

УДК 532.529/534-18

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСАЖДЕНИЯ МЕЛКОДИСПЕРСНОЙ ВЗВЕСИ ИЗ ВОЗДУХА ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ВОЛН ДАВЛЕНИЯ

К. И. Михайленко<sup>1</sup>, Ю. Р. Валеева<sup>1</sup>

Исследован процесс осаждения мелкодисперсной среды под воздействием проходящих волн давления. Предложена математическая модель, предусматривающая коагуляцию дисперсных частиц с ростом концентрации. На дисперсные частицы действуют силы Стокса со стороны дисперсионной среды и сила тяжести. Приведены результаты вычислительного моделирования процессов осаждения дисперсной взвеси. Показано, что одним из механизмов осаждения взвесей может быть коагуляция частиц при прохождении волн давления. Произведено распараллеливание задачи на основе MPI, что позволило проводить численные эксперименты на больших пространственно-временных сетках. Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии» (ПаВТ-2013; <http://agora.guru.ru/pavt2013>).

**Ключевые слова:** многофазные системы, дисперсная среда, математическое моделирование, высокопроизводительные вычисления.

**1. Введение.** В настоящей статье рассматривается один из аспектов поведения дисперсной системы — особого соединения двух фаз, когда одна из фаз образует непрерывную дисперсионную среду, в объеме которой распределена дисперсная фаза в виде мелких кристаллов, твердых аморфных частиц, капель или пузырьков. Системы с газообразной дисперсионной средой играют важную роль в природе, быту и производственной деятельности человека. Природными источниками таких смесей являются землетрясения, извержения вулканов, метеоритная и космическая пыль, туман и др. Источниками техногенных дисперсных систем могут быть аварии, выбросы предприятий (в том числе вредные), пожары, нефтяная и газовая промышленности.

Нередко возникает необходимость в создании эффективной защиты помещений и открытых пространств от распыленных частиц вредных веществ. Одним из способов, позволяющих решить поставленную задачу, является использование акустического поля для осаждения дисперсной взвеси [1].

Экспериментальное исследование осаждения дисперсных сред и аэрозолей активно ведется, например, в Институте механики и машиностроения КазНЦ РАН [1, 2]; в представленных работах описываются особенности нелинейных колебаний и осаждения аэрозоля в безударно-волновом режиме.

Нами построена упрощенная математическая модель процессов, связанных со стратификацией дисперсной фазы при прохождении волн давления в несущей газовой фазе, на основе которой проведено численное исследование процессов осаждения.

**2. Математическая модель.** Рассматривается двухфазная система газ-дисперсная среда, в которой дисперсная среда представляется как множество гладких сферических частиц с небольшой концентрацией. Динамика системы описывается на базе основных положений механики сплошной среды [3]. Межфазное взаимодействие определяется осредненной по пространству силой Стокса [4, 5]. Кроме того, учтено влияние силы тяжести на движение частиц дисперсной среды.

Таким образом, математическая модель, описывающая движение двухфазной смеси газа и дисперсной среды, при наличии коагуляции дисперсных частиц может быть записана исходя из следующих предположений:

— гранулированная среда состоит из гладких сферических частиц одинакового размера, для которых выполняются предположения о малости частиц по сравнению с характерными линейными масштабами течений;

— время коагуляции пары частиц при их соударении пренебрежимо мало по сравнению со средним временем между столкновениями;

<sup>1</sup> Уфимский научный центр РАН, Институт механики им. Р.Р. Мавлютова (ИМех УНЦ РАН), просп. Октября, 71, 450054, Уфа; К. И. Михайленко, ст. науч. сотр., e-mail: const@uimech.org; Ю. Р. Валеева, аспирант, e-mail: vjulietr@gmail.com

- после соединения частицы гранулированной среды вновь образуют сферическую частицу с вдвое бóльшим объемом;
- воздействие газовой фазы на дисперсную описывается осредненной по пространству силой Стокса;
- воздействие на газовую фазу со стороны дисперсной при рассматриваемых концентрациях ( $\alpha_2 \ll 1$ ) достаточно мало и им можно пренебречь;
- на гранулированную среду действует осредненная по пространству сила тяжести.

