

УДК 519.6

ОПРЕДЕЛЕНИЕ "ЛОКАЛЬНОЙ" СТЕПЕНИ ГОМОГЕННОГО СМЕШЕНИЯ ПРИ ПРЯМОМ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

Ю. В. Янилкин, А. Р. Гужова, Л. И. Дегтяренко, О. Г. Синькова
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Описывается модель для определения *локальной* (по пространству) степени гомогенного смешения при прямом численном моделировании турбулентного перемешивания двух несмешивающихся веществ. Под термином *локальная* понимается, что степень гомогенного смешения определяется для каждой смешанной ячейки, содержащей два вещества. Модель основана на анализе смешанной ячейки с точки зрения возможности восстановления контактной границы между веществами в такой ячейке. Если граница восстанавливается, то полагается, что вещества в ней не перемешаны, в противном случае вещества находятся в перемешанном состоянии.

Модель тестируется на классической задаче турбулентного перемешивания, возникающего вследствие неустойчивости Рэлея—Тейлора при постоянном ускорении контактной границы между двумя разноплотными газами. Численное моделирование задачи проведено как в двумерном, так и трехмерном приближении. Результаты вычислений для интегральной (по пространству) степени гомогенности с применением предлагаемой модели сравниваются с результатами, полученными по известной модели. Имеется удовлетворительное согласие результатов между собой, что дает основание для утверждения об адекватности предлагаемой модели.

Ключевые слова: неустойчивость Рэлея—Тейлора, зона турбулентного перемешивания, прямое численное моделирование, степень гомогенного смешения, методика ЭГАК.

Введение

В задачах турбулентного перемешивания вещества могут находиться в двух состояниях: перемешанном, когда они перемешаны вплоть до молекулярного уровня, и неперемешанном, когда смесь состоит из фрагментов веществ. Определение соответствующего состояния веществ (степени гомогенности) в некоторых задачах приобретает важное значение для определения скорости реакций — как химических, так и ядерных. При использовании феноменологических моделей турбулентности с этой целью разрабатываются специальные модели (см., например, [1]). При прямом численном моделировании для определения степени гомогенности широко используется модель, предложенная в работе [2] (далее модель 1). Модель может применяться как для смешивающихся, так и несмешивающихся веществ. С ее использованием вы-

полнен ряд исследований задачи гравитационного перемешивания (табл. 1). Во втором столбце таблицы приводятся результаты расчетов, в которых вещества описывались одним компонентом с одним и тем же уравнением состояния, в третьем столбце — расчетов с описанием веществ разными компонентами со своими плотностями, энергиями, объемными долями и, вообще говоря, уравнениями состояний.

Из табл. 1 видно, что имеются, во-первых, значительный разброс расчетных данных в зависимости от степени гомогенности θ (ср. результаты в разных столбцах) и, во-вторых, существенное отличие некоторых расчетных данных от экспериментальных. В [11] установлена связь значения θ с методом расчета (с выделением границы раздела или без него), а также способом обработки результатов. Показано, что для несмешивающихся жидкостей (в расчетах этому случаю соответствует выделение контактных границ (КГ)

Расчетные и экспериментальные данные по степени гомогенности

Работа и ее авторы	Одно вещество	Два вещества
Linden & Redondo [2], $At \approx 0,04 \div 0,05$ (эксперимент для смешивающихся жидкостей)	0,6 – 0,7	–
Кучеренко и др. [3], $At = 0,5$ (эксперимент для смешивающихся жидкостей)	$\sim 0,7$	–
Dimonte et al. [4], $At = 0,5$ (расчет)	0,8	0,3
Weber et al. [5], $At = 0,5$ (расчет)	0,7 – 0,75	0,25
Cook et al. [6], $At = 0,5$ (расчет)	0,75 – 0,8	–
Youngs [7], $At = 0,5$ (расчет)	0,75 – 0,8	–
Mellado & Sarkar [8], $At = 0,5$ (расчет)	0,75 – 0,8	–
Yanilkin et al. [9], $At = 0,5$ (расчет)	0,75 – 0,8	0,25 – 0,3
Stadnik et al. [10], $At = 0,5$ (расчет)	0,75 – 0,8	0,25 – 0,3

между компонентами смеси) значения θ лежат в пределах 0,25–0,3. К сожалению, экспериментальные данные имеются лишь для смешивающихся жидкостей и отсутствуют для несмешивающихся. Если задачу моделировать без выделения КГ (в предположении одного вещества), результаты расчетов согласуются с опытными данными для смешивающихся веществ.

