

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951505309_2022_27_1_442

Определение локальной степени гомогенного смешения при прямом численном моделировании турбулентного перемешивания

А. Р. Гужова, Л. И. Дегтяренко,
О. Г. Синькова, Ю. В. Янилкин

Описывается модель 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 восстанавливаема, то предполагается, что вещества в ней не перемешаны, в противном случае вещества находятся в перемешанном состоянии.

Модель тестируется на классической задаче турбулентного перемешивания, возникающего вследствие неустойчивости Рэля – Тейлора при постоянном ускорении контактной границы между двумя разноплотными газами. Численное моделирование задачи проведено как в двумерном, так и в 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.

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 (степени гомогенности) смеси 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 выполнен 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.

Таблица 1

Расчетные и экспериментальные данные по степени гомогенности

Работа и ее авторы	Одно вещество	Два вещества
Linden & Redondo [2], $At \approx 0,04-0,05$ (эксперимент для смешивающихся жидкостей)	0,6–0,7	–
Кучеренко и др. [3], $At = 0,5$ (эксперимент для смешивающихся жидкостей)	~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

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) 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 количества 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

$$\theta = \frac{S \sum \bar{\beta}_1 (1 - \bar{\beta}_1) \Delta x \Delta y}{(\sum \bar{\beta}_1 \Delta x \Delta y) (\sum (1 - \bar{\beta}_1) \Delta x \Delta y)}. \quad (1)$$

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]

$$\Theta = \frac{\int (\overline{\beta_2 - \beta_2^2}) dz}{\int (\overline{\beta_2 (1 - \beta_2)}) dz},$$

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]. Метод концентраций 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 (штриховая 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 $\beta_{1A} = \frac{1 + \beta_{10}}{2}$, а в узле B – $\beta_{1B} = \frac{0 + \beta_{10}}{2} = \frac{\beta_{10}}{2}$. 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 будет равна 0,5, совпадает с положением определенной выше КГ.

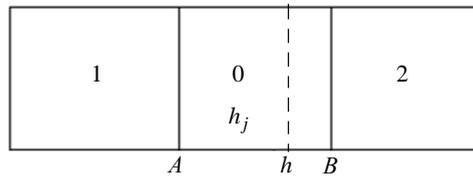


Рис. 1. К определению положения КГ

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) суммирование 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, разделенных 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. 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 $\delta = 0,1$.

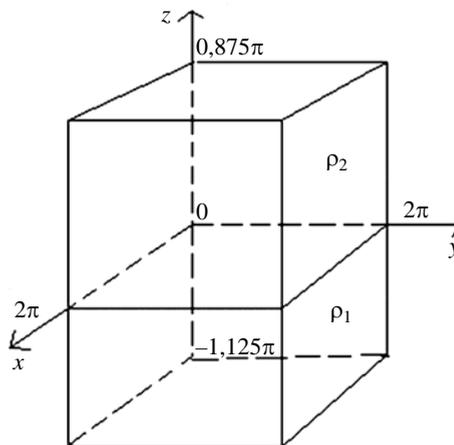


Рис. 2. Начальная геометрия задачи

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 вышеописанной.

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.

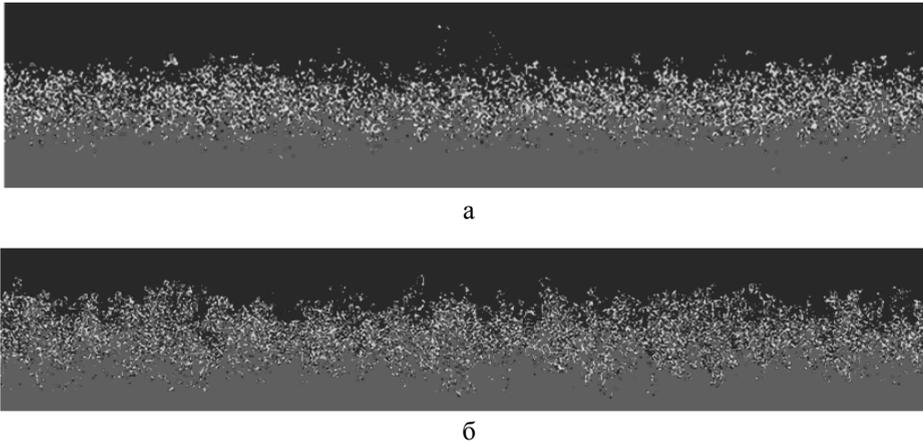


Рис. 3. Картины течения на момент времени $t = 4,2$: а – 3D расчет (плоскость $x = \text{const}$); б – 2D расчет

