



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

Прямое численное моделирование турбулентного перемешивания веществ

Забабахинские Научные Чтения

Янилкин Ю.В.

Что надо моделировать

Перемешивание – это сложный процесс, включающий в себя несколько стадий:

- **линейный и нелинейный этапы роста начальных возмущений,**
- **этап перехода в турбулизированный режим,**
- **этап развитой турбулентности,**
- **этап затухания турбулентности и сепарации веществ и перехода течения в ламинарный режим,**
- **определение локальной степени гомогенности перемешивания.**

Все эти этапы надо уметь моделировать, так как в задаче могут быть они все.

Методы моделирования перемешивания

1. Прямое численное моделирование (ПЧМ или DNS) по 3D кодам без привлечения каких-либо моделей перемешивания. Общепринято, что это решение уравнений Навье-Стокса, однако возможно и решение уравнений Эйлера при условии малости молекулярной вязкости по сравнению с турбулентной вязкостью. Имеется ограничение, связанное со счетным числом Рейнольдса, которое определяется количеством ячеек в задаче.
2. Моделирование крупных вихрей (LES), основанный на прямом моделировании крупномасштабных вихрей и использовании подсеточных моделей для моделирования вихрей с масштабами, меньшими размеров счетной ячейки. Позволяет использовать достаточно грубую сетку.
3. RANS моделирование – это модели типа к-е и НИК. Сетка может быть грубой.

В настоящее время не существует RANS моделей для полномасштабного моделирования всех стадий перемешивания, имеются лишь модели для стадии развитой турбулентности. LES моделирование имеет ограничение, связанное с начальным спектром мелкомасштабных возмущений из-за недостаточно мелкой сетки. Технология ПЧМ – единственная, которая позволяет моделировать все стадии процесса перемешивания.

Что здесь понимается под прямым численным моделированием?

1. Решаются 2D или 3D уравнения Эйлера или Навье-Стокса.
2. Предполагается, что размеры счетных ячеек на порядки меньше масштабов энергонесущих вихрей.
3. Не применяются никакие дополнительные модели.

Одни из первых публикаций:

1. Анучина Н.Н., Кучеренко Ю.А., Неуважаев В.Е. и др. Турбулентное перемешивание на ускоряющейся границе разноплотных жидкостей // МЖГ, №6, 1978.
2. Андронов, Бахрах, Никифоров, Янилкин. Численное моделирование некоторых турбулентных течений в приближении двумерной турбулентности // МЖГ, №6, 1984.

Далее приводятся результаты моделирования по методике ЭГАК.

Про методику ЭГАК

1. Решаются 2D или 3D уравнения Эйлера или Навье-Стокса в лагранжево-эйлеровых переменных на неподвижных сетках.
2. Счетная сетка представляет собой квадратики (2D) или кубики (3D). Возможны и другие сетки.
3. Для решения уравнения адвекции в однородной среде используется метод PPM.
4. Для многокомпонентных течений используется метод концентраций (VOF).
5. Разностная схема имеет первый порядок по времени и третий по пространству для гладких профилей.
6. Методика включает в себя и программы, реализованные в ее рамках для моделирования сопутствующих процессов, таких как упругопластика, теплопроводность, детонация ВВ, магнитная гидродинамика и др.

Про методику ЭГАК

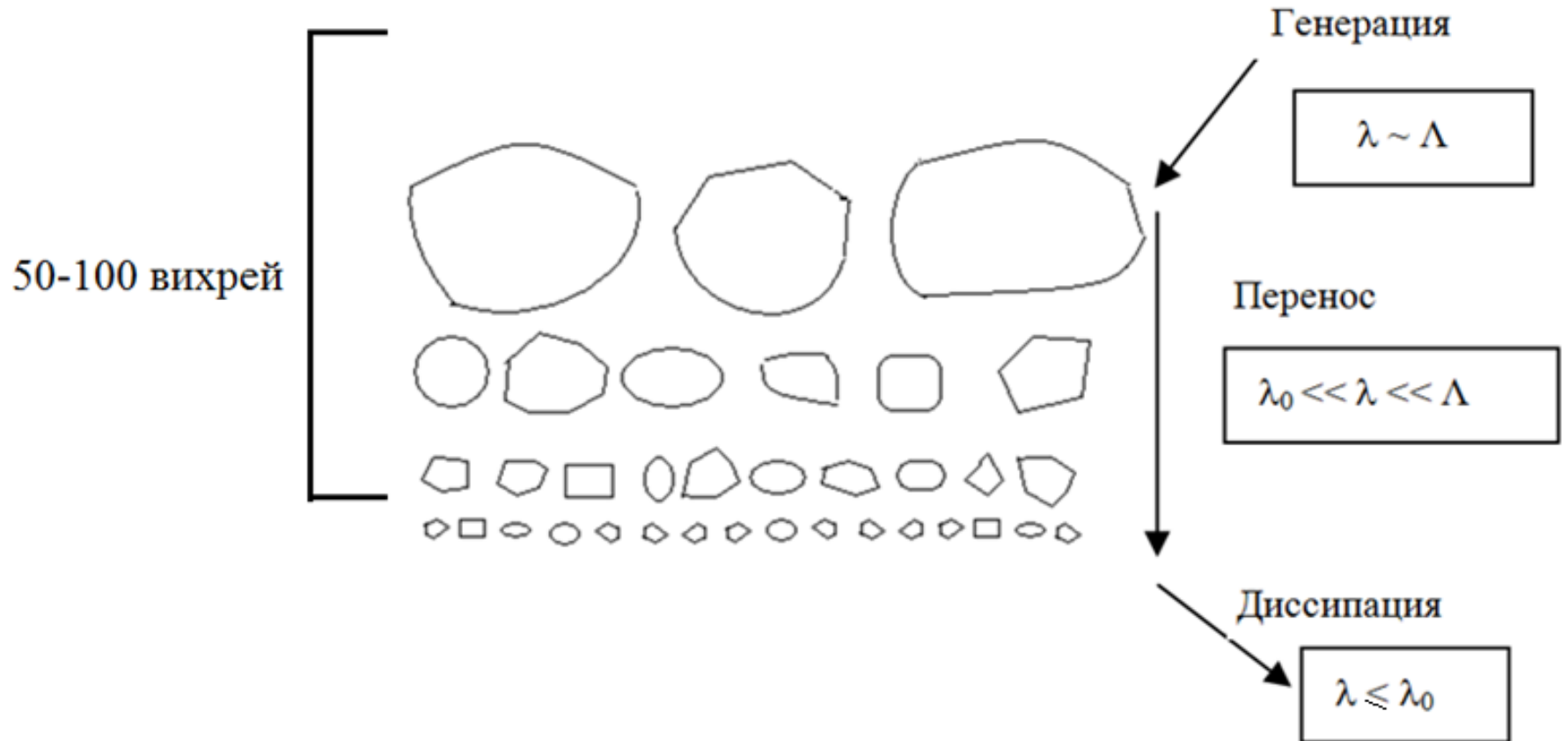
При моделировании имеется несколько вопросов, требующих выяснения, из-за наличия у методики так называемой схемной вязкости, коэффициент которой дается выражением

$$\nu_{cx} = A \cdot h \cdot \langle u \rangle$$

1. При моделировании турбулентности необходимо обеспечить ее малость по сравнению с турбулентной вязкостью, или, что то же самое, обеспечить достаточно большое значение расчетного числа Рейнольдса, которое пропорционально линейному количеству ячеек по ЗТП.
2. Если в расчетах важно учесть наличие физической вязкости, то необходимо обеспечить малость схемной вязкости по отношению к ней. В противном случае бессмысленно учитывать ее в расчетах.
3. Еще один важный вопрос касается возможности моделирования трехмерной турбулентности по двумерным программам. Расчеты показывают, что основные явления турбулентности вполне адекватно (с точностью до 20-30%) ухватываются и по двумерным программам.
4. Принципиальный вопрос связан с заданием начальных данных, а именно шероховатости или возмущений в течении, без адекватного задания которых невозможно корректно моделировать начало процесса перемешивания.

