

На правах рукописи



Сухарев Тимур Юрьевич

Численное моделирование процессов гидродинамического перемешивания

Специальность 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор **Ревизников Дмитрий Леонидович**

Официальные оппоненты: **Черкасов Сергей Гелиевич**
доктор физико-математических наук, профессор, Государственный научный центр Российской Федерации – федеральное государственное унитарное предприятие «Исследовательский центр имени М.В. Келдыша», главный научный сотрудник

Коротеева Екатерина Юрьевна
кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», физический факультет, старший научный сотрудник каф. молекулярных процессов и экстремальных состояний вещества

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»

Защита состоится 20 декабря 2019 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.125.14 Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4 или на сайте МАИ по ссылке: https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT_ID=108237.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2019 г.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, 4, отдел ученого и диссертационных советов.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.125.14, кандидат физико-математических наук, доцент



В. Ю. Гидаспов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Гидродинамическое перемешивание присутствует во многих производственных технологических циклах, где необходимо равномерно распределить примесь по рабочему объему перемешивающего устройства. В некоторых областях промышленности, таких как производство композитных материалов, суспензий, битумов, моющих средств и др., в качестве примеси используются твердотельные взвешенные частицы и волокнистые включения. Понимание механического и реологического поведения отдельных частиц примеси и их агрегатов имеет важное значение для повышения эффективности этих технологий. Как правило, такие процессы рассматриваются в рамках теории двухфазных сред. Мощным инструментом в данном направлении является компьютерное моделирование. В настоящее время вычислительные мощности ЭВМ позволяют использовать сложные математические модели, которые дают возможность в деталях проследить ход протекаемых процессов. Разработанные при этом программно-алгоритмические решения могут быть использованы для создания эффективных схем устройств микширования и режимов их работы. Ряд значимых результатов в этом направлении был получен в филиале Института машиноведения имени А.А. Благонравова Российской академии наук «Научный центр нелинейной волновой механики и технологии РАН». Представленная работа базируется на исследованиях этой научной школы.

Целью работы является создание методов, алгоритмического и программного обеспечения для моделирования процессов гидродинамического перемешивания и их применения для выбора эффективных схем и оптимальных режимов работы смесительных устройств. В диссертации были поставлены и решены следующие задачи:

- Проведен анализ существующих методов моделирования двухфазных течений жидкости.
- Расширен функционал программного комплекса вычислительной гидродинамики Fluent с помощью технологии UDF (user defined function) с целью моделирования течений жидкости в установках с элементами, совершающими колебательные и вращательные движения.
- Разработаны эффективные численные алгоритмы для описания динамики дисперсной фазы и оценки эффективности перемешивания.
- Выполнен сравнительный анализ полученных результатов с экспериментальными данными и результатами работ других авторов.
- Проведен широкомасштабный параметрический анализ с целью выявления режимов работы устройств колебательного типа, обеспечивающих эффективное перемешивание при приемлемых энергетических затратах.
- Найдены оптимальные с практической точки зрения протоколы перемешивания в системе подвижных коаксиальных цилиндров.
- Сформулированы числа подобия для перемешивающих устройств двух различных классов.

- На основе разложений по динамическим модам (DMD-алгоритм) построены редуцированные модели гидродинамического перемешивания, обеспечивающие эффективное хранение информации о поле течения.
- Разработана математическая модель процессов перемешивания в жидких средах с волокнистыми включениями. Модель реализована в программном комплексе.
- Проведено исследование влияния разрывного протокола на перемешивание и ориентацию ансамбля волокон в прямоугольной камере с подвижными дном и крышкой.

Методы исследования. Для исследования использовались методы математического моделирования и вычислительной гидродинамики. Для разработки проблемно ориентированных программных комплексов и проведения вычислительных экспериментов использовались современные компьютерные технологии.

Научная новизна. В диссертационной работе получены следующие новые результаты:

- Разработаны алгоритмы численного моделирования процессов гидродинамического перемешивания, позволяющие определять пространственно-временные структуры в сложных гидродинамических течениях и оценивать их влияние на процесс перемешивания.
- Изучены процессы гидродинамического перемешивания в установках колебательного типа. Применительно к рассматриваемым процессам сформулированы числа подобия. Созданы основы для определения оптимальных режимов работы устройств колебательного типа с позиций «потребляемая мощность - эффективность перемешивания». Предложен подход к оптимальному размещению рабочих элементов в установке.
- Изучены процессы гидродинамического перемешивания в системе подвижных коаксиальных профилированных цилиндров. Сформулированы числа подобия, позволяющие обоснованно подходить к масштабированию стендовых устройств. На основе анализа особых точек векторного поля скоростей жидкости предложены способы создания эффективных схем перемешивающих устройств данного типа.
- С использованием разложений по динамическим модам разработаны алгоритмы и построены редуцированные модели, которые позволяют описать эволюцию поля скоростей жидкости конечномерным линейным оператором.
- Разработаны и протестированы комплексная математическая модель и численные алгоритмы процессов перемешивания в жидких средах с волокнистыми включениями. Исследовано влияние протокола перемешивания на ориентацию ансамбля волокон в прямоугольной камере с подвижными дном и крышкой.

Практическая значимость. В диссертации были разработаны способы, которые позволяют находить эффективные схемы и режимы работы перемешивающих устройств. Сформулированы числа подобия, которые дают

возможность осуществить переход от лабораторных стендовых установок к реальным производственным аппаратам. Разработанный программный комплекс для построения конечномерных редуцированных моделей позволяет анализировать и экономично хранить информацию о поле течения, полученную не только в ходе расчета, но и в процессе физического эксперимента. Программный комплекс для моделирования динамики волокнистых включений в жидкости позволяет в деталях проследивать процесс формирования структуры композитных материалов.

Достоверность и обоснованность результатов, полученных в ходе диссертационного исследования, обеспечивается согласованностью результатов проведенных вычислительных экспериментов с аналитическими решениями и результатами других авторов, а также с результатами физических экспериментов.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях: XI Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях, Алушта, 2016; XX Юбилейная международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам, Алушта, 2017; Международная научная конференция «Колебания и волны в механических системах», Москва, 2017; XII Международная конференция по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли, Алушта, 2018; XII Международная летняя научная школа-конференция «Гидродинамика больших скоростей и кораблестроение», Чебоксары, 2018; Международная конференция «Машины, технологии и материалы для современного машиностроения» Москва, 2018.

Личный вклад автора заключается в разработке алгоритмов и программных средств численного моделирования, адаптации математических моделей применительно к различным схемам перемешивания, проведении вычислительных экспериментов с последующим анализом результатов.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 12 работах, из которых 5 опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК [1-5], в том числе 5 опубликованы в журналах, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus, 7 работ опубликованы в сборниках материалов научных конференций [6-12].

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка использованных источников (141 наименование). Работа изложена на 127 страницах, содержит 74 иллюстрации и 3 таблицы.

Благодарности. Автор выражает благодарность коллегам из филиала Института машиноведения имени А.А. Благоднарова Российской академии наук «Научный центр нелинейной волновой механики и технологии РАН» за сотрудничество и предоставленные результаты экспериментов.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, описаны методы исследования, обоснована научная новизна и отмечена практическая значимость.

В **первой главе** дается обзор литературы и конкретизируется область исследования: рассматривается перемешивание при ламинарном режиме течения.

Моделирование процессов гидродинамического перемешивания в настоящей работе рассматривается в двумерных постановках и включает в себя три основных этапа: моделирование течения жидкости в установках с элементами, совершающими колебательные и вращательные движения; моделирование эволюции объема примеси в несущей среде; расчет критериев эффективности перемешивания.

В представленном исследовании моделирование течения несущей среды производится путем решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости (1):

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где x, y – координаты [м], ρ – плотность жидкости [кг/м³], P – давление [Па], μ – динамическая вязкость [Па·с], u, v – компоненты скорости [м/с] в направлениях x, y соответственно, t – время [с].

Решение системы (1) в аналитическом виде может быть получено только в частных случаях при ряде допущений и относительно простой геометрии исследуемой области. В общем случае решение находится с помощью численного моделирования. К настоящему времени для этой цели разработаны достаточно точные и эффективные вычислительные алгоритмы, реализованные как в авторских программных кодах, так и в CFD (Computational Fluid Dynamics) программных комплексах. Данные программные модули обычно состоят из трех больших взаимодействующих блоков: построитель вычислительной сетки, расчетный модуль и модуль для последующей графической обработки данных.