По модели 1 определение степени гомогенности производится для фрагмента области решения задачи или для всей зоны турбулентного перемешивания (ЗТП). Для определения *локальной* степени гомогенности (в каждой смешанной ячейке) ее применение затруднено или требует большого количества вычислений из-за необходимости привлечения большого числа ячеек, окружающих данную. Предлагаемая ниже *модель контактных границ* (модель 2) предназначена прежде всего для определения именно локальной степени гомогенности, и для нее требуется информация о состоянии минимального количества соседних ячеек. Для ее тестирования используется модель 1.

Отметим также работу [12], в которой для описания степени гомогенного смешения предложена оригинальная феноменологическая модель. Однако полученные в [12] формы профилей θ существенно отличаются от тех, которые получаются при использовании модели 1, принятой в научной среде, поэтому ниже модель [12] не используется.

Модель интегральной степени гомогенности (модель 1)

Пусть имеются две несжимаемые жидкости, невозмущенные плотности каждой из которых

(без примеси другого вещества) ρ_1, ρ_2 . Объемная концентрация первого вещества β_1 , второго — $\beta_2 = 1 - \beta_1$. Согласно модели 1 [2] среднее значение степени гомогенного смешения определяется как

$$\theta = \frac{S \sum \beta_1 (1 - \beta_1) \Delta x \Delta y}{(\sum \beta_1 \Delta x \Delta y) (\sum (1 - \beta_1) \Delta x \Delta y)}. \quad (1)$$

В рассматриваемой задаче о гравитационном перемешивании плоского слоя смешения суммирование (осреднение) производится по горизонтальной плоскости площадью $S = \sum \Delta x \Delta y$, при этом в формулу входят как смешанные, так и "чистые" ячейки.

Отметим одну некорректность этой модели. Рассмотрим слой ячеек, в котором все ячейки имеют концентрации $\beta_1 = \beta_2 = 0,5$, в слоях выше $\beta_1 = 1$, а в слоях ниже $\beta_2 = 1$. Это означает, что в рассматриваемом слое ячеек имеется контактная граница, а согласно формуле (1) в этом случае получим значение $\theta = 1$, т. е. вещества оказываются полностью перемешанными.

Можно ввести в рассмотрение также интегральную по всей ЗТП степень гомогенности смешения [3]

$$\Theta = \frac{\int (\bar{\beta}_2 - \bar{\beta}_2^2) dz}{\int (\bar{\beta}_2 (1 - \bar{\beta}_2)) dz},$$

где черта сверху означает осредненное значение величины. Данная модель позволяет определять состояние перемешивания для ансамбля ячеек и интегральную степень гомогенности по всей ЗТП. Но при проведении расчетов, в которых надо рассчитать состояние перемешивания в каждой ячейке, например, в задачах горения, она

непригодна. Ниже предлагается модель 2, свободная от этого недостатка, т. е. позволяющая определять степень гомогенности смешения локально.

Модель локальной степени гомогенности (модель 2)

Предлагаемая в настоящей работе модель определения локальной степени гомогенности основана на следующих положениях:

1. Полагается, что вещества в каждой смешанной ячейке могут находиться только в одном из двух состояний: либо в гомогенно перемешанном, либо в неперемешанном. Промежуточные состояния не идентифицируются.
2. Определение степени гомогенности производится в зависимости от того, возможно в данной ячейке восстановление КГ или нет. В первом случае полагается, что вещества находятся в неперемешанном состоянии, во втором случае — в гомогенно перемешанном.

Основная проблема модели — это определение состояния смешанной ячейки. Рассмотрим соответствующий алгоритм в двумерном случае. Он представляет собой упрощенный вариант метода концентраций в методике ЭГАК [13]. Этот метод основан на использовании концентраций веществ в окрестности смешанных ячеек, содержащих два и более компонентов. На основе анализа поля концентраций на каждом шаге по времени может быть восстановлено положение КГ в ячейке, и исходя из этого производится определение потоков веществ из смешанных ячеек. В данном случае необходимо определить лишь факт наличия или отсутствия КГ в смешанной ячейке.