С учетом высказанных предположений система уравнений математической модели может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla_\ell \cdot \rho_i v_i^\ell &= 0, \\ \rho_i \frac{\partial v_i^\ell}{\partial t} + \rho_i v_i \frac{\partial v_i^\ell}{\partial x^\ell} &= -\alpha_i \nabla_\ell p + \nabla_k \tau_i^{\ell k} + \rho_i g + F_{ji}^\ell, \end{aligned}$$

где  $v_i^\ell$  —  $\ell$ -я составляющая вектора скорости  $i$ -й фазы (в нашей модели принято, что  $i = 1$  соответствует дисперсионной газовой фазе, а  $i = 2$  — гранулированной);  $\rho_i$  — эффективная плотность  $i$ -й фазы, связанная с полной плотностью  $\rho_i^0$  соотношением  $\rho_i = \alpha_i \rho_i^0$ ;  $\alpha_i$  — объемная концентрация  $i$ -й фазы,  $\sum_i \alpha_i = 1$ ;  $\tau_i^{\ell k}$  — тензор сдвиговых напряжений  $i$ -й фазы;  $p$  — давление;  $F_{ji}^\ell$  —  $\ell$ -я составляющая вектора силы межфазного взаимодействия, действующего со стороны  $j$ -й фазы на  $i$ -ю;  $g$  — ускорение свободного падения.

В соответствии с введенными выше предположениями принимаем, что  $\rho_1 g = 0$ ,  $F_{21}^\ell = 0$ ,  $\tau_2^{\ell k} = 0$ .

Обсудим подробнее силы, действующие на частицу, движущуюся в дисперсионной среде. Это силы трех категорий: внешние силы (сила тяжести), силы сопротивления среды и силы взаимодействия между частицами. Последние, в случае электрически нейтральных частиц и при условии  $\alpha_2 \ll 1$ , достаточно малы, так что ими можно пренебречь.

Сила сопротивления среды описывается формулой Стокса  $F_{st} = 6\pi a \mu (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_p)$ , где  $a$  — радиус сферической частицы,  $\mu$  — вязкость дисперсионной среды,  $\mathbf{v}_1$  — скорость дисперсионной фазы и  $\mathbf{v}_p$  — скорость частицы.

Сила тяжести, действующая на частицу сферической формы, определяется формулой  $F_g^0 = \frac{4}{3} \pi a^3 \rho_2^0 g$ , где  $\rho_2^0$  — плотность вещества дисперсной среды и  $g$  — ускорение свободного падения.

Взаимодействие взвешенных частиц с колеблющимся потоком газа приводит к нарушению их равномерного распределения в пространстве, сближению друг с другом и последующей коагуляции. В процессе коагуляции образуются частицы бóльшего размера, причем для упрощения модели мы считаем, что вновь образованная частица имеет удвоенную массу, но при этом остается сферической.

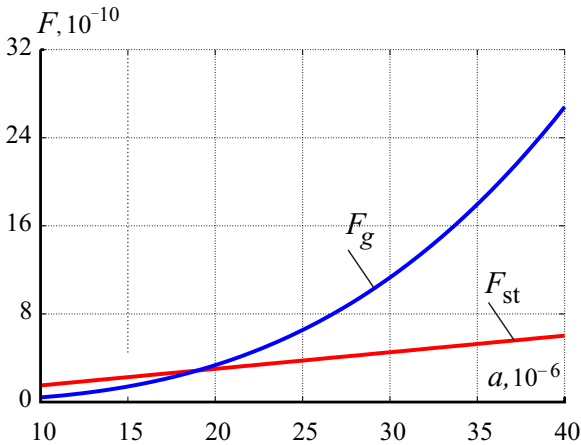


Рис. 1. Сравнение величины силы Стокса  $F_{st}$  при некоторой заданной разнице в скорости между частицей и газом и силы тяжести  $F_g$ , действующих на отдельную частицу, в зависимости от радиуса частицы  $a$