В представленной работе для получения гидродинамических полей используется пакет программ вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent. Данный инструмент был выбран из-за своей универсальности и широкого функционала. Он позволяет пользователю дописывать собственные функции на языке программирования C и интегрировать их в вычислительный код через набор определённых макросов, используя технологию UDF (User Defined Function). Так как отличительной чертой настоящего исследования является наличие в перемешивающих установках элементов, совершающих

колебательные и вращательные движения в жидкости, то UDF технология активно используется при численном моделировании для задания граничных и начальных условий. Также, чтобы наиболее точно моделировать ход протекающих процессов, используются как стационарные структурируемые вычислительные сетки, так и различного рода неструктурированные динамические сетки: деформируемые, скользящие и перестраиваемые.

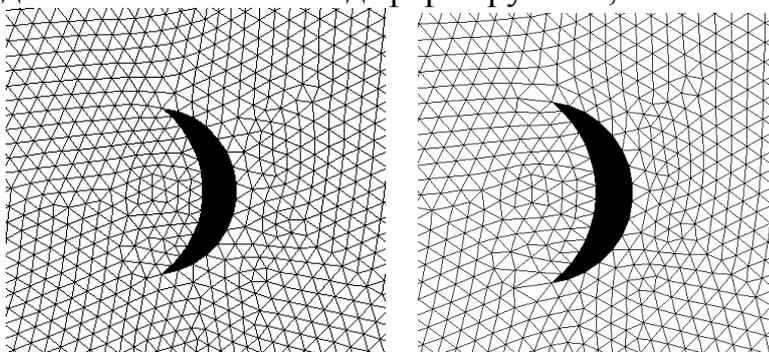


Рис. 1. Вид вычислительной сетки вблизи колеблющегося элемента (лопатки). *Слева:* при отсутствии деформации вычислительной сетки (лопатка проходит положение равновесия). *Справа:* при максимальной деформации (лопатка максимально удалена от положения равновесия).

Характерный пример деформации вычислительной сетки для задачи из главы 2 представлен на рис. 1.

Согласование полей скоростей и давлений в системе уравнений Навье-Стокса (1) проводится с использованием алгоритма PISO, так как применительно к задачам данного класса он обеспечивает наиболее быструю сходимость на каждом временном шаге по сравнению с другими алгоритмами, предложенными в данном CFD коде. Это является принципиальным, так как в основном решаются нестационарные задачи.

Для описания дисперсной фазы используется система дифференциальных уравнений динамики ее элементов. Другими словами, для моделирования эволюции примеси используется Лагранжев подход. В представленном исследовании, если не оговорено специально, рассматривается безынерционная примесь, поэтому система ОДУ для описания движения ее элемента имеет следующий вид:

Для описания дисперсной фазы используется система дифференциальных уравнений динамики ее элементов. Другими словами, для моделирования эволюции примеси используется Лагранжев подход. В представленном исследовании, если не оговорено специально, рассматривается безынерционная примесь, поэтому система ОДУ для описания движения ее элемента имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = u(t, X, Y), & X(t = 0) = X_0; \\ \frac{dY}{dt} = v(t, X, Y), & Y(t = 0) = Y_0. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $u(t, X, Y)$, $v(t, X, Y)$ – компоненты поля скорости, [м/с], полученные из решения системы уравнений (1), X, Y – координаты положения частицы примеси в пространстве, [м], t – время, [с].

Для расчета эволюции примеси применяется маркерный метод. В данном методе частица-маркер представляет постоянный объем примеси. Конечное множество всех маркеров составляет начальный объем. На каждом временном шаге выполняется перенос каждого из маркеров полем скорости несущей среды согласно уравнению (2). Множество маркеров с новыми координатами образует объем примеси на следующем временном шаге.

Определение принадлежности частицы-маркера к ячейке вычислительной сетки осуществляется при помощи условия P2L (particle-to-the-left), для

восстановления параметров потока u и v в точке локализации частицы используется процедура интерполяции. Система уравнений (2) для каждого маркера решается численно явным методом Рунге-Кутты 4-го порядка точности с постоянным шагом интегрирования, равным гидродинамическому шагу по времени. Все модели и численные алгоритмы, описывающие динамику дисперсной фазы, были реализованы в авторском программном коде на языке программирования C++.

На третьем этапе моделирования на основе рассчитанного распределения примеси по объему оценивает эффективность процесса перемешивания. В настоящей работе эффективность перемешивания определяется посредством основного и дополнительного критериев. Расчетная область разбивается новой прямоугольной сеткой на N_0 одинаковых ячеек. В качестве основного критерия I_1 выбирается процент заполнения частицами ячеек, составляющих исследуемую область: $I_1 = N/N_0$, где N – количество заполненных частицами ячеек. А в качестве дополнительного критерия, характеризующего неравномерность распределения частиц по заполненным ячейкам, используется величина I_2 , [1, 2, 4]. В отличие от основного критерия, меньшее значение дополнительного указывает на лучшее качество перемешивания.

Вторая глава посвящена численному моделированию процессов перемешивания в установках колебательного типа, [1, 2, 4, 6, 7, 9].

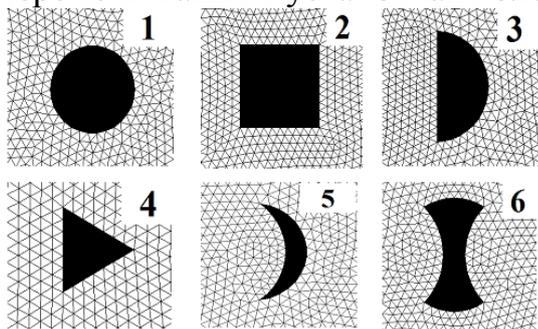


Рис. 2. Варианты геометрической формы лопаток.

Постановка задачи. Расчетная область представляет прямоугольник размерами $L_x \times L_y$, заполненный жидкостью. Внутри области расположена профилированная лопатка стандартной формы (вариант 5 на рис. 2) с максимальным диаметром 10 мм, которая совершает колебательное движение по синусоидальному закону с амплитудой в диапазоне $a = 2.5-4.5$ мм, и частотой $f = 20-50$ Гц в направлении,

перпендикулярном боковым стенкам. В начальный момент времени жидкость находится в состоянии покоя и приходит в движение посредством колебаний лопатки. Представляет интерес анализ влияния амплитуды и частоты колебаний рабочего элемента, а также его геометрические формы (рис. 2) на процесс перемешивания.

Для решения поставленной задачи применяется методика, описанная в главе 1. На боковых и нижней границах прямоугольной области, а также на поверхностях лопаток, ставятся условия прилипания и непротекания ($u = 0, v = 0$), на верхней границе задается условие равенства статического давления атмосферному. Примесь аппроксимируется набором из 500 тыс. частиц-маркеров. В качестве начального положения частиц в пространстве рассмотрены два распространённых на практике варианта: примесь равномерно распределяется вдоль верхней границы и располагается пятном внутри области. Шаги по времени для гидродинамического расчета при разных частотах равны

$\Delta t = 10^{-3}, 10^{-4}$ с. Для расчета критериев эффективности перемешивания применяется декартова сетка размером 50×25 ячеек.

На рис. 3 видно неплохое качественное соответствие расчетных и экспериментальных данных. По экспериментальным данным и результатам вычислительного эксперимента в процессе перемешивания можно выделить два этапа.