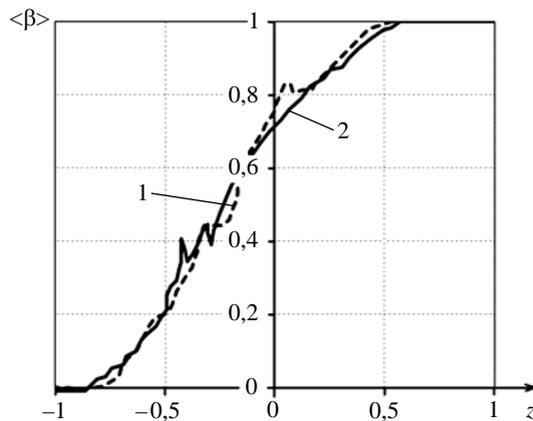
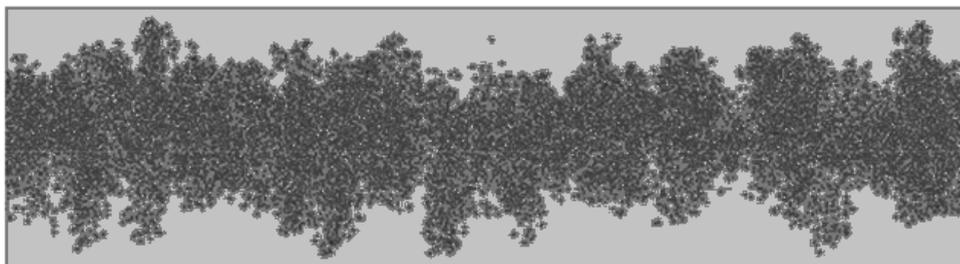


Рис. 4. Профили осредненной концентрации тяжелого вещества $\langle \beta \rangle$ на момент времени $t = 4,2$: 1 – 2D расчет, 2 – 3D расчет

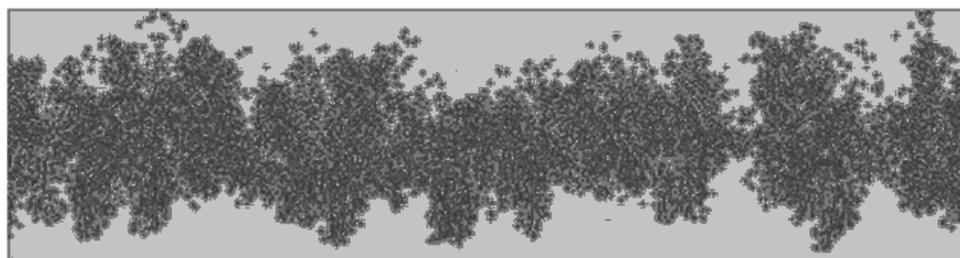
Как было отмечено, модель 2 позволяет определить локальную степень гомогенности.

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 случае (см. рис. 5,б) – в одном двумер-

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



а



б

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

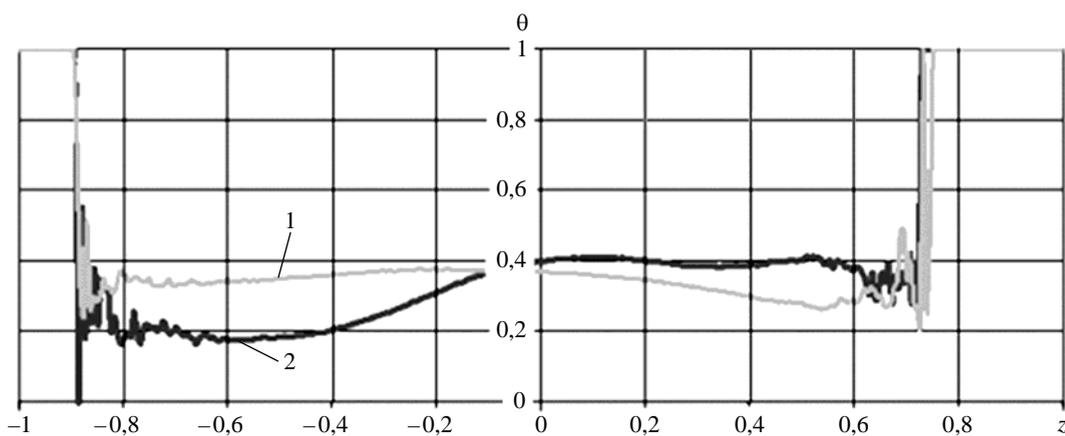


Рис. 6. Профили степени гомогенного смешения для компонента 1 в зависимости от высоты в 3D расчете, $t = 4,5$: 1 – модель 1; 2 – модель 2

