



doi 10.26089/NumMet.v25r433

УДК 519.63;
532.529.5

Анализ эффективности регулирования численной диссипации при компьютерном моделировании динамики газа и газовзвесей

Е. Н. Широкова

Военно-космическая академия имени А. Ф. Можайского,
Санкт-Петербург, Российская Федерация
ORCID: 0000-0002-8188-2003, e-mail: shirokhelen-78@mail.ru

Д. В. Садин

Военно-космическая академия имени А. Ф. Можайского,
Санкт-Петербург, Российская Федерация
ORCID: 0000-0001-5335-4847, e-mail: sadin@yandex.ru

Аннотация: Работа посвящена изучению диссипативных свойств гибридного метода крупных частиц второго порядка аппроксимации. Регуляризация численного решения обеспечена двумя способами: нелинейной коррекцией искусственной вязкости (на эйлеровом этапе) и гибридной аппроксимацией пространственных производных за счет использования различных нелинейных ограничительных функций (на лагранжевом этапе). Диссипативные свойства метода продемонстрированы на примере задачи Сода, ее модификации с отражением ударной волны от стенки. Изучено течение газовзвеси при распаде произвольного разрыва с малым начальным отношением давлений при различных числах Стокса. Численные решения сопоставлены с асимптотически точными решениями.

Ключевые слова: компьютерные технологии, гибридный метод крупных частиц, диссипативные свойства.

Для цитирования: Широкова Е.Н., Садин Д.В. Анализ эффективности регулирования численной диссипации при компьютерном моделировании динамики газа и газовзвесей // Вычислительные методы и программирование. 2024. 25, № 4. 441–452. doi 10.26089/NumMet.v25r433.



Analysis of the efficiency of numerical dissipation regulation in computer modeling of gas and gas suspension dynamics

Elena N. Shirokova

Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, Russia
ORCID: 0000-0002-8188-2003, e-mail: shirokhelen-78@mail.ru

Dmitry V. Sadin

Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, Russia
ORCID: 0000-0001-5335-4847, e-mail: sadin@yandex.ru

Abstract: The work is devoted to studying the dissipative properties of the hybrid large-particle method of the second order of approximation. The regularization of the numerical solution is provided in two ways: nonlinear correction of artificial viscosity (at the Eulerian stage) and hybrid approximation of spatial derivatives through various nonlinear restrictive functions (at the Lagrangian stage). The dissipative properties of the method are demonstrated by the example of the Sod problem, its modification with the reflection of the shock wave from the wall. The flow of a gas suspension during the decay of an arbitrary discontinuity with a small initial pressure ratio at various Stokes numbers has been studied. Numerical solutions are compared with asymptotically exact solutions.

Keywords: computer technologies, hybrid large-particle method, dissipative properties.

For citation: E. N. Shirokova and D. V. Sadin, “Analysis of the efficiency of numerical dissipation regulation in computer modeling of gas and gas suspension dynamics,” *Numerical Methods and Programming*, **25** (4), 441–452 (2024). doi 10.26089/NumMet.v25r433.

1. Введение. Дисперсные системы находят широкое применение в химических установках псевдооживления [1], в вихревых устройствах для процессов гетерогенного катализа [2]. Струйные газодисперсные технологии представляют интерес в различных промышленных приложениях, процессах напыления полимеров [3], импульсных газопорошковых системах пожаротушения или нейтрализации загрязнений [4]. Управление параметрами технических устройств и их оптимизация требуют изучения количественных закономерностей с применением как экспериментальных, так и компьютерных методов моделирования.

Широко применяемый подход при решении вычислительных задач динамики многофазных сред заключается в адаптации численных методов, хорошо зарекомендовавших себя в “чистой” газодинамике [5–8]. При этом следует отметить проблемы природной неконсервативности законов сохранения неравновесных многофазных сред [8] и жесткости определенного класса задач [9].

Среди многочисленных подходов весьма плодотворной оказалась идея Харлоу расщепления дискретных аналогов законов сохранения на эйлеров и лагранжевы этапы. Эти идеи в дальнейшем получили развитие в виде метода крупных частиц и его модификаций [9–13], лагранжево-эйлеровой аппроксимации [14], численных схем PIC (particle-in-cell) [15, 16] и SPH (Smoothed particle hydrodynamics) [17–19].

Методы первого порядка аппроксимации с расщеплением по физическим процессам привлекательны ввиду простоты их алгоритмической и компьютерной реализации. Вместе с тем, вследствие значительной численной диссипации применение схем первого порядка становится проблематичным для задач акустики, моделирования неустойчивости и развития турбулентности.

Целью настоящей работы является исследование диссипативных свойств гибридного метода крупных частиц второго порядка аппроксимации [13] на одномерной задаче Сода и ее модификации с отражением ударной волны от стенки. Проверяется работоспособность метода в условиях с малым начальным отношением давлений $(p^{(1)} - p^{(0)})/p^{(0)} \leq 0.1$, где $p^{(1)}$, $p^{(0)}$ — значения давлений слева и справа от произвольного разрыва.

2. Физико-математическая модель. Для описания динамики газовзвеси используем широко применяемый феноменологический подход в рамках взаимопроникающих континуумов [20]. Несущей фазой является калорически совершенный газ, а дисперсная фаза представляет собой несжимаемые сферические



частицы одинакового радиуса. При этом мы пренебрегаем энергией и другими эффектами хаотического и внутреннего движения дисперсных частиц и столкновений между ними. Каждая составляющая смеси обладает собственной скоростью и температурой. Тогда законы сохранения газозвеси в одномерном случае можно записать в следующем виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u_i}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u_1^2}{\partial x} + \alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} = -F_\mu, \\ \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 u_2^2}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} = F_\mu, \\ \frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 u_2}{\partial x} = Q_T, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 E_1 + \rho_2 E_2) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 E_1 u_1 + \rho_2 K_2 u_2 + p(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2)) = -Q_T, \\ \rho_i = \rho_i^\circ \alpha_i, \\ \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \\ E_1 = e_1 + u_1^2/2, \\ K_2 = u_2^2/2. \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь и далее нижние индексы $i = 1, 2$ относятся соответственно к параметрам несущей и дисперсной фаз, верхний индекс \circ относится к истинным значениям плотности. Через $\alpha_i, \rho_i, u_i, E_i, e_i, p$ обозначены объемная доля, приведенная плотность, скорость, полная и внутренняя энергии единицы массы i -й фазы, давление газа; F_μ — сила межфазного трения, Q_T — интенсивность теплообмена между газом и частицами в единице объема; x, t — координата и время.