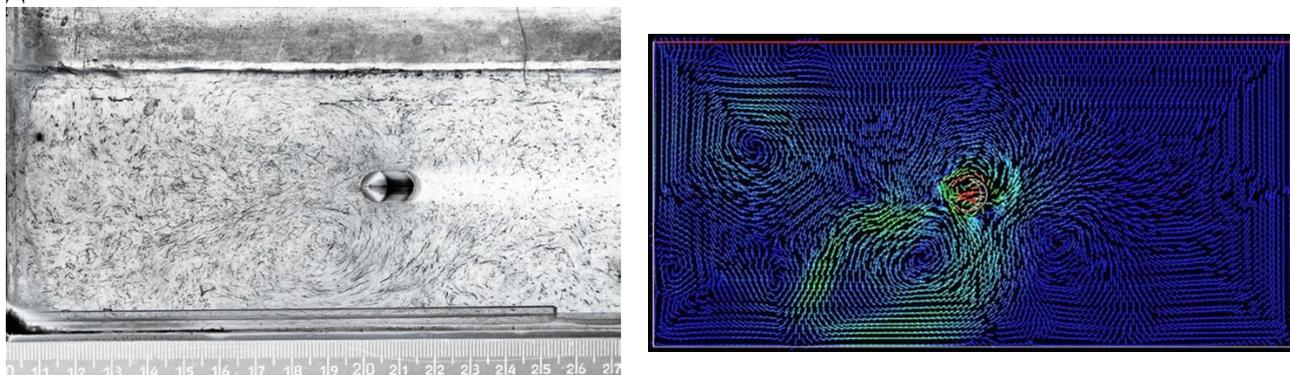


Рис. 3. Рассчитанное и экспериментальное поля скоростей в момент времени $t = 3$ с.
Вариант №5. $f = 30$ Гц. $a = 3.5$ мм.

«Процесс затягивания» примеси, в ходе которого частицы затягиваются внутрь области к колеблющемуся телу, практически не перемешиваясь. Данный эффект обусловлен колебаниями рабочего элемента, так как вблизи него в векторном поле скорости жидкости образуется особая точка – устойчивый узел. При этом роль формы лопатки незначительна.

На втором этапе вблизи лопатки начинают образовываться вихревые структуры, расходящиеся со временем по пространству. Структура в жидкости, способствующая перемешиванию, представляет собой гиперболическую точку, у которой устойчивая и неустойчивая ветви сепаратрис замыкаются и образуют гомоклиническую кривую, внутри которой существует эллиптическая точка. Возмущение данной системы приводит к распаду гомоклинической кривой, что способствует хаотическому движению частиц примеси. На данном этапе существенное влияние на процесс микширования оказывает как геометрическая форма лопатки, так и параметры ее колебаний.

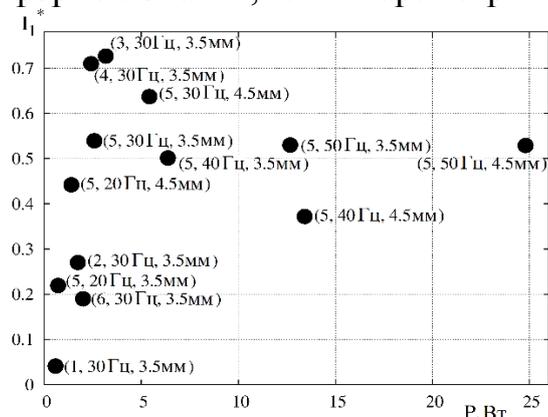


Рис. 4. Карта режимов в плоскости «эффективность перемешивания – потребляемая мощность».

исходя из нее наиболее предпочтительными оказываются вариант 3 (полукруглый профиль) и вариант 4 (треугольный профиль).

Большое значение в рассматриваемых процессах имеет мощность, потребляемая смесительной установкой. С учетом скорости лопатки определяется мгновенная мощность, необходимая для преодоления сил сопротивления движению подвижного элемента, которая затем осредняется по периоду колебаний. На основании расчетных данных строится карта режимов в плоскости «эффективность перемешивания – потребляемая мощность» (рис. 4),

Также исследуется влияние пространственного расположения двух рабочих элементов (лопаток) на эффективность перемешивания. Показано, что качество смеси выше по сравнению с вариантом 5 (одна лопатка). По результатам численного анализа предложен подход к оптимальному размещению рабочих элементов в установке колебательного типа, который основан на отслеживании всех частиц примеси и определении ячейки, где их количество за время расчета было максимальным (в центре данной ячейки располагается новая лопатка). На рис. 5 проиллюстрирована работа данного метода, стрелками показано местоположение следующего рабочего элемента.

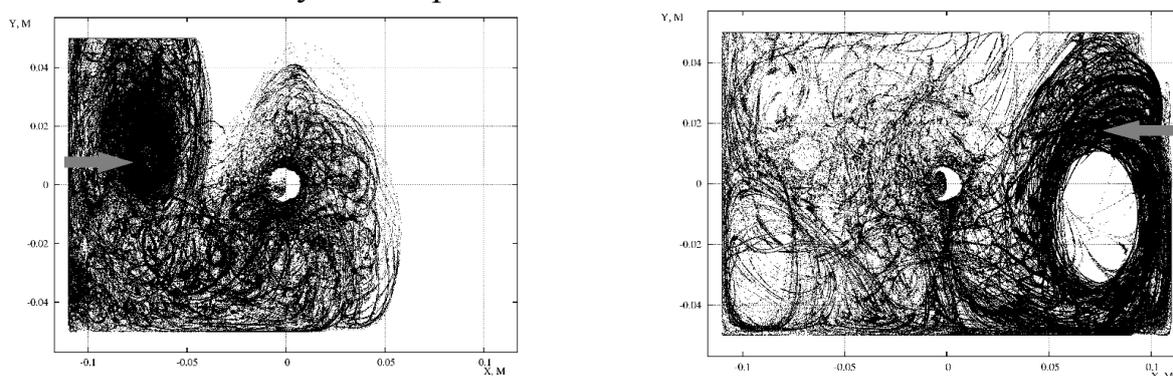


Рис 5. Траектории всех частиц внутри области. *Слева:* вариант для одной лопатки; *Справа:* вариант для двух лопаток.

Кроме того, рассматривается вопрос масштабирования перемешивающих устройств колебательного типа. Введены безразмерные критерии, которые являются аналогами чисел Рейнольдса и Струхалья:

$$Re^* = \frac{f\rho L_x L_y}{\mu}, St^* = \frac{L_x L_y}{a^2}. \quad (3)$$

Показано, что они являются числами подобия. Для этого рассматривается стандартная форма лопатки (вариант 5), увеличенная совместно с расчетной областью пропорционально в 2 раза. При этом числа Re^* , St^* зафиксированы. Отсюда следует, что для получения подобного течения в укрупненном перемешивающем устройстве амплитуда должна увеличиться в 2 раза, а частота уменьшиться в 4 раза. На рис. 6 представлены результаты обработки соответствующего вычислительного эксперимента совместно с результатами для стандартного размера области.

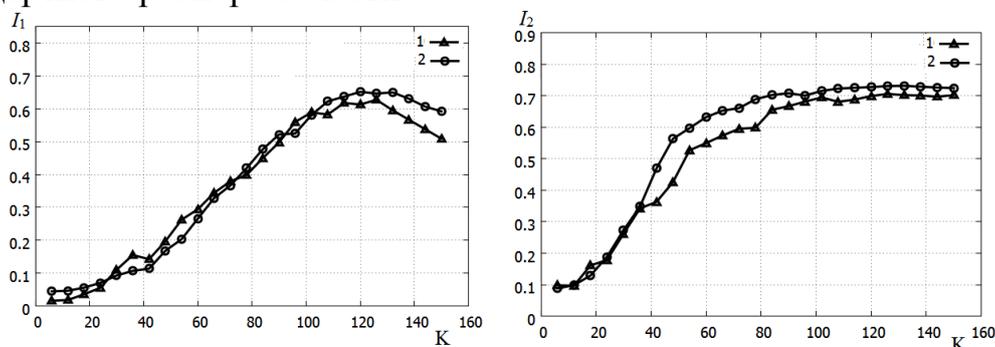


Рис. 6. *Слева:* критерий эффективности перемешивания I_1 ; *Справа:* критерий эффективности перемешивания I_2 . 1 – стандартный размер установки, 2 – размер установки пропорционально увеличен в 2 раза.

Так как два процесса имеют разные частоты, то для сравнения на оси X откладывается число колебаний K рабочего элемента.

Таким образом, сформулированные числа подобия позволяют обоснованно подходить к масштабированию установок колебательного типа.

Третья глава настоящей работы посвящена численному моделированию процессов перемешивания в системе подвижных коаксиальных цилиндров, где внутренний цилиндр спрофилирован определенным образом, [3, 5, 12].

