Основни проблеми при численото решаване на уравненията на Навие-Стокс, описващи движението на вискозен несвиваем флуид в цилиндричен реактор с механично разбъркване

Анна Лечева

Basic problems in numerical solving of the Navier-Stockes equations, which describe motion of viscous uncompressible fluid in cylindrical reactor with mechanical mixing: *The paper presents basic problems in numerical solving of the Navier-Stockes equations. It is well known that these equations have not always known analytical solution and they usually have to be solved numerically. The difficulty in solving is due to nonlinearity of the equations, the complex shape of the geometrical domain and necessity of proper boundary conditions for all unknown functions.*

Key words: *mechanical mixing, cylindrical reactor, fluid motion, Navier-Stockes equations, numerical algorithm.*

ВЪВЕДЕНИЕ

Според световната научна общност по разбъркване, 25% от всички химични процеси се извършват между газ и течност, а 15% от процесите в химичните технологии се реализират в реактори с механично разбъркване и аерация [24]. Механичното разбъркване е основна операция в химическата промишленост и биотехнологиите.

Ето защо, изучаването на движенията на флуид в цилиндрични реактори с механично разбъркване е предизвикало интереса на изследователите още в средата на петдесетте години на миналия век. Първите изследвания в тази област са били провеждани експериментално в малки стъклени лабораторни съдове с прозрачни стени и основните изводи са били правени чрез пряко наблюдение и измерване на скоростните полета. Един от пионерите в тази област е японският учен Нагата (Nagata). Той изучава проблемите на разбъркването от чисто инженерна гледна точка и обобщава резултатите в сензационна за времето си книга "Разбъркването: принципи и приложения", ("Mixing: Principles and Applications") през 1975 година [9].

С навлизането на компютърните технологии в началото на осемдесетте години на миналия век, започва и бурното изследване на хидродинамичните характеристики на флуиди в съдове с ръзбъркване. Създават се теоритични модели и се провеждат изчислителни експерименти, които се сравняват с успоредно провеждани лабораторни наблюдения и експерименти.

В настоящата статия са представени основните проблеми, свързани с численото решаване на уравненията на Навие-Стокс, описващи движението на несвиваем вискозен флуид в цилиндричен реактор с механично разбъркване.

ИЗЛОЖЕНИЕ

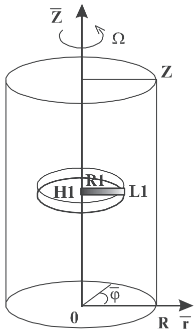
1. МАТЕМАТИЧЕСКИ МОДЕЛ

1.1. Геометрична област

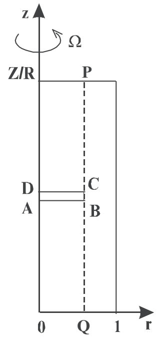
За построяването на математическия модел отчитаме, че реакторът представлява цилиндричен съд с плоско дъно и има дадени радиус R и височина Z. Той е запълнен с реакционната смес, за която може да се предположи, че е хомогенна или нехомогенна течност, в зависимост от конкретната технология. Бъркалките (една или повече) са неподвижно разположени на вал по оста на цилиндъра и се въртят с постоянна зададена ъглова скорост. Движението на флуида в реактора е ососиметрично и въртеливо, и се предизвиква от въртенето на вала с бъркалката, като целта на разбъркването е хомогенизация на флуида или интензификация на протичащите процеси.

От съображения за удобство, въвеждаме цилиндрична координатна система $(\bar{r}, \bar{\varphi}, \bar{z})$ [2, 21, 22]. Предполагаме, че бъркалката представлява диск с радиус R1 и дебелина L1. Дискът е поставен на височина H1 от дъното и се върти с постоянна зададена ъглова скорост Ω. Схемата на реактор с бъркалка е показана на Фиг.1.

В геометричната област има симетрия относно всяка равнина, минаваща през оста на симетрия на цилиндъра. Ето защо предполагаме, че неизвестните функции, които описват движението на флуида, зависят само от *r* и *z*. В такъв случай можем да разглеждаме само половината от осовото сечение на цилиндъра. По този начин тримерната геометрична област от Фиг.1. се редуцира в така наречената "изчислителна" геометрична област, която е двумерна. Тази област е показана на Фиг.2. В нея, всъщност, имаме $0 \le r \le 1$ и $0 \le z \le Z/R$. Бъркалката представлява областта ABCD.