Замыкающими соотношениями системы (1) являются уравнения состояния идеального калорически совершенного газа и несжимаемых твердых частиц: $p = (\gamma_1 - 1)\rho_1^\circ e_1, e_1 = c_v T_1, e_2 = c_2 T_2, \{\gamma_1, c_v, c_2, \rho_2^\circ\} \equiv \text{const}$, где T_1, T_2 — температуры несущей фазы и частиц; γ_1, c_v — показатель адиабаты и удельная теплоемкость газа при постоянном объеме; c_2 — удельная теплоемкость частиц. Силовое и тепловое межфазные взаимодействия F_μ, Q_T определяются из эмпирических соотношений [20]:

$$\begin{aligned} F_\mu &= \frac{3}{8} \frac{\alpha_2}{r} C_\mu \text{Re}_{12} \rho_1 (u_1 - u_2) |u_1 - u_2|, \quad \alpha_2 < 0.08, \\ C_\mu &= \frac{24}{\text{Re}_{12}} + \frac{4.4}{\text{Re}_{12}^{1/2}} + 0.42, \\ Q_T &= \frac{3}{2} \frac{\alpha_2}{r^2} \lambda_1 \text{Nu}_1 (T_1 - T_2), \\ \text{Nu}_1 &= \begin{cases} 2 + 0.106 \text{Re}_{12} \text{Pr}_1^{1/3}, & \text{Re}_{12} \leq 200, \\ 2.274 + 0.6 \text{Re}_{12}^{2/3} \text{Pr}_1^{1/3}, & \text{Re}_{12} > 200, \end{cases} \\ \text{Re}_{12} &= 2r \rho_1^\circ |u_1 - u_2| / \mu_1, \\ \text{Pr}_1 &= c_v \gamma_1 \mu_1 / \lambda_1, \end{aligned}$$

где $\text{Re}_{12}, \text{Nu}_1, \text{Pr}_1$ — числа Рейнольдса, Нуссельта и Прандтля; $C_\mu, \mu_1, \lambda_1, r$ — коэффициент межфазного трения, динамическая вязкость, коэффициент теплопроводности газа и радиус частицы.

Система уравнений двухскоростного движения бесстолкновительной газозвеси (1) не является гиперболической. Вместе с тем, как показано в работе [20], для широкого класса задач эта система правильно отражает физику процесса и постановка задачи Коши “условно корректна”.

Релаксационные свойства течений газозвеси можно оценить числом Стокса

$$\text{Stk} = \frac{1}{72} \frac{\rho_2^\circ r^2 u_1}{\mu_1 (1 - \alpha_2) L},$$

где u_1, α_2 — скорость газа и объемная доля частиц в заданном сечении с характерным линейным масштабом задачи L .

В предельном случае $Stk \rightarrow 0$ имеем равновесную модель газозвеси гиперболического типа:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \zeta_2}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta_2}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho u e}{\partial x} + \frac{\partial p u}{\partial x} = 0. \end{array} \right. \quad (2)$$

Здесь приняты обозначения для смеси в целом: плотности $\rho = \rho_1 + \rho_2$, массовой концентрации фаз $\zeta_i = \rho_i/\rho$, скорости $u = u_1 = u_2$, внутренней энергии единицы массы $e = \zeta_1 e_1 + \zeta_2 e_2$.

Из теории квазилинейных гиперболических уравнений [21] следует, что в некоторой полосе $0 \leq t \leq t_0$ задача Коши для системы (2) является корректно поставленной. Асимптотически ($Stk \rightarrow 0$) точные решения задач распада разрыва с описанием тип волн, условий на разрывах приведены в [22] и будут использованы ниже для сопоставлений с численными решениями.

3. Численная модель. В настоящей работе используется вариант CDP2-CC (Controlled Dissipative Properties Centered-Centered) гибридного метода крупных частиц [13]. Для компактного представления алгоритма запишем систему (1) в операторном виде с расщеплением по физическим процессам на потоковые \mathbf{G} и градиентно-деформационные величины \mathbf{F} :

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x} + \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{H}(\mathbf{q}),$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= [\rho_1, \rho_2, \rho_1 u_1, \rho_2 u_2, \rho_2 e_2, \rho_1 E_1 + \rho_2 K_2]^T, \\ \mathbf{G} &= [\rho_1 u_1, \rho_2 u_2, \rho_1 u_1^2, \rho_2 u_2^2, \rho_2 e_2 u_2, \rho_1 E_1 u_1 + \rho_2 K_2 u_2]^T, \\ \mathbf{F} &= [0, 0, p, p, 0, p(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2)]^T, \\ \mathbf{H} &= [0, 0, -F_\mu, F_\mu, Q_T, -Q_T]^T, \\ \mathbf{B} &= \text{diag}[1, 1, \alpha_1, \alpha_2, 1, 1]. \end{aligned}$$

Для перехода с временного слоя k на $k+1$ используется двухшаговый численный алгоритм предиктор-корректор с расщеплением на каждом шаге на эйлеров и лагранжев этапы.

Шаг “предиктор”:

эйлеров этап

$$\mathbf{q}_n^{(0)} - \mathbf{H}(\mathbf{q}_n^{(0)}) \tau = \mathbf{q}_n^k - \mathbf{B}_n^k (\mathbf{F}_{n+1/2}^k - \mathbf{F}_{n-1/2}^k) \tau/h, \quad (3.1)$$

лагранжев этап

$$\mathbf{q}_n^{(1)} = \mathbf{q}_n^{(0)} - (\mathbf{G}_{n+1/2}^{(0)} - \mathbf{G}_{n-1/2}^{(0)}) \tau/h. \quad (3.2)$$

Шаг “корректор”:

эйлеров этап

$$\mathbf{q}_n^{(2)} - \mathbf{H}(\mathbf{q}_n^{(2)}) \tau = 0.5 (\mathbf{q}_n^k + \mathbf{q}_n^{(1)}) - 0.5 (\mathbf{F}_{n+1/2}^{(1)} - \mathbf{F}_{n-1/2}^{(1)}) \tau/h, \quad (4.1)$$

лагранжев этап

$$\mathbf{q}_n^{k+1} = \mathbf{q}_n^{(2)} - 0.5 (\mathbf{G}_{n+1/2}^{(2)} - \mathbf{G}_{n-1/2}^{(2)}) \tau/h. \quad (4.2)$$

Здесь h — размер ячейки с центром x_n и гранями $x_{n\pm 1/2} = x_n \pm h/2$, t^k — временной слой, $\tau = t^{k+1} - t^k$ — шаг по времени.

