# ВВЕДЕНИЕ

Микроструктурированные среды находят широкое применение в различных отраслях промышленности — энергетике, биотехнологии, медицине. Так, в энергетике стоит отметить разработку перспективных реакторов на основе микротвэлов. В подобных задачах движение потока жидкости сопряжено с течением в каналах сложной конфигурации, формируемой засыпкой топливных элементов.

В книге рассматриваются особенности гидродинамики таких процессов, возникающие при этом процессы теплообмена, зарождения паровой фазы и взаимодействия жидкой и паровой фазы. Рассмотрены теоретические и экспериментальные основы изучения подобных сред, включая описание схем и методов постановки экспериментальных исследований, обработки результатов и подходов к реализации численных моделей. В части моделирования процессов тепломассопереноса в последнее время получают все большее распространение специализированные численные методы, эффективно решающие задачи численного моделирования сред со сложной пространственной геометрией, включая зернистые и микрозернистые среды. Так, в книге рассматривается моделирование многофазных потоков методом сглаженных частиц.

Развитие индустрии биомедицины, в том числе создание биореакторов медицинского назначения, формирование живых тканей методом трехмерной биопечати для регенеративной медицины, приводит к необходимости изучения материалов, пригодных для инкубации и развития биологических объектов. Одним из перспективных материалов является гидрогель и материалы на основе комбинаций различных гелей (смесевые гели). Гидрогели обладают широким потенциалом также для применения в высокотехнологичных направлениях, таких как биомедицина, фармацевтика, биотехнология, биосепарация, сельском хозяйстве, добыче нефти. Однако, например, для практического использования гидрогелей в биопечати необходимо получить материалы с заданными устойчивыми свойствами, что может быть достигнуто путем использования, как смесевых гелей, так и гелей с добавлением модифицирующих компонентов. В настоящее время перспективными материалами для 3D-биопечати считаются и чистые агарозные гели, и желатиновые гели с различными добавками. Смешение компонентов может существенно изменять условия образования геля, особенности его временной стабилизации и другие технологические свойства, что позволит добиться увеличения его функциональности. Реализация технологии послойной 3D-биопечати с использованием многокомпонентных гелевых систем предполагает постановку и решение новых фундаментальных задач, направленных на исследование свойств таких материалов и протекающих в них процессов.

Задача создания тканевой структуры предполагает не только рост концентрации, но и дифференциацию живых клеток при их культивировании в объеме геля. В связи с этим необходимо обеспечить условия, подходящие для их жизнедеятельности: обеспечить клетки питательными веществами и кислородом. Механизм диффузии может быть использован для транспортировки питательных веществ, содержащихся в питательной среде к отдельным клеткам в геле. Представленные исследования были поддержаны государственным заданием ФГАОУ ВО «Московский политехнический университет» (проект АААА-A20-120092190052-9).

# Глава 1 ГИДРОДИНАМИКА И МАССОПЕРЕНОС МНОГОФАЗНЫХ ПОТОКОВ В ЗЕРНИСТОМ СЛОЕ

## 1.1. Зернистые среды

Зернистые среды представляют собой засыпку, как правило сферической формы, и находят применение во многих отраслях промышленности, особенно в энергетике и химической технологии. Так, зернистый слой может состоять из катализатора, используемого в каталитических реакторах. Системы фильтрации газа могут использовать зернистый слой для очистки газового потока от примесей. Процесс псевдоожижения, применяемый, например, для насыщения жидкости либо удаления примесей, в своей основе имеет зернистую засыпку. В атомной энергетике в последнее время наблюдается тенденция на переход к мобильным источникам атомной энергии [1]. Одним из перспективных направлений являются реакторы на основе шаровой засыпки (твэл). В таких реакторах топливо заключено в защитную оболочку сферической формы, а выделяемое тепло отводится путем помещения засыпки в трубу (рабочий участок), по которой идет непрерывная циркуляция жидкости [2]. Все вышеописанные области применения зернистой засыпки имеют в своей основе общие принципы: зернистый слой, являющийся твердой фазой, взаимодействует с подвижной средой в виде жидкой или газовой фазы (либо их смеси, именуемой газожидкостным потоком), и в процессе взаимодействия происходит обмен массой и энергией [3; 4; 5].