Сначала находим точку пересечения КГ со стороной ячейки, которая определяется как точка, где значение объемной концентрации равно 0,5. Значение концентрации вдоль стороны ячейки определяется линейной интерполяцией по ее значениям в узлах сетки. Так как в методике ЭГАК объемные концентрации центрированы для ячеек, то их значения в узлах находятся осреднением по четырем окружающим данный узел ячейкам:

$$\beta_{\text{узел}} = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 \beta_j. \quad (2)$$

Покажем на примере одномерной задачи на равномерной сетке (рис. 1), что точка, в которой концентрация равна 0,5, и есть точка пересечения КГ со стороной ячейки. Пусть в ячейке 0 находится КГ двух компонентов (пунктирная линия), один из которых имеет объемную концентрацию $\beta_1 = \beta_{10}$. Это означает, что линейный размер части ячейки, занятой этим компонентом, составляет $h_1 = \beta_{10}h$. При наличии КГ в ячейке 0 концентрация этого компонента в ячейке 1 должна быть равна 1 или 0. Пусть $\beta_{11} = 1$, тогда концентрация β_1 в ячейке 2 будет равна $\beta_{12} = 0$. При заданном состоянии концентрация этого компонента в узле A будет равна $\beta_{1A} = (1 + \beta_{10})/2$, а в узле B — $\beta_{1B} = (0 + \beta_{10})/2 = \beta_{10}/2$. Линейной интерполяцией по этим значениям можно определить концентрацию данного компонента в любой точке рассматриваемой ячейки. Легко показать, что координата точки, в которой концентрация этого компонента равна 0,5, совпадает с координатой определенной выше КГ.

Если такой точки на данной стороне ячейки не обнаруживается, т. е. объемная концентрация одного из компонентов в каждом из двух узлов ребра меньше 0,5 (или больше 0,5 для другого компонента), то КГ данную сторону ячейки не пересекает. Если таких сторон в ячейке оказывается больше или меньше двух, то КГ в этой ячейке не может быть восстановлена; тогда полагается, что вещества находятся в гомогенно перемешанном состоянии. В противном случае КГ в ячейке существует и вещества не перемешаны. Требуемое для анализа ситуации количество соседних ячеек в двумерном случае равно 8.

Данный подход просто обобщается на трехмерный случай. Обобщение заключается в том, что для наличия КГ в ячейке требуется, чтобы в ней были, как минимум, три ребра, на которых имеются точки с объемной концентрацией, равной 0,5. При этом в формуле (2) суммирова-

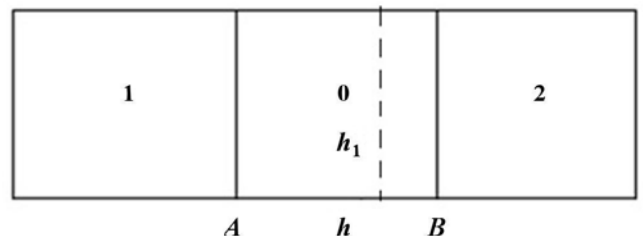


Рис. 1. К определению положения КГ

ние производится по восьми окружающим данный узел ячейкам. Таким образом, общее количество требуемых ячеек — 26.

Интегральная степень гомогенности в некоторой области задачи по модели 2 определяется по формуле

$$\Theta = \frac{\sum_{j=1}^N \beta_j^{\text{гом}} V_j}{\sum_{i=1}^N V_i},$$

где $\beta_j^{\text{гом}}$ — объемная концентрация вещества в ячейке, в которой оно считается гомогенно перемешанным; суммирование выполняется по всем смешанным ячейкам рассматриваемой области, содержащим данное вещество.

Для тестирования предложенной модели степени гомогенности ниже приводятся результаты расчетов классической задачи гравитационного турбулентного перемешивания в двумерной и трехмерной постановках (2D- и 3D-расчетов).