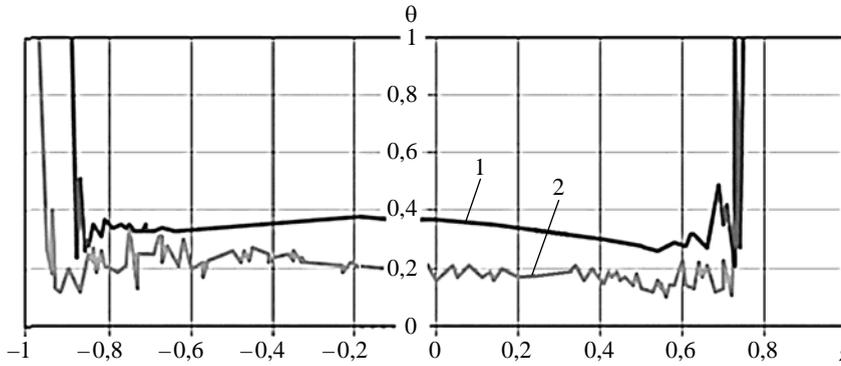


Рис. 7. Профили степени гомогенного смешения для компонента 1 в зависимости от высоты в расчетах по модели 1, $t = 4,5$: 1 – 3D расчет, 2 – 2D расчет

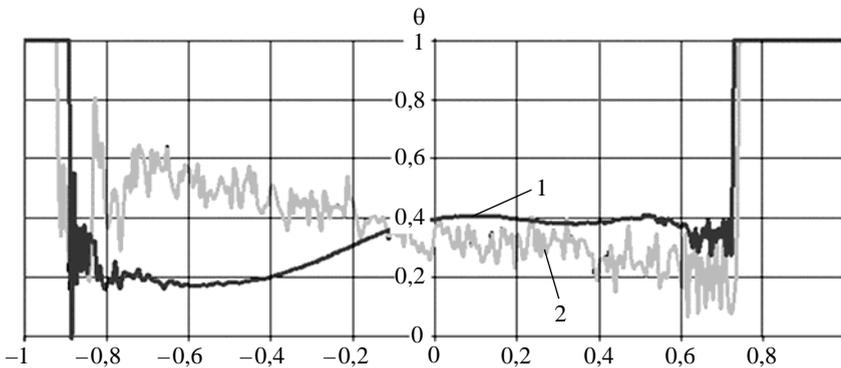


Рис. 8. Профили степени гомогенного смешения для компонента 1 в зависимости от высоты в расчетах по модели 2, $t = 4,5$; 1 – 3D расчет, 2 – 2D расчет

Таблица 2

Интегральные (по всей ЗТП) значения степени гомогенности в расчетах

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

Обсуждение и выводы

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

Список литературы

1. Никифоров В. В. Турбулентное перемешивание на контактной границе разноплотных сред // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теор. и приклад. физика. 1985. Вып. 1. С. 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. и др. Экспериментальное определение доли молекулярного перемешивания на стадии развития рэлей-тэйлоровской неустойчивости методикой химического индикатора // Сб. докл. междунаро. конф. «VII Забабахинские научные чтения». – Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2005.
4. Dimonte G., Youngs D. L., Dimits A. et al. 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, N 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. Pasadena, USA, 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. Marseille, France, 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, N 076101. P. 1–20.
9. Yanilkin Yu. V., Statsenko V. P., Rebrov S. V. et al. Study of gravitational turbulent mixing at large density differences using direct 3D numerical simulation // 8th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. Pasadena, USA, 2001.
10. Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V. Direct 3D numerical simulation of gravitational turbulent mixing with regard to molecular viscosity // 9th Int. Workshop on Physics of Compressible Turbulent Mixing. Cambridge, England, 2004.
11. Стаценко В. П., Янилкин Ю. В., Синькова О. Г., Стадник А. Л. Степень гомогенного смешения по результатам 3D численных расчетов гравитационного турбулентного перемешивания // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теор. и приклад. физика. 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.

Identification of the «Local» Homogeneous Mixing Degree in the Direct Numerical Simulation of Turbulent Mixing

A. R. Guzhova, L. I. Degtyarenko, O. G. Sin'kova, Yu. V. Yanilkin

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.