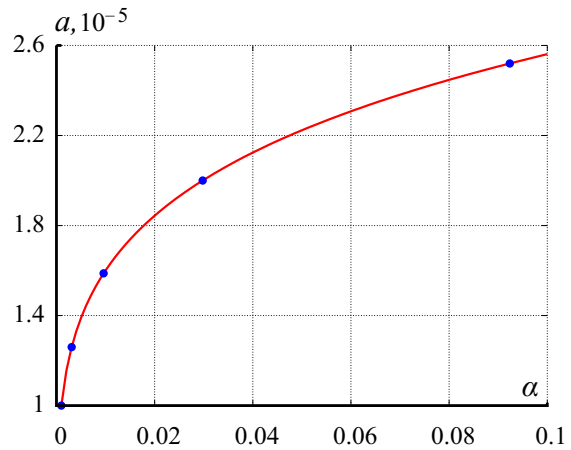


Рис. 2. Зависимость эффективного радиуса  $\tilde{a}$  частиц гранулированной фазы от концентрации  $\alpha_2$ ; точками обозначены значения размеров дисперсных частиц при заданных  $\alpha_i$

При достижении радиусом частицы определенного значения, величина силы тяжести начинает превышать значение силы Стокса, как это показано на рис. 1, что приведет к усиленному осаждению дисперсной фазы.

Поскольку поведение дисперсной среды описывается с помощью континуальной модели, действие внешних сил необходимо записать в форме действия на единицу объема с заданной концентрацией дисперсной фазы  $\alpha_2$ .

Силу межфазного взаимодействия можно записать в виде  $F_{12} = \eta_\mu \alpha_1 \alpha_2 a^{-2} (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)$ , где  $a$  — радиус частиц дисперсной фазы;  $\eta_\mu$  — структурный коэффициент, определяемый формой и поверхностью частиц. Для случая гладких сфер имеем  $\eta_\mu = \frac{9}{2} \mu_1$ .

Аналогичным образом записывается сила тяжести, действующая на дисперсную фазу:  $F_g = \alpha_2 \rho_2^0 \mathbf{g}$ .

Для моделирования коагуляции вводится понятие эффективного радиуса дисперсной частицы  $\tilde{a}$ . Поясним введенное понятие на примере. Начальная концентрация дисперсной фазы равна  $\alpha_0$ , при этом все частицы имеют одинаковый радиус, равный эффективному радиусу  $\tilde{a}_0 = a$ . При увеличении концентрации частицы начинают коагулировать, и при достижении некоторого значения  $\xi \alpha_0$  достигаем максимума коагуляции исходных частиц, когда все частицы считаются попарно объединившимися. Новые частицы имеют эффективный радиус, определяемый их удвоенным от начального объемом  $\tilde{a}_1 = 2^{1/3} a$ . При достижении концентрации  $\xi^2 \alpha_0$  мы будем иметь частицы с эффективным радиусом  $\tilde{a}_2 = 2^{2/3} a$  и т.д. Таким образом, имеется следующая зависимость:  $\alpha_i = \xi^i \alpha_0 \Rightarrow \tilde{a}_i = 2^{i/3} a$ . Другими словами, эффективный радиус является функцией концентрации:  $\tilde{a} = f(\alpha)$ , ее графическое представление приведено на рис. 2.

**3. Численный метод.** Уравнения модели решаются численно с использованием метода крупных частиц [6]. Выбор данного метода определяется его консервативностью и хорошей устойчивостью при решении задач со слабыми ударными волнами.

Основная идея метода крупных частиц заключается в расщеплении по физическим процессам системы уравнений, записанной в форме законов сохранения. Среда моделируется системой из крупных частиц, совпадающих в рассматриваемый момент времени с ячейкой эйлеровой сетки. Расчет каждого временного шага разбивается на три этапа.

*Эйлеров этап*, на котором пренебрегаем всеми эффектами, связанными с перемещением элементарной ячейки (потока массы через границы ячеек нет), и учитываем эффекты ускорения жидкости лишь за счет давления; здесь для крупной частицы определяются промежуточные значения искомых параметров потока  $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{E})$ .

*Лагранжесв этап*, во время которого вычисляются потоки физических величин через границы ячеек.

*Заключительный этап* для определения в новый момент времени окончательных значений гидродинамических параметров потока  $(u, v, E, \rho)$  на основе законов сохранения массы, импульса и энергии для каждой ячейки и всей системы в целом на фиксированной расчетной сетке.

