

УДК 532.529

А. А. Андрижиевский, А. А. Михалевич, А. Г. Трифонов

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОДВИЖНЫХ ГРАНИЦ И ПОВЕРХНОСТЕЙ РАЗДЕЛА В РЕАЛЬНЫХ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ

*Приведена математическая модель сопряженного описания водных сред с подвижными межфазными границами различных типов.*

Актуальная в настоящее время проблема создания достоверных эволюционных моделей различных экологических ситуаций, в частности в реальных водных системах, ставит задачи сопряженного описания неомогенных многофазных систем с подвижными непрерывными (протяженными) или дисперсными поверхностями раздела. Если первый тип межфазных границ требует для адекватного описания учета локальных динамических и тепло-массообменных процессов в сопрягаемых фазах (включая и собственно переходную фазу), то при моделировании динамики дисперсных межфазных поверхностей возникает проблема согласования локальных и интегральных (ансамблевых) эффектов. Последние могут быть учтены введением в математические модели реальных физических систем соответствующих вероятностных (термодинамически равновесных) или счетных функций распределения. Подобный подход представляется авторам вполне обоснованным.

Основу представленной в работе комплексной модели реальных водных систем составляют системы уравнений сохранения для отдельных фаз, которые решаются численно совместно с уравнениями, описывающими процессы межфазного переноса и динамику межфазных поверхностей, включая процессы коагуляции и распада, поверхностные волны, капиллярные эффекты и смачивание жидкостью твердой поверхности.

В общем виде системы уравнений сохранения для каждой из рассматриваемых фаз имеют вид [1-3]:

$$\frac{\partial \rho W_i}{\partial x_i} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} + W_j \frac{\partial W_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( v \frac{\partial W_i}{\partial x_j} - \overline{W_i' W_j'} \right); \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + W_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( a_e \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \quad (3)$$

где в приближении  $k$ - $\epsilon$  модели второго порядка:

$$-\overline{W_i' W_j'} = v_e \left( \frac{\partial W_i}{\partial x_j} + \frac{\partial W_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} K; \quad (4)$$

$$\frac{\partial K}{\partial t} + W_j \frac{\partial K}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{v_e}{\sigma_k} \frac{\partial K}{\partial x_j} \right) + v_\tau \left( \frac{\partial \overline{W_i}}{\partial x_j} \right)^2 - \epsilon; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + W_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{v_e}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_\epsilon \frac{\epsilon}{K} v_\tau \left( \frac{\partial \overline{W_i}}{\partial x_j} \right)^2 - C_\epsilon \frac{\epsilon^2}{K}; \quad (6)$$

$$v_c = v_l + v_r; \quad v_r = F_\mu C_\mu \frac{K^2}{\epsilon};$$

$$\sigma_k = 1,0; \quad \sigma_\epsilon = 1,3; \quad C_\mu = 0,09; \quad C_{\epsilon_1} = 1,44;$$

$$F_\mu = \exp(-2,51/(1 + 0,02\text{Re}_l)); \quad \text{Re}_r = \frac{K^2}{v\epsilon};$$

$$C_{\epsilon_2} = 2(1 - 0,3 \exp(-\text{Re}_r^2)); \quad a_c = \frac{v_l}{\text{Pr}_l} + \frac{v_r}{\text{Pr}_r}; \quad \text{Pr}_r \approx 1; \quad (7)$$

$$\Delta P = \sigma \left( \pm \frac{1}{R_1} \pm \frac{1}{R_2} \right); \quad (8)$$

$$\Delta \sigma = \sigma_{\text{glq}} (\cos \theta - \cos \theta_0); \quad (9)$$

$a$  – коэффициент температуропроводности;  $K$  – турбулентная кинетическая энергия;  $P$  – давление;  $R$  – радиус кривизны;  $T$  – температура;  $t$  – время;  $W$  – скорость;  $x$  – координата;  $\text{Pr}$  – число Прандтля;  $\epsilon$  – скорость диссипации турбулентной кинетической энергии;  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения;  $\nu$  – коэффициент кинематической вязкости;  $\rho$  – плотность;  $\theta$  – краевой угол смачивания в месте контакта трех фаз. Индексы:  $i, j$  – координаты по осям  $x_i, x_j$ ;  $e$  – эффективное значение;  $l, r$  – ламинарный, турбулентный режимы;  $0$  – равновесное значение;  $g, \text{liq}$  – газ, жидкость.

Для учета термоконвекции член, учитывающий силу тяжести, записывается в приближении Буссинеска:

$$(\rho g) \rightarrow \bar{\rho} (1 - \beta (T - \bar{T})), \quad (10)$$

где  $\beta$  – коэффициент термического расширения.