Постановка задачи и расчетов

В начальный момент времени два полупространства, разделенные плоскостью $z = z_c = 0$ (рис. 2), заполнены покоящимися идеальными газами с плотностями $\rho_1 = 1$ и $\rho_2 = 3\rho_1$; число Атвуда $At = 0,5$. Оба газа находятся в поле постоянного ускорения тяжести $g_z = -1 \equiv -g$, направленного от тяжелого вещества к легкому.

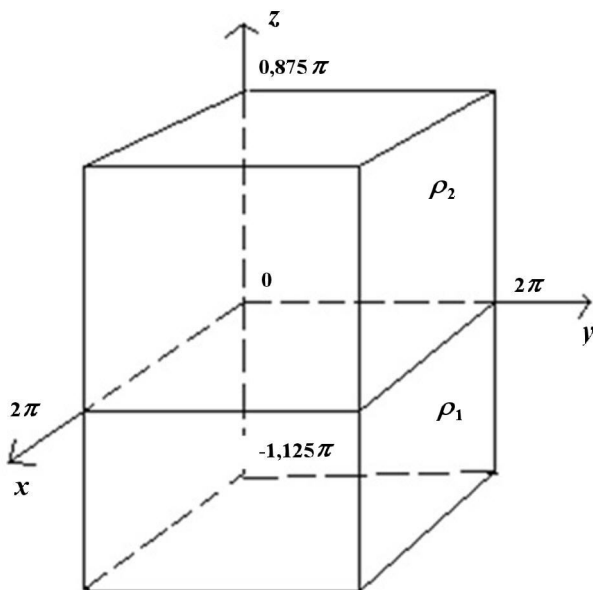


Рис. 2. Начальная геометрия задачи

Счетная область — куб со стороной 2π . Координата верхней грани $z_2 = 0,875\pi$, нижней — $z_1 = -1,125\pi$. Счетная сетка состоит из 1000^3 кубических ячеек. В начальный момент на границе раздела $z_c = 0$ (в слое толщиной в одну ячейку) задаются случайные возмущения плотности $\delta\rho = \pm\rho_1\delta$, где $\delta = 0,1$.

Начальный профиль давления задается исходя из условия гидростатического равновесия: $P(z) = P_0 - \int_{z_2}^z \rho(z) g dz$. Здесь $P_0 = 10$. Давление $P \approx P_0$ таково, что для данного турбулентного течения хорошо выполняется условие несжимаемости: $k = \xi L_T g \ll \gamma P / \rho$, где k — турбулентная энергия; L_T — ширина ЗТП; $\xi = \text{const} \ll 1$.

Задано уравнение состояния идеального газа с постоянной адиабатой $\gamma = 1,4$. На всех границах счетной области задавалось условие *идеальной жесткой стенки*.

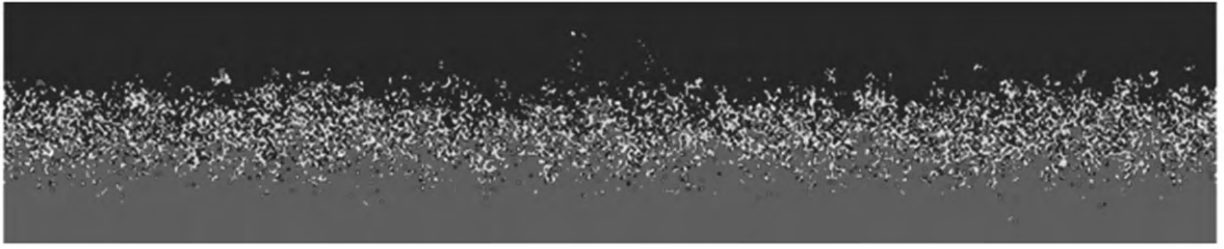
Проводилось также 2D-моделирование задачи. В этом случае направление y отсутствует, во всем остальном постановка задачи идентична описанной.