Разностная схема для расчета течения двухфазных сред является модификацией схемы для расчета течения однофазного газа, приведенной выше. Изменяется заключительный этап. В новой схеме добавляются концентрация и силы межфазного взаимодействия. Для рассматриваемой задачи была принята модель с общим давлением:  $p_1 = p_2 = p$ . В силу того, что  $\alpha_2 \ll \alpha_1$ , давление газа является определяющим, оно и принимается в качестве общего давления системы. Концентрации газа и дисперсных частиц рассчитываются для каждой ячейки. Кроме того, были добавлены функция пересчета концентрации фаз системы и функция, вычисляющая значение силы Стокса.

#### 4. Результаты.

##### 4.1. Моделирование процесса осаждения.

Описанная математическая модель и численный метод были использованы для решения поставленной задачи об осаждении дисперсной фазы при прохождении через среду волн давления.

Расчетная область представляет собой закрытую с одного конца трубу прямоугольного сечения. В качестве граничных условий на боковых и верхней границах используется условие прилипания (стенка). На нижней границе ставится условие периодического изменения давления (акустическое воздействие).

На рис. 3 и 4 показаны результаты моделирования осаждения дисперсной среды при прохождении волн давления. Приведенные результаты были получены при следующих параметрах рассматриваемой системы:

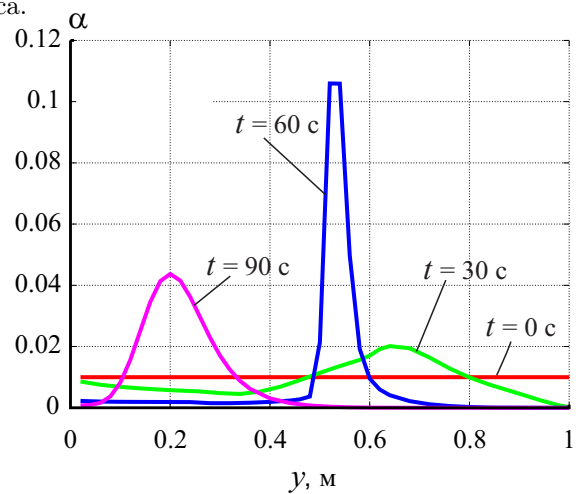


Рис. 3. Изменение концентрации дисперсной фазы  $\alpha_2$  с течением времени

- исходный размер дисперсных частиц  $a = 10^{-5}$ ;
- исходная объемная концентрация дисперсной среды  $\alpha = 0.01$ ;
- исходная плотность газовой фазы  $\rho_1^0 = 1 \text{ кг/м}^3$ ;
- плотность дисперсной фазы  $\rho_2^0 = 1000 \text{ кг/м}^3$ ;
- вязкость газовой фазы  $\mu = 10^{-5} \text{ П}$ ;
- геометрические размеры системы  $1 \times 0.15 \times 0.15 \text{ м}^3$ .

На рис. 3 показано продольное распределение концентрации дисперсной фазы в некоторые моменты времени. Здесь показано, что в начальный момент времени мы имеем равномерно распределенную по области концентрацию дисперсной среды. Под действием непрерывно проходящих волн давления равномерное распределение нарушается и концентрация дисперсной фазы начинает увеличиваться вблизи дальнего, закрытого конца области (рис. 4а).

