

Моделирование динамики полидисперсных сред с эффективным методом расчета межфазного трения

Давыдов М. Н.

Отчет о использовании кластера НГУ (2022)

Аннотация

Работа посвящена моделированию динамики газовой среды с пылевыми частицами различных фракций. Построена трехмерная численная реализация и проведены тестовые расчеты для верификации метода расчета трения. В качестве тестовой задачи рассмотрен сферически симметричный разлет в вакуум газопылевого шара, содержащего пыль с малым характерным временем релаксации скоростей. Полученные результаты соответствуют ранее полученным и верифицированным результатам для одномерного случая. В качестве численного метода используется метод гидродинамических сглаженных частиц SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) с модификацией IDIC (Drag In Cell). Программа для расчетов на C++ и CUDA написана самостоятельно, реализован параллельный расчет с использованием графических ускорителей.

Состав коллектива.

Давыдов Максим Николаевич, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института гидродинамики СО РАН (лаборатория механики многофазных сред и кумуляции) и старший преподаватель НГУ (ММФ, кафедра теоретической механики).

Стояновская Ольга Петровна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института гидродинамики СО РАН (лаборатория прикладной и вычислительной гидродинамики).

Савватеева Татьяна Александровна, младший научный сотрудник Института гидродинамики СО РАН (лаборатория прикладной и вычислительной гидродинамики).

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 19-71-10026 (рук. Стояновская О.П.).

1 Введение

При движении газа с мелкими пылевыми частицами происходит интенсивное межфазное взаимодействие, которое накладывает свои особенности на численное моделирование подобных течений [1, 2]. В частности, возникают новые характерные величины — времена релаксации скоростей фаз или, если считать что именно пыль увлекается газом, время за которое скорости пылевых фракций выравниваются со скоростью газа. С точки зрения численного моделирования появление новых характерных величин может сказаться на временном шаге. В обычном случае ограничением на временной шаг служит CFL (Courant–Friedrichs–Lewy) condition, но в случае если время релаксации скоростей для какой-то пылевой фракции оказывается меньше, временной шаг необходимо уменьшать. В результате временной шаг для устойчивости расчета требуется уменьшать до минимального из характерных времен.

Для моделирования подобных задач в динамике многофазной среды широко распространён такой метод как SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics). В этом методе уравнения динамики сплошной среды сплошной среды решаются на подвижных узлах аппроксимации, которые называются SPH-particles в которых задаются масса, импульс, энергия и другие параметры среды. Для вычисления параметров среды используется аппроксимирующая функция (ядро), а для вычисления пространственных производных используется градиент ядра.

$$f(r) = \int f(r')W(r - r', h)dr' \quad (1)$$

где W — сглаживающее ядро, h — ширина ядра.

Газопылевая среда представляется наборами частиц, которые соответствуют газу, как несущей фазе, и пылевым фракциям. А межфазное взаимодействие может быть вычислено различными способами, в которых от метода вычислений относительных скоростей будут зависеть общая вычислительная сложность

и асимптотические свойства метода. Для метода SPH можно выделить три основных подхода пространственной интерполяции скоростей: частица-частица [1], дублирующий узел [3] и трение в ячейке [4].

Авторами был предложен [4] лагранжево-эйлеров подход для расчета межфазного взаимодействия (трение в ячейке), при котором все другие силы вычисляются обычным для SPH образом. В нем используются вспомогательные ячейки в которых вычисляются средние скорости фаз, причём размер ячейки может быть меньше радиуса сглаживания.

В работе представлены результаты численного моделирования разлета газопылевого шара в трёхмерной постановке. Трёхмерная реализация SPH метода требует большого количества частиц и, соответственно, время расчёта сильно увеличивается. Поэтому метод IDIC был адаптирован для параллельной реализации с использованием графических ускорителей на основе технология nVidia CUDA

2 Описание метода IDIC

Используются следующие предположения: газопылевая среда рассматривается как среда с общим давлением, массообмен между газом и фракциями пыли отсутствует, дисперсная фаза обменивается импульсом и энергией с несущим газом баланс энергии смеси учитывает изменение энергии за счет давления, меняющего объем смеси.

