of the Third ECCOMAS Conference (Barcelona, 11–14 September 2000). 1–15.
10. *Saffman P.G.* The lift force on a small sphere in a slow shear flow // Journal of Fluid Mechanics. 1965. **22**, N 2. 385–400.
11. *Асмолов Е.С.* О движении дисперсной примеси в ламинарном пограничном слое на плоской пластине // Изв. РАН. МЖГ. 1992. № 1. 66–73.
12. *Наумов В.А.* Влияние подъемной силы Саффмэна на движение частицы в слое Куэтта // ИФЖ. 1995. **68**, № 5. 840–844.
13. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Под ред. Дж. Холла и Дж. Уатга. М.: Мир, 1979.
14. *Shih T.I.-P., Dasgupta A.* Noniterative implicit method for tracking particles in mixed Lagrangian–Eulerian formulations // AIAA Journal. 1993. **31**, N 4. 782–784.
15. *Волков К.Н.* Турбулентные течения газозвеси в каналах со вдувом // Дис. канд. физ.-мат. наук. Санкт-Петербург, 1998.

Поступила в редакцию
27.11.2003