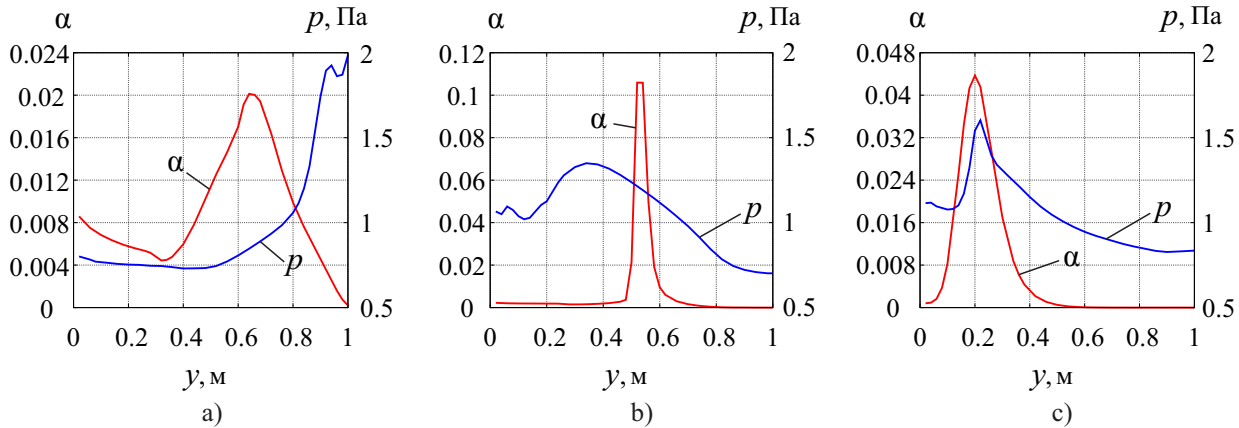


Рис. 4. Распределение концентрации дисперсной фазы  $\alpha_2$  и давления  $p$  в моменты времени  $t = 30 \text{ с}$  (а),  $t = 60 \text{ с}$  (b) и  $t = 90 \text{ с}$  (с)

Одновременно с ростом концентрации происходит также и рост размеров частиц, в результате чего они, под действием силы тяжести, начинают смещаться вниз, повышая концентрацию в нижележащих слоях и ускоряя этот процесс. В итоге, в некоторый момент времени приблизительно посреди расчетной области образуется небольшой слой с концентрацией, почти на порядок превосходящей начальную, как это показано на рис. 4b. Этот слой состоит из большей части ранее находящейся выше него дисперсной фазы.

На рис. 4с показан заключительный этап осаждения дисперсной фазы. Образовавшийся на предыдущем этапе слой высокой концентрации начинает с заметной скоростью оседать, собирая по пути и те дисперсные частицы, которые находятся ниже. Этот процесс происходит достаточно быстро, и в ходе него наблюдается “размывание” концентрации дисперсной среды, вызванное, по-видимому, волнами давления, наиболее энергичными вблизи их источника — нижней границы области.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что процесс осаждения состоит из двух сравнимых по длительности этапов. На первом этапе происходит постепенное выведение дисперсной среды из положения равновесия под действием проходящих волн давления. После того как в результате перераспределения концентрации дисперсной среды образовалась область с достаточно заметно повышенной концентрацией, начинается второй этап — собственно осаждение дисперсной среды.

Как было показано выше, второй этап процесса вначале приводит к образованию слоя с высокой концентрацией дисперсных частиц, после чего этот слой достаточно быстро опускается вниз, вбирая в себя все встреченные дисперсные частицы.

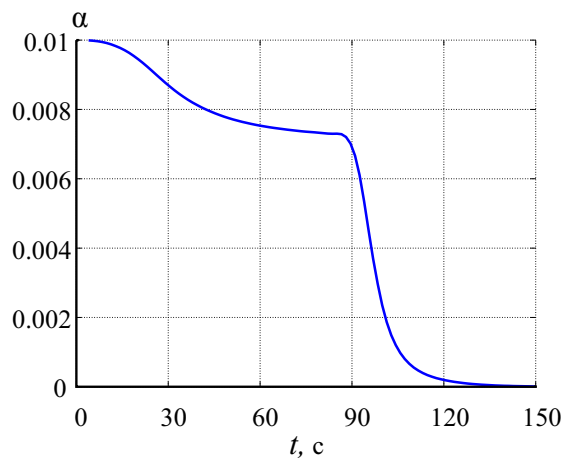


Рис. 5. Изменение средней концентрации дисперсной фазы  $\bar{\alpha}_2$  в расчетной области с течением времени

Описанную двухэтапность процесса осаждения, определяемого механизмом коагуляции дисперсных частиц при росте концентрации, можно наблюдать и на рис. 5, где показана кривая изменения средней концентрации дисперсной фазы  $\bar{\alpha}_2$ . На этой кривой можно видеть два перегиба: слабо выраженный в момент времени  $t \approx 40$  сек. и резкий при  $t \approx 80$  сек. При этом первый перегиб как раз и разделяет этап начального перераспределения концентрации и этап последующего осаждения. Второй перегиб образуется, когда в процессе осаждения область повышенной концентрации достигает нижней границы, и дисперсная среда начинает активно выводиться из расчетной области.