Уравнения движения газопылевой среды с одной фракции пыли в SPH формулировке запишутся следующим образом:

$$\frac{dv_a^n}{dt} = - \sum_b m_g \left(\frac{p_b^n}{(\rho_{g,b}^n)^2} + \frac{p_a^n}{(\rho_{g,a}^n)^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla_a W_{ab} - \frac{K^*}{\rho_g^*} (v_a^{n+1} - u_*^{n+1}),$$

$$\frac{du_j^n}{dt} = \frac{K^*}{\rho_d^*} (v_*^{n+1} - u_j^{n+1}),$$

где v, u — скорости газа и пыли соответственно, ρ_g, ρ_d — плотности газовой и пылевой фракций, m_g — масса газовой частицы, Π_{ab} — искусственная вязкость. Здесь используются средние по ячейкам величины t_{stop}^* — время релаксации фаз, ρ_d^* — плотность пылевой фракции и $(L, N$ — число газовой и пылевых частиц в ячейке)

$$\varepsilon^* = \frac{m_d L}{m_g N}, \quad K^* = \frac{\rho_d^*}{t_{\text{stop}}^*}, \quad \rho_g^* = \frac{\rho_d^*}{\varepsilon^*}, \quad v_* = \frac{\sum_{i=1}^N v_i}{N}, \quad u_* = \frac{\sum_{j=1}^L u_j}{L}.$$

Средние скорости на слое $n + 1$ вычисляются следующим образом (A_g^n — все силы, кроме трения, действующие на газовую частицу) [4]:

$$\left(\frac{1}{\tau} + \frac{\varepsilon_*^n}{t_*^n} \right) v_a^{n+1} = \frac{v_a^n}{\tau} + \frac{\varepsilon_*^n}{t_*^n} u_*^{n+1} + A_a^n, \quad \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{t_*^n} \right) u_l^{n+1} = \frac{u_l^n}{\tau} + \frac{1}{t_*^n} v_*^{n+1}.$$

Уравнения дополняются уравнением состояния газа, в нашем случае газ полагался идеальным:

$$p_a^{n+1} = \rho_{g,a}^{n+1} e_{g,a}^{n+1} (\gamma - 1),$$

и уравнением энергии:

$$\frac{de_a^n}{dt} = \frac{m_g p_a}{(\rho_{g,a}^n)^2} \sum_b (v_a^n - v_b^n) \nabla_a W_{ab} + \frac{m_g}{2} \sum_b \Pi_{ab} (v_a^n - v_b^n) \nabla_a W_{ab}.$$

В начале расчёта разбиваем всю расчетную область на непересекающиеся объемы таким образом, чтобы объединение этих объемов совпадало со всей областью. Данный шаг выполняется на CPU, поскольку разбиение не меняется со временем и его достаточно выполнить один раз перед основным циклом расчёта.

Пусть на временном слое n известны координаты, скорости, плотности газовой и пылевой частиц, а также внутренняя энергия газовой частицы, будем находить эти величины на слое $n + 1$.

- Вычисление ускорения ($A_{g,*}^n$) от всех сил кроме трения, которые действуют на частицы на слое n , данный шаг совпадает с соответствующим шагом в классическом методе SPH и реализуется на GPU. Процедуры вычисления ускорений параллельно обрабатывают массив частиц, а сами вызываются в цикле по соседним ячейкам вспомогательной сетки для поиска соседей.