Гибридный метод крупных частиц обладает высокой устойчивостью при решении жестких задач за счет неявного учета источников (межфазных взаимодействий) в соотношениях (3.1), (3.2) и (4.1), (4.2). Метод обеспечивает двухшаговую регуляризацию численного решения с нелинейной коррекцией численной вязкости на эйлеровом этапе и потоков на лагранжевом этапе [13].



Для нелинейной коррекции используем следующие ограничительные функции наклонов r и параметра $c = u\tau/h$:

$$\begin{aligned} \text{UpWind (UW):} & \quad \psi_{\text{UW}}(r) = 0, \\ \text{Minmod (MM):} & \quad \psi_{\text{MM}}(r) = \max[\min(r, 1), 0], \\ \text{SuperB (SB):} & \quad \psi_{\text{SB}}(r) = \max[\min(2r, 1), \min(r, 2), 0], \\ \text{SuperC (SC):} & \quad \psi_{\text{SC}}(r, c) = \begin{cases} \min(2r/|c|, 1), & 0 \leq r \leq 1, \\ \min(r, 2/(1 - |c|)), & r > 1, \\ 0, & r < 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Для удобства далее использовалось обозначение варианта схемы гибридного метода крупных частиц CDP2 (LIM_f, LIM_v), где LIM_f, LIM_v — ограничительные функции потоков и численной вязкости соответственно. Все схемы с приведенными выше ограничительными функциями обеспечивают второй суммарный порядок аппроксимации по пространству и времени $O(h^2 + \tau^2)$ на гладких решениях. Исключением является противопоточная схема (UW), имеющая первый порядок. Расчеты выполнялись на пространственных равномерных сетках с числом Куранта CFL = 0.4.

4. Компьютерная реализация. Компьютерная реализация выполнена в свободной (лицензия GPL/LGPL) кроссплатформенной интегрированной среде разработки Lazarus 2.2.6 на языке Object Pascal с компилятором FPC 3.2.2. Численный метод реализован в виде параллельных (многопоточных) вычислений с общей памятью.

Программа предоставляет пользователю следующие возможности:

- 1) задавать или считывать из файла физические свойства, сеточные и схемные данные;
- 2) задавать или загружать из файла начальные и граничные условия;
- 3) выполнять параллельные вычисления в нескольких потоках;
- 4) выполнять графическое отображение текущих результатов и записывать их на диск в заданные моменты времени;
- 5) устанавливать условие завершения программы по циклам или по времени.

Компьютерное приложение имеет развитый пользовательский интерфейс, позволяющий комфортно проводить серийные расчеты. Программа носит достаточно универсальный характер и позволяет выполнять высокопроизводительные расчеты динамики газа и неравновесной двухфазной среды в одно- и двумерной плоской постановке, а также с цилиндрической и сферической симметрией.

5. Анализ диссипативных свойств численной модели. Существуют два подхода к анализу спектрального поведения численных схем: использование аналитических инструментов, например разложения Фурье, или расчетный метод путем выявления на тестовых задачах численных диссипативных ошибок сглаживания разрывов и дисперсионных искажений решения в виде осцилляций. Для нелинейной схемы невозможно получить точную аналитическую формулу спектральных соотношений [23]. В этом случае используют линейные аналоги, замораживание нелинейных коэффициентов уравнений и другие способы. Однако, как отмечается в [24], нелинейные особенности схем могут сильно отличаться от линейных прогнозов.

В нашей работе диссипативные свойства гибридного метода крупных частиц изучаются непосредственно с применением расчетного подхода на примере ряда задач волновой динамики газа и газовзвесей. Компьютерное моделирование “чистой” газодинамики выполнялось в рамках двухскоростной модели (1) при задании пренебрежимо малой концентрации частиц $\alpha_2 = 10^{-10}$.

Рассмотрим классическую задачу Сода, имеющую точное решение. Начальные условия заданы в виде безразмерных величин давления p , плотности ρ и проекции скорости u на ось x :

$$(p, \rho, u)^T = \begin{cases} (1, 1, 0)^T, & 0 \leq x < 0.5, \\ (0.1, 0.125, 0)^T, & 0.5 \leq x \leq 1. \end{cases}$$

На левой и правой границах заданы мягкие краевые условия. Задача решалась до момента времени 0.25 на пространственной сетке с шагом 1/100.

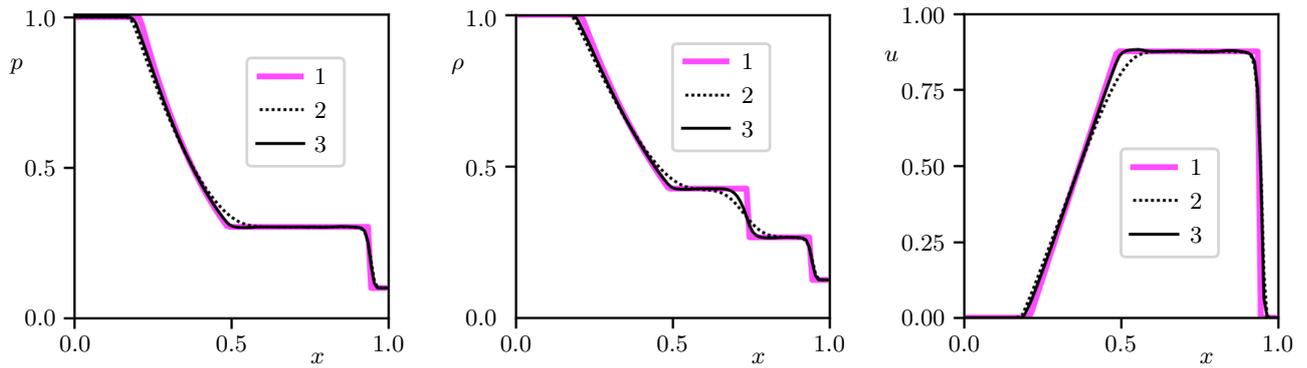


Рис. 1. Задача Сода. На рисунке обозначены: 1 — точное решение; 2 — численное решение CDP2 (UW, SB); 3 — численное решение CDP2 (MM, SB)