Описание процессов гидродинамики и тепломассообмена между зернистым слоем и потоками жидкости и газа является нетривиальной задачей. Подобные системы изучаются экспериментально [6], однако в рамках экспериментального исследования получаемые данные ограничены возможностью и количеством установленных датчиков в экспериментальной установке. Так, датчики давления, установленные по длине трубы, заполненной зернистым слоем, могут дать представление об изменении поля давления в процессе движения газожидкостного потока в трубе с зернистым слоем, но вопрос о трехмерном распределении поля давления, конфигурациях течений при взаимодействии с шаровой засыпкой остается открытым.

Для расширения понимания физики взаимодействия зернистого слоя с подвижной фазой были созданы аналитические подходы к описанию подобных систем [7; 6]. Такой подход позволяет путем вычислений получать непрерывные зависимости основных параметров течения жидкости и газа в зернистом слое, таких как массовый расход, скольжение фаз, гидравлическое сопротивление. Несмотря на то, что аналитический подход несомненно обогащает представление о системах с зернистым слоем и является ценным дополнением к экспериментальным данным, результаты, полученные таким способом, имеют скалярный характер. Таким образом, остается открытым вопрос о пространственном изменении физических параметров систем с зернистым слоем. Эту

5

задачу позволяют решить подходы, основанные на методах численного моделирования. Учитывая сложность задач (наличие нескольких фаз в совокупности нестационарными процессами тепло- и массообмена), для численного моделирования применяются помимо классических подходов [8; 9] (например, метод конечного объема и метод спектральных элементов) также методы, получившие свое распространение в вычислительной гидродинамике сравнительно недавно. Среди подобных методов стоит выделить метод сглаженных частиц. Метод сглаженных частиц относится к классу лагранжевых методов [10; 11] и хорошо подходит для описания задач гидродинамики, где течение идет в каналах сложной геометрии [12; 13]. Зернистая засыпка создает в канале (или трубе) разветвленную сеть пересекающихся каналов, по которым течет жидкость или газ [6]. Таким образом, метод сглаженных частиц представляет интерес с точки зрения численного моделирования задач гидродинамики зернистого слоя [14]. С точки зрения построения трехмерных численных моделей, метод сглаженных частиц интересен также возможностью реализации эффективных параллельных алгоритмов [15]. Возможность реализации параллельных алгоритмов особенно важна при трехмерных расчетах ввиду высокой вычислительной сложности.

## 1.2. Двухфазные потоки в зернистых средах

#### 1.2.1. Движение газовых снарядов в вертикальных и наклонных трубках

С точки зрения практического применения двухфазных газожидкостных потоков представляет интерес течение жидкости с пузырями, объем которых превышает 30–40 мл [1.16]. Такие пузыри характеризуются вытянутой формой, занимают всю трубку по ее сечению и ввиду своей формы называются газовыми снарядами, а режим течения, соответственно, снарядный [17; 18; 19]. Подобный режим течения встречается в таких устройствах, как теплообменники, трубопроводы, холодильные агрегаты [20]. Как правило, появление газовых снарядов в трубах носит нежелательный эффект и может привести к нарушению функционирования устройства, поэтому изучение особенностей динамики движения подобных пузырей особенно важно. В случае теплообменных аппаратов при недостаточно быстрой прокачке охлаждающей жидкости по трубам может произойти вскипание жидкости в трубе с образованием паровых пузырей. Аналогичный процесс возможен в холодильных установках, когда происходит вскипание хладагента [21; 22]. Наличие крупных пузырей пара или газа может приводить к замедлению скорости движения жидкости и снижению процесса интенсификации тепломассообмена.

Интенсивность массообменных процессов при снарядном режиме течения можно оценить по скорости движения пузырей. При этом представляет интерес изучение влияния угла наклона трубки на скорость всплытия газовых пузырей [23] ввиду того, что наклон трубки приводит к изменению формы пузыря, что в свою очередь меняет сопротивление пузыря в жидкости и, соответственно, ведет к изменению скорости [24]. Другим фактором, требующим учета, являются массообменные процессы. Так, в случае движения газового пузыря углекислого газа происходит процесс абсорбции углекислоты жидкостью [25]. Процесс абсорбции непосредственно влияет на изменение объема пузыря, что может оказать влияние на скорость его движения. Массообменные процессы при снарядном режиме могут наблюдаться в барботажных процессах [26] при коалесценции пузырьков газа и формировании крупных пузырей газа.