Фиг.1. Схема на реактор с дискова бъркалка



Фиг.2 Схема на изчислителната геометрична област за реактор с дискова бъркалка

1.2. Основни уравнения на модела

Уравнението на непрекъснатостта и уравненията на Навие – Стокс описват движението на вискозните флуиди. Тези уравнения изразяват от математическа гледна точка основните закони за съхранение в механиката на непрекъснатите среди - закона за запазване на масата и на количеството на движение.

При направените предположения за движението на флуида и след въвеждане на функция на тока ψ, вихър на скоростта ω и момент на тангенциалната скорост M, основните уравнения на модела, записани в цилиндрични координати, са следните:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)=-\omega \tag{1}$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial (rUM)}{\partial r}+\frac{\partial (WM)}{\partial z}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial M}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 M}{\partial z^2}\right], \tag{2}$$

$$\frac{\partial (U\omega)}{\partial r}+\frac{\partial (W\omega)}{\partial z}-\frac{1}{r^3}\frac{\partial M^2}{\partial z}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial (r\omega)}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2}\right], \tag{3}$$

$$U=-\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z},\; W=\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}, \tag{4}$$

където $\vec{V}(U,V,W)$ е векторът на скоростта, $\mathrm{Re} = \frac{\Omega R^2}{\nu}$ е числото на Рейнолдс, R и ΩR са характерните размери на задачата съответно за дължина и скорост, ψ е функцията на тока, $\vec{\omega} = rot\,\vec{V} = (0,\omega,0)$ е векторът–вихър на скоростта и $M = Vr$ е големината на момента на тангенциалната скорост в безразмерен вид.

1.3. Гранични условия

За коректната математическа формулировка на разглежданата задача е необходимо да се дефинират гранични условия за неизвестните функции. Известно е, че цялото разнообразие от течения на вискозни флуиди се описва от уравненията на Навие-Стокс [16, 27]. Различните течения, т.е. различните решения на уравненията на Навие-Стокс, се различават помежу си по граничните и началните условия, както и по някои динамични параметри на течението, като например числото на Рейнолдс (Re). Това определя особената важност на коректното поставяне на граничните условия при решаването на конкретни задачи на хидродинамиката.

Областта, в която се изследва течението на флуида, т.е. реакторът с механично разбъркване, има неподвижни и подвижни твърди граници. Неподвижните граници са стените, пода и капака на реактора, а подвижната гарница е бъркалката, която се върти с постоянна ъглова скорост. Върху неподвижните твърди стени на реактора се поставят традиционните гранични условия за полепване и непротичане на вискозния флуид, т.е. поставят се нулеви гранични условия за компонентите на вектора на скоростта $\vec{V} = 0$. Върху бъркалката, скоростта на флуида съвпада с линейната скорост на бъркалката Ωr. Твърдите граници на областта, стените на бъркалката и линията на симетрия представляват линиии на тока. Граничните условия за функцията на тока върху тях са:

$$\psi = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0,$$

където n е единичният нормален вектор към съответната граница [16, 18, 25, 27].

Така формулираната задача за решаване уравненията на Навие - Стокс е отворена, тъй като за функцията на тока има две гранични условия, а за вихъра на скоростта липсва гранично условие [26, 27]. Това води до съществени затруднения при решаването, ако двете уравнения се разглеждат поотделно – задачата за определяне функцията на тока е преопределена, а тази за определяне вихъра на скоростта е неопределена.

Ето защо, обикновено, граничните условия за вихъра на скоростта се изчисляват от стойностите на функцията на тока в околност на границите, което обяснява необходимостта от едновременното решаване на двете уравнения (1) и (3). Граничното условие за вихъра ω се определя на базата на получените стойности на функцията на тока. Върху линията на симетрия – оста на цилиндъра - (Фиг.1), поставяме нулево гранично условие за вихъра $\omega = 0$ [27].

2. ПРОБЛЕМИ, СВЪРЗАНИ С ЧИСЛЕНОТО РЕШАВАНЕ НА УРАВНЕНИЯТА НА НАВИЕ-СТОКС

За да отпразнува навлизането на математиката в новото хилядолетие, Clay Mathematics Institute (CMI), Кеймбридж, Масачузетс, учредява награда за разрешаването на седем от основните нерешени математически проблеми. Програмата е замислена, за да бъдат отбелязани някои от най-трудните проблеми, с които математиката се бори в началото на второто хилядолетие; да се издигне в съзнанието на широката общественост фактът, че в математиката границите все още са отворени и изобилстват глобални нерешени проблеми; да се наблегне на значението на продължаващата работа за намиране на решение на най-дълбоките, най-трудните проблеми и да се признаят постиженията в математиката, които са от историческа величина.