Fig. 1. Sod problem. The figure shows: 1 — exact solution; 2 — numerical solution CDP2 (UW, SB); 3 — numerical solution CDP2 (MM, SB)

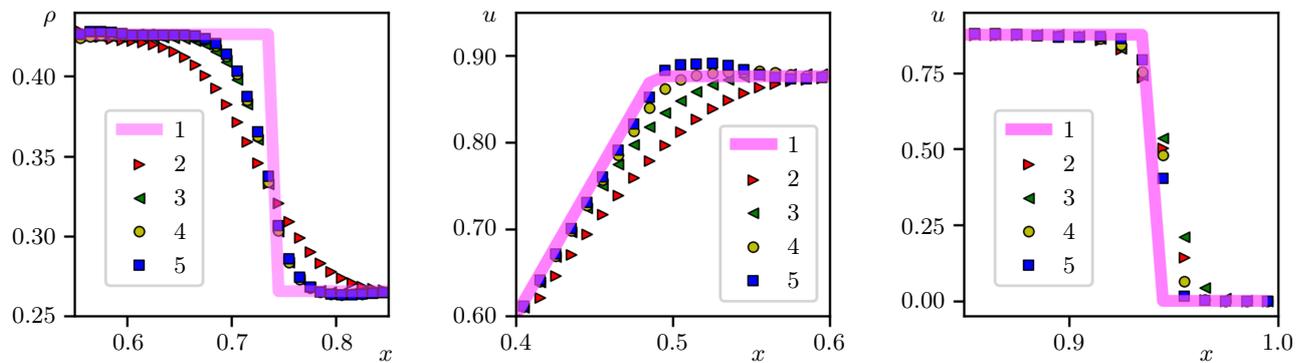


Рис. 2. Задача Сода (увеличенные фрагменты). На рисунке обозначены: 1 — точное решение; 2 — численное решение CDP2 (UW, SB); 3 — CDP2 (MM, MM); 4 — CDP2 (MM, SB); 5 — CDP2 (MM, SC)

Fig. 2. Sod problem (locally zoomed region). The figure shows: 1 — exact solution; 2 — numerical solution CDP2 (UW, SB); 3 — CDP2 (MM, MM); 4 — CDP2 (MM, SB); 5 — CDP2 (MM, SC)

На рис. 1 представлены численные решения задачи Сода: схема CDP2 (MM, SB) второго порядка $O(h^2 + \tau^2)$ — тонкой сплошной кривой, а также CDP2 (UW, SB) с первым порядком по пространству и вторым по времени $O(h + \tau^2)$ — пунктиром. Точное решение показано жирной сплошной линией.

В решении присутствуют два сильных разрыва (ударная волна и контактный разрыв) и два слабых разрыва (фронт волны разрежения и ее сопряжение с зоной постоянного течения). Как видно из рис. 1, схема первого порядка CDP2 (UW, SB) существенно сглаживает слабые разрывы в решении (10–20 ячеек). Известные схемы первого порядка, например Годунова, Рое [25] и различные модификации метода крупных частиц [12], также обладают значительной численной диссипацией.

Исследуем влияние нелинейной коррекции гибридного метода крупных частиц на его диссипативные свойства. На рис. 2 приведены сеточные решения при использовании различных ограничителей вязкости: UW, MM, SB, SC и неизменного лимитера потоков MM. Степени сглаживания (в ячейках) особенностей решения для указанных вариантов нелинейной коррекции схемы CDP2 сведены в табл. 1.

По критерию степени сглаживания разрывов гибридный метод крупных частиц с ограничителем вязкости SC превосходит методы первого порядка [12, 25] в зонах ударной волны и контактной границы в 2–3 раза и на порядок при разрешении слабого разрыва (сопряжения волны разрежения и области постоянного течения). А в сравнении с современными численными схемами высокой разрешающей способности, например [8, 23], тестируемый метод сопоставим по степени сглаживания разрывов, вместе с тем обладая меньшей вычислительной трудоемкостью и семантической сложностью.



Таблица 1. Степень сглаживания разрывов решения с различными ограничителями вязкости

Table 1. Degree of smoothing of solution discontinuities with different viscosity limiters

Особенности решения Features of the solution	UW $O(h)$	MM $O(h^2)$	SB $O(h^2)$	SC $O(h^2)$
ударная волна shock wave	3–4	2–3	2–3	1–2
слабый разрыв weak gap	10–12	4–5	1–2	0.5–1
контактный разрыв contact gap	20–24	8–9	8–9	8–9

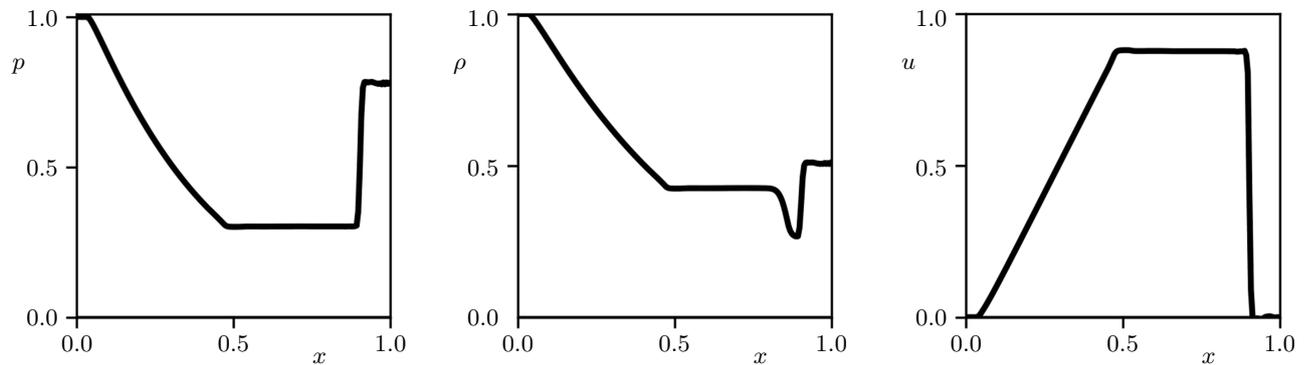


Рис. 3. Задача Сода с отражением от стенки. Численное решение CDP2 (MM, SB)

Fig. 3. Sod problem with wall reflection. Numerical solution CDP2 (MM, SB)

Модифицируем задачу Сода, изменив правые граничные условия на условия непротекания (стенка). Увеличим время решения задачи до 0.38, чтобы ударная волна после распада начального разрыва отразилась от стенки.