Постановка задачи. На рис. 7, а) представлен вид расчетной области. Внешняя стенка (статор) представляет собой цилиндр радиуса R_w . Минимальная величина зазора между внутренней стенкой (ротором) и статором равна H . В качестве рабочей жидкости рассматривается глицерин при стандартных условиях. Управление ротором осуществляется по разрывному протоколу с периодом T (смена движения происходит мгновенно). Угловые скорости рабочих элементов (ротора и статора) равны по модулю ($|\omega_w(t)| = |\omega_r(t)|$) и противоположны по направлению. В начальный момент времени в расчетную область круглым пятном помещается некоторый объем примеси (240 тыс. частиц) в центре каждого квадранта (см. рис. 7, а). Шаг интегрирования по времени для гидродинамического поля и частиц совпадает и равен $\Delta t = 0.01$ с.

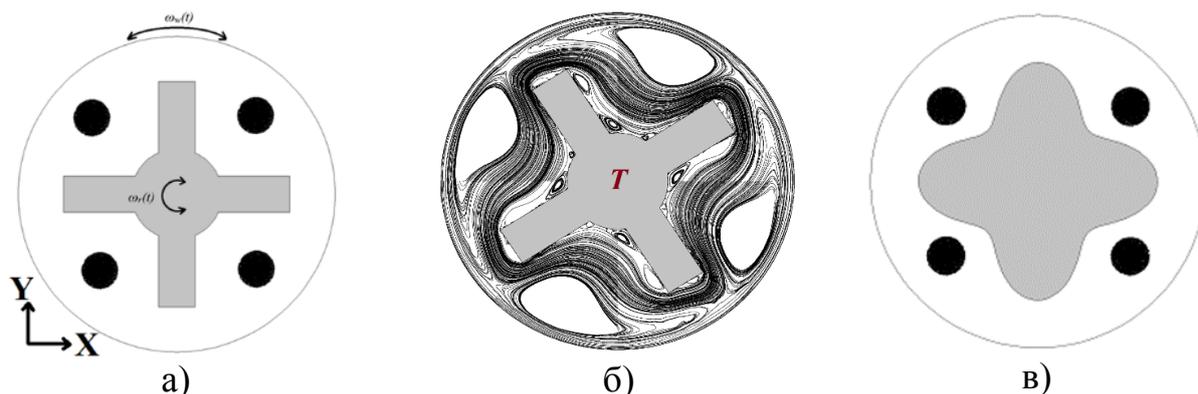


Рис 7. а) Вид расчетной области до профилирования ротора и начальное расположение примеси. б) Положение особых точек в нелинейных системах с малым возмущением вблизи резонанса. в) Вид расчетной области после профилирования ротора и начальное расположение примеси.

Перед началом исследования проводится тестирование вычислительной модели на задаче о течении между двумя эксцентрично расположенными цилиндрами, для которой существуют аналитические решения для поля скорости. Полученные результаты говорят о применимости используемых подходов к моделированию течений между цилиндрами.

На рис. 8 *сверху* показаны положения частиц примеси через равные периоды времени на протяжении 80 с. Видно, что у данного типа устройства высокий перемешивающий потенциал. Разберем подробнее способствующий этому механизм. Для образующихся структур в жидкости характерно наличие эллиптических точек (они образуют «островки» с пустотами на рис. 7 б). По отдельности они окружены инвариантными кривыми, не возникает обмена веществ между слоями жидкости и, следовательно, нет интенсивного

перемешивания. Однако, взаимодействие двух эллиптических точек, порождает гиперболическую точку, в окрестности которой происходит сжатие и растяжение примеси, вытягивание ее в нить. Наличие системы таких гиперболических точек (как на рис. 7 б) приводит к эффективному перемешиванию, так как представленная система из гиперболических точек образует гетероклиническое сплетение сепаратрис. Небольшое возмущение такой системы приводит к сложному расщеплению сепаратрис, что и вызывает хаотическое движение примеси, которое благоприятным образом сказывается на процессе перемешивания.

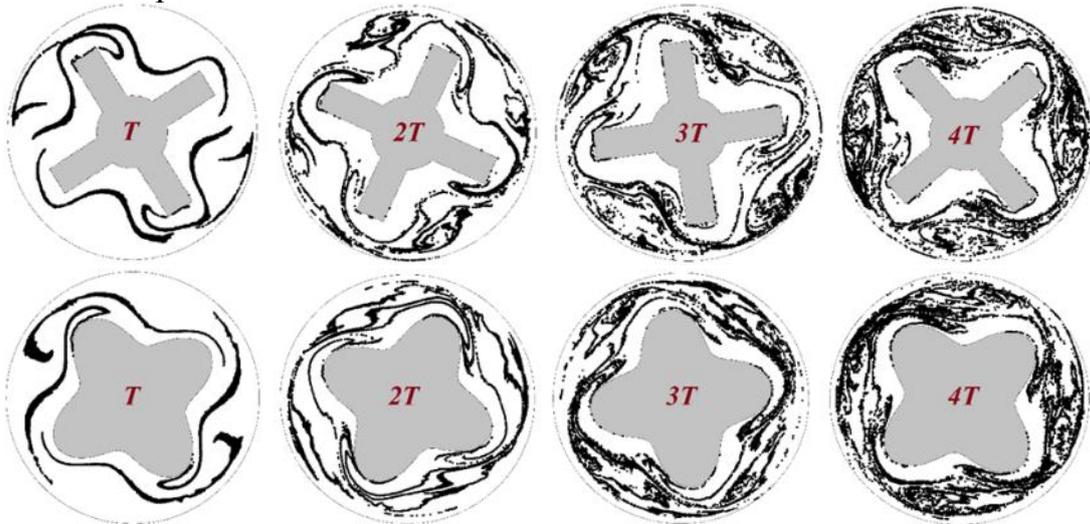


Рис. 8. Положение частиц в пространстве в моменты времени кратные периоду.
Сверху: форма ротора до профилирования; *Снизу:* результат профилирования.

Однако, в конце каждого периода вблизи ротора возникает система из мелких эллиптических точек, которые являются центрами вихрей малой интенсивности, что приводит к образованию застойной зоны.

В ряде работ с использованием элементов аппарата теории Колмогорова-Арнольда-Мозера было показано, что в процессе перемешивания образуются ориентированные трубки, соответствующие КАМ кривым, которые являются инвариантными поверхностями и не могут пересекаться частицами примеси. Если придерживаться данной логики, то поверхность, которая образуется сгущением траекторий меченых частиц, будет КАМ-поверхностью, и частицы примеси не смогут пересечь ее. Таким образом, наиболее простой способ избавиться от застойной зоны состоит в профилировании ротора формой, которая определяет КАМ-поверхность как на рис. 7 б). С этой целью форма ротора была аппроксимирована следующим уравнением, записанным в полярной системе координат (R, φ) :

$$R_r(\varphi) = 1.0 + 0.25 \cos(4\varphi). \quad (4)$$

Геометрически расчетная область теперь выглядит как на рис. 7 в).

Из результатов вычислительных экспериментов следует, что данное профилирование никак не отразилось на динамике особых точек, но при этом удалось существенно сократить площадь застойной зоны (рис. 8 *снизу*). Добиться их полного отсутствия при такой новой форме ротора возможно через подбор определенных значений периода разрывного протокола.

Для данного класса устройств сформулированы числа подобия (аналоги чисел Рейнольдса и Струхала):

$$Re^* = \frac{|u|}{\nu} \left(\frac{H^2}{W} \right), St^* = \frac{1}{T|u|} \left(\frac{H^2}{W} \right). \quad (5)$$

На рис. 9 демонстрируется их применимость при рассмотрении рабочей жидкости, динамическая вязкость которой в 10 раз больше глицерина (7.5 Па·с).

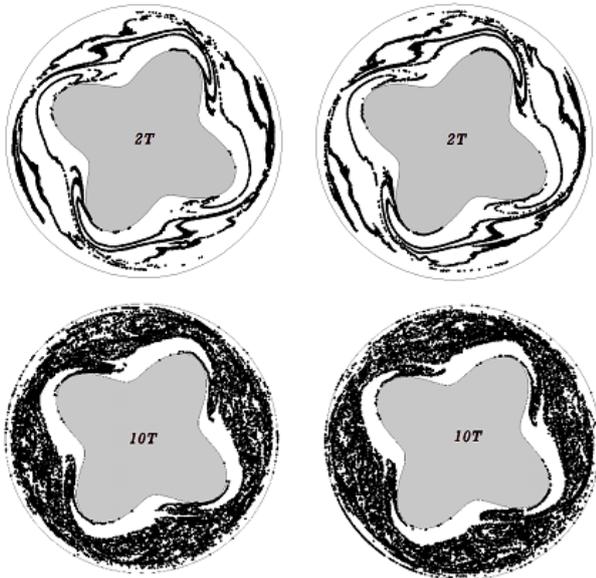


Рис. 9. Положения частиц в пространстве. Слева: вязкость 7.5 Па·с; Справа – 0.75 Па·с.