Наградите са обявени на среща в Париж, проведена на 24 май 2000 г. в Collège de France. Списъкът със седемте основни нерешени проблеми на хилядолетието е изготвен от специално създаден за целта научен консултативен съвет на CMI, който се е срещал с водещи експерти в световен мащаб. В центъра на вниманието на този борд попадат важни класически въпроси, за които все още не е намерено решение в продължение на много години. Единият от тези проблеми е свързан с намиране на решение на уравненията на Навие-Стокс [6].

През 2006 година, същият институт публикува издание, в което са описани детайлно набелязаните по-рано основни седем проблема. В него Чарлс Феферман представя същността на проблема и предизвикателството за намиране на гладки решения на уравненията на Навие-Стокс, завършвайки с думите: „Флуидите са важни и трудни за разбиране. Има много пленяващи проблеми и предположения за поведението на решенията на уравненията на Ойлер и на Навие-Стокс. Тъй като ние дори не знаем дали съществуват тези решения, нашето разбиране е на много примитивно ниво. Стандартните методи на частните диференциални уравнения (PDE – Partial Differential Equations) изглеждат недостатъчни, за да разрешат този проблем. Вместо това, ние вероятно се нуждаем от някои дълбоки, нови идеи” [8].

Съществуват много трудности, които възпрепятстват пълното изследване на уравненията на Навие-Стокс и това представлява едно от основните научни предизвикателства на XXI век [4, 8, 17].

2.1. Проблеми, свързани с нелинейността

В уравнения (2) за големината на момента на тангенциалната скорост и (3) за вихъра на скоростта, коефициентът пред старшите производни е $\frac{1}{\mathrm{Re}}$. С нарастването на числото на Рейнолдс се намалява влиянието на дифузионните членове и се увеличава влиянието на конвективните (нелинейните) членове. Това води до съществени трудности при намирането на стационарни решения на уравненията на Навие-Стокс при големи числа на Рейнолдс. Тъй като $\frac{1}{\mathrm{Re}} \xrightarrow[\mathrm{Re}\to\infty]{} 0$, уравненията съдържат така наречения малък параметър пред старшата производна. В литературата тези уравнения са известни като singularly perturbed differential equations (сингулярно смутени диференциални уравнения).

Съществуват голям брой методи за намиране решенията на сингулярно смутени диференциални уравнения [14, 29]. Някои от тези методи са свързани с конструирането на специални мрежи [5, 12, 13, 29], върху които се доказва равномерната сходимост на съответния метод. За съжаление, тази теория е разработена изцяло за линейни уравнения на дифузия, реакция-дифузия или за едномерни и двумерни линейни уравнения на конвекция-дифузия.

Уравненията на Навие-Стокс, които описват движението на флуид в реактор с механично разбъркване са тримерни нелинейни частни диференциални уравнения на конвекция-дифузия и за тяхното решаване все още няма разработен математически апарат, базиран на теорията за изследване на сингулярно смутени диференциални уравнения чрез т. нар. fitted numerical methods for singular perturbation problems (удобни числени методи за решаване на сингулярно смутени диференциални уравнения) [15].

Други методи за решаване уравненията на дифузия или конвекция-дифузия са т. нар. finite volume methods (методи на крайните обеми). За тяхното прилагане се построяват мрежи с центрирани клетки (cell-centered grids) или мрежи върху диагоналите на клетките (cell-vertex grids). Основната идея на методите на крайните обеми се състои в записването на диференциалните уравнения в консервативна форма, интегрирането им върху клетките от мрежата (крайните обеми) и конвертирането на всеки интеграл върху границата на съответната клетка, посредством теоремата на Гаус [7, 13]. Основният проблем при използването на тези методи е свързан с решаването на алгебричните системи уравнения, които се получават след дискретизацията на основните уравнения. Налага се използването на паралелно програмиране за намиране на тяхното решение, особено ако се приложи техника за локално подобряване на мрежата (local refinement technique) [7].

Друг широко използван клас методи за решаване на уравненията на Навие-Стокс са методите на крайните елементи [1, 13]. В последните години тези методи заемат основно място в решаването на редица приложни задачи, каквато е и задачата за изследване на хидродинамиката в реактори с механично разбъркване. Методите на крайните елементи и на крайните обеми са в основата на софтуерния продукт FLUENT, собственост на корпорацията ANSYS Ltd. [3, 13]. За съжаление, използването на този продукт изисква големи възможности на изчислителната техника и дори използването на паралелно програмиране. Съществуват трудности при прилагането му на обикновен PC, поради процесорното време, необходимо за получаването на един резултат (повече от 1000 часа процесорно време) [11, 24].