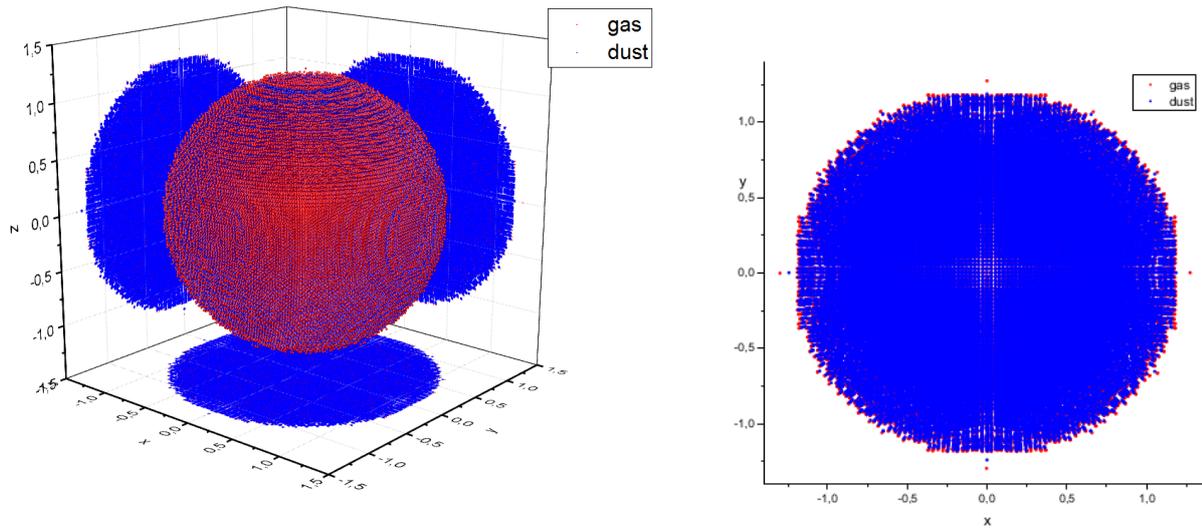


Рис. 1: Распределение газовых и пылевых SPH частиц в пространстве и в проекции на плоскость XY при $t = 0.2$.

- Вычисление средних по каждой ячейке значения величин на слое n , данный шаг требует однократного прохода по всем частицам и его параллельная реализация порождает проблемы с коллизиями доступа к памяти при накоплении сумм по ячейкам, поэтому данный шаг реализован на CPU.
- Вычисление средних значений скоростей в ячейках на слое $n+1$ выполняется на GPU параллельным образом.
- Вычисление скоростей на слое $n+1$ реализуется на GPU параллельно для частиц каждой фазы. Расчёты по каждой из фаз выполняются последовательно. То есть сначала параллельно обрабатываются газовые частицы, а потом пылевые.
- Вычисления новых координат, плотностей, давления и энергии не отличаются от классического метода SPH и выполняется на GPU соответствующими параллельными процедурами.

Данная реализация показала хорошие результаты как по времени счёта, так и по количеству частиц. Тестовые расчёты показали что можно проводить вычисления при нескольких миллионов частиц каждой фазы за приемлемое время.

3 Разлет газопылевого шара

В трёхмерном случае представлены результаты задачи о разлёте газопылевого шара в вакуум. Среда, состоящая из идеального газа и одной фракции пыли, в начальный момент покоится и занимает сферический объём радиуса 1.0 с центром в начале координат. Начальные параметры среды были следующие: плотность газа $\rho_g = 1.0$, пыли $\rho_d = 0.5$, энергия в газе $e = 2.5$, давление $p = 1.0$. Время релаксации для пыли было выбрано малым, в начальный момент $t_1 \approx 8.45 \cdot 10^{-4}$, и в дальнейшем, несмотря на локальный рост времени релаксации, оно оставалось мало по сравнению со временем расчёта. Начальное время релаксации было существенно меньше шага по времени $\tau = 0.005$.

Изначально SPH частицы располагались равномерно по декартовой сетке, их число для каждой фазы составило ≈ 247 тыс, шаг сглаживания $h = 0.1$, размер ячейки в методе IDIC $0.5h$.

Общий вид на газопылевой шар в момент времени $t = 0.2$ показан на рисунке 1, несмотря на увеличение шара в размерах центральная симметрия сохраняется. Отдельно показан вид «сверху», со стороны оси z , на котором хорошо видно как выбросы отдельных частиц, что связано с неидеальной расстановкой частиц, так и разрежение, распространяющееся от свободной поверхности.