В четвертой главе описан алгоритм разложений по динамическим модам (DMD-алгоритм), на основании которого строится ряд конечномерных редуцированных моделей для процессов гидродинамического перемешивания, [10]. Согласно DMD-методу производится декомпозиция пространственно-временных данных в набор динамических мод, которые получаются из времен-

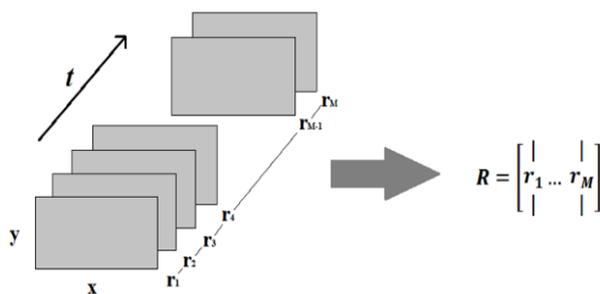


Рис. 10. Схема процесса подготовки данных.

ных срезов в процессе расчета или измерений данной системы во времени. Для того чтобы произвести разложение, требуется точно определить два параметра: N – количество пространственных измерений (точек, в которых измеряется или рассчитывается соответствующая величина) на одном временном срезе; M – количество временных срезов.

$$R = [r(t_1) \ r(t_2) \ r(t_3) \ \dots \ r(t_M)]. \quad (6)$$

Вектор $r(t_j)$ состоит из N значений переменной состояния системы в конкретный момент времени t_j . В случае двумерной области (рис. 10) такой

Путем вариации чисел Re^* , St^* за счет изменения вязкости и периода разрывного протокола построена карта режимов перемешивания.

Кроме того, определен наиболее технологичный способ управления процессом перемешивания в системе подвижных коаксиальных цилиндров – колебательно-вращательный протокол: ротор совершает колебания по синусоидальному закону с определенным периодом, а внешний цилиндр вращается с постоянной угловой скоростью:

$$\omega_r(t) = -\omega \sin\left(\frac{\pi t}{T}\right),$$

$$\omega_w(t) = \omega.$$

вектор получается в процессе векторизации двумерного массива данных. Для проведения процедуры разложения вводится следующая матрица:

$$R_j^k = [\mathbf{r}(t_j) \mathbf{r}(t_{j+1}) \mathbf{r}(t_{j+2}) \dots \mathbf{r}(t_k)], \quad (7)$$

где нижний индекс показывает номер временного слоя, с которого начинается сбор информации, а верхний – на котором заканчивается сбор данных. Разложение по динамическим модам включает в себя нахождение матрицы A , которая связывает состояние \mathbf{r}_j в момент времени t_j с состоянием системы \mathbf{r}_{j+1} на следующем временном шаге t_{j+1} :

$$\mathbf{r}_{j+1} \approx A\mathbf{r}_j. \quad (8)$$

Запишем выражение (8) через (7), получим выражение в более общем виде:

$$R_2^M \approx AR_1^{M-1}, \quad (9)$$

где матрица A выбрана так, что минимизирует Фробениусову норму:

$$\|R_2^M - AR_1^{M-1}\|_F. \quad (10)$$

Для нахождения матрицы A в данном исследовании используется подход, который базируется на сингулярном разложении матрицы (SVD), как наиболее устойчивый к шуму в измерениях.

Непосредственно сам алгоритм DMD представлен ниже:

- 1) Подготавливаются наборы данных R_1^{M-1}, R_2^M .
- 2) Производится SVD разложение матрицы R_1^{M-1} :

$$R_1^{M-1} = P\Sigma Q^T. \quad (11)$$

- 3) Вычисляется A :

$$A = P^T R_2^M Q \Sigma^{-1}. \quad (12)$$

- 4) Вычисляются собственные значения и собственные векторы матрицы-пропагатора, A :

$$AW = \Lambda W, \quad (13)$$

где столбцы матрицы W - собственные векторы и Λ - диагональная матрица с соответствующими собственными значениями λ_k , которые содержат в себе информацию о динамике процесса. Отметим, что элементы матриц W и Λ могут принимать комплексные значения.

- 5) Динамическими модами будут столбцы матрицы Ψ , которая определяется следующим образом:

$$\Psi = R_2^M Q \Sigma^{-1} W. \quad (14)$$

В результате уравнения течения жидкости, на основании (8), можно свести к конечномерной системе (построить редуцированную модель), которая представляется следующим образом:

$$d\mathbf{r}/dt = A\mathbf{r}. \quad (15)$$

Матрица A является матрицей-пропагатором для данной динамической системы. Задача (15) может быть решена любым известным численным методом для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Однако, целесообразно использовать найденные в пунктах 4) и 5) собственные значения матрицы пропагатора (13) и динамические моды (14). Тогда решение данной системы имеет следующий вид:

$$\mathbf{r}_{DMD}(t) = \Psi \text{diag}(\exp(\omega t))\mathbf{b}, \quad (16)$$

где компоненты вектора ω определяются как $\omega_k = \ln(\lambda_k) / \Delta t$. Здесь функция логарифма используется для устранения проблем, возникающих при работе с разномасштабными собственными значениями. Для определения вектора коэффициентов \mathbf{b} можно использовать начальное условие при $t_1 = 0$. Так как в общем случае Ψ не является квадратной матрицей, то решение для \mathbf{b} может быть найдено методом наименьших квадратов и записано через псевдообратную матрицу:

$$\mathbf{b} = \Psi^+ \mathbf{r}(0). \quad (17)$$

Кроме того, можно проводить усечение матрицы-пропагатора по сингулярным числам на этапе 2) алгоритма, понижая тем самым размерность матрицы A с N до K ($P \in \mathbb{R}^{N \times K}$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{K \times K}$, $Q \in \mathbb{R}^{M-1 \times K}$, K – ранг SVD усечения), что актуально, так как на практике начальная размерность может быть достаточно большой.

В качестве примера применения DMD-алгоритма, рассматривается задача о перемешивании в каверне с подвижными дном и крышкой с тремя различными режимами перемешивания.

В *первом* случае скорость крышки U_{top} и дна U_{bot} равны по модулю и движутся в одну сторону: $U_{\text{top}} = U_{\text{bot}} = 0.0158$ м/с.

Во *втором* случае действует синусоидальный протокол с периодом $T = 20$ с и сдвигом фазы $\alpha = \pi/2$, который определяется следующим законом:

$$U_{\text{top}} = 0.0269 \cdot \sin^2\left(\frac{\pi t}{T} + \alpha\right), U_{\text{bot}} = -0.0269 \cdot \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right). \quad (18)$$

В *третьем* случае расчетной областью является прямоугольник размером 2×1 м. Жидкость имеет динамическую вязкость 15 Па·с и плотность 1250 кг/м³. Действует разрывный протокол перемешивания, а именно: крышка и дно двигаются попеременно в разных направлениях с периодом $T = 15$ с (первую половину периода движется крышка со скоростью $U_{\text{top}} = 1$ м/с, вторую – дно со скоростью $U_{\text{bot}} = -1$ м/с).

Для всех рассматриваемых режимов перемешивания получено хорошее согласование с экспериментальными данными. Для примера на рис. 11 показано распределение примеси для синусоидального протокола.

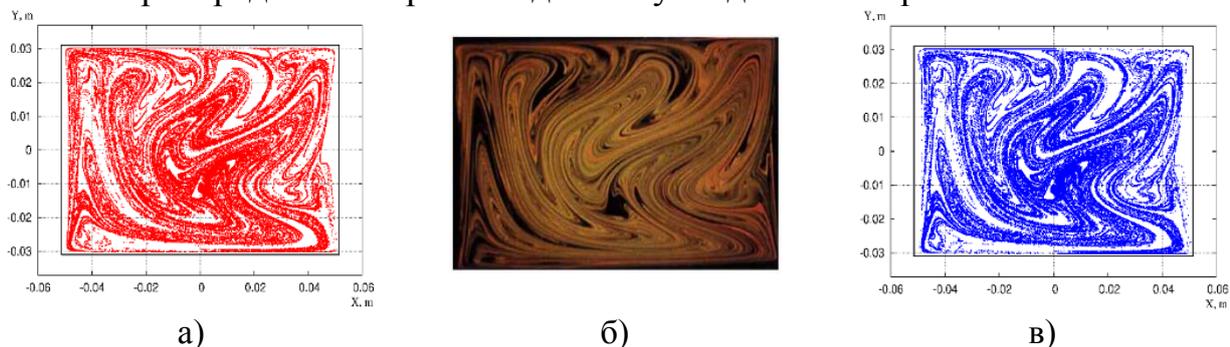


Рис. 11. Положение примеси в пространстве при $t = 280$ с. а) Гидродинамическое поле получено из численного решения системы уравнений Навье-Стокса. б) Эксперимент. в) Гидродинамическое поле построено при помощи редуцированной модели, $K = 30$.