2.2. Проблеми, свързани с геометричната област

Геометричната област, в която се изследва хидродинамиката има сложен характер поради наличието на разбъркващия диск. Изчислителната геометрична област от Фиг.2 съдържа изпъкналите в потока ъгли на диска - това са точките B и C от Фиг.2. Известно е, че съществуват проблеми с непрекъснатостта на решението в тези изпъкнали ъгли [10, 27, 29], което води до понижаване на точността на численото решение в тяхната околност. Възниква необходимостта от коректно поставяне на граничните условия за вихъра на скоростта в тези гранични точки, както и от конструирането на подходяща неравномерна мрежа със сгъстявания в критичните области.

Както вече беше споменато, поради специфичния характер на геометричната област се налага използването на цилиндрична координатна система, която е показана на Фиг.1. Проблемът, който възниква в този случай, е свързан с особеността на решението в околност на точката $r = 0$. В производните по пространствената променлива r в уравненията (1)-(4) участва изразът $1 / r$. В точките от мрежата, които са съседни на точката $r = 0$ се появява особеност от вида $\frac{1}{r} \xrightarrow[r \to 0]{} \infty$. Този проблем е преодолян посредством поставянето на условия за симетрия в околност на точката $r = 0$ и избора на подходящ числен алгоритъм за решаване на основните уравнения (1) - (4) [19].

2.3. Проблеми, свързани с граничните условия

При решаването на различни хидродинамични задачи, обикновено, върху твърдите граници на областта се поставят гранични условия за полепване и непротичане на вискозния флуид. Това са условията

$$\vec{V} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial \vec{V}}{\partial n} = 0 .$$

Когато задачата се решава в променливи скорост-налягане, възниква трудност при определянето на граничните условия за налягането [10, 26]. Когато задачата се решава в термините функция на тока-вихър на скоростта, възниква трудност при определянето на граничните условия за вихъра на скоростта върху твърдите граници на областта. Това се дължи на факта, че няма физични гранични условия за вихъра на скоростта там. За да се формулира коректно граничната задача, се налага да се поставят математически гранични условия за вихъра на скоростта. Различните автори подхождат по различен начин при поставянето на тези гранични условия. Тъй като вихърът се поражда от твърдите граници на геометричната област, обикновено се използват изчислените стойности на функцията на тока в околност на съответната граница. В специализираната литература съществуват гранични условия за вихъра на скоростта с различна точност и с различен брой точки от мрежата, в които стойностите на функцията на тока участват в изчисляването на граничните условия за вихъра на скоростта [10, 27, 28].

Предложени са диференчни уравнения от първи ред на точност за гранични условия за вихъра на скоростта. Те са изчислени на база на стойностите на функцията на тока в четири вътрешни точки от мрежата. В изпъкналите върхове на разбъркващия диск, граничните условия за вихъра на скоростта се изчисляват чрез стойностите на функцията на тока в седем съседни на ъгъла точки [19, 20].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящата статия са представени подробно проблемите, свързани с численото решаване на уравненията на Навие-Стокс, описващи движението на несвиваем вискозен флуид в цилиндричен реактор с механично разбъркване. Те се дължат основно на:

1. Нелинейността на уравненията на Навие-Стокс, поради наличието на конвективните членове в тях.
2. Сложния характер на геометричната област, поради изпъкналите в потока върхове на разбъркващия диск.
3. Необходимостта от поставяне на математически гранични условия за вихъра на скоростта, за да се затвори системата от диференциални уравнения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Akin J.E., Applcation and Implementation of Finite Elements Methods, Agrippa's Books, London, UK, 2003

[2] Angelov G., Zheleva I., Gerasimov B., Churbanov A. Mathematical Modeling of flow Hydrodynamics in a multistage column apparatus Hungarian journal of industrial chemistry Vesprem, vol. 21, 1993, pp 45-50

[3] ANSYS Inc., 2012, www.ansys.com

[4] Carlson J., Jaffe A., Wiles A., The Millennium Prize Problems, The Clay Mathematics Institute, Cambridge, MA, USA, 2006, www.ams.org

[5] Clavero C., Jorge J. C., Lisbona F., Shishkin G. I., Splitting time methods and one dimensional special meshes for reaction-diffusion parabolic problems, pp.106-113

[6] Clay Mathematics Institute, The Millennium Prize Problems, Official website: www.claymath.org

[7] Ewing R. E., Lazarov R. D., Vassilevski P. S., Local refinement techniques for elliptic problems on cell-centered grids, Wyoming, 1989

[8] Fefferman C., Existence and Smoothness of the Navier-Stokes Equation, The Millennium Prize Problems, The Clay Mathematics Institute, Cambridge, MA, USA, 2006, www.ams.org/library/monographs/MPP.pdf pp. 57-67