Для базового и некоторых модификаций метода крупных частиц в работе [12] отмечены заметные дисперсионные ошибки (осцилляции) расчетной ударной волны после взаимодействия с непроницаемой границей. Предложенная авторами [12] модификация метода подавляет осцилляции за счет повышения схемной диссипации — ширина сглаживания фронта отраженной ударной волны увеличивается до 5–6 ячеек. Численные профили относительных газодинамических параметров, полученные по схеме CDP2 (MM, SB) на сетке с шагом 1/200, представлены на рис. 3. Возникающие начальные колебания газодинамических параметров после взаимодействия падающей ударной волны со стенкой практически полностью затухают через несколько шагов по времени. Ширина сеточного фронта отраженной ударной волны составляет 2–3 ячейки.

Решение следующей задачи направлено на проверку работоспособности гибридного метода крупных частиц для случаев распада произвольного разрыва в газе или газозвеси с малым начальным отношением давлений $(p^{(1)} - p^{(0)}) / p^{(0)} = 0.1$ (здесь и далее верхними индексами 1 и 0 помечены начальные термодинамические параметры слева и справа от разрыва).

В начальный момент времени заданы следующие параметры газа и частиц из работы [26]: $p^{(1)} = 0.11$; $p^{(0)} = 0.1$ МПа; $\rho_1^{o(1)} = 1.404$; $\rho_1^{o(0)} = 1.276$ кг/м³; $u_i^{(1)} = u_i^{(0)} = 0$; $\gamma_1 = 1.4$ (воздух); $\alpha_2^{(1)} = \alpha_2^{(0)} = 0.0005$ в случае газозвеси или 10^{-10} — чистого газа; $\rho_2^o = 2500$ кг/м³. Диаметр дисперсных частиц варьировался и приведен ниже. Размер расчетной области: $0 < x < L$, $L = 10$ м. Слева и справа поставлены граничные условия свободного стока. Расчеты выполнены на равномерной пространственной сетке, содержащей 500 ячеек.

В работе [26] приведены данные расчетов динамики идеального газа и равновесной газозвеси, полученные методом Мак-Кормака с нелинейной коррекцией Музафарова–Утюжниковой, в сопоставлении с аналитическими решениями. Расхождение 25% автор объясняет диссипацией численного решения.

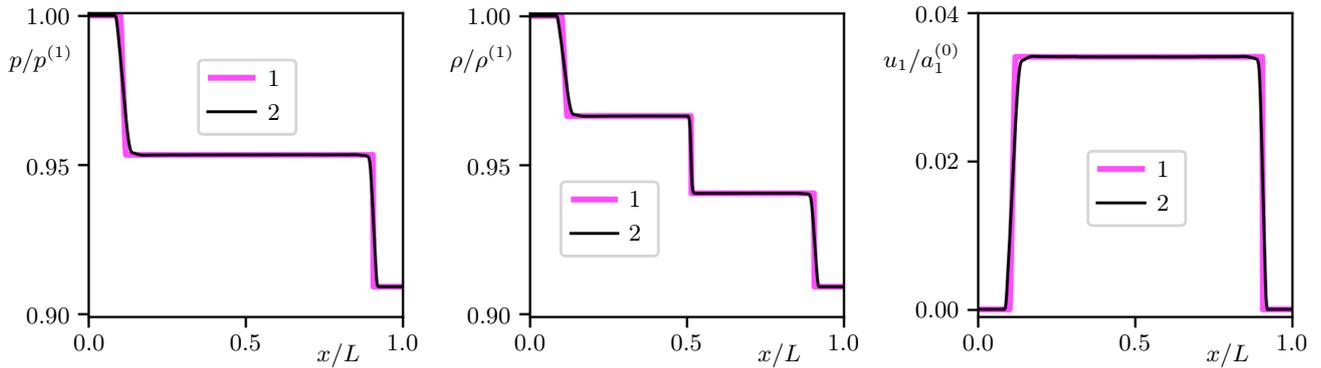


Рис. 4. Задача распада разрыва в газе с малым начальным отношением давлений. На рисунке обозначены: 1 — точное решение; 2 — численное решение CDP2 (MM, SB)

Fig. 4. Riemann problem in a gas with a small initial pressure ratio. The figure shows: 1 — exact solution; 2 — numerical solution CDP2 (MM, SB)

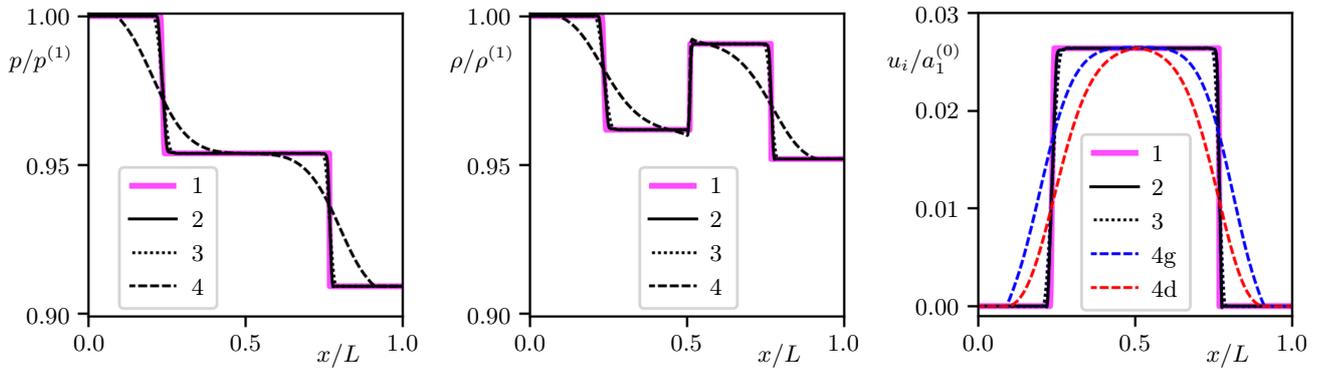


Рис. 5. Задача распада разрыва в газозвеси с малым начальным отношением давлений. На рисунке обозначены: 1 — точное решение; 2, 3, 4 — численные решения CDP2 (MM, SB) для $d = 0.1, 2, 20$ мкм соответственно; 4g — скорость газа; 4d — скорость частиц