Использовать все динамические моды для редукции нецелесообразно. Поэтому после второго этапа DMD-алгоритма производится понижение

размерности матрицы-пропатора A . Для выбора оптимального количества динамических мод K (ранг матрицы после SVD усечения) используется относительная погрешность редуцированной модели по сравнению с точным решением на каждом временном слое:

$$\varepsilon(t) = \frac{\|r(t) - r_{DMD}(t)\|_F}{\|r(t)\|_F} \cdot 100\%. \quad (19)$$

Чтобы не рассматривать по отдельности поля скоростей $u(t_j, X, Y)$ и $v(t_j, X, Y)$, используется абсолютная величина скорости. Затем вычисляется погрешность по формуле (19) и проводится усреднение по времени.

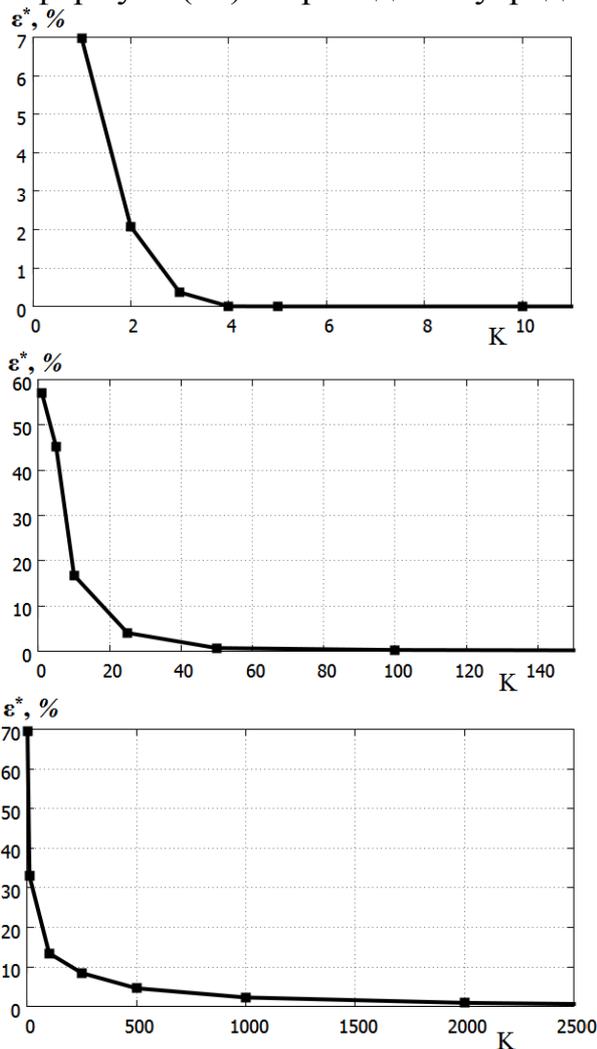


Рис. 12. График зависимости осредненной по времени относительной погрешности модуля скорости от количества динамических мод. а) Стационарный протокол б) Синусоидальный протокол перемешивания. в) Разрывной протокол перемешивания.

Полученный график осредненной по времени относительной погрешности модуля скорости ε^* в зависимости от числа динамических мод для всех рассматриваемых режимов перемешивания представлен на рис. 12.

Таким образом, использование метода разложения по динамическим модам позволяет построить ряд конечномерных редуцированных моделей. При этом процедура усечения матрицы-пропатора дает возможность существенно сократить объем хранимой информации о течении. В отличие от классического случая, когда для хранения информации о режиме необходима вся матрица R размера $N \times M$, для редуцированной модели необходимо знать матрицу ψ размером $N \times K$ и два вектора - столбца ω , b размера K . Выигрыш в хранении информации о течении в каверне после обработки DMD - методом составляет для рассмотренных в данной главе режимов 80% и более. Приблизительно такой же выигрыш в хранении информации получен в задаче из главы 2 после обработки DMD-методом. Стоит отметить, что при рассмотрении хаотичных режимов прогностическая сила выражения (16) уменьшается.

Пятая глава посвящена моделированию процессов перемешивания в жидких средах с волокнистыми включениями [8, 11]. Дается описание проблемы моделирования гибких волокон в жидкой среде.

Рассматривается модель волокна, которое аппроксимируется набором из N сфер радиуса a , сцепленных друг с другом, см. рис. 13. Каждая пара сфер может растягиваться, изгибаться и скручиваться, изменяя при этом расстояние между сферами, углы изгиба и кручения в своих плоскостях (рис. 14).

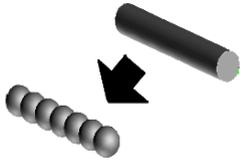


Рис. 13. Схематическое представление волокна, состоящего из сфер.

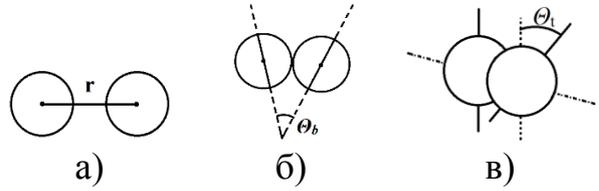
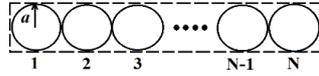


Рис 14. Конфигурации пары связанных сфер при деформации: а) растяжение; б) изгиб; в) скручивание.

Сила упругости (F^s) и гибкость волокна (T^b и T^t) определяются законом Гука с тремя постоянными параметрами k_s , k_b и k_t :

$$F^s = -k_s(r - r_{eq}), T^b = -k_b(\theta_b - \theta_{b eq}), T^t = -k_t(\theta_t - \theta_{t eq}). \quad (20)$$

Данные параметры получены из сравнения деформаций связанных сфер с упругой деформацией эквивалентного цилиндрического стержня с модулем Юнга E и модулем сдвига G :

$$k_s = \frac{\pi a}{2} E, k_b = \frac{\pi a^3}{8} E, k_t = \frac{\pi a^3}{4} G. \quad (21)$$

В уравнениях (20) начальные значения недеформируемых величин равны: $r_{eq} = 2a$, $\theta_{b eq} = 0$, $\theta_{t eq} = 0$. Таким образом, модель волокна, построенная из связанных сфер, может растягиваться, изгибаться и скручиваться. Гибкость волокна определяется параметрами связи k_s , k_b и k_t (21).

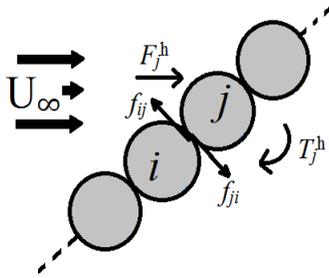


Рис. 15.

Гидродинамические взаимодействия связанных сфер в поле течения.