[9] Fountain G. O., Khakhar D. V., Mezic I., Ottino J. M., Chaotic mixing in a bounded three-dimensional flow, J. Fluid Mech, vol.417, 2000, pp. 265-301

[10] Gustafsson B., The convergence rate for difference approximations to general mixed initial boundary value problems. SIAM J. Numer. Anal., 1981, 18, No 2, pp.179-190

[11] Lamberto D. G., Alvarez M. M., Muzzio F. J., Experimental and computational investigation of the laminar flow structure in a stirred tank, Chemical Engeneering Science 54, 1999, pp. 919-942

[12] Madden N., Stynes M., Efficient generation of oriented meshes for solving convection-diffusion problems, International journal for numerical methods in engineering, John Wiley & Sons Ltd., New York, 1997, vol. 40, pp 565-576

[13] Marshall E., Bakker. A., Computational fluid mixing, Fluent Inc., 2003

[14] Miller J. J. H., O'Riordan E., Shishkin G. I., Fitted numerical methods for singular perturbation problems: Error estimates in the maximum norm for linear problems in one and two dimensions, World Scientific, Singapore, 1996
[15] Nikolova M., Prof.Dr. A. O. H. Axelsson-promotor, Adaptive refinement methods for singularly perturbed convection-diffusion problems, PhD Thesis Katholieke Universiteit Nijmegen, 1999
[16] Rempfer D., On boundary conditions for incompressible Navier-Stokes problems, Applied Mechanics Rewiews, ASME, Vol.59, pp. 107-125, 2006
[17] Smale S., Mathematical problems for the next century, Math Track, School of mathematical Sciences, GCU, 2005, Vol.1, No.1, pp. 5-30, Lahore, Pakistan
[18] Zheleva I., Kambourova V., Rusev R.,Dimitrov P., Numerical algorithm for studying hydrodynamics in a glass melting furnace, Conference "Differencial methods", Rousse, NOVA SCIENCE, USA, 242-251, 1997
[19] А. Лечева, Изследване на хидродинамиката в цилиндричен реактор с механично разбъркване, И. Желева – научен ръководител, Дисертация за присъждане на ОНС „Доктор", Русе, 2013
[20] А. Лечева, Поставяне на граничните условия за ненулевата компонента на вектора-вихър на скоростта при хидродинамични задачи с изпъкнал в потока ъгъл, Научни трудове РУ"А. Кънчев" 2004, Том 41, серия 7.2, Майски научни четения, стр. 176-183
[21] Ангелов Г., Герасимов Б. П., Желева И. М., Илиев О., Чурбанов А. Г. Математическое моделирование гидродинамических процессов в многоступенчатом колонном химическом аппарате Препринт № 39 за 1991 на Института по приложна математика "М.В.Келдыш АН СССР, 14 стр., 1991
[22] Ангелов Г., Желева И.,Численное исследование течения в колонном контактном химическом аппарате В сб. "Механика V Национален конгрес – Варна, България, 1985", 522 – 527, 1985
[23] Бахвалов Н., Жидков Н., Кобельков Г., Численные методы, Физматлит, Лаборатория базовых знаний, Москва – Санкт-Петербург, 2000
[24] Влаев С. Д. Хидродинамика и масообмен в реактори с механично разбъркване и аерация – автореферат на дисертационен труд за присъждане на научната степен "Доктор на техническите науки", 2003
[25] Желева И. М., Герасимов Б.П., Лесуновский А. В., Численный алгоритм для исследования гидродинамики в аппаратах с мешалками В Сб. Математика и математическо образование – 1991,221 – 229, 1991
[26] Маринова Р., Диференчни схеми на векторно разцепване на оператора за уравненията на Навие-Стокс, Хр. Христов – научен ръководител, Дисертация за присъждане на ОНС „Доктор", Варна, 1998
[27] Роуч П., Вычислительная гидродинамика, Мир, Москва, 1980
[28] Христов Хр., Полностью развитое течение вязкой несжимаемой жидкости в тороидальной трубе круглого поперечного сечения для широкого интервала числа Дийна, Новосибирск, 1978
[29] Шишкин Г. И., Сеточная аппроксимация сингулярно возмущенных краевых задач в невыпуклой области с кусочно-гладкой границей, Математическое моделирование, Вычислительные алгоритмы и методы, том 11, номер 11, 1999, стр. 75-90

За контакти:

гл. ас. д-р Анна Лечева, Катедра "Математика", Русенски университет "Ангел Кънчев", тел.: 082-888 420, e-mail: alecheva@uni-ruse.bg

Докладът е рецензиран.