### 1.2.2. Оборудование для экспериментальных исследований

С целью получения новых экспериментальных данных по скорости всплытия пузырей в трубах, в том числе наклонных, была выполнена серия экспериментов с использованием экспериментального стенда, изображенного на рисунке 1.1. Экспериментальный стенд состоит из трубки 2, к которой подсоединен гибкий шланг 4. Трубка зафиксирована на штативе 1 с помощью зажима 3, в который интегрирована светодиодная лампа подсветки 6. Использование лампы позволяет повысить контрастность при видеофиксации и, соответственно, упростить визуальный анализ выполненных экспериментов.



**Рис. 1.1** Экспериментальный стенд:

*1* — штатив; 2 — стеклянная труба; 3 — зажим; 4 — прозрачный резиновый шланг; 5 — шприц; 6 — подсветка; 7 — видеокамера.

Штатив может вращаться вокруг своей оси, что необходимо при выполнении экспериментов по определению скорости всплытия при различных углах наклона трубки. При этом в штативе были проделаны отверстия, позволяющие фиксировать его при различных углах наклона. Предусмотрена возможность фиксации штатива при углах наклона от 10 до 90° с шагом в 10°. Для введения газовой фазы применялся шприц 5, подключенный к шлангу. Процесс движения газового пузыря фиксировался с помощью видеокамеры. Фотография экспериментального комплекса представлена на рисунке 1.2.



**Рис. 1.2** Фотография экспериментального комплекса

Методика исследования была основана на подходе, использованном в [27]. Эксперимент начинался с заполнения трубки стеклянными шариками (эксперимент с зернистым слоем). В экспериментальном исследовании применялись зернистые засыпки диаметрами 3, 5, 7, 10 и 20 мм. Затем трубка заполнялась жидкостью через шланг. В качестве жидкости использовались вода и этанол. Далее к шлангу подсоединялся шприц, содержащий необходимый объем газовой фазы. В качестве газовой фазы применялся воздух и углекислый газ. При этом шланг сжимался специальным зажимом с целью предотвращения попадания газовой фазы в рабочий участок до начала исследования. После установки трубы на заданный угол, производилось включение видеозаписи, со шланга убирался зажим, а газовая фаза инжектировалась в шланг. С помощью видеокамеры производилась видеозапись процесса движения газового снаряда (пузыря) в трубе.

При исследовании всплытия пузырей в трубе, заполненной зернистой засыпкой, использовалась иммерсионная жидкость, имеющая коэффициент преломления, близкий к коэффициенту преломления стекла (рис. 1.3).



Рис. 1.3

Газовый пузырь в трубе с зернистой засыпкой и иммерсионной жидкостью

Использование иммерсионной жидкости делает зернистую засыпку из стеклянных шариков менее заметной при визуальном наблюдении. Таким обра-

зом, исследователь может наблюдать за движением газового пузыря без помех со стороны зернистой засыпки, так как если бы эксперимент проводился в чистой жидкости.

#### 1.2.3. Времяпролетный метод

После выполнения серии экспериментов выполнялся анализ полученных видеозаписей с целью определения скорости всплытия газового пузыря. Для этого видеозапись разбивалась на кадры с помощью программной библиотеки ffmpeg. Учитывая, что запись производилась с частотой 24 кадра в секунду, по номеру кадра можно определить точное время, к которому данный кадр был снят. В процессе визуального анализа кадров производился учет номера кадра, на котором наблюдался вход газового пузыря в рабочий участок, и кадра, на котором наблюдался выход пузыря из трубы. Затем вычислялась разность номеров кадров.