Результаты расчетов

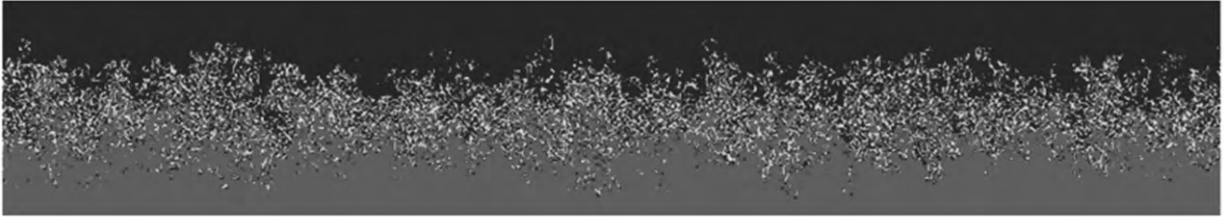
Рассмотрим сначала общую картину течения. Из рис. 3, на котором приведены результаты, полученные в 2D- и 3D-расчетах на один и тот же момент времени ($t = 4,2$), видно, что они достаточно близки как по общей картине течения (имеется выраженная ЗТП), так и по ширине ЗТП. Еще более наглядно это видно из рис. 4, на котором приводятся профили осредненной (по поперечным плоскостям $z = \text{const}$ в трехмерном случае и по линиям $z = \text{const}$ — в двумерном) объемной концентрации одного из веществ. Видно, что профили 2D- и 3D-расчетов близки, близки и ширины ЗТП.

Как было отмечено, модель 2 позволяет определить локальную степень гомогенности.

Далее на рисунках и в таблицах расчетные данные приводятся на момент времени $t = 4,5$. На рис. 5 — распределение смешанных ячеек, содержащих гомогенно перемешанную смесь. В двумерном случае (см. рис. 5, а) это все ячейки, в трехмерном (см. рис. 5, б) — в одном двумерном разрезе $x = \text{const}$ по линиям сетки. На рис. 6 приводится степень гомогенного смешения для легкого вещества (компонент 1), определенная по моделям 1 и 2 в 3D-расчете, а на рис. 7, 8 та же величина сравнивается с полученной в двумер-



a



б

Рис. 3. Картины течения на момент времени $t = 4,2$: *a* — 3D-расчет (плоскость $x = \text{const}$); *б* — 2D-расчет

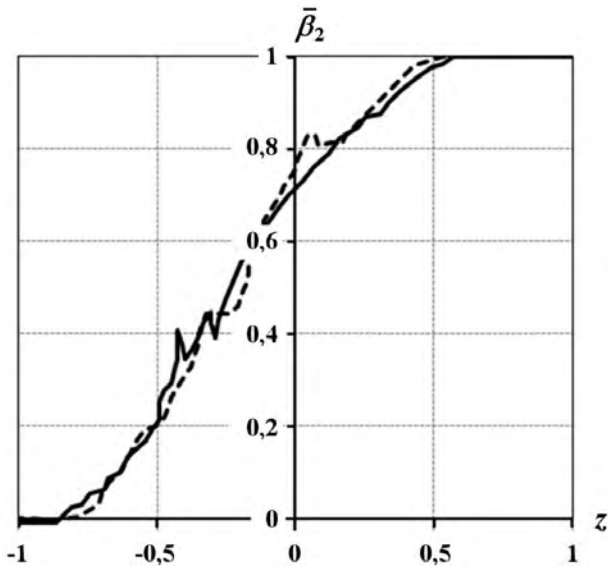


Рис. 4. Профили осредненной концентрации тяжелого вещества на момент времени $t = 4,2$: - - - - 2D-расчет, — — 3D-расчет

ном расчете. В табл. 2 приводятся интегральные значения степени гомогенности по всей ЗТП.

Обсуждение и выводы

Результаты расчетов (см. рис. 3–5, 7, 8) показывают, во-первых, близость картин пере-

Таблица 2

Интегральные (по всей ЗТП) значения степени гомогенности в расчетах, $t = 4,5$

Расчет	Модель 1		Модель 2	
	Компонент 1	Компонент 2	Компонент 1	Компонент 2
2D	0,317	0,289	0,359	0,278
3D	0,310	0,320	0,311	0,323

мешивания в двумерном и трехмерном случаях. Это дает основание для проведения 2D-моделирования трехмерного процесса перемешивания, что позволяет получать вполне адекватную картину процесса. Во-вторых, предлагаемая модель 2 определения степени гомогенности для прямого численного моделирования в двумерном и трехмерном приближениях дает интегральное по ЗТП значение величины, качественно согласующееся с известной моделью 1 (см. рис. 6 и табл. 2). Предлагаемая модель, однако, предпочтительнее модели 1, потому что она, в отличие от предыдущей, позволяет получать локальную (в каждой смешанной ячейке) степень гомогенности, которая, как правило, более необходима в практических расчетах по сравнению с интегральной величиной.