Fig. 5. Riemann problem in a gas suspension with a small initial pressure ratio. The figure shows: 1 — exact solution; 2, 3, 4 — numerical solutions CDP2 (MM, SB) for $d = 0.1, 2, 20 \mu\text{m}$ accordingly; 4g — gas velocity; 4d — particles velocity

Решение поставленной задачи гибридным методом крупных частиц для случая чистого газа ($\alpha_2^{(1)} = \alpha_2^{(0)} = 10^{-10}$) представлены на рис. 4. Численное решение хорошо воспроизводит точное. Относительная ошибка скорости газа в зоне постоянного течения ($x/L = 0.5$) составляет 0.0138%.

Расчеты распада начального разрыва в газозвеси ($\alpha_2^{(1)} = \alpha_2^{(0)} = 0.0005$) в неравновесной формулировке (1) выполнены для следующих размеров частиц: $d = 0.1; 2; 20$ мкм, соответствующих числам Стокса по параметрам в сечении $x/L = 0.5$: $\text{Stk} = 2.7 \cdot 10^{-7}; 1.1 \cdot 10^{-4}; 1.1 \cdot 10^{-2}$. Результаты показаны на рис. 5. Аналитические решения получены по асимптотически ($\text{Stk} \rightarrow 0$) точным соотношениям [22].

Для малых чисел Стокса ($\text{Stk} < 10^{-4}$) течение газозвеси почти равновесное: расчетные профили параметров (рис. 5, кривые 2 и 3) графически совпадают с точными (рис. 5, кривые 1). Относительная ошибка скорости дисперсной фазы с размером частиц $d = 2$ мкм в зоне постоянного течения ($x/L = 0.5$) составляет 0.0025%.

При увеличении размеров частиц эффекты неравновесности (различие термодинамических параметров и скоростей фаз) и, как следствие, пространственные зоны релаксаций фаз становятся существенными (рис. 5, кривые 4, 4g, 4d). При этом профили параметров на границах зоны релаксации приближаются к равновесным. Так, отличие расчетной скорости частиц диаметром $d = 20$ мкм ($\text{Stk} = 1.1 \cdot 10^{-2}$) в точке $x/L = 0.5$ от асимптотического значения составляет 0.372%.



Из рис. 5 видно, что скорость распространения возмущений в газозвеси в области волны разрежения и сжатия существенно зависит от числа Стокса. В равновесном течении ($Stk < 10^{-4}$) наблюдается наименьшая скорость распространения возмущений (рис. 5, кривые 2), которая увеличивается с ростом Stk (рис. 5, кривые 4).

6. Заключение. Выполнен анализ диссипативных свойств предложенного ранее варианта гибридного метода крупных частиц второго порядка аппроксимации по пространству и времени для задач динамики газа и газозвеси. Спектральное поведение метода изучено численно на примерах тестовых задач: задачи Сода и ее модификации с отражением ударной волны от стенки, а также задачи распада разрыва в среде с малым начальным отношением давлений.

Продемонстрированы малая численная диссипативность схемы, которая сопоставима с современными численными методами высокой разрешающей способности. При этом метод обладает меньшей вычислительной трудоемкостью и меньшей семантической сложностью.

Численно установлено, что скорость распространения возмущений в газозвеси существенно зависит от числа Стокса. В равновесном течении наблюдается наименьшая скорость распространения возмущений, которая увеличивается с ростом числа Стокса.

Кратко описана программная реализация параллельных (многопоточных) вычислений, которая позволяет выполнять производительные расчеты с целью управления и оптимизации параметров протекающих процессов в технических приложениях.

Список литературы

1. *Da Calva Mouillevois T., Audren-Paul M., Chollon G., Bertrand N.* Fluidization of variable short fiber/powder mixtures: hydrodynamic investigation // *Chemical Engineering Journal*. 2023. **471**. Article Number 144846. doi 10.1016/j.cej.2023.144846.
2. *Wéry F., Vandewalle L.A., Marin G.B., et al.* Hydrodynamic CFD-DEM model validation in a gas–solid vortex unit // *Chemical Engineering Journal*. 2023. **455**. Article Number 140529. doi 10.1016/j.cej.2022.140529.
3. *Губайдуллин Д.А., Федяев В.Л., Моренко И.В.* Математическое моделирование неизотермических процессов струйного напыления полимерных порошковых композиций и формирования защитных покрытий // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2016. **17**, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-4/articles/656/>. Cited October 27, 2024.
4. *Shirokova E.N.* Numerical study of a pulsed jet flow of an inhomogeneous gas-dispersed mixture // *Fluid Dynamics*. 2023. **58**, N 8. 1594–1601. doi 10.1134/S0015462823602590.
5. *Tokareva S.A., Toro E.F.* HLLC-type Riemann solver for the Baer–Nunziato equations of compressible two-phase flow // *J. Comput. Phys.* 2010. **229**, N 10. 3573–3604. doi 10.1016/j.jcp.2010.01.016.
6. *Губайдуллин Д.А., Тукмаков Д.А.* Численное исследование эволюции ударной волны в газозвеси с учетом неравномерного распределения частиц // *Матем. моделирование*. 2014. **26**, № 10. 109–119.
7. *Kummer F.* Extended discontinuous Galerkin methods for two-phase flows: the spatial discretization // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2016. **109**, N 2. 259–289. doi 10.1002/nme.5288.
8. *Balsara D.S., Bhowmik D., Shu C.-W., et al.* Efficient finite difference WENO scheme for hyperbolic systems with non-conservative products // *Commun. Appl. Math. Comput.* 2024. **6**, N 2. 907–962. doi 10.1007/s42967-023-00275-9.
9. *Садин Д.В.* TVD-схема для жестких задач волновой динамики гетерогенных сред негиперболического неконсервативного типа // *Ж. вычисл. матем. матем. физики*. 2016. **56**, № 12. 2098–2109. doi 10.7868/S0044466916120152.
10. *Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М.* Нестационарный метод “крупных частиц” для газодинамических расчетов // *Ж. вычисл. матем. матем. физики*. 1971. **11**, № 1. 182–207.
11. *Губайдуллин А.А., Ивандяев А.И., Нигматуллин Р.И.* Модифицированный метод “крупных частиц” для расчета нестационарных волновых процессов в многофазных средах // *Ж. вычисл. матем. матем. физики*. 1977. **17**, № 6. 1531–1544.
12. *Ковалев Ю.М., Кузнецов П.А.* Модификация метода крупных частиц для решения задач распространения ударных волн и волн разрежения // *Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование*. 2019. **12**, № 2. 58–66. doi 10.14529/mmmp190205.
13. *Садин Д.В.* Эффективная реализация гибридного метода крупных частиц // *Матем. моделирование*. 2022. **34**, № 4. 113–127. doi 10.20948/mm-2022-04-08.