Например, кадр, на котором был зафиксирован вход на рабочий участок № 20, а кадр, на котором газовый снаряд покидает участок, № 232. В таком случае разность кадров составит 212. Учитывая частоту съемки в 24 кадра в секунду, время, затраченное на прохождение рабочего участка, вычисляется как отношение разности количества кадров к 24. Для определения скорости всплытия применялся времяпролетный метод:

$$V = \frac{L_{\rm yq}}{t_2 - t_1},\tag{1.1}$$

где разность времени вычислялась по кадрам видеосъемки вышеописанным методом, а длина рабочего участка составляла 400 мм. Диаметр трубки — 24 мм.

## 1.2.4. Влияние угла наклона трубки на скорость всплытия

По результатам серии экспериментов были получены зависимости по скорости движения газовых снарядов в трубе, в том числе при наличии зернистой засыпки. Замеры скорости осуществлялись для углов наклона трубки от 10 до 90° относительно горизонтальной плоскости. Таким образом, угол наклона в 90° соответствует вертикальному положению трубки.

По результатам серии экспериментов были получены зависимости по скорости движения газовых снарядов в трубе, в том числе при наличии зернистой засыпки. В случае движения пузыря в трубе без засыпки наблюдается рост скорости всплытия при увеличении угла наклона от 10 до 30° с дальнейшим плавным уменьшением скорости вплоть до 90°. Подобная зависимость наблюдается как для воды, так и для этанола. При добавлении зернистой засыпки малого диаметра наблюдается смещение максимумов скорости всплытия. Так, для воды максимум достигается при угле наклона 60°, а для этанола 50° (рис. 1.4). Результаты согласуются с аналогичными исследованиями, проведенными в [18].

При увеличении диаметра шариков наблюдается изменение скоростей всплытия по сравнению с чистой жидкостью и засыпкой диаметром 5 мм, однако характер зависимости остается неизменным, и максимум скорости всплытия наблюдается также при углах 50–60°. Дальнейшее увеличение зерна засыпки вплоть до 20 мм не меняет характер зависимости скорости всплытия, при этом с увеличением диаметра зерна засыпки скорость уменьшается (рис. 1.5). Уменьшение скорости фиксируется как для воды, так и для этанола.



Скорость всплытия газового снаряда в зависимости от угла наклона, диаметр трубы — 24 мм:

*I* — вода без засыпки; *2* — этанол без засыпки; *3* — вода в зернистом слое, d = 5 мм; *4* — этанол в зернистом слое, d = 5 мм.



Скорость всплытия газового снаряда в зависимости от угла наклона в зернистом слое с шариками разного диаметра: да в зернистом слое d = 10 мм; 2 — этанод в зернистом слое d = 10 мм; 3 —

1 — вода в зернистом слое, d = 10 мм; 2 — этанол в зернистом слое, d = 10 мм; 3 — вода в зернистом слое, d = 20 мм; 4 — этанол в зернистом слое, d = 20 мм.

Таким образом, дальнейшее увеличение диаметра зерна засыпки ведет к снижению скорости движения газового пузыря как для воды, так и для этанола.

#### 1.2.5. Безразмерные критерии

С целью оценки влияния сил поверхностного натяжения на скорость движения пузыря произведен расчет числа Бонда и числа Вебера  $We = \frac{\rho' v^2 l}{\sigma}$  в зависимости от угла наклона для аналогичных условий. Наблюдается зависимость, схожая по характеру с зависимостью, полученной для скорости всплытия как для чистой жидкости (рис. 1.6), так и для трубы с засыпкой (рис. 1.7). Во всех случаях We > 1, что говорит о преобладании инерциальных сил, в том числе при наличии зернистой засыпки.



Число Вебера в зависимости от угла наклона, диаметр трубы — 24 мм: I — вода без засыпки; 2 — этанол без засыпки; 3 — вода в зернистом слое, d = 5 мм; 4 — этанол в зернистом слое, d = 5 мм.



Число Вебера в зависимости от угла наклона в зернистом слое с шариками разного диаметра: I — вода в зернистом слое, d = 10 мм; 2 — этанол в зернистом слое, d = 10 мм; 3 — вода в зернистом слое, d = 20 мм; 4 — этанол в зернистом слое, d = 20 мм.