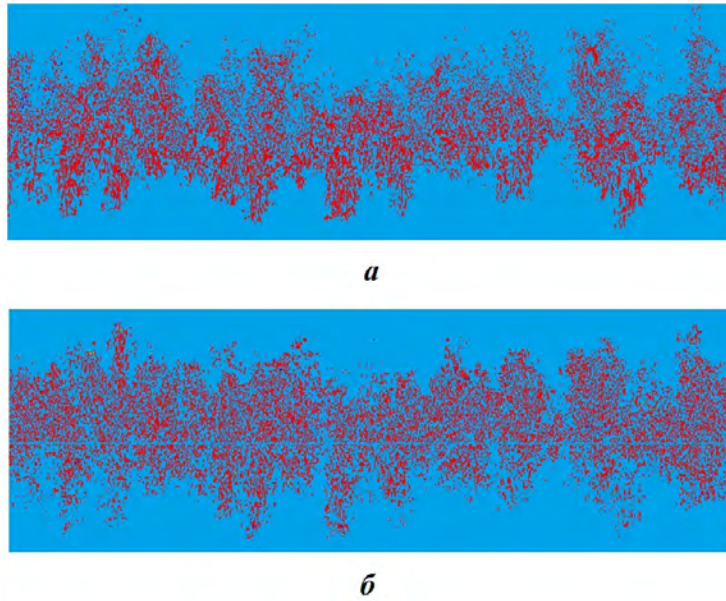


Рис. 5. Распределение смешанных ячеек, содержащих гомогенную смесь, по модели 2 (другие смешанные ячейки не представлены) на момент времени $t = 4,5$: *a* — 2D-расчет; *b* — 3D-расчет, двумерное сечение $x = \text{const}$

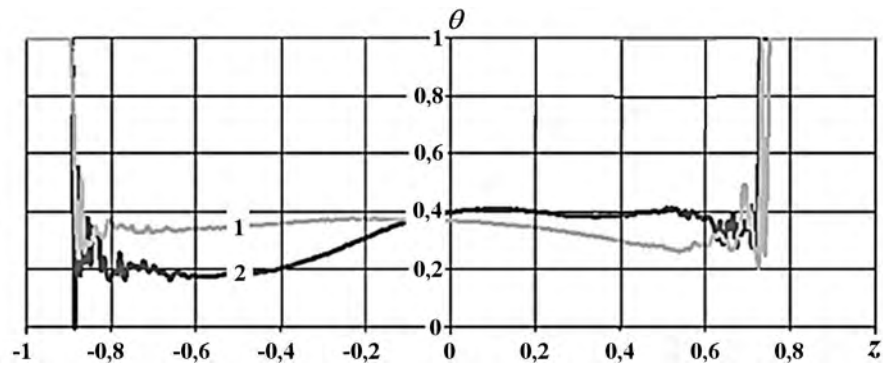


Рис. 6. Профили степени гомогенного смешения для компонента 1 в зависимости от высоты в 3D-расчете, $t = 4,5$: 1 — модель 1; 2 — модель 2