О возможности ПЧМ

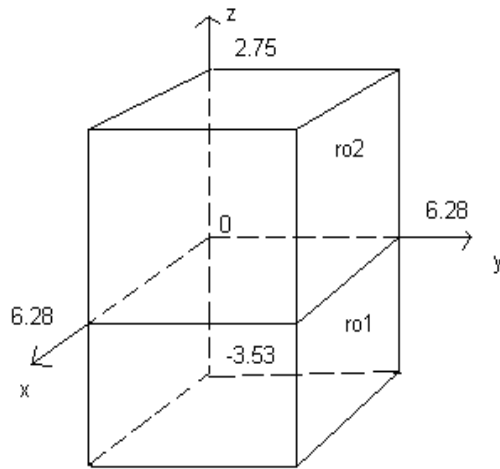
Каскадный перенос турбулентной энергии



Гравитационное турбулентное перемешивание

Тип сетки для моделирования ТП [1]

Здесь приведены картины гравитационного перемешивания в 3D расчетах на двух сетках (начальные возмущения задавались набором одинаковых мод).



4 расчета

1. $h_x=h_y=h_z=h$
2. $h_x=h_y, h_z=3h$
3. $h_x=h_y, h_z=1/3h$
4. $h_x=h_z=h, h_y(\min)=h/2, h_y(\max)=2.3h$

$\rho_1=1$ и $\rho_2=3$, $g=-1$

Счётная сетка:

$(N_x = N_y = N_z = 512)$

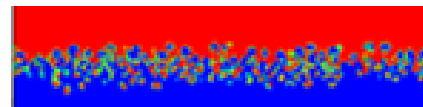
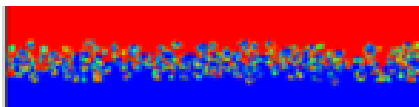
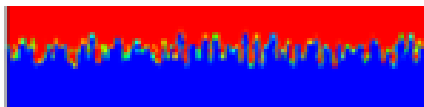
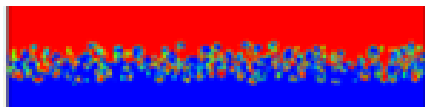
Часть 1. Двумерные разрезы

$hz=hx=hy$

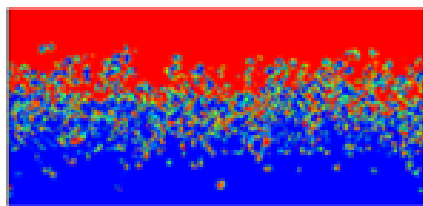
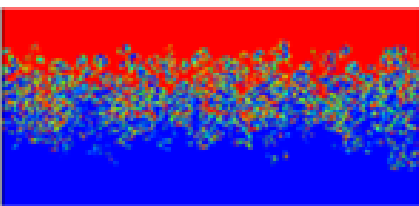
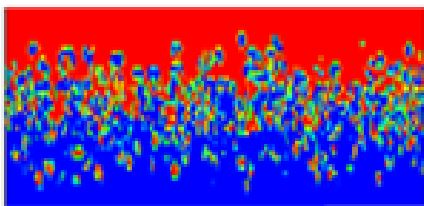
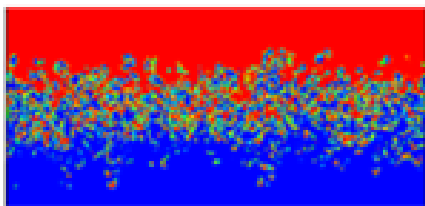
$hz=3hx$

$hz=1/3hx$

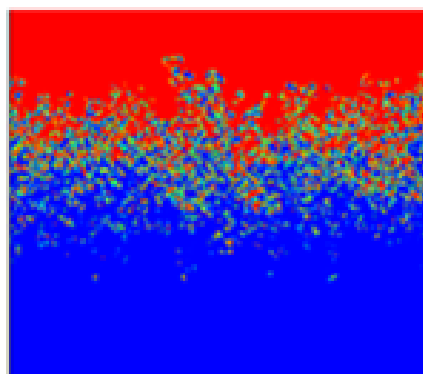
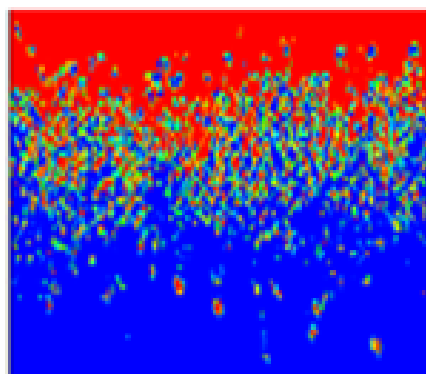
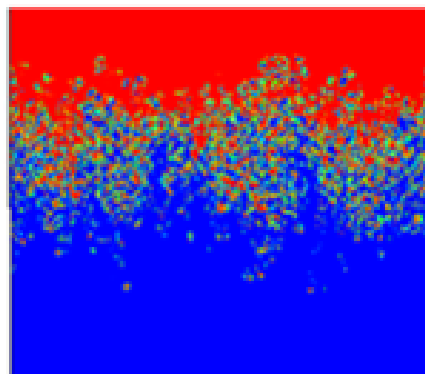
$hz=hx, hy(q)$



$t=1.0$



$t=2.0$



$t=3.0$

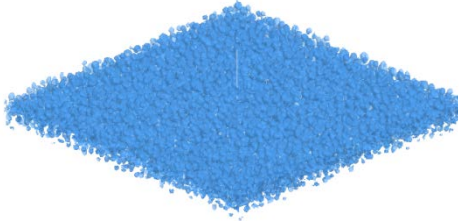
Часть 1. Картины течения

$hz=hx=hy$

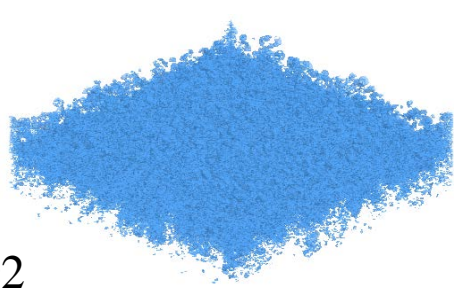
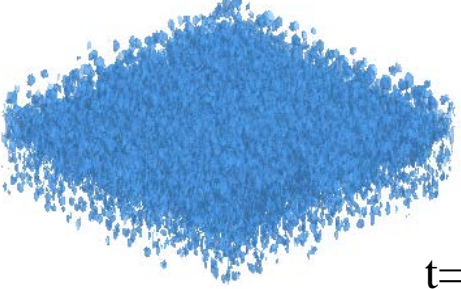
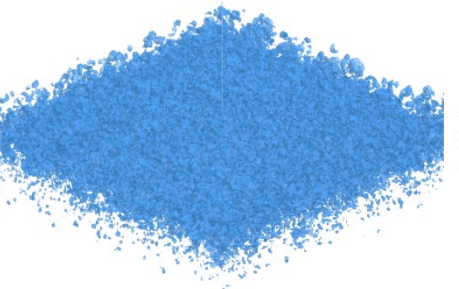
$hx=hy, hz=3hx$

$hx=hy, hz=1/3hx$

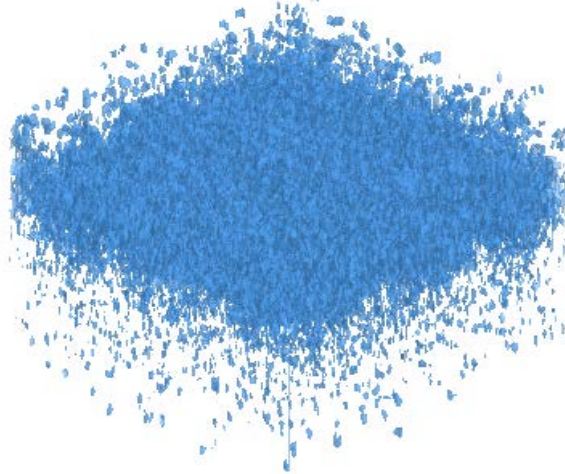
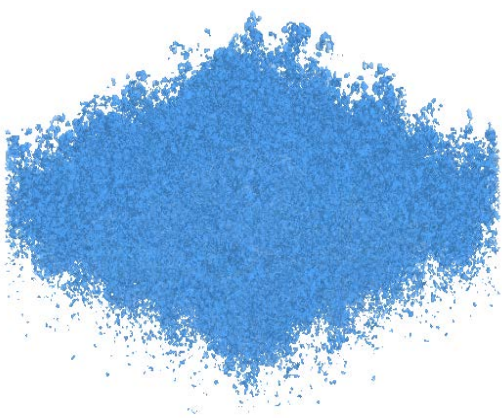
$hz=hx, hy(q)$