Численная реализация данной модели применительно к описанию различных физических систем с подвижными межфазовыми границами проводилась методом расщепления по отдельным процессам [4], который позволяет наиболее полно учитывать заложенные в математическую модель физические представления отдельных рассматриваемых процессов. Для отслеживания динамики межфазовой границы использовался метод маркировки [5], при этом радиусы кривизны и угол смачивания определялись из анализа значений маркеров в близлежащих ячейках.

Следует отметить, что без обоснованных упрощений применение подобных (1)–(10) систем уравнений сохранения совместно с полным набором начальных и граничных условий к описанию реальных водных систем достаточно затруднительно, а в ряде задач и малоэффективно. Каждая реальная ситуация требует предварительного анализа условий симметрии и соотношения макро- и микропроцессов в прилегающих к межфазовой границе областях.

Так, при моделировании процессов переноса через поверхность водоемов-охладителей (ВО) нами решалась задача сопряженного описания квазистационарного конвективно-диффузионного слоя и нестационарного газожидкостного скин-слоя с возможной барботажной интенсификацией [6–9]. При этом вводились допущения о цилиндрической симметрии и ламинарном характере микротечений в расчетных областях. Кроме того, в дополнение к условиям сопряжения и неустойчивости Марангони на межфазной границе учитывался суммарный тепловой поток, связанный как с конвективной и радиационной составляющей, так и с фазовым переходом (испарением). Последний определен нами в рамках приближения диффузионного слоя в виде

$$q_{cv} = \frac{\text{Nu}}{l^*} D^* \rho_{\text{mx}} \kappa \ln \left\{ \frac{(m_{\text{mx}} (1 - C''))_{\infty}}{(m_{\text{mx}} (1 - C''))_{\text{sf}}} \right\}, \quad (11)$$

где  $(m_{\text{mx}})_{\text{sf}, \infty}$  – молекулярная масса парогазовой смеси на межфазной поверхности и на удалении;  $C''$  – концентрация пара;  $\kappa$  – скрытая теплота испарения;  $D^*$  – коэффициент диффузии пара;  $l^*$  – характерный размер.

Правомерность такого подхода подтверждается согласованием результатов численного моделирования, лабораторных экспериментов и натуральных

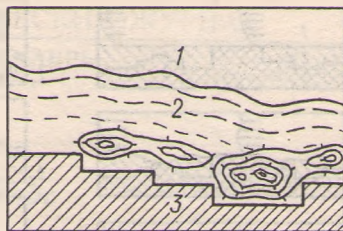
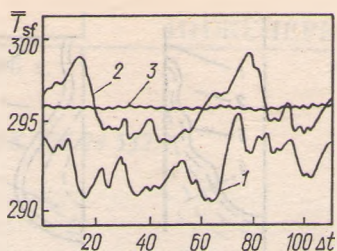


Рис. 1. Осредненные температуры поверхности ВО: 1 – без возмущения; 2 – "слабый" барботаж; 3 – "сильный".  $\bar{T}_{sf}$ , К;  $\Delta t$ , с

Рис. 2. Изменение концентраций примесных веществ в придонной области транспортногo потока: 1 – внешняя воздушная среда; 2 – транспортный поток; 3 – подстилающий грунт

наблюдений. Действительно в приповерхностном скин-слое образуются зоны локального переохлаждения, которые характеризуются существенной нестационарностью. Иллюстрацией этого процесса может служить рис. 1, на котором представлены осредненные по межфазной поверхности профили температур для режимов функционирования ВО: без и при наличии барботажной интенсификации.

С другой стороны, при моделировании проточных водных систем [10, 11], содержащих водорастворимые и водонерастворимые примеси, становится существенным учет турбулентных характеристик транспортного потока, формы межфазной поверхности на границе "транспортный поток–твердое дно" и локальных процессов переноса в придонной области. При этом математическая модель (1)–(10) рассматривается в полном объеме и, кроме того, дополняется концентрационным уравнением для примесной фазы вида

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + W_{ji} \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D_i \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right) + J_i, \quad (12)$$

где  $W_{ji}$  – скорости частиц, получаемые из решений уравнений движения отдельных частиц различных размеров;  $J_i$  – массовый источник;  $C_i$  – концентрация частиц.

Как показали результаты численных исследований, наличие вторичных течений может существенно видоизменить профили концентраций в транспортном потоке и привести к "динамической" локализации примесей внутри придонных макровихрей (рис. 2).