Для оценки соотношения вклада сил поверхностного натяжения и силы Архимеда был произведен расчет числа Бонда для чистой трубы и для случаев заполнения трубы зернистой засыпкой. Для случая с чистой трубой характерный размер принимался равным диаметру трубы, а в случае наличия зернистой засыпки — диаметру зерна засыпки. Такой выбор обусловлен тем, что за характерный диаметр принималось максимальное расстояние между зернами засыпки, что соответствует двум радиусам и, соответственно, диаметру зерна (рис. 1.8).



Рис. 1.8

Свободное пространство, образующееся между зернами засыпки:

*R* — радиус зерна засыпки.

Критерий Бонда Во =  $\frac{g(\rho' - \rho'')l^2}{\sigma}$  (рис. 1.9) был рассчитан для диаметра зерна от 3 до 20 мм. Также на графике отображен случай чистой трубы. В этом случае в качестве характерного диаметра был взят диаметр трубы 24 мм.



Число Бонда в зависимости от характерного диаметра:

*1* — диаметр зерна 3 мм; 2 — диаметр зерна 20 мм.

Число Бонда увеличивается с ростом диаметра зерна засыпки и достигает максимума в случае с чистой жидкостью. Минимальное значение числа Бонда наблюдается при диаметре зерна 3 мм. Когда число Бонда становится близким к единице, силы поверхностного натяжения между зернами засыпки начинают играть существенную роль и могут оказывать сопротивление движению газовых пузырей. Так, для диаметра зерна d = 3 мм число Бонда составляет 1,2 и при нем уже наблюдается эффект гидравлического запирания.

### 1.2.6. Движение газовых снарядов с учетом процесса массообмена

В дополнение к экспериментальным исследованиям движения газовых пузырей в трубах с зернистой засыпкой были выполнены эксперименты по определению интенсивности массоотдачи при движении газовых пузырей в трубах с различными углами наклона, а также определению влияния присутствия зернистой засыпки на процесс массоотдачи. Схема проведения эксперимента и установка были аналогичны тем, что использовались при экспериментальном исследовании гидродинамики всплытия пузырей. Дополнением к схеме проведения эксперимента является визуальная фиксация изменения объема пузыря после прохождения зернистого слоя. В качестве жидкости в экспериментах использовался этанол, а в роли газовой фазы выступал углекислый газ. В исследовании использовалась та же трубка, что и при исследовании гидродинамики газовых пузырей. Исходный объем газового снаряда составлял 8 см<sup>3</sup>.

## 1.3. Численное моделирование

#### 1.3.1. Метод сглаженных частиц

Численная модель была основана на методе сглаженных частиц. Данный метод относится к классу лагранжевых бессеточных методов. Данный метод был выбран ввиду возможности создания эффективных параллельных алгоритмов по сравнению со стандартными расчетными методами вычислительной гидродинамики, таким как метод конечных объемов [10]. Необходимость параллелизации алгоритма обусловлена необходимостью сокращения времени расчета в случае выполнения трехмерного моделирования. Также сокращение времени для выполнения расчетов позволяет реализовать программное обеспечение, позволяющее выполнять расчет задач гидродинамики и теплообмена в реальном времени, что важно при разработке программных решений для моделирования аварийных ситуаций в энергетических аппаратах. В таком случае возможно получить данные о последствиях аварии и принять адекватные меры по ее ликвидации непосредственно в момент возникновения.

В методе сглаженных частиц характерно разделение жидкости на ряд частиц (дискретных элементов). У таких частиц есть определенные особенности. Они отличаются пространственным расстоянием, также именуемым длиной сглаживания. На его протяжении свойства каждой дискретной частицы попадают под «сглаживание» при воздействии функции ядра. Итак, справедливо утверждение: искомую физическую величину дискретного элемента можно получить, суммировав величины имеющихся дискретных единиц, расположенных в рамках пары частиц на расстоянии длины сглаживания.

Оценку воздействия дискретной единицы на свойственные характеристики осуществляют по различным критериям, в конкретном случае — опираясь на ее плотностные данные и удаленность до соседних частиц. В методе сглаженных частиц для аппроксимации физических величин используется функция ядра. Распространенным при этом является использование функции Гаусса, а также работа с кубическим сплайном.