t=1

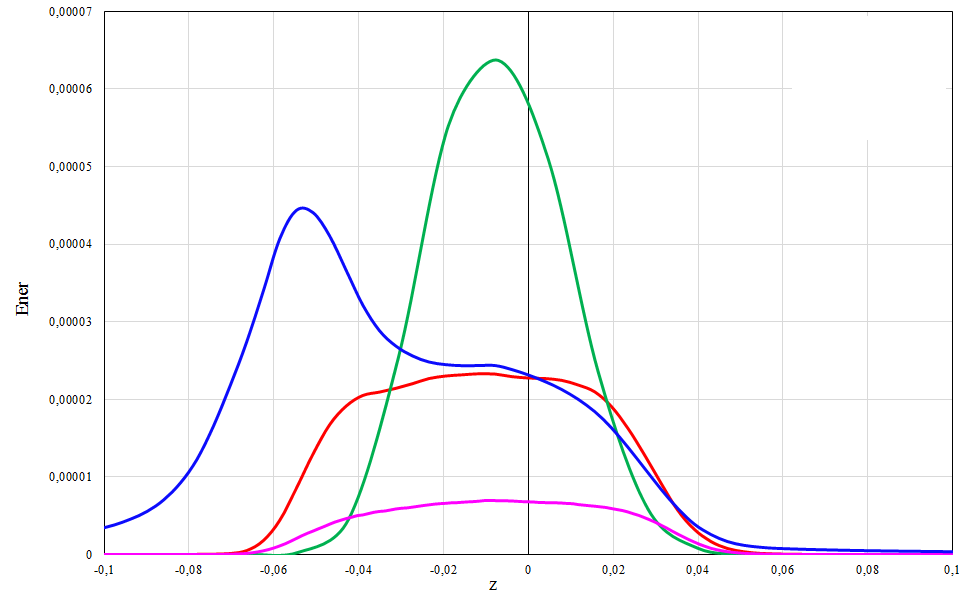
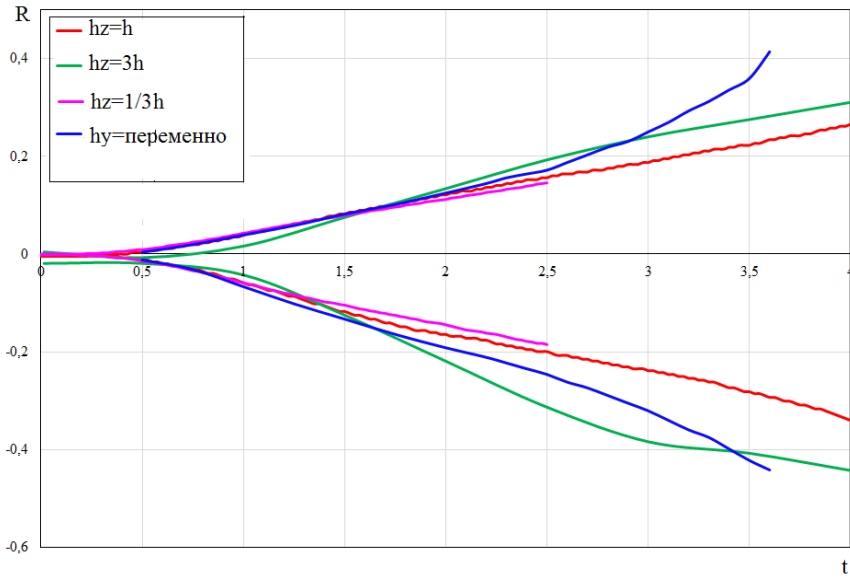


t=2

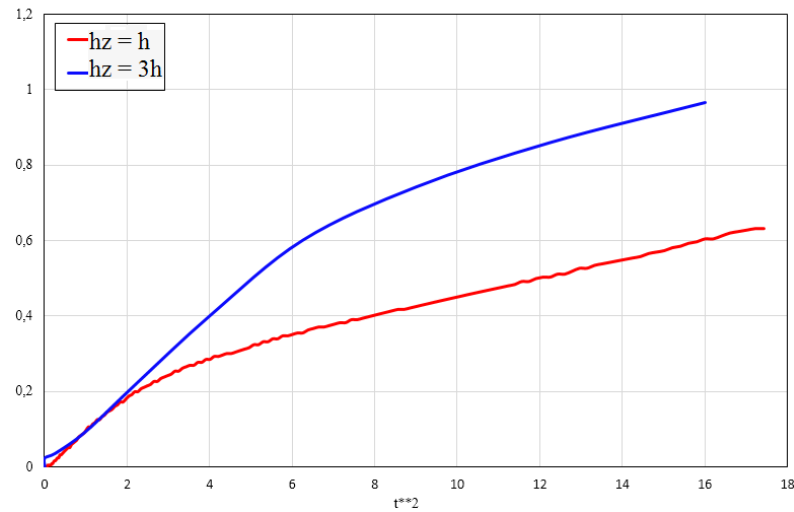


t=3

R-t диаграммы границ ЗТП и турбулентная энергия



ширина ЗТП



Часть 2.

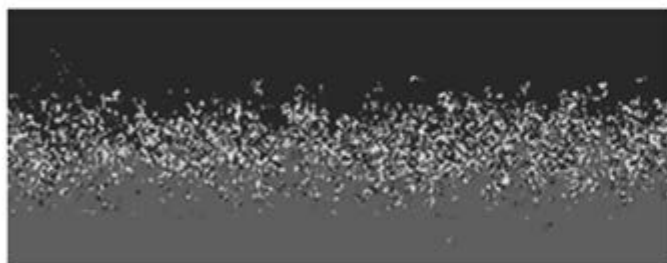
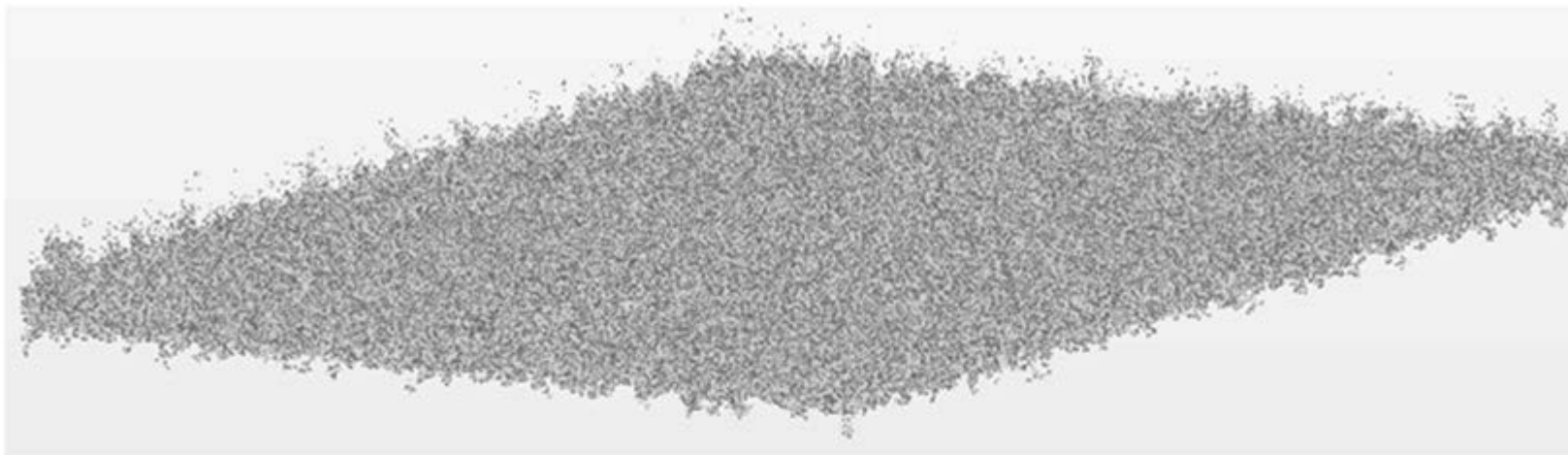
2D моделирование 3D турбулентности

По работам

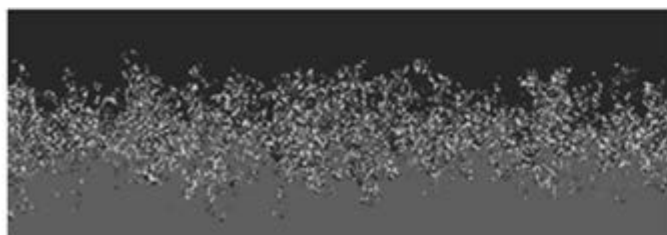
Yanilkin, Statsenko, Rebrov, Sin'kova, Stadnik. Study of gravitational turbulent mixing at large density differences using direct 3D numerical simulation // International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing, Pasadena (USA), 2001.