Естественно, что в силу симметрии разлёт должен проходить в радиальном направлении, поэтому на рисунке 2 показано распределение плотностей газа и пыли по радиусу вблизи границы среды к моменту

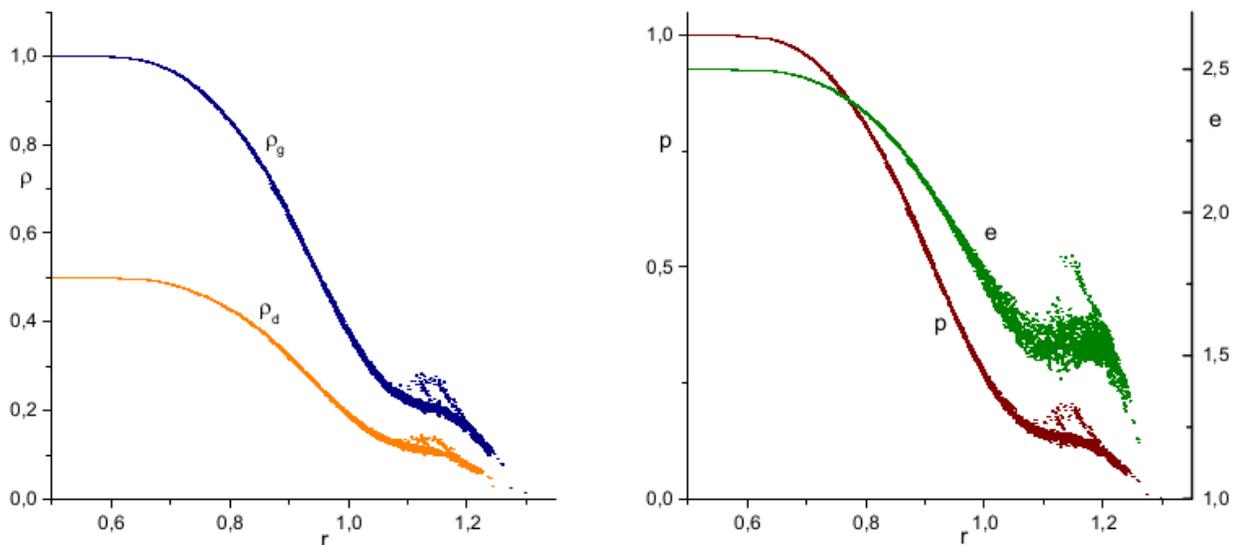


Рис. 2: Профили плотности пыли и газа, давление в среде и энергия газа при $t = 0.2$.

времени $t = 0.2$. К этому времени сформировалась волна разрежения, распространяющаяся от свободной поверхности. Малое время релаксации скоростей означает что динамика газа и пыли должны быть одинаковы. На рисунке это хорошо видно, особенности профилей волны на плотностях практически совпадают. Необходимо отметить, что на границе области у SPH частиц с одной стороны «не хватает» соседних частиц и падение плотности больше связано с данным фактом, нежели с движением частиц. Данная особенность наблюдается на длине $2h$ от границы и определяет заметное изменение профиля распределения всех характеристик газа. Незначительные неоднородности, видимые на фронте волны в виде линий из частиц, связаны с несимметричной, относительно радиальной координаты, начальной расстановкой частиц. Другим следствием такой расстановки являются выбросы отдельных частиц.

Распределение давления в газе повторяет профиль плотности, а на графике энергии заметна большая неоднородность значений. Связано это с особенностями метода SPH и большей чувствительностью результата расчёта энергии к параметрам искусственной вязкости.

Граница пыли находится на одном уровне с границей газа, можно полагать что газопылевой шар расширился до радиуса ≈ 1.25 . Фракция пыли движется синхронно с газом, поскольку время её релаксации даже на свободной границе, где также наблюдается его увеличение, оказалось меньше чем время расчёта.

На следующем рисунке 3 показано распределение величины скорости SPH частиц. Виден характерный «шлейф», ширина которого соответствует размеру вспомогательной ячейки для осреднения в методе IDIC. Облака частиц для газовой фазы и пылевой фракции «накладываются» друг на друга, видно, что все особенности распределения скорости у них совпадают.