Далее предполагается, что волокно погружено в ньютоновскую жидкость с динамической вязкостью μ . Жидкость находится в движении, которое определено полем скорости \mathbf{U}_∞ . Гидродинамическая сила \mathbf{F}^h и крутящий момент \mathbf{T}^h действуют на каждую сферу, а тангенциальная сила трения \mathbf{f} действует в точке контакта между каждой парой сфер, как показано на рис. 15. Для примера рассматривается приближение Стокса ($Re < 1$). Если \mathbf{r}_j и $\boldsymbol{\theta}_j$ — это векторы положения и угла для сферы j , тогда сила гидродинамического сопротивления \mathbf{F}_j^h ,

действующая на сферический сегмент j , равна:

$$\mathbf{F}_j^h = -6\pi\mu a \left(\frac{d\mathbf{r}_j}{dt} - \mathbf{U}_\infty \right). \quad (22)$$

Похожим образом определяется соответствующий гидродинамический момент:

$$\mathbf{T}_j^h = -8\pi\mu a^3 \left(\frac{d\boldsymbol{\theta}_j}{dt} - \mathbf{w}_\infty \right), \mathbf{w}_\infty = 0.5 \text{ rot } (\mathbf{U}_\infty). \quad (23)$$

Поступательное и вращательное движения сегмента волокна i в поле течения описываются следующими дифференциальными уравнениями:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum \mathbf{F}_i^s + \sum \mathbf{f}_{ij} + \mathbf{F}_i^h, \quad (24)$$

$$\frac{2}{5} m a^2 \frac{d^2 \boldsymbol{\Theta}_i}{dt^2} = \sum \mathbf{T}_i^b + \sum \mathbf{T}_i^t + \sum \mathbf{f}_{ij} \times a \mathbf{n}_{ij} + \mathbf{T}_i^h. \quad (25)$$

Здесь m – масса сферического сегмента с плотностью ρ_f , \mathbf{f}_{ij} – сила трения, которая действует на сферу i со стороны сферы j . Знак суммирования в уравнениях (24), (25) означает суммирование слева и справа от элемента i .

В точке контакта двух сфер накладывается условие скольжения, поступательные скорости обеих сфер одинаковы. Это условие записывается следующим образом (символ \times обозначает векторное произведение):

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + a \frac{d\boldsymbol{\Theta}_i}{dt} \times \mathbf{n}_{ij} = \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} + a \frac{d\boldsymbol{\Theta}_j}{dt} \times \mathbf{n}_{ji} \quad (26)$$

Если волокно растягивается, то из-за непрерывности физического волокна по-прежнему рассматривается условие скольжения на контакте сфер (26).

Для нахождения \mathbf{f}_{ij} необходимо продифференцировать (26) по времени и подставить в него уравнения (24), (25), тогда получим систему из $3(N-1)$ линейных уравнений. После чего, определяются из (24), (25) \mathbf{r}_j и $\boldsymbol{\Theta}_j$ на новом временном шаге, используя методы численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Затем определяются новые значения гидродинамических и деформационных сил и моментов по выражениям (20), (22), (23), находятся \mathbf{f}_{ij} , и процесс повторяется для следующего временного шага.

В случае трехмерной модели волокна для описания в пространстве каждой сферы в данном исследовании, в отличие от известных работ, вводятся параметры Эйлера, которые периодически нормализуются во время расчета. Использование нормализованных параметров Эйлера позволяет сделать вычислительный алгоритм более стабильным. Для решения систем ОДУ (24), (25) применяется многошаговый явный метод Адамса-Башфорта 4-го порядка.

На основе представленной модели разработан программно-алгоритмический комплекс для моделирования динамики гибких волокон в жидкости. В ходе его тестирования исследуется поведение волокна в сдвиговом течении при различных параметрах гибкости, рассчитывается период вращения для различных относительных длин волокна. Полученные результаты сравниваются с аналитическими решениями.

Для гибких волокон деформация и структура поступательно-вращательного движения согласуются с экспериментальными данными (рис. 16) и результатами численных исследований других авторов (рис. 17).

В настоящем исследовании сформулирована задача о перемешивании с волокнистыми включениями в прямоугольной каверне с подвижным дном и крышкой. Рассматривается разрывный протокол перемешивания с периодом T , как в главе 4, за исключением того, что в качестве примеси используются гибкие волокна. Принимаются следующие допущения: концентрация волокон такова, что они не оказывают обратного влияния на жидкость и не взаимодействуют друг с другом.

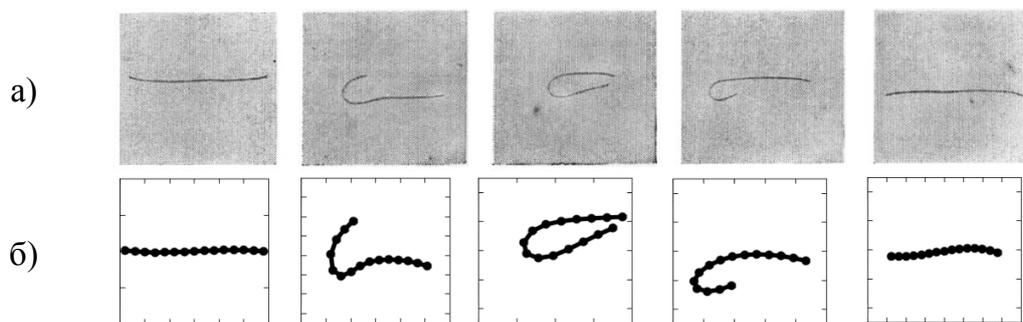


Рис. 16. Движение очень гибкого волокна в сдвиговом течении. а) Эксперимент. б) Результат численного моделирования.

В качестве материала дискретной фазы используется стекловолокно с длиной волокна $1.8e-02$ м и диаметром $3.6e-04$ м. Таким образом, рассматривается модель со следующими параметрами: $N = 50$, $a = 1.8e-04$ м, $E = 50$ ГПа, $G = 2.9$ ГПа, $\rho_f = 2500$ кг/м³. Общее число волокон в вычислительном эксперименте постоянно и равно 100. Для определения угла

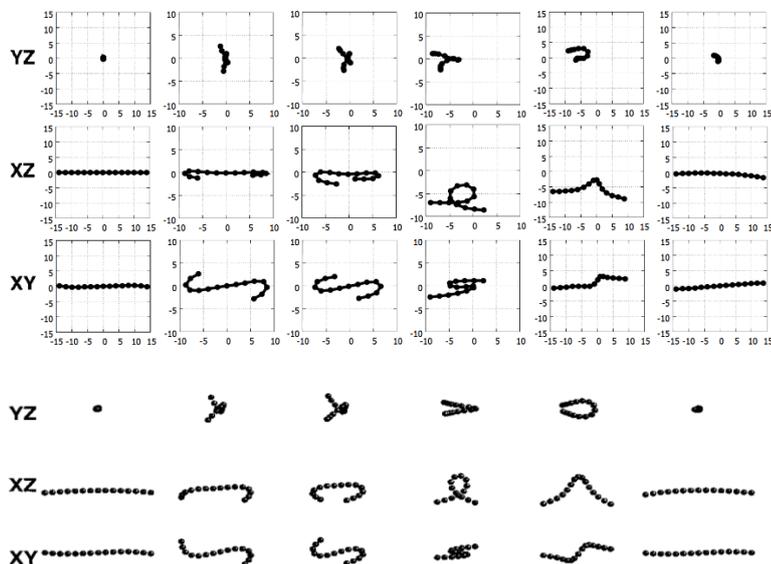


Рис. 17. Положение волокна в различные моменты времени. *Сверху* результаты, полученные с использованием представленной модели (точками показаны центры положения сфер). *Снизу* результаты работы других авторов.

гидродинамического расчета равен $1.0e-02$ с, а для расчета примеси $1.0e-05$ с. Время окончания расчета составляет 300 секунд.

В работе демонстрируется, что разрывный протокол способствует распределению волокон в пространстве таким образом, что большинство углов их ориентации принимают приблизительно равные значения. Кроме того, исследуется влияние периода разрывного протокола на процесс. В диапазоне значений периода от 3 до 10 с выявляются зоны жгутования: скопление волокон, очень близко расположенных друг к другу. Также определен оптимальный с точки зрения перемешивания и направленности волокон период разрывного протокола (рис. 18).