Если говорить о варианте со сплайном, то он равняется нулю для каждой частицы, что располагается на более далеком расстоянии, чем две сглаженные длины (этим разнится с функцией Гаусса, которая отличается небольшим влиянием независимо от конечного расстояния). Таким образом, происходит экономия вычислительных ресурсов ввиду того, что устраняется необходимость учета достаточно небольшого влияния дискретных элементов на большом расстоянии от искомой частицы.

Метод сглаженных частиц также демонстрирует устойчивость расчетной схемы в случае комплексных трехмерных расчетов задач гидрогазодинамики, учитывающих процессы гидродинамики, теплообмена и фазовых переходов [10]. Также отмечается возможность упрощенного задания граничных условий для расчетных областей со сложной геометрий [28], какой является среда с зернистым слоем. Также была продемонстрирована устойчивость данного метода при решении гидродинамических задач с учетом процессов теплообмена [29].

Таким образом, физические величины, такие как давление, температура или скорость, в каждой точке расчетной области могут быть рассчитаны как сумма значений каждой соседней частицы [10]. Аппроксимация физических величин достигается путем введения сглаживающего ядра — специальной функции, которой осуществляется аппроксимация [30]. В задачах гидродинамики в качестве функции ядра широко применяется функция Гаусса.

### 1.3.2. Описание численной модели

В общем виде любая физическая величина для заданной точки в методе сглаженных частиц рассчитывается по уравнению (1.2). При этом для численного расчета применяется дискретная форма записи (1.3), где W функция сглаживания (функция ядра), которая должна удовлетворять условию (1.4). При этом дискретизированное уравнение Навье — Стокса принимает вид (1.5).

$$A(r) = \int A(r')W(r - r', h)dr';$$
(1.2)

$$A(r) = \sum_{i} m_{i} \frac{A_{i}}{\rho_{i}} W(|r - r'|, h);$$
(1.3)

$$\int W(|r|, h)dr = 1;$$
(1.4)

$$\rho_i a_i = p_i + v_i + \rho_i g. \tag{1.5}$$

Вязкость и давление для каждой точки рассчитываются по (1.6) и (1.7) соответственно:

$$p_{i} = -\sum_{j} m_{j} \frac{p_{j} - p_{i}}{\rho_{j}} W(|r_{i} - r_{j}|, h);$$
(1.6)

$$v_i = \mu \sum_j m_j \frac{v_j - v_i}{\rho_j} \nabla W(|r_i - r_j|, h).$$
(1.7)

Так как сглаженная частица занимает определённый объем расчетной области, её объем можно определить согласно

$$v = \frac{m}{\rho(r)}.$$
(1.8)

Учитывая, что задача гидродинамики всплытия газового пузыря представляет собой задачу, в которой происходит взаимодействие жидкой и газообразной фаз, необходимо задание граничных условий для учета межфазного взаимодействия.

Ввиду нерегулярной структуры границ фаз и наличия разрывов, вместо непосредственного расчета значения коэффициента поверхностного натяжения, для метода сглаженных частиц для случая границ газ — жидкость используются граничные условия, предложенные в [31; 32].

Подход заключается в задании переходного слоя между газом и жидкостью, где параметры давления (1.9) и динамической вязкости (1.10) меняются плавно:

$$p_{\mathsf{W}\Gamma} = \frac{2p_{\mathsf{W}}p_{\Gamma}}{p_{\mathsf{W}} + p_{\Gamma}};\tag{1.9}$$

$$\mu_{\mathbf{x}\Gamma} = \frac{2\mu_{\mathbf{x}}\mu_{\Gamma}}{\mu_{\mathbf{x}} + \mu_{\Gamma}}.$$
(1.10)

Для упрощения формулировки граничных условий вводится оператор межфазного взаимодействия [31]:

$$\overline{Z} = \overline{Z} = \frac{2m_{\mathfrak{K}}(r_{\Gamma} - r_{\mathfrak{K}})\nabla W_{\Gamma\mathfrak{K}}}{\rho_{\Gamma}\rho_{\mathfrak{K}}\left(r_{\Gamma\mathfrak{K}}^{2} + \xi\right)}.$$
(1.11)