Янилкин, Гужова, Дегтяренко, Синькова. Определение «локальной» степени гомогенного смешения при прямом численном моделировании турбулентного перемешивания // ВАНТ, сер. ММФП, вып. 3, 3-10, 2020.

Сравнение 3D и 2D расчетов (сетка N=1000)

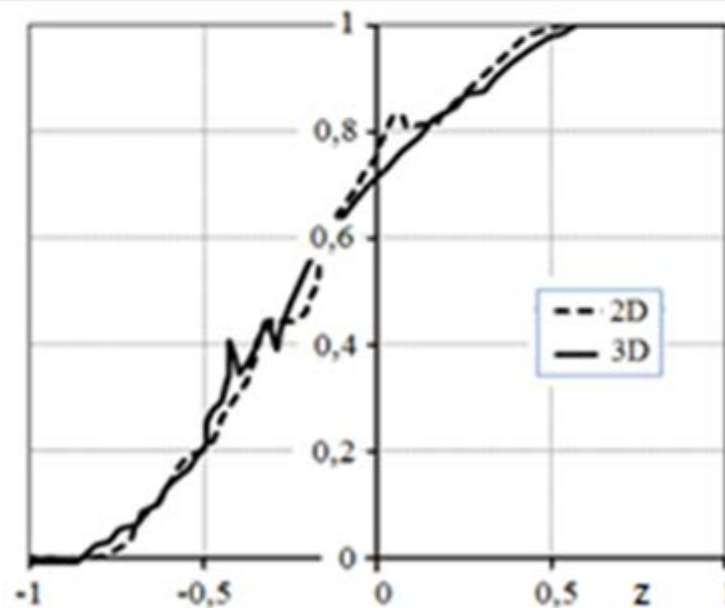


3D



2D

двумерный разрез фрагмента



профиль средней концентрации

Часть 3

Влияние начальных возмущений

По работам

Kuchugov, Zmitrenko, Rozanov, Yanilkin. The Evolution Model of Rayleigh-Taylor Instability Development // Journal of Russian Laser Research, 2012, V.33, #6, 517-530.

Янилкин, Стаценко, Синькова, Чернышова, Розанов, Змитренко. Численное моделирование влияния начального спектра возмущений на развитие гравитационного турбулентного перемешивания // ВАНТ, сер.ТПФ, в.1, 29-40, 2013.

Постановка расчетов

$$\mathbf{2D} \quad a(x) = \sum a_n \cdot \cos(k_n \cdot x)$$

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} \quad \lambda_n = 0,007 \cdot i_n + 0,063$$

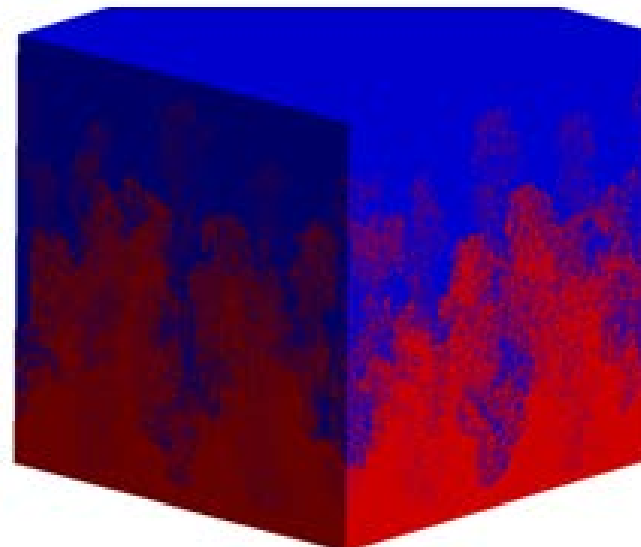
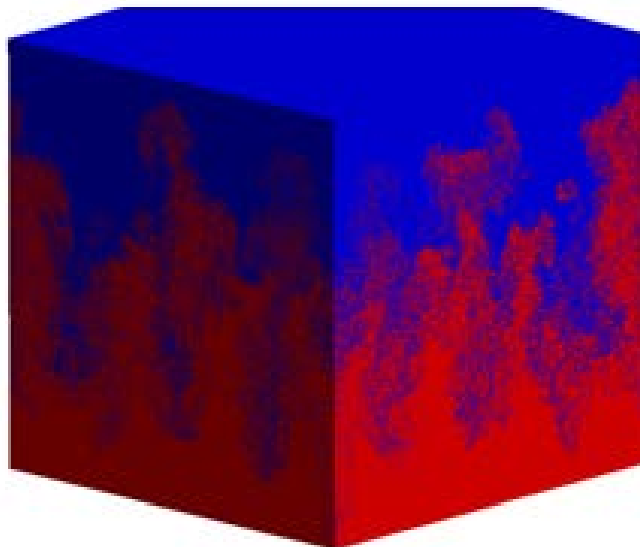
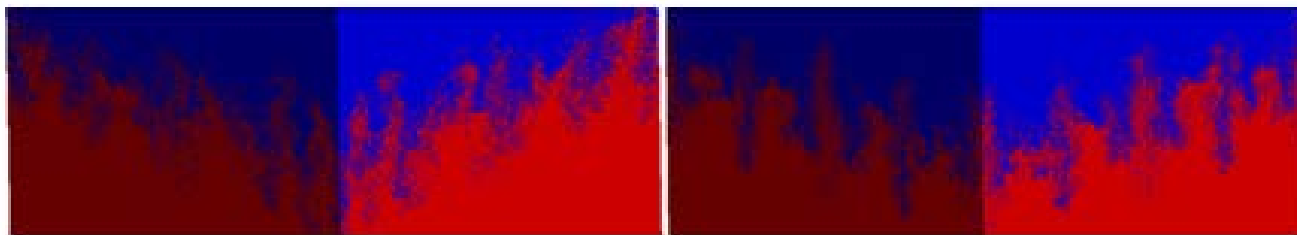
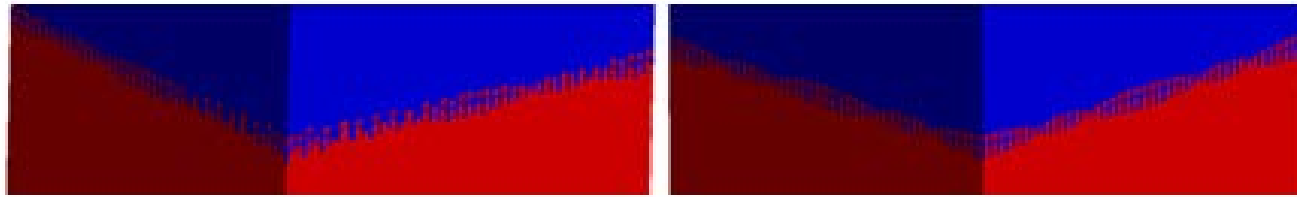
$$\mathbf{3D} \quad a(x, y) = \sum_{n=1}^9 a_n \cdot \cos(k_n \cdot x) \cdot \cos(k_n \cdot y)$$

$$a_n = a_0 \left(\frac{\lambda_{\min}}{1,43 \cdot \lambda_n} \right), \quad a_0 = \frac{0,1}{3}, \quad \lambda_{\min} = 0,1.$$

$$k_n = [43 \ 41 \ 39 \ 23 \ 22,5 \ 22 \ 9,5 \ 9 \ 8,5].$$

Вариант (2D)	Начальные возмущения КГ	Вариант (3D)
1	43 41 39	5
2	$k_n = 43 \ 41 \ 39 \ 23 \ 22,5 \ 22 \ 9,5 \ 9 \ 8,5$	6
3	23 22,5 22 9,5 9 8,5	7
4	Случайные возмущения плотности	8
	Случайные возмущения плотности	9 16