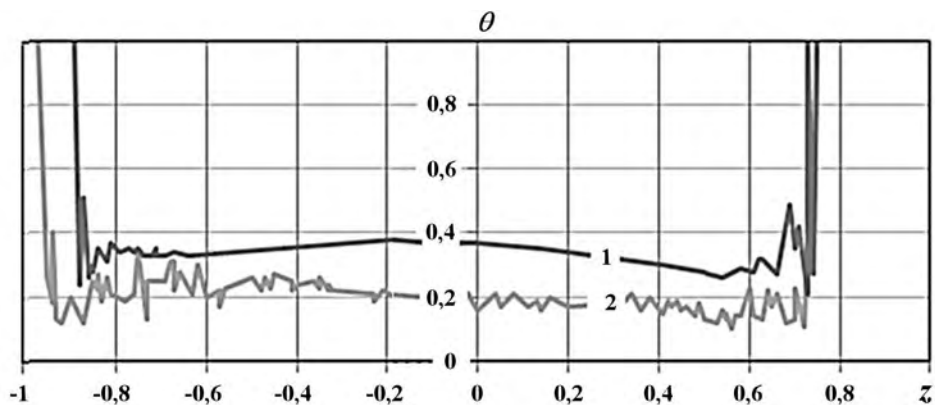


Рис. 7. Профили степени гомогенного смешения для компонента 1 в зависимости от высоты в расчетах по модели 1, $t = 4,5$: 1 — 3D-расчет; 2 — 2D-расчет

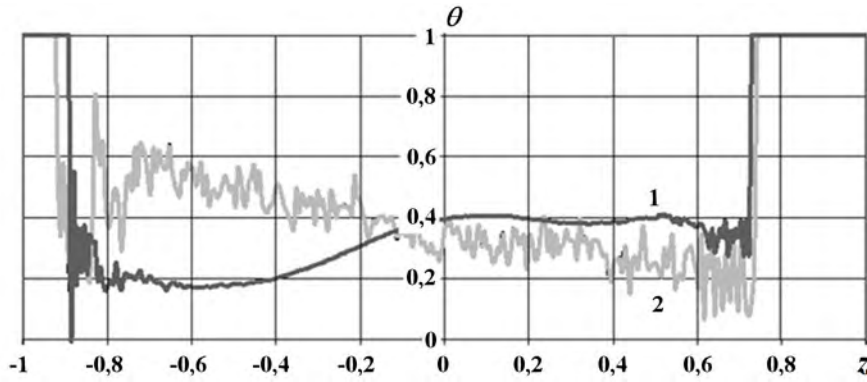


Рис. 8. Профили степени гомогенного смешения для компонента 1 в зависимости от высоты в расчетах по модели 2, $t = 4,5$: 1 — 3D-расчет; 2 — 2D-расчет

Список литературы

1. *Никифоров В. В.* Турбулентное перемешивание на контактной границе разноплотных сред // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1985. Вып. 1. С. 3–8.
Nikiforov V. V. Turbulentnoe peremeshivanie na kontaktnoy granitse raznplotnykh sred // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 1985. Vyp. 1. S. 3–8.
2. *Linden P. F., Redondo J. M.* Molecular mixing in Rayleigh–Taylor instability // J. Fluid Mech. A. 1991. Vol. 3 (5). P. 1269–1277.
3. *Кучеренко Ю. А., Пылаев А. П., Мурзаков В. Д.* Экспериментальное определение доли молекулярного перемешивания на стадии развития рэлей–тейлоровской неустойчивости методикой химического индикатора // VII Забабакхинские науч. чтения. Снежинск, 2005.
Kucherenko Yu. A., Pylaev A. P., Murzakov V. D. Eksperimentalnoe opredelenie doli molekulyarnogo peremeshivaniya na stadii razvitiya reley-teylovskoy neustoychivosti metodikoy khimicheskogo indikatora // VII Zababakhinskie nauch. chteniya. Snezhinsk, 2005.
4. *Dimonte G., Youngs D. L., Dimits A., Weler S., Marinak M., Wunsch S., Garasi C., Robinson A., Andrews M. J., Ramaprabhu P., Calder A., Fryzell B., Biello J., Dursi L., MacNeice P., Olson K., Ricker P., Rosner F., Tufo H., Young Y.-N., Zingale M.* A comparative study of the turbulent Rayleigh–Taylor instability using high-resolution three-dimensional numerical simulations: the Alpha-Group collaboration // Phys. Fluids. 2004. Vol. 16, No 5. P. 1668–1693.
5. *Weber S. W., Dimonte G., Marinak M. M.* ALE simulations turbulent Rayleigh–Taylor instability in 2D and 3D // 8th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. USA, Pasadena, 2001.
6. *Cook A. W., Cabot W., Miller P. L.* The mixing transition in Rayleigh–Taylor instability // J. Fluid Mech. 2004. Vol. 511. P. 333–362.
7. *Youngs D. L.* Variable acceleration Rayleigh–Taylor mixing // 6th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. France, Marseille, 1997. P. 534–538.
8. *Mellado J. P., Sarkar S.* Large-eddy simulation of Rayleigh–Taylor turbulence with compressible miscible fluids // Phys. Fluids. 2005. Vol. 17, No 076101. P. 1–20.
9. *Янилкин Ю. В., Стаценко В. П., Ребров С. В., Силькова О. Г., Стадник А. Л.* Исследование гравитационного турбулентного перемешивания при больших разноплотностях с помощью прямого трехмерного численного моделирования // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 2. С. 3–9.
Yanilkin Yu. V., Statsenko V. P., Rebrov S. V., Sinkova O. G., Stadnik A. L. Issledovanie gravitatsionnogo turbulentnogo peremeshivaniya pri bolshikh raznplotnostyakh s pomoshchyu pryamogo trekhmernogo chislennogo modelirovaniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovaniye fizicheskikh protsessov. 2002. Vyp. 2. S. 3–9.

- nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2002. Вып. 2. С. 3—9.
10. Стадник А. Л., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Учет молекулярной вязкости при прямом 3D численном моделировании гравитационного турбулентного перемешивания // Там же. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 1—2. С. 74—83.
Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V. Uchet molekulyarnoy vyazkosti pri pryamom 3D chislennom modelirovanii gravitatsionnogo turbulentnogo peremeshivaniya // Tam zhe. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 2005. Вып. 1—2. С. 74—83.
11. Стаценко В. П., Янилкин Ю. В., Синькова О. Г., Стадник А. Л. Степень однородного смешения по результатам 3D численных расчетов гравитационного турбулентного перемешивания // Там же. 2007. Вып. 2—3. С. 32—40.
- Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Sinkova O. G., Stadnik A. L. Stepen gomogennoogo smesheniya po rezultatam 3D chislennykh raschetov gravitacionnogo turbulentnogo peremeshivaniya // Tam zhe. 2007. Вып. 2—3. С. 32—40.*
12. Kozlovskih A. S., Neuvazhayev D. V. Coefficient of heterogeneity in turbulent mixing zone // *Lazer and Particle Beams*. 2000. Vol. 18. P. 207—212.
13. Янилкин Ю. В. Численное моделирование двумерных течений многокомпонентной среды с учетом некоторых мелкомасштабных процессов // *Физическая мезомеханика*. 1999. Т. 2. № 5. С. 27—48.
Yanilkin Yu. V. Chislennoe modelirovanie dvymernykh techeniy mnogokomponentnoy sredy s uchetom nekotorykh melkomasshtabnykh protsessov // Fizicheskaya mezomekhanika. 1999. Т. 2. № 5. С. 27—48.

Статья поступила в редакцию 10.10.19.

IDENTIFICATION OF THE "LOCAL" HOMOGENEOUS MIXING DEGREE IN THE DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT MIXING / Yu. V. Yanilkin, A. R. Guzhova, L. I. Degtyarenko, O. G. Sinkova (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region).

The paper describes a model used to identify the local (in space) degree of homogeneous mixing in the direct numerical simulation of the turbulent mixing of two immiscible fluids. The term "local" means that the degree of homogeneous mixing is identified for each mixed cell containing two materials. The model is based on the analysis of a mixed cell from viewpoint of the ability to reconstruct a material-material interface in such a cell. If the interface is recoverable, it is assumed that materials are not mixed in the cell, otherwise materials are in the mixed state.

The model was tested on the classic problem of turbulent mixing under the Rayleigh-Taylor instability conditions due to a continuously accelerating interface between two fluids (gases) of different densities. Both the 2D and 3D numerical simulations of the problem were performed. Results of simulations with the proposed model for the integral (in space) degree of homogeneity were compared with those obtained using the known model. There is a satisfactory agreement of results that allows stating the proposed model adequacy.

Keywords: Rayleigh-Taylor instability, turbulent mixing area, direct numerical simulation, a homogeneous mixing degree, the EGAK code.