Определяющим фактором массообмена в придонной области являются также процессы взмучивания и осаждения твердых веществ. Механизм перехода частиц в подвижное состояние имеет достаточно сложный вероятностный характер и обусловлен протеканием ряда взаимозависимых процессов. В данной работе в основу процедуры расчета массообмена в придонной области были положены вероятностные соотношения Эйнштейна. В этом случае равновесное значение потока частиц в придонной области определяется уравнением

$$q_s = q_s - q_{вз} = \frac{q_s^* (C_{дно} - C_{пот})}{1 - \epsilon}, \quad (13)$$

где  $q_{вз}$  и  $q_s$  – потоки частиц при взмучивании и осаждении;  $C_{дно}$  и  $C_{пот}$  – концентрации частиц на дне и в потоке;  $\epsilon$  – пористость дна;  $q_s^*$  – коэффициент обобщенной поверхностной проводимости частиц, характеризующий устойчивость донных отложений.

Адекватность подобных представлений реально наблюдаемым физическим процессам иллюстрируется рис. 3, на котором представлена трансформация участка донного рельефа, связанная с подвижностью донных отложений.

К особому классу модельных задач, возникающих при рассмотрении водных сред с подвижными межфазными границами, следует отнести описание локальных взаимодействий одновременно всех трех фаз (жидкости, газа и твердого тела) [12]. Именно в подобных случаях заметно проявля-

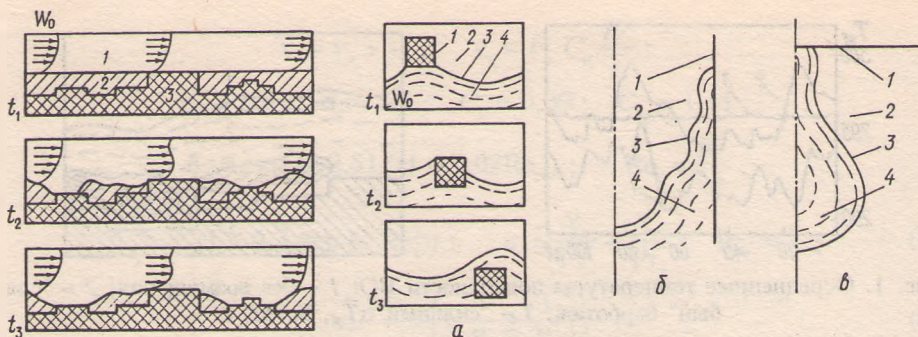


Рис. 3. Трансформация участка донного рельефа в транспортном потоке: 1 – транспортный поток; 2 – придонные наносы; 3 – неподвижный подстилающий грунт

Рис. 4. Моделирование трехфазных взаимодействий в транспортном потоке: а – переход твердой примеси через поверхность транспортного потока; б – проникновение жидкости в пористой структуре дна; а – переход жидкости в подземные горизонты; 1 – твердая поверхность; 2 – газовая среда; 3 – газожидкостная граница; 4 – водная среда

ются такие характеристики жидких сред, как смачивание и поверхностное натяжение. Иллюстрацией эффективности приложения комплексной модели водных сред (с соответствующими граничными и начальными условиями) к ряду модельных ситуаций, связанных с переносом примесной субстанции транспортным потоком, может служить рис. 4, на котором представлены типичные модельные ситуации взаимодействия сред различного фазового состава.

В целом, как показали результаты вычислительных экспериментов и их сопоставление с лабораторными и натурными наблюдениями, предлагаемая комплексная модель характеризуется универсальностью, достаточной для данного класса задач достоверностью и возможностью численной реализации на персональных ЭВМ. Последнее, как нам кажется, особенно важно для ее практического использования.

### Литература

1. Турбулентность: принципы и применения /Под ред. У. Фроста, Т. Моулдена. М., 1980.
2. Современная теория капиллярности /Под ред. А. И. Русанова, Ф. И. Гудрича. Л., 1980.
3. Накоряков В. Е., Покусаев Б. Г., Шрейбер И. Р. Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. М., 1990.
4. Марчук Г. И. Методы расщепления. М., 1988.
5. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М., 1980.
6. Федоровский А. Д., Никифорович Е. И., Приходько Н. А. Процессы переноса в системах газ-жидкость. Киев, 1988.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., 1964.
8. Франк-Каменецкий А. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., 1987.
9. Киссин В. А. Моделирование гидротермических процессов в водоемах-охладителях: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. М., 1992.
10. Гришанин К. В. Динамика русловых потоков. Л., 1979.
11. Системный анализ и методы математического моделирования в экологии /Под ред. А. А. Морозова и др. Киев, 1990.
12. Дерягин Б. В., Чураев Н. В., Муллер В. М. Поверхностные силы. М., 1985.