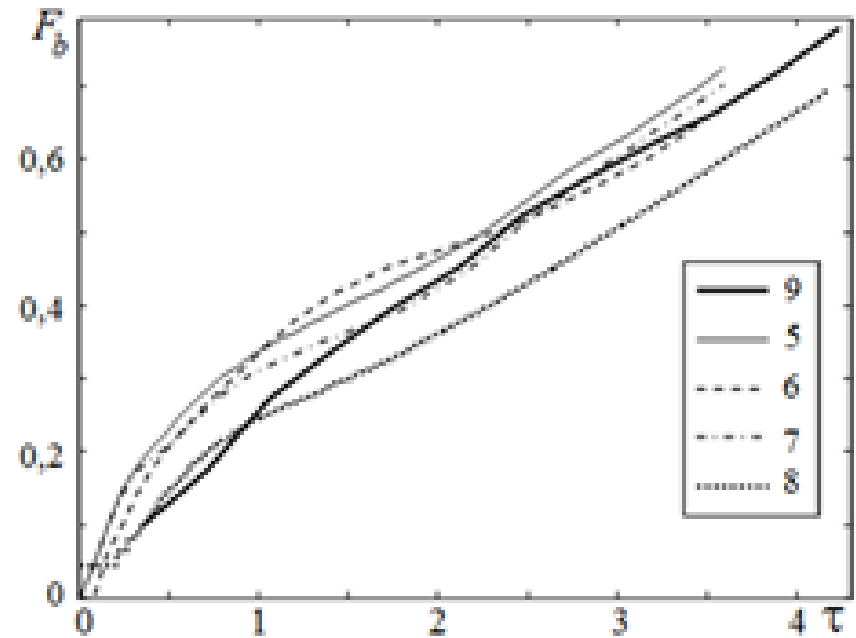
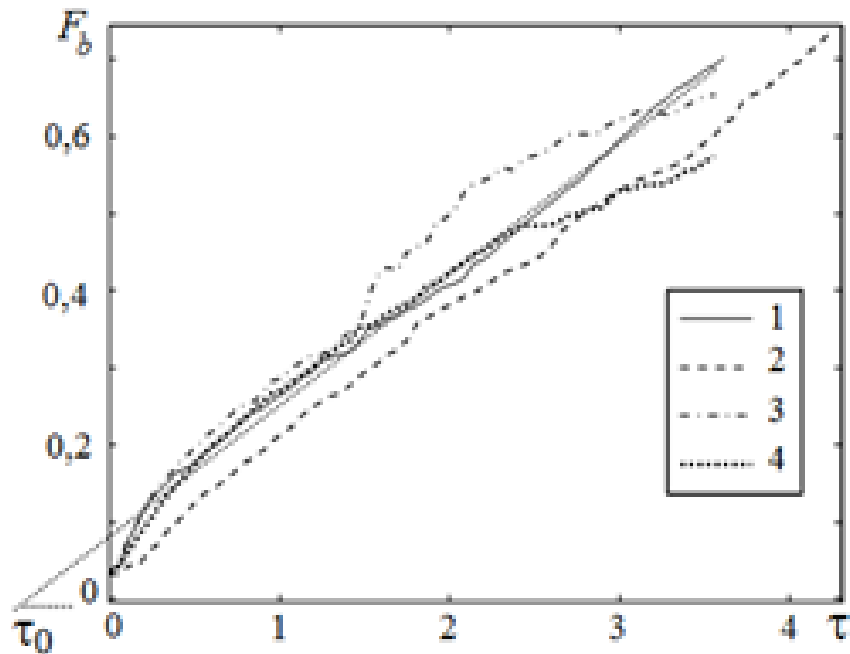
Картины течения в 3D расчетах



вариант 5 (43 41 39)

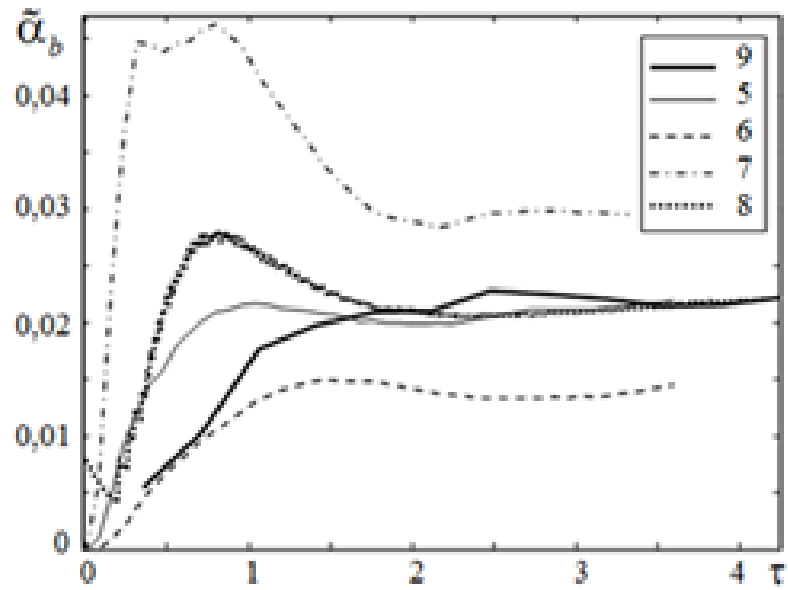
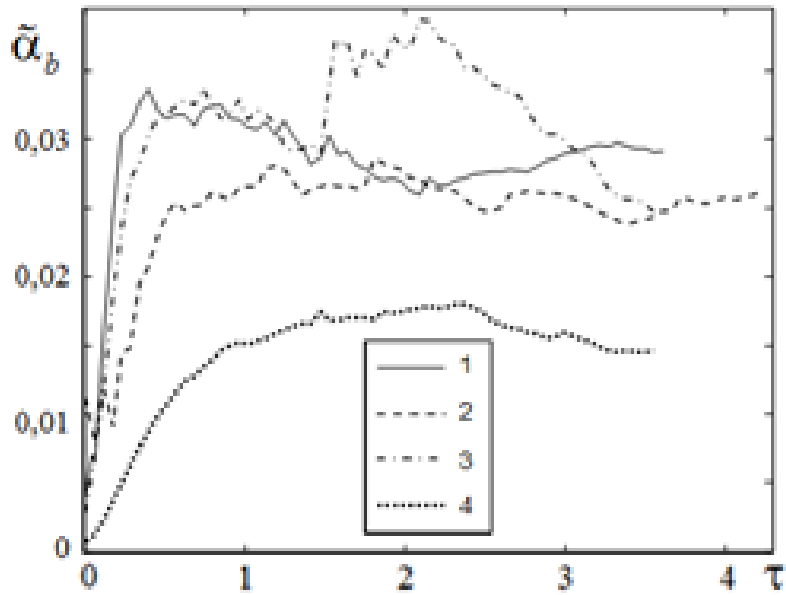
вариант 7 (23 22,5 22 9,5 97 8,5)

Зависимости функции ширины ЗТП от времени



Вариант (2D)	Начальные возмущения КГ	Вариант (3D)
1	43 41 39	5
2	$k_n = 43$ 41 39 23 22,5 22 9,5 9 8,5	6
3	23 22,5 22 9,5 9 8,5	7
4	Случайные возмущения плотности	8
	Случайные возмущения плотности	9

Зависимости функции ширины ЗТП от времени



Вариант (2D)	Начальные возмущения КГ	Вариант (3D)
1	43 41 39	5
2	$k_n = 43$ 41 39 23 22,5 22 9,5 9 8,5	6
3	23 22,5 22 9,5 9 8,5	7
4	Случайные возмущения плотности	8
	Случайные возмущения плотности	9

Часть 4

Степень гомогенного смешения

По работам

Statsenko, Yanilkin, Sin'kova, Stadnik. The Degree of Mixing Homogeneity under Direct 3D Numerical Simulation of Gravitational Turbulent Mixing. International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing, Paris (France), 2006.

Стаценко, Янилкин, Синькова, Стадник. Степень гомогенного смешения по результатам 3D численных расчетов гравитационного турбулентного перемешивания // ВАНТ, сер. ТПФ, 2007.

Янилкин, Гужова, Дегтяренко, Синькова. Определение «локальной» степени гомогенного смешения при прямом численном моделировании турбулентного перемешивания // ВАНТ, сер. ММФП, вып. 3, 2020.