14. Шестаковская Е.С., Стариков Я.Е., Макеева И.Р. Об одном лагранжево-эйлеровом методе расчета нестационарных течений сжимаемых сред // Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование. 2023. 16, № 2. 78–90. doi 10.14529/mmp230208.
15. Григорьев Ю.Н., Вишнев В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004.
16. Чижонков Е.В. О погрешностях в PIC-методе при моделировании ленгмюровских колебаний // Вычислительные методы и программирование. 2024. 25, № 1. 47–63. doi 10.26089/NumMet.v25r105.
17. Храпов С.С., Хоперсков А.В., Кузьмин Н.М. и др. Численная схема для моделирования динамики поверхностных вод на основе комбинированного SPH-TVD подхода // Вычислительные методы и программирование. 2011. 12, № 2. 282–297.
18. Stoyanovskaya O., Davydov M., Arendarenko M., et al. Fast method to simulate dynamics of two-phase medium with intense interaction between phases by smoothed particle hydrodynamics: gas–dust mixture with polydisperse particles, linear drag, one-dimensional tests // J. Comput. Phys. 2021. 430. Article Number 110035. doi 10.1016/j.jcp.2020.110035.
19. Zhang C., Zhu Y.-J., Wu D., et al. Smoothed particle hydrodynamics: methodology development and recent achievement // J. Hydrodyn. 2022. 34, N 5. 767–805. doi 10.1007/s42241-022-0052-1.
20. Нигматуллин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука, 1987.
21. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. М.: Наука, 1978.
22. Садин Д.В. Тестовые задачи динамики газовзвесей с использованием асимптотически точных решений // Матем. моделирование. 2022. 34, № 12. 59–74. doi 10.20948/mm-2022-12-04.
23. Liu X., Zhang S., Zhang H., Shu C.-W. A new class of central compact schemes with spectral-like resolution II: hybrid weighted nonlinear schemes // J. Comput. Phys. 2015. 284. 133–154. doi 10.1016/j.jcp.2014.12.027.
24. Pirozzoli S. Numerical methods for high-speed flows // Annual Review of Fluid Mechanics. 2011. 43. 163–194. doi 10.1146/annurev-fluid-122109-160718.
25. Toro E.F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Berlin: Springer 2009.
26. Тукмаков Д.А. Сопоставление компьютерных реализаций равновесной и континуальной методик моделирования многофазных сред на примере одномерного нестационарного течения газовзвеси // Вестн. ЮУрГУ. Серия компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. 2023. 23, № 3. 59–75. doi 10.14529/ctcr230306.

Поступила в редакцию
20 августа 2024 г.

Принята к публикации
24 октября 2024 г.

Информация об авторах

Елена Николаевна Широкова — к.х.н., преподаватель; Военно-космическая академия имени А. Ф. Можайского, ул. Ждановская, д. 13, 197198, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

Дмитрий Викторович Садин — д.т.н., профессор; Военно-космическая академия имени А. Ф. Можайского, ул. Ждановская, д. 13, 197198, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

References

1. T. Da Calva Mouillevois, M. Audren-Paul, G. Chollon, and N. Bertrand, “Fluidization of Variable Short Fiber/Powder Mixtures: Hydrodynamic Investigation,” Chem. Eng. J. 471, Article Number 144846 (2023). doi 10.1016/j.cej.2023.144846.
2. F. Wéry, L. A. Vandewalle, G. B. Marin, et al., “Hydrodynamic CFD-DEM Model Validation in a Gas–Solid Vortex Unit,” Chem. Eng. J. 455, Article Number 140529 (2023). doi 10.1016/j.cej.2022.140529.
3. D. Gubaidullin, V. L. Fedyaev, and I. Morenko, “Mathematical Modeling of Non-Isothermal Process of the Jet Spraying of Powder Polymeric Compositions and the Formation of Protective Coatings,” Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics. 17 (4) (2016). <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-4/articles/656/>. Cited October 27, 2024.