ориентации волокна $\varphi \in [0^\circ; 180^\circ]$ служит вектор \mathbf{P}_{end} , который соединяет его концы. Изначально ансамбль волокон располагается так, что центр масс каждого из них находится в центре каверны, при этом угол ориентации является случайной равномерно распределенной величиной ($\varphi \sim \mathcal{R} [0; 180]$). Начальное положение пятна генерируется один раз и используется в дальнейших исследованиях. На боковых границах каверны для дискретной фазы формулируются периодические условия. Шаг по времени в процессе

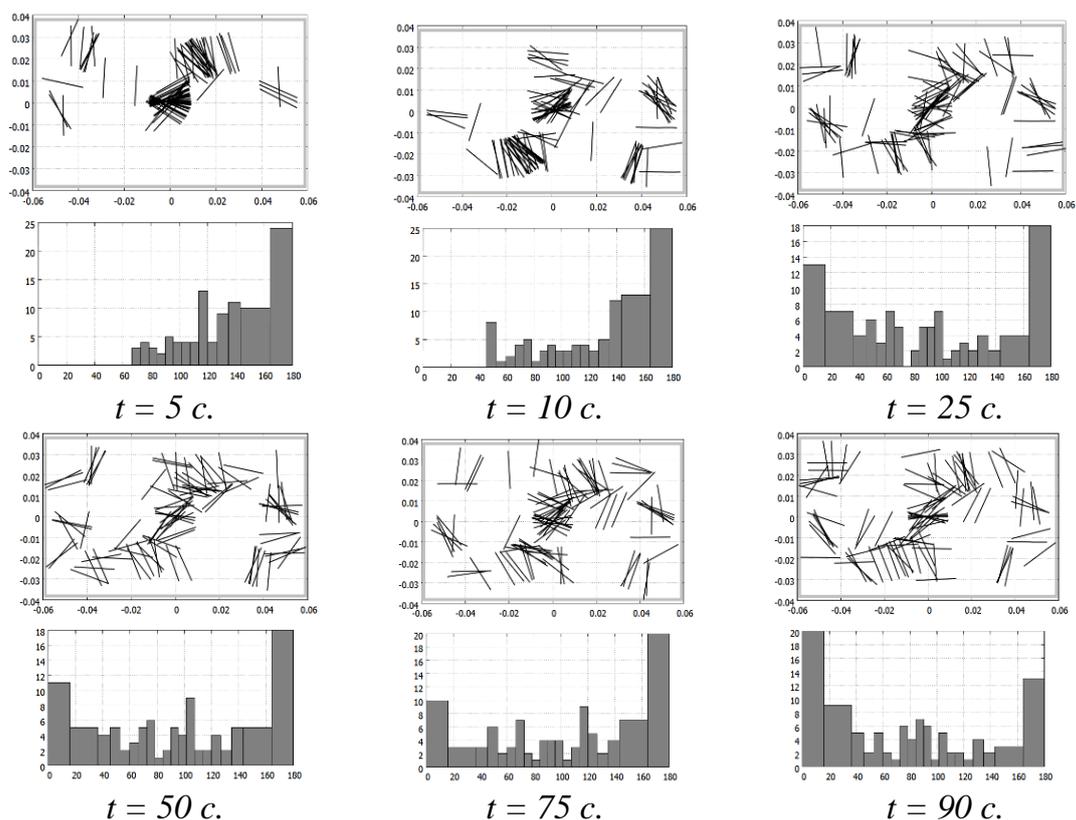


Рис. 18. Положения волокон в пространстве и гистограмма углов их ориентации в различные моменты времени. Период разрывного протокола $T = 2$ с.

Необходимо отметить, что при рассматриваемых параметрах жидкой и дисперсной фаз, волокна не испытывают сильной деформации. Максимальное отклонение от прямого волокна составляет десятую часть миллиметра и практически не воспринимается на рисунках глазом.

Таким образом, программный комплекс для моделирования динамики волокнистых включений в жидкости позволяет в деталях проследивать процесс формирования структуры композитных материалов.

В **заключении** представлены основные результаты диссертационной работы.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

1. Разработаны методы, алгоритмическое и программное обеспечение для моделирования процессов гидродинамического перемешивания, которые позволяют описывать пространственно-временные структуры в сложных течениях и оценивать их влияние на процесс перемешивания. Это создаёт основы для выбора эффективных схем перемешивающих устройств и оптимальных режимов их работы. [1-7, 9, 12]
2. Представлены результаты численного моделирования процессов гидродинамического перемешивания в установках колебательного типа. Исследовано влияние на процесс перемешивания амплитудно-частотных характеристик колеблющегося элемента, а также его геометрической формы. Получена карта режимов в плоскости «эффективность

- перемешивания – потребляемая мощность». Предложена методика оптимального размещения рабочих элементов. [1, 2, 4, 6, 7, 9]
3. Представлены результаты численного моделирования процессов гидродинамического перемешивания в системе подвижных коаксиальных профилированных цилиндров. Определены эффективные протоколы перемешивания, построена соответствующая карта режимов. Предложена методика профилирования внутреннего цилиндра на основе анализа особых точек в векторном поле скорости жидкости. Выявлен наиболее технологичный способ управления процессом перемешивания. [3, 5, 12]
 4. Сформулированы числа подобия для перемешивающих устройств двух различных классов. С помощью вычислительных экспериментов доказана их состоятельность. [3-5]
 5. С использованием разложений по динамическим модам разработаны алгоритмы и построены редуцированные модели для ряда задач перемешивания. Данный подход обеспечивает эффективное хранение информации о поле течения. [10]
 6. Сформулирована комплексная математическая модель динамики гибкого волокна в жидкой среде. Разработан и апробирован соответствующий программно-алгоритмический комплекс. Исследовано влияние протокола перемешивания на ориентацию ансамбля волокон в представленном типе устройств. [8, 11]

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в журналах из перечня ВАК и из МСЦ:

1. Ганиев Р.Ф., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е. Волновое перемешивание в установках колебательного типа // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2017. № 3. С. 5-10. (WoS, Scopus)
2. Ганиев Р.Ф., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е. Оптимизация пространственного расположения рабочих элементов в установках колебательного типа // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2018. № 1. С. 3-8. (WoS, Scopus)
3. Ганиев Р.Ф., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е. Профилирование поверхностей рабочих элементов перемешивающих устройств // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2019. № 3. С. 3-9. (WoS, Scopus)
4. Ганиев Р.Ф., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е. Влияние формы лопатки на эффективность перемешивания в установках колебательного типа // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2019. № 2. С. 3-8. (WoS, Scopus)
5. Ганиев Р.Ф., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е. Волновое перемешивание в системе подвижных коаксиальных цилиндров // Доклады Академии наук. 2019. Т. 486, № 1. С. 30-33. (WoS, Scopus)

Публикации в других изданиях:

6. *Ганиев Р.Ф., Панин С.С., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е.* Численное моделирование процесса перемешивания в установках колебательного типа // *Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016)*. 25-31 мая 2016 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2016. 600 с. С. 69-70.
7. *Ганиев Р.Ф., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Украинский Л.Е.* Влияние пространственного расположения рабочих элементов на процесс волнового перемешивания в установках колебательного типа // *Материалы XX Юбилейной Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным системам (ВМСППС'2017)*. 24-31 мая 2017 г., Алушта. – М.: МАИ-Принт, 2017. 816 с. С. 401-403.
8. *Сухарев Т.Ю., Ревизников Д.Л., Украинский Л.Е.* Моделирование динамики гибкого волокна в сдвиговом потоке // *Материалы Международной научной конференции «Колебания и волны в механических системах»*. 21-23 ноября 2017 г., Москва. – М.: Столица, 2017. 168 с. С. 35.
9. *Ганиев Р.Ф., Сухарев Т.Ю., Ревизников Д.Л., Украинский Л.Е.* Математическое моделирование и оптимизация процессов перемешивания в установках колебательного типа. // *Материалы Международной научной конференции «Колебания и волны в механических системах»*. 21-23 ноября 2017 г., Москва. – М.: Столица, 2017. 168 с. С. 33-34.
10. *Сухарев Т.Ю., Ревизников Д.Л.* Описание гидродинамических полей с использованием разложений по динамическим модам // *Сборник научных трудов XII Международной летней научной школы-конференции, посвященной 155-летию со дня рождения академика А.Н. Крылова*. 2018. 24-29 июня 2018 г., Чебоксары. – Чебоксары: Изд-во Чуваш. гос. ун-та, 2018. 268 с. С. 121-126.
11. *Сухарев Т.Ю., Ревизников Д.Л., Украинский Л.Е.* Компьютерное моделирование динамики гибкого волокна в жидкой среде. // *Материалы XII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018)*. 24-31 мая 2018 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2018. 768. С. 227-228.
12. *Ганиев Р.Ф., Сухарев Т.Ю., Ревизников Д.Л., Украинский Л.Е.* Численное моделирование волнового перемешивания в системе подвижных коаксиальных цилиндров // *Сборник тезисов международной конференции, посвященной 80-летию Института машиноведения им. А.А. Благонравова РАН «Машины, технологии и материалы для современного машиностроения»*, 21-22 ноября 2018 г., Москва. – Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2018. 225 с. С. 53.