Янилкин Ю. В., Гужова А.Р., Дегтяренко Л.И., Колобянин В.Ю., Шмелев В.А. Учет истории процесса перемешивания при прямом численном моделировании турбулентности в двумерных задачах // ВАНТ, сер. ММФП, вып. 1, 2023.

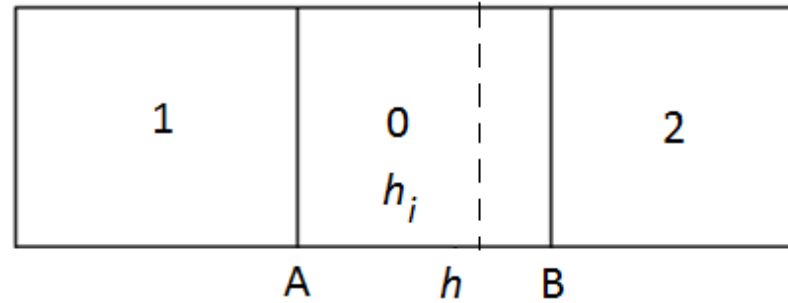
Модель 1 для степени гомогенного смешения

$$\Theta = \frac{\int (\langle \beta_2 \rangle - \langle \beta_2^2 \rangle) \cdot dz}{\int (\langle \beta_2 \rangle \cdot (1 - \langle \beta_2 \rangle)) \cdot dz} \quad (\text{Linden et al, 1994}) \quad (\text{модель 1})$$

Интегральные значения Θ по модели 1

	1 вещество	2 вещества
Linden, Redondo, 1991; эксперимент для смешивающихся жидкостей		0.6-0.7
Кучеренко и др. 2004; эксперимент для смешивающихся жидкостей		~0.7
Dimonte et al, 2004	0.8	0.3
Weber, Dimonte, Marinak, 2001	0.7-0.75	0.25
Cook, Cabot, Miller, 2004	0.75-0.8	-
Youngs, 1994, 1997	0.75-0.8	-
Mellado, Sarkar, 2005	0.75-0.8	-
Наши данные, 2001, 2004	0.75-0.8	0.25-0.3

Локальная степень гомогенного смешения (модель 2)



Интегральная степень гомогенности по модели 2

$$\Theta = \frac{\sum_{j=1}^N \beta_j^{20M} V_j}{\sum_{i=1}^N V_i}$$

$$\Theta = \frac{\sum_{j=1}^N \alpha_j^{20M} M_j}{\sum_{j=1}^N M_j}$$

Учет истории процесса перемешивания

Алгоритм состоит из следующих основных положений.

1. Исходные смешивающиеся компоненты – это обычные вещества, и их движение и взаимодействие со всеми другими компонентами рассчитываются стандартным алгоритмом метода концентраций. Для каждого из этих компонентов заводятся дополнительные компоненты, являющиеся дубликатами исходных компонентов. Дубликаты имеют те же уравнения состояния и модели среды, однако в отличие от исходных веществ объявляются компонентами смеси. В начальный момент времени они являются пустыми, то есть с нулевыми объемными долями и термодинамическими параметрами. Отметим, если дубликаты не объявлять компонентами смеси, то в этом случае они являются обычными компонентами и их движение описывается по стандартным алгоритмам метода концентраций.

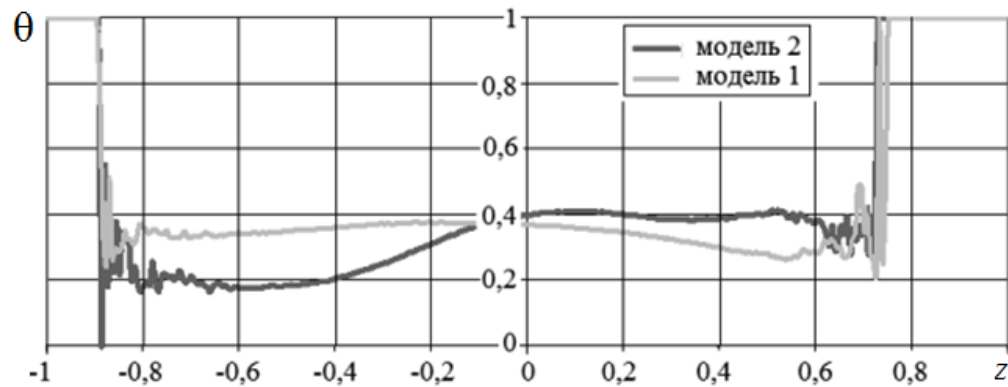
2. На каждом временном шаге в смешанных ячейках, содержащих исходные компоненты, определяется состояние смешения. Если смешение гомогенное, то все компоненты переводятся в свои смесевые дубликаты.

Расчеты по новой технологии с учетом истории процесса перемешивания

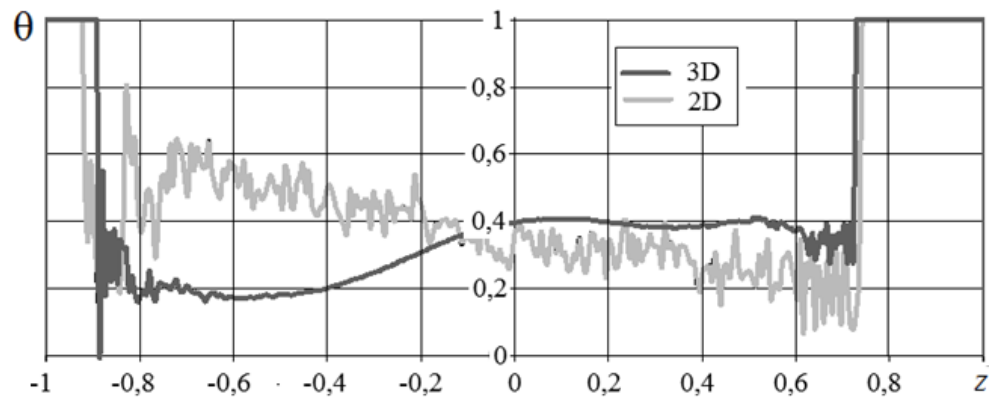
Характеристика расчетов

Номер расчета	Размерность геометрии	История процесса	Наличие у дубликатов веществ признака «смесь»	Тип веществ
0	3D	Нет	Нет	Несмешивающиеся (стандартный)
1	2D	Нет	Нет	Несмешивающиеся (стандартный)
2	2D	Есть	Нет	Несмешивающиеся
3	2D	Есть	Есть для обоих дубликатов	Смешивающиеся дубликаты

Степень гомогенного смешения



Профили степени гомогенного смешения в зависимости от высоты в 3D расчете: 1 – модель 1, 2 – модель 2 (стандартный расчет)



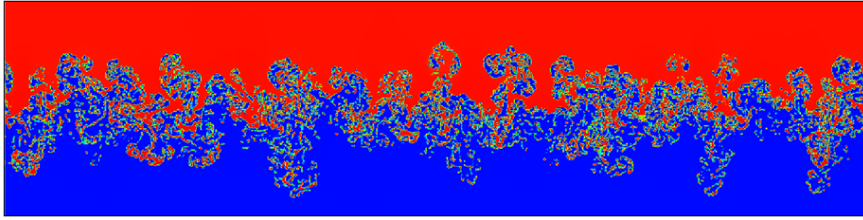
Профили степени гомогенного смешения в зависимости от высоты в 3D и 2D расчетах по модели 2 (стандартный расчет)

Степень гомогенного смешения

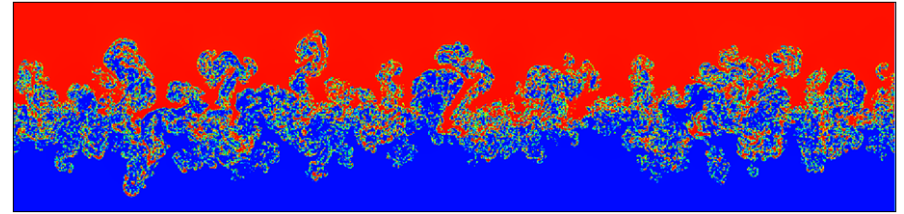
Интегральные (по всей ЗТП) значения степени гомогенности в стандартных расчетах