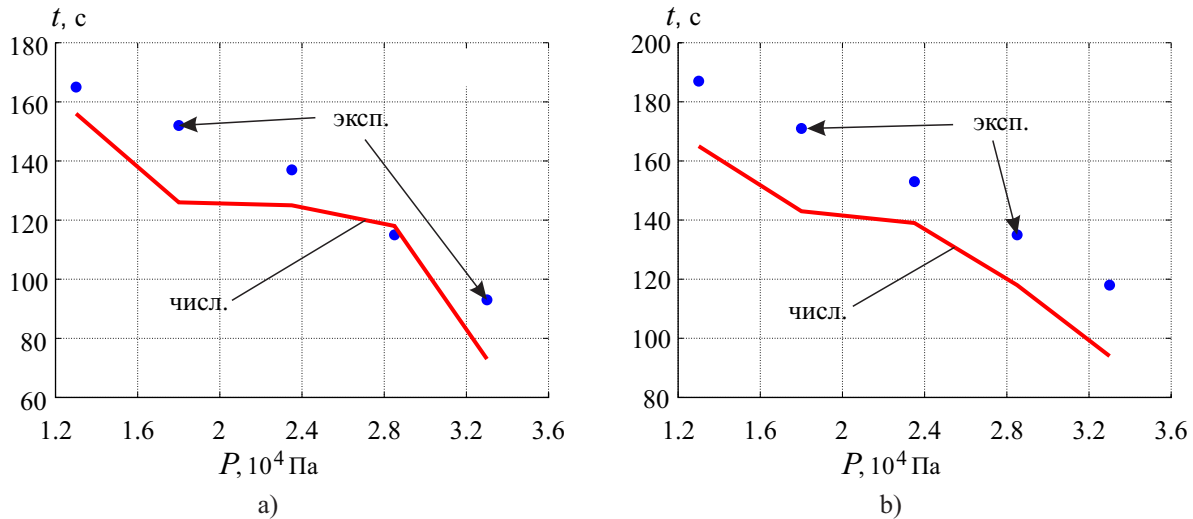


Рис. 6. Время осаждения дисперсной фазы в зависимости от амплитуды волны давления при различных частотах в эксперименте [2] (точки) и полученные из расчета (линия): а)  $\omega = 158$  Гц; б)  $\omega = 160.66$  Гц

**4.2. Сравнение с экспериментом.** На рис. 6 приведены результаты сравнения данных, полученных из эксперимента [2], с расчетами, в которых основной упор делался на эмпирическое получение используемого в модели коэффициента коагуляции  $\xi$ .

На приведенных графиках сравниваются времена осаждения дисперсной фазы в зависимости от частоты и амплитуды волны давления, генерируемой на нижней границе области.

Соответствие с экспериментальными данными достигается при следующих параметрах вычислительного эксперимента:

- исходный размер дисперсных частиц  $a_0 = 0.83 \times 10^{-6}$  м, их плотность  $\rho_2^0 = 557$  кг/м<sup>3</sup> и начальная концентрация  $\alpha = 0.073$ ;
- плотность и вязкость газовой фазы:  $\rho_1^0 = 2$  кг/м<sup>3</sup> и  $\mu = 1.97 \times 10^{-4}$  Па;
- размер расчетной области: длина 1 м, диаметр 0.03 м;
- коэффициент коагуляции  $\xi = 4.7$ .

Наблюдаемое расхождение между вычисленными и экспериментальными параметрами может быть объяснено в том числе и используемыми в модели упрощающими предположениями. В частности, предположением о том, что отдельная частица дисперсной среды всегда представляет собой сферу, независимо от того, сколько исходных частиц ее образовали. При таком подходе сохраняется возможность использования силы Стокса для вычисления межфазного взаимодействия на всех этапах, однако тем самым модель занижает влияние несущей фазы на дисперсную. По-видимому, это одна из причин, вследствие которой скорость осаждения дисперсной среды в расчетах оказывается выше, чем в эксперименте.