Далее с помощью оператора межфазного взаимодействия задаются уравнения сохранения массы со стороны жидкой фазы (1.12) и газообразной (1.13), а также скорости (1.14) на межфазной границе:

$$\frac{d\rho_{\mathrm{K}\Gamma}}{dt} = m_{\Gamma}(u_{\mathrm{K}} - u_{\Gamma})\nabla W_{\mathrm{K}\Gamma}; \qquad (1.12)$$

$$\frac{d\rho_{\Gamma \mathcal{K}}}{dt} = m_{\mathcal{K}}(u_{\Gamma} - u_{\mathcal{K}})\nabla W_{\mathcal{K}\Gamma}; \qquad (1.13)$$

$$\frac{du_{\Gamma \mathcal{K}}}{dt} = -m_b \left(\frac{2p_{\Gamma \mathcal{K}}}{p_{\Gamma}p_{\mathcal{K}}} + \Pi_{\Gamma \mathcal{K}} + R_{\Gamma \mathcal{K}}\right) \nabla W_{\Gamma \mathcal{K}} + \overline{Z}\mu_{\Gamma \mathcal{K}}(u_{\Gamma} - u_{\mathcal{K}}).$$
(1.14)

Для стабилизации расчетной схемы в [31] вводится искусственная вязкость  $\Pi_{\text{гж}}$ . С целью исключения численного эффекта сингуляризации частиц, вызванной особенностью расчетной схемы в методе сглаженных частиц [31], вводится компенсирующая сила отталкивания  $R_{\text{гж}}$  на границе жидкость — газ. Для исключения численных эффектов, которые могут внести неточности в результаты расчета, согласно [31] вводится компенсирующая сила отталкивания  $R_{\text{гж}}$ .

С учетом наличия зернистой засыпки и проявления капиллярных эффектов при прохождении газового пузыря через каналы, сформированные между зернами засыпки, необходим учет капиллярных эффектов в расчетной модели. Для моделирования капиллярных эффектов было использовано уравнение Кана — Хилларда (1.15), которое было преобразовано в терминах метода сглаженных частиц (1.16):

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (M \nabla \mu); \tag{1.15}$$

$$\frac{Dc_a}{Dt} = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} (M_i + M_j) \frac{x_{ab}}{x_{ab}^2} \nabla W_{ab} \cdot (\mu_a - \mu_b).$$
(1.16)

Данное уравнение часто применяется для моделирования спиноидальных распадов и фазовых превращений в нестационарных системах. Такие условия реализуются при взаимодействии фаз в условиях критического истечения парожидкостного потока. Учитывая, что модель гидродинамики газовых пузырей является основной для разработки модели критического истечения, представляется целесообразным использование данного уравнения для описания процесса капиллярных эффектов в модели. Для проверки работоспособности модели были решены тестовые задачи по движению газовой (рис. 1.10*a*) и жидкой фаз (рис. 1.10*b*) в емкости с зернистым слоем.



Рис. 1.10

Тестовые задачи для моделирования капиллярных эффектов при взаимодействии газообразной (а) и жидкой (б) фаз с засыпкой

В данном случае область была заполнена водой, а часть объема была заполнена воздухом. Размещение зерен засыпки на расстояниях от 2 до 4 мм позволило оценить способность модели к воспроизведению капиллярных эффектов.

#### 1.3.3. Учет взаимодействия с твердой фазой

Для учета взаимодействия жидкой и газообразной фаз с твердыми препятствиями были введены специальные граничные условия [33]. Для каждой сглаженной частицы, не принадлежащей твердой фазе, вводится проверка на наличие сглаженной частицы, принадлежащей к твердой фазе, среди её соседних частиц. В случае обнаружения такой частицы, для сглаженной частицы, принадлежащей жидкой или газообразной фазе, вводится специальная сила *f*, направленная на частицу твердой фазы:

$$f_{ka} = -\frac{m_a}{m_a + m_k} K(x, y) n_k.$$
 (1.17)

Учитывая, что на частицу твердой фазы может оказывать влияние несколько частиц твердой или газообразной фаз, рассчитывается совокупная сила воздействия:

$$f_k = \sum_a f_{ka}.$$
 (1.18)

Для компенсации силы, действующей со стороны жидкости и газа, для частицы твердой фазы вводится компенсирующая сила:

$$f_{ak} = -\frac{m_k}{m_a + m_k} K(x, y) n_k.$$
 (1.19)

При этом для исключения численного эффекта проникновения частиц жидкой и газообразной фаз в твердые границы используется ступенчатая функция K(x, y). Данная функция возрастает скачкообразно при уменьшении расстояния между частицами подвижной фазы и твердой границей.