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

Растровые картины величин

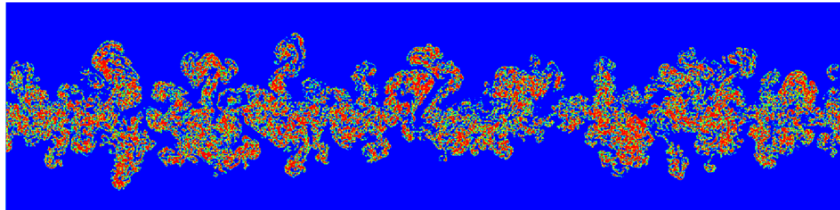


расчет 1 (стандартный)

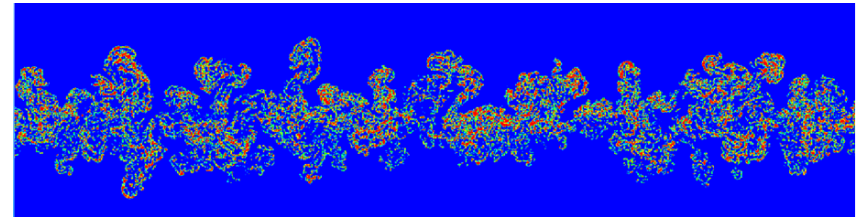


расчет 2 (дубликаты несмешивающиеся)

Распределения плотности



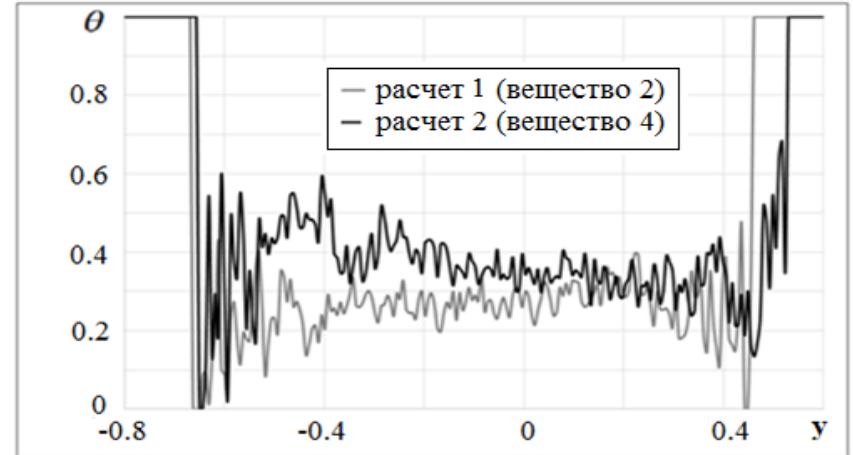
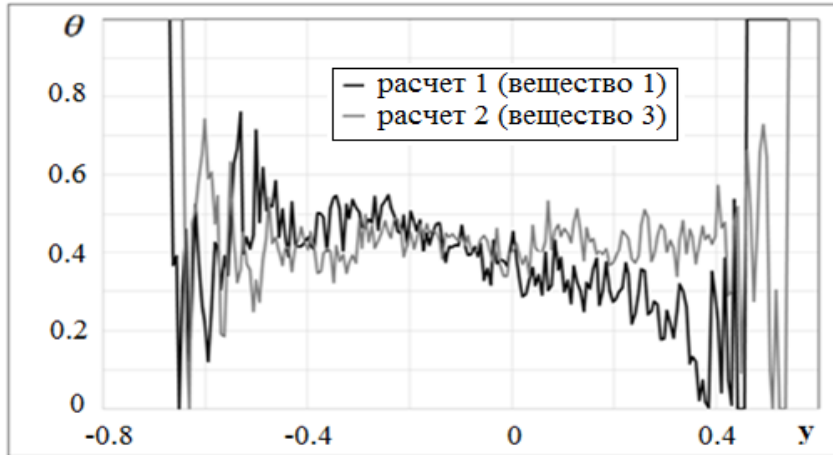
расчет 2 (дубликаты несмешивающиеся)



расчет 3 (дубликаты смешивающиеся)

Распределения концентраций одного из дубликатов

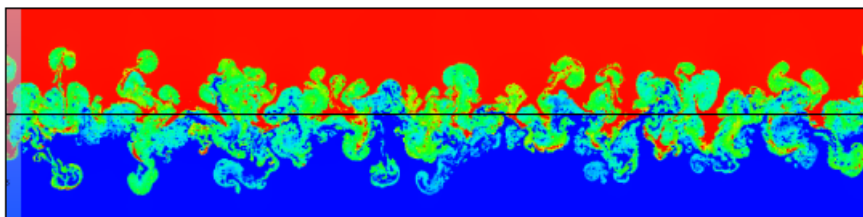
Степень гомогенного смешения



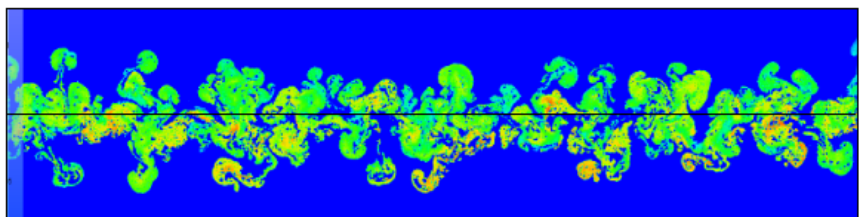
Профили степени гомогенного смешения в расчетах 1 и 2: а – для вещества 1 из расчёта 1 и дубликата 3 из расчета 2; б – для вещества 2 из расчёта 1 и дубликата 4 из расчета 2

Номер расчета	Θ_1	Θ_2	Θ	$M_1^{\text{гом}}$	$M_2^{\text{гом}}$
1	0,359	0,275	0,294	0.199	0.711
2	0,402	0,349	0,361	0.331	1.092
3	0,649	0,803	0,772	0.537	3.896

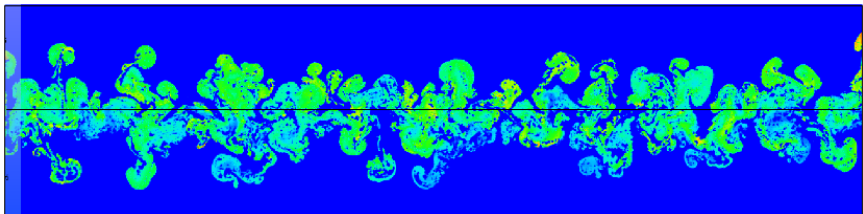
Результаты расчета 3 (смешивающиеся жидкости)



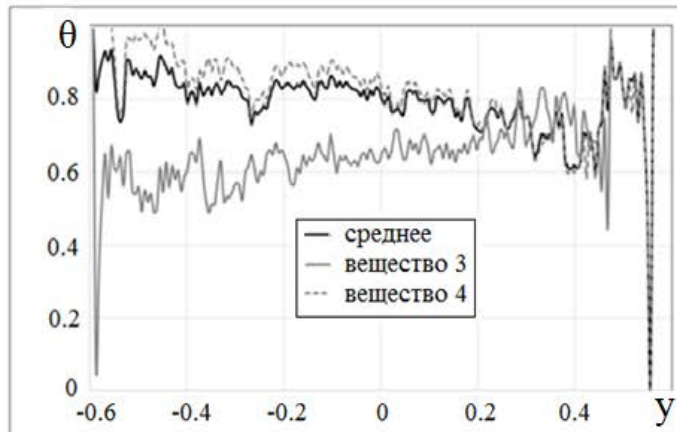
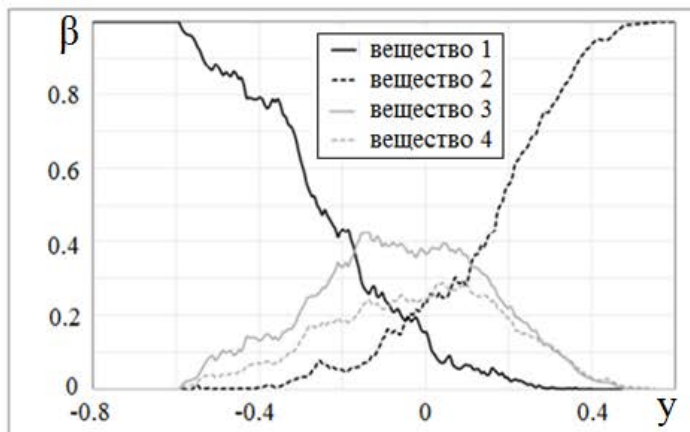
средняя плотность;



объемная концентрация вещества 3
(смесевой дубликат вещества 1);