4. E. N. Shirokova, “Numerical Study of a Pulsed Jet Flow of an Inhomogeneous Gas-Dispersed Mixture,” *Fluid Dyn.* **58** (8), 1594–1601 (2023). doi [10.1134/S0015462823602590](https://doi.org/10.1134/S0015462823602590).
5. S. A. Tokareva and E. F. Toro, “HLLC-Type Riemann Solver for the Baer–Nunziato Equations of Compressible Two-Phase Flow,” *J. Comput. Phys.* **229** (10), 3573–3604 (2010). doi [10.1016/j.jcp.2010.01.016](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.01.016).
6. D. A. Gubaidullin and D. A. Tukmakov, “Numerical Investigation of the Evolution of a Shock Wave in a Gas Suspension with Consideration for the Nonuniform Distribution of the Particles,” *Mat. Model.* **26** (10), 109–119 (2014) [*Math. Models Comput. Simul.* **7** (3), 246–253 (2015)]. doi [10.1134/S2070048215030072](https://doi.org/10.1134/S2070048215030072).
7. F. Kummer, “Extended Discontinuous Galerkin Methods for Two-Phase Flows: The Spatial Discretization,” *Int. J. Numer. Methods Eng.* **109** (2), 259–289 (2016). doi [10.1002/nme.5288](https://doi.org/10.1002/nme.5288).
8. D. S. Balsara, D. Bhoriya, C.-W. Shu, et al., “Efficient Finite Difference WENO Scheme for Hyperbolic Systems with Non-conservative Products,” *Commun. Appl. Math. Comput.* **6** (2), 907–962 (2024). doi [10.1007/s42967-023-00275-9](https://doi.org/10.1007/s42967-023-00275-9).
9. D. V. Sadin, “TVD Scheme for Stiff Problems of Wave Dynamics of Heterogeneous Media of Nonhyperbolic Non-conservative Type,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **56** (12), 2098–2109 (2016) [*Comput. Math. Math. Phys.* **56** (12), 2068–2078 (2016)]. doi [10.1134/S0965542516120137](https://doi.org/10.1134/S0965542516120137).
10. O. M. Belotserkovskii and Yu. M. Davydov, “A Non-Stationary “Coarse Particle” Method for Gas-Dynamical Computations,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **11** (1), 182–207 (1971) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **11** (1), 241–271 (1971)]. doi [10.1016/0041-5553\(71\)90112-1](https://doi.org/10.1016/0041-5553(71)90112-1).
11. A. A. Gubaidullin, A. I. Ivandaev, and R. I. Nigmatulin, “A Modified “Coarse Particle” Method for Calculating Non-Stationary Wave Processes in Multiphase Dispersive Media,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **17** (6), 1531–1544 (1977) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **17** (6), 180–192 (1977)]. doi [10.1016/0041-5553\(77\)90183-5](https://doi.org/10.1016/0041-5553(77)90183-5).
12. Yu. M. Kovalev and P. A. Kuznetsov, “Modification of the Large-Particle Method to Solve Shock Waves and Rarefaction Waves Propagation,” *Vestn. Yuzhn. Ural. Gos. Univ. Ser. Mat. Model. Programm.* **12** (2), 58–66 (2019). doi [10.14529/mmp190205](https://doi.org/10.14529/mmp190205).
13. D. V. Sadin, “Efficient Implementation of the Hybrid Large Particle Method,” *Mat. Model.* **34** (4), 113–127 (2022) [*Math. Models Comput. Simul.* **14** (6), 946–954 (2022)]. doi [10.1134/S207004822206014X](https://doi.org/10.1134/S207004822206014X).
14. E. S. Shestakovskaya, Ya. E. Starikov, and I. R. Makeeva, “On a Lagrangian–Eulerian Method Calculation of Unsteady Flows Compressible Media,” *Vestn. Yuzhn. Ural. Gos. Univ. Ser. Mat. Model. Programm.* **16** (2), 78–90 (2023). doi [10.14529/mmp230208](https://doi.org/10.14529/mmp230208).
15. Yu. N. Grigor’ev, V. A. Vshivkov, and M. P. Fedoruk, *Numerical Simulation by Particle-in-Cell Methods* (Ross. Akad. Nauk, Novosibirsk, 2004) [in Russian].
16. E. V. Chizhonkov, “On Errors in the PIC-Method when Modeling Langmuir Oscillations,” *Numerical Methods and Programming.* **25** (1), 47–63 (2024). doi [10.26089/NumMet.v25r105](https://doi.org/10.26089/NumMet.v25r105).
17. S. S. Khrapov, A. V. Khoperskov, N. M. Kuz’min, et al., “A Numerical Scheme for Simulating the Dynamics of Surface Water on the Basis of the Combined SPH–TVD Approach,” *Numerical Methods and Programming* **12** (2), 282–297 (2011).
18. O. Stoyanovskaya, M. Davydov, M. Arendarenko, et al., “Fast Method to Simulate Dynamics of Two-Phase Medium with Intense Interaction between Phases by Smoothed Particle Hydrodynamics: Gas–Dust Mixture with Polydisperse Particles, Linear Drag, One-Dimensional Tests,” *J. Comput. Phys.* **430**, Article Number 110035 (2021). doi [10.1016/j.jcp.2020.110035](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.110035).
19. C. Zhang, Y.-J. Zhu, D. Wu, et al., “Smoothed Particle Hydrodynamics: Methodology Development and Recent Achievement,” *J. Hydrodyn.* **34** (5), 767–805 (2022). doi [10.1007/s42241-022-0052-1](https://doi.org/10.1007/s42241-022-0052-1).
20. R. I. Nigmatulin, *Dynamics of Multiphase Media. Part 1* (Nauka, Moscow, 1987; Hemisphere, New York, 1990).
21. B. L. Rozhdestvenskii and N. N. Yanenko, *Systems of Quasilinear Equations and Their Applications to Gas Dynamics* (Nauka, Moscow, 1978; Amer. Math. Society, Providence, 1983).
22. D. V. Sadin, “Test Problems of Gas Suspension Dynamics Using Asymptotically Exact Solutions,” *Mat. Model.* **34** (12), 59–74 (2022) [*Math. Models Comput. Simul.* **15** (3), 564–573 (2023)]. doi [10.1134/S2070048223030158](https://doi.org/10.1134/S2070048223030158).
23. X. Liu, S. Zhang, H. Zhang, and C.-W. Shu, “A New Class of Central Compact Schemes with Spectral-Like Resolution II: Hybrid Weighted Nonlinear Schemes,” *J. Comput. Phys.* **284**, 133–154 (2015). doi [10.1016/j.jcp.2014.12.027](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.12.027).
24. S. Pirozzoli, “Numerical Methods for High-Speed Flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **43**, 163–194 (2011). doi [10.1146/annurev-fluid-122109-160718](https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122109-160718).



25. E. F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics* (Springer, Berlin, 2009).
26. D. A. Tukmakov, “Comparison of Computer Implementations of the Equilibrium and Continuous Modeling Techniques for Multiphase Media on the Example of a One-Dimensional Unsteady Flow of a Gas Suspension,” *Vestn. Yuzhn. Ural Gos. Univ. Ser. Comput. Tekhnol., Automatic Control, Radio Electronics*. **23** (3), 59–75 (2023). doi [10.14529/ctcr230306](https://doi.org/10.14529/ctcr230306).

Received
August 20, 2024

Accepted for publication
October 24, 2024

Information about the authors

Elena N. Shirokova — Ph.D., Lecturer; Mozhaisky Military Aerospace Academy, Zhdanovskaya ulitsa, 13, 197198, Saint Petersburg, Russia.

Dmitry V. Sadin — Dr. Sci., Full Professor; Mozhaisky Military Aerospace Academy, Zhdanovskaya ulitsa, 13, 197198, Saint Petersburg, Russia.