Указанные особенности течения соответствуют полученным и верифицированным результатам для одномерного случая. Таким образом, проведённое моделирование показало, что метод работоспособен в трехмерном случае и даже на небольшом числе частиц показывает физически корректные результаты.

Список литературы

- [1] Monaghan J and Kocharyan A 1995 *Computer Physics Communications* **87** 225 – 235 ISSN 0010-4655 URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/001046559400174Z>
- [2] Monaghan J 2020 *European Journal of Mechanics - B/Fluids* **79** 454 – 462 ISSN 0997-7546 URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997754619302390>
- [3] Lorén-Aguilar P and Bate M 2014 *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **443** 927–945

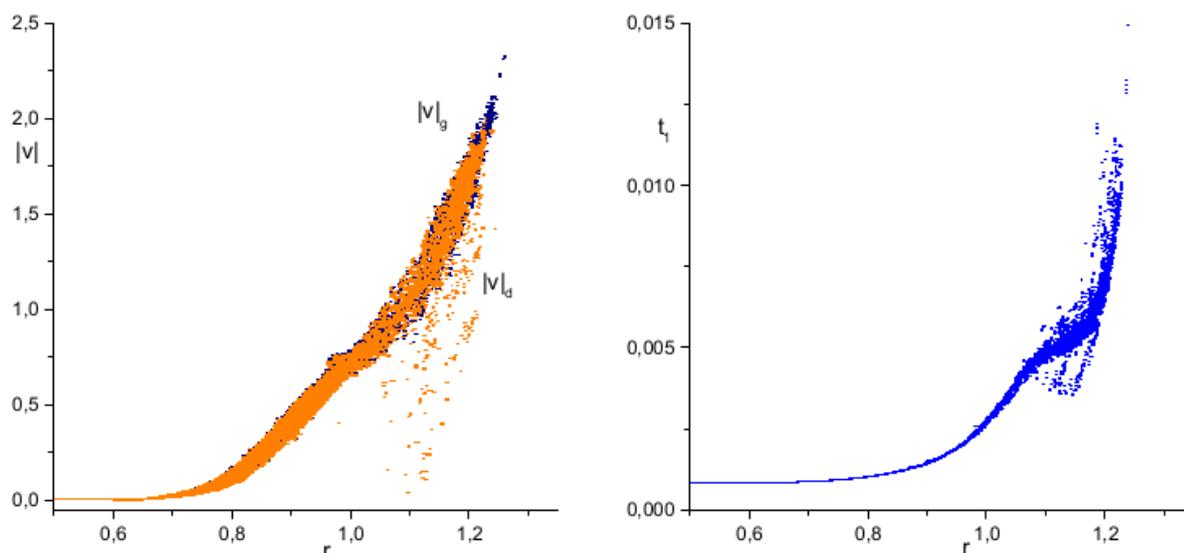


Рис. 3: Распределение величины скоростей фаз и значение локального времени релаксации в частицах при $t = 0.2$.

[4] Stoyanovskaya O, Glushko T, Snytnikov N and Snytnikov V 2018 *Astronomy and Computing* **25** 25 – 37
 ISSN 2213-1337 URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2213133718300805>

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Ускорение вычислений за счет использования графических ускорителей и возможность запусков расчет выполнять другую работу.

Перечень публикаций.

1. Davydov M. N., Stoyanovskaya O. P., Glushko T. A. Numerical modelling of a gas-dust sphere scattering by SPH-IDIC method
 Journal of Physics: Conference Series , Vol. 1675, 2020, IOP Publishing, p. 012071.
2. Stoyanovskaya O., Davydov M., Arendarenko M., Isaenko E., Markelova T., Snytnikov V. 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 // Journal of Computational Physics, 2021, Vol. 430, p. 110035.
3. Stoyanovskaya O. P., Grigoryev V. V., Suslenkova A. N., Davydov M. N., Snytnikov N. V. Two-Phase Gas and Dust Free Expansion: Three-Dimensional Benchmark Problem for CFD Codes
 Fluids, 2022, Vol. 7, No. 2.