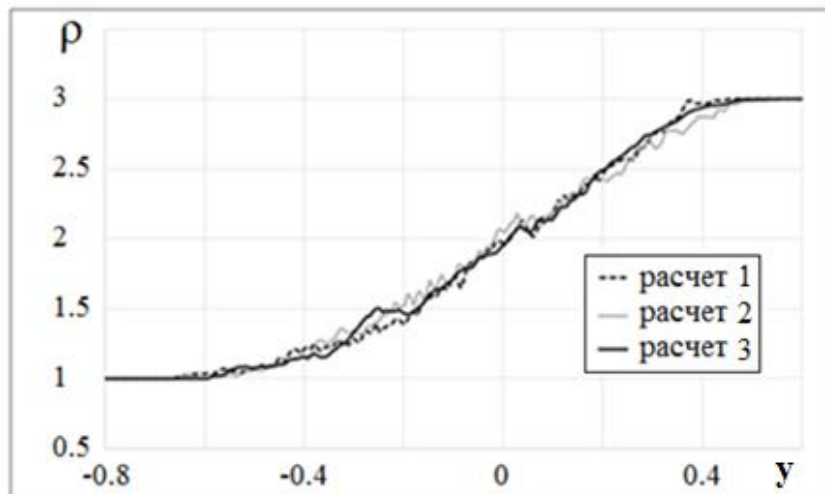


объемная концентрация вещества 4
(смесевой дубликат вещества 2)

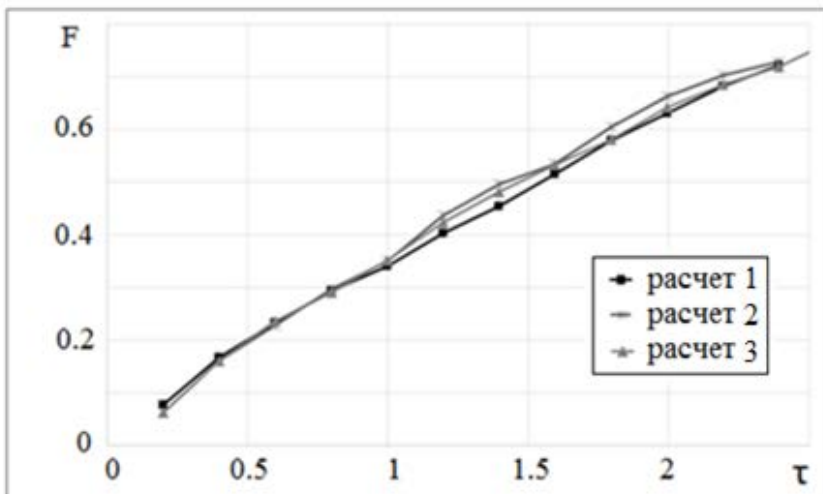


Профили величин в расчете 3

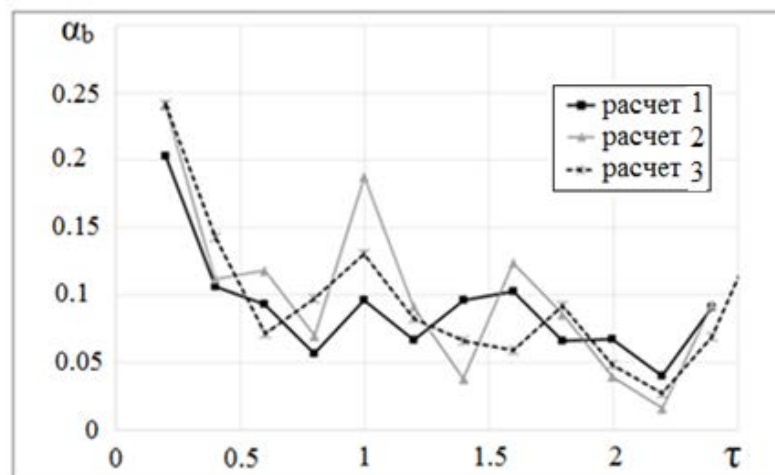
Интегральные результаты расчетов



профили средней плотности

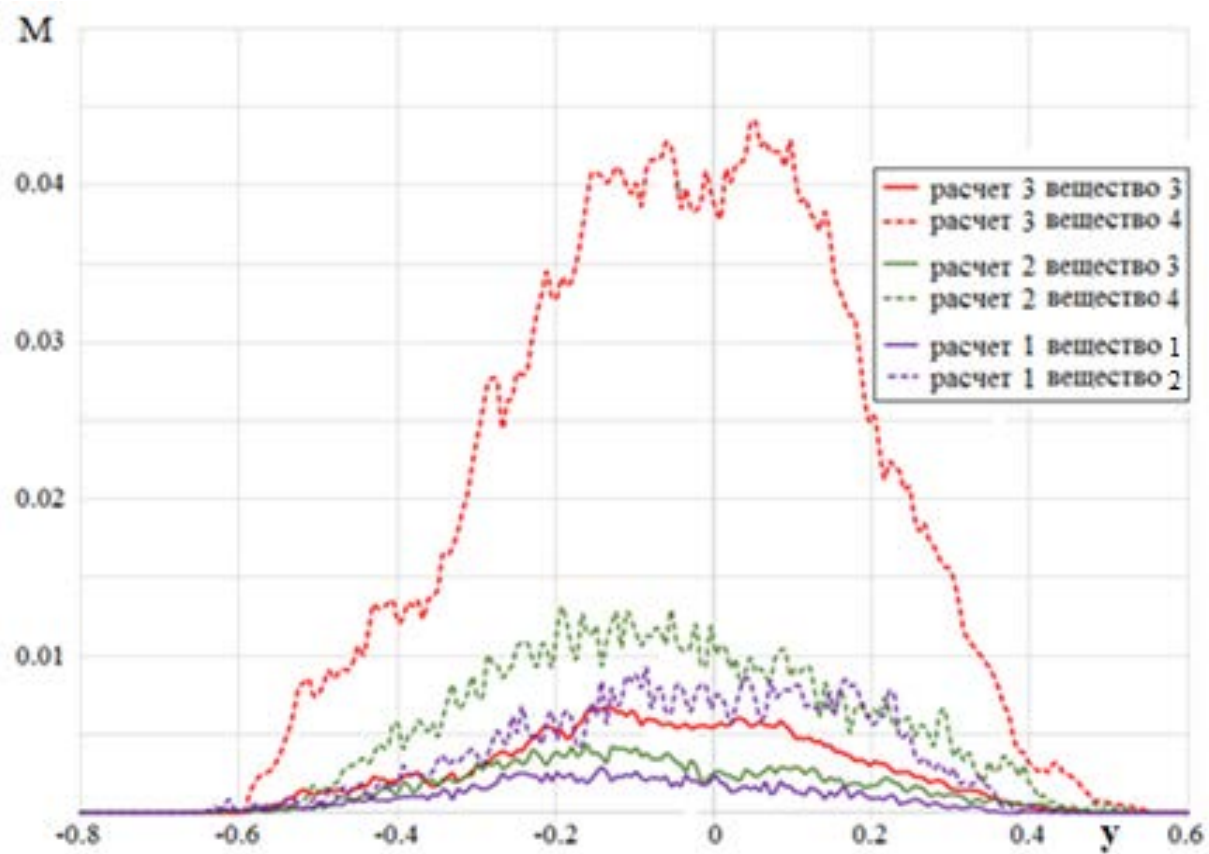


зависимости функции ширины ЗТП от τ



зависимости α_b от τ

Массы веществ в 2D расчетах



Заключение

В целом прямое 3D (и даже 2D) численное моделирование позволяет получать близкие к экспериментальным данным результаты на всех стадиях процесса перемешивания.

Это при условии адекватного задания начальных данных и достаточном количестве ячеек сетки, которая при этом должна быть квадратной (кубической) из-за «изотропности» развитой турбулентности.

Более полные результаты моделирования рассмотренных и других (более сложных) задач содержатся в монографии: Ю.В. Янилкин, В.П. Стаценко, В.И. Козлов «Математическое моделирование турбулентного перемешивания в сжимаемых средах» в 2-х томах. Издательство ВНИИЭФ.

Автор выражает благодарность всем своим соавторам и людям, которые формально не являясь соавторами работ, оказывали помощь на протяжении многих лет работы во ВНИИЭФ.

Спасибо за внимание