**5. Высокопроизводительные вычисления.** Использование трехмерной математической модели приводит к значительному увеличению требований к используемым аппаратным ресурсам. По этой причине расчеты проводились на суперкомпьютере Уфимского государственного авиационного технического университета. Нам было выделено для расчетов четыре двухsocketных вычислительных узла с четырехъядерными процессорами Intel Quad Xeon 5300 и 8 ГБ оперативной памяти на один вычислительный узел. Среда передачи данных — Infiniband.

В результате распараллеливания программного кода с использованием технологии MPI было получено ускорение, близкое к линейному, как это видно из рис. 7. Столь высокое ускорение обусловлено достаточно удобной явной численной схемой модели, позволяющей значительно минимизировать обмен

теньевыми гранями для больших расчетных областей.

Наблюдаемые отклонения от линейного ускорения можно объяснить двумя причинами. Некоторое “излишнее” ускорение при использовании четырех процессов определяется архитектурными особенностями вычислительной системы и тем, что программа в этом случае обрабатывается в пределах одного вычислительного узла. Наблюдаемое постепенное уменьшение ускорения при использовании большого количества процессов можно объяснить ростом отношения объема пересылок к количеству операций, выполняемых в рамках одного процесса.

**6. Заключение.** В представленной работе показано, что известный из экспериментальных работ процесс осаждения дисперсной фазы под воздействием волн давления может быть описан в рамках модели конкуренции силы тяжести и силы межфазного взаимодействия, когда возможна коагуляция частиц дисперсной среды.

Следует особо отметить, что даже в рамках чрезвычайно простой модели оказалось возможным получить достаточно хорошее соответствие с результатами экспериментов.

Дальнейшая работа должна предусматривать развитие модели путем включения в систему уравнений некоторого кинетического соотношения, описывающего процессы коагуляции и диссоциации дисперсных частиц. Кроме того, необходимо учесть, что после коагуляции частицы становятся несферическими, поэтому выражение для сил межфазного взаимодействия не должно основываться только на силе Стокса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Губайдуллин Д.А., Зарипов Р.Г., Галиуллин Р.Г. Экспериментальное исследование коагуляции аэрозоля в трубе вблизи субгармонического резонанса // Теплофизика высоких температур. 2004. **42**, № 5. 788–795.
2. Ткаченко Л.А., Зарипов Р.Г. Особенности нелинейных колебаний аэрозоля в закрытой трубе в безударно-волновом режиме // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. **3**, № 4. 1171–1173.
3. Нигматуллин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. I. М.: Наука, 1987.
4. Фукс Н.А. Механика аэрозолей. М.: Наука, 1995.
5. Михайленко К.И., Везиров Р.Р., Ахатов И.Ш., Урманчиев С.Ф. Численное моделирование течения мелкодисперсного катализатора в канале лифт-реактора // Нефтепереработка и нефтехимия. 1997. № 12. 17–20.
6. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982.

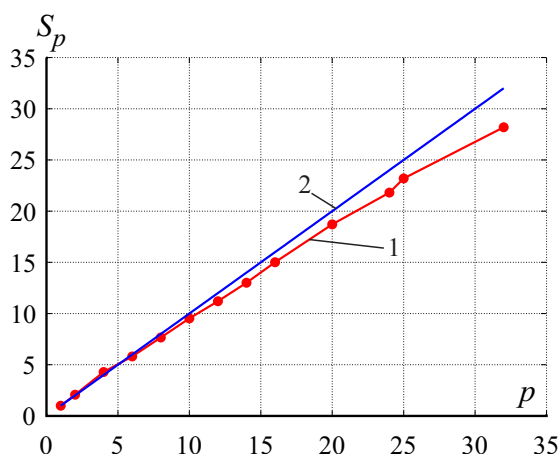


Рис. 7. Зависимость ускорения вычислительного процесса от числа используемых ядер (линия 1); для сравнения приведена линия 2 линейного роста ускорения

Поступила в редакцию  
13.05.2013