### 1.3.4. Расчетная область трубки

Для численного моделирования использовался высокопроизводительный компьютер, при этом для повышения скорости расчетов была реализована возможность параллельных вычислений с использованием графического процессора. Выбор в пользу графического процессора обусловлен тем, что его архитектура лучше приспособлена для выполнения параллельных вычислений по сравнению с центральным процессором. Например, семейства процессоров Intel Xeon имеют 8 ядер, а графический процессор nVidia Tesla C2075, используемый в данной работе, 448. Такой графический процессор позволяет достичь производительности до 1,03 ТФлопс.

Расчетная область была задана цилиндрической формы (рис. 1.11), при этом каждая сглаженная частица в расчетной области относилась либо к жидкой фазе, либо к газообразной. Количество сглаженных частиц варьировалось от 25 до  $30 \cdot 10^6$  в зависимости от структуры расчетной области. В начале трубы формировался свободный участок *1* для инициализации газовой фазы. В исходном состоянии газовая фаза 2 задавалась в форме параллелепипеда в нижней части трубы. В первые итерации газовая фаза преобразовалась в форму пузыря, наблюдаемого в эксперименте. В конце трубы также предусматривалось свободное пространство для принятия газовой фазы *3*. Основная часть расчетной области была заполнена зернистой засыпкой 4. Модель позволяет варьировать следующие параметры: угол наклона трубы, диаметр зерна засыпки, объем газового пузыря, длина и диаметр трубы.



Рис. 1.11

Схема расчётной области трубы с зернистой засыпкой:

*I* — входной участок; *2* — газовый пузырь; *3* — конечный участок; *4* — зернистая засыпка.

Для формирования зернистой засыпки используется подпрограмма, отвечающая за укладку сфер в цилиндрическом объеме. В процессе работы подпрограммы часть слаженных частиц помечается как элементы твердой фазы. Для таких частиц задается коэффициент связности, при котором сглаженные частицы представляют систему жестко скрепленных элементов, что является реализацией твердой неподвижной фазы.

#### 1.3.5. Результаты моделирования

На каждой итерации вычислительного эксперимента производится расчет физических параметров системы для каждой частицы. При этом результаты расчета сохраняются в памяти компьютера. Для хранения экспериментальных данных применялся формат VTK, который возможно использовать в дальнейшем в специализированном программном обеспечении ParaView для анализа результатов расчета, в том числе визуализации результатов моделирования для всплытия пузыря в чистой жидкости (рис. 1.12, 1.13), так и при наличии зернистой засыпки (рис. 1.14).



#### Рис. 1.12

Результат трёхмерного моделирования движения газового снаряда в наклонной трубе, угол наклона: 40°, начальный объём пузыря — 20 мл, рабочее вещество — вода



Рис. 1.13

Визуализация расчетной области, моделирующей наклонную трубу со свободно всплывающим газовым пузырем



Рис. 1.14 Визуализация процесса моделирования газового пузыря в трубе с зернистой засыпкой

Формат VTK предназначен специально для хранения результатов численного моделирования. В нем можно сохранить данные для каждой итерации расчета о параметрах системы (скорость, плотность, вязкость) для каждой точки расчетной области.

С целью получения расчетных данных по скорости всплытия газовых пузырей в трубах была выполнена серия экспериментов. Рассматривался случай с трубой диаметром 24 мм и длиной 400 мм. Углы наклона менялись от 10 до 90° с шагом 10°. При наличии зернистой засыпки рассматривались случаи использования зерна диаметром от 3 до 20 мм.

С помощью программного пакета ParaView была получена визуализация процесса всплытия тейлоровского пузыря в вертикальной трубе как в чистой жидкости, так и при наличии зернистого слоя. Визуализация процесса численного моделирования позволяет наблюдать за эволюцией формы пузыря в процессе его всплытия, наблюдая особенности всплытия, которые затруднительно зафиксировать при наблюдении в эксперименте. Согласно [24], на скорость