

УДК 519.6

УЧЕТ ИСТОРИИ ПРОЦЕССА ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ПРИ ПРЯМОМ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ

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

Предлагается новый подход к прямому численному моделированию турбулентного перемешивания разноплотных смешивающихся и несмешивающихся веществ. Идея подхода заключается в том, чтобы в смешанных ячейках, содержащих перемешивающиеся вещества, разделить состояния гомогенных смесей и гетерогенных смесей, состоящих из фрагментов с контактными границами. Описывается метод решения двумерных задач, разработанный в методике ЭГАК для реализации описанного выше подхода. Метод тестируется на классической задаче турбулентного перемешивания, возникающего вследствие неустойчивости Рэлея—Тейлора при постоянном ускорении контактной границы между двумя разноплотными газами.

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

Введение

В последние годы для исследований турбулентности все большее значение приобретает подход, основанный на прямом численном моделировании (ПЧМ), т. е. численном решении уравнений Эйлера или Навье—Стокса без использования каких-либо дополнительных моделей на сеточном уровне.

В работе предлагается новый подход к ПЧМ турбулентного перемешивания разноплотных смешивающихся и несмешивающихся веществ. Идея подхода заключается в том, чтобы в смешанных ячейках, содержащих перемешивающиеся вещества, разделить состояния гомогенных смесей и гетерогенных смесей, состоящих из фрагментов с контактными границами (КГ).

Одна из ключевых проблем при предлагаемом подходе — это определение локальной (по пространству) степени гомогенного смешения. Под термином *локальная* понимается то, что определение степени гомогенного смешения производится для каждой смешанной ячейки, содержащей два и более веществ. Вторая возникающая проблема — это корректный расчет движения смесей при определении потоков из одной ячейки в другую. Наконец, третья проблема — это учет

истории перемешивания, заключающийся в том, чтобы вещества, перешедшие в состояние гомогенного смешения, оставались в этом состоянии до конца счета.

Широкое применение при моделировании течений с большими деформациями КГ нашел метод концентраций (VOF) [1, 2], позволяющий аппроксимировать уравнения для многокомпонентной среды в эйлеровых переменных на неподвижной счетной сетке. Данный метод позволяет локализовать положение КГ с точностью до одной счетной ячейки. При использовании подробных счетных сеток этого вполне достаточно для корректного моделирования движения КГ.

Метод концентраций изначально был разработан для моделирования течений с четко выделенными КГ и в силу этого обладает свойством самолокализации положения КГ в процессе счета. В методе потоки из смешанных ячеек рассчитываются таким образом, чтобы минимизировать количество смешанных ячеек, что позволяет лучше определять положение КГ. Тем самым метод в процессе счета ограничивает характерную для эйлеровых методов счетную диффузию контактных разрывов. В то же время он допускает существование ячеек, содержащих смеси веществ. Однако существуют методы, в ко-

торых смеси в ячейках вообще не допускаются: предполагается, что в них, в крайнем случае, находятся фрагменты веществ, границы которых могут быть локализованы. К таким методам относятся, например, MOF [3], являющийся дальнейшим развитием метода VOF, и метод, реализованный в работе [4].

Метод концентраций позволяет проводить ПЧМ турбулентного перемешивания двух и более разноплотных несмешивающихся веществ в широком диапазоне чисел Маха. В настоящей работе под ПЧМ понимается численное решение двумерных (2D) газодинамических уравнений Эйлера без использования каких-либо моделей турбулентности. Широкий набор задач турбулентного перемешивания, исследованных методом ПЧМ по методике ЭГАК [5] с использованием метода концентраций, представлен в книге [6].

При турбулентном перемешивании смешивающихся веществ КГ между веществами размывается и вместо нее возникает зона, содержащая смесь веществ, поэтому стандартный метод концентраций в этом случае непригоден и требует его модификация. Отметим, что самый простой способ моделирования перемешивания смешивающихся веществ заключается в отказе от их представления как отдельных компонентов со своими объемными концентрациями и термодинамическими параметрами [7]. Однако этот подход непригоден для моделирования течений, содержащих вещества с различающимися моделями среды и уравнениями состояний.

Особое место среди физических процессов, включающих турбулентное перемешивание, занимает процесс горения, как химического, так и термоядерного. Особенностью данного процесса является то, что он сильно зависит от степени смешения участвующих в горении веществ, т. е. от того, находятся вещества в состоянии гомогенного смешения или состоят из гетерогенных фрагментов.

При ПЧМ для определения степени гомогенности широко используется модель, предложенная в [8], далее это модель 1. С использованием этой модели выполнен ряд исследований задачи гравитационного перемешивания. Расчеты проводились в двух постановках. В одной из них вещества представлялись одним компонентом (концентрацией) с одним уравнением состояния. Во второй постановке вещества описывались разными компонентами, каждый со своей плотностью, энергией, объемной долей и, вооб-

ще говоря, своим уравнением состояния. Анализ показал, что имеются, во-первых, значительный разброс расчетных данных по интегральной степени гомогенности Θ в зависимости от постановки расчетов и, во-вторых, значительное отличие некоторых расчетных данных от экспериментальных значений. В [7] 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 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 веществ (в предположении только одного компонента), результаты расчетов согласуются с опытными данными для смешивающихся веществ.

По модели 1 интегральную степень гомогенности Θ находят для фрагмента задачи или для всей зоны турбулентного перемешивания (ЗТП). Для локального определения степени гомогенности в отдельной ячейке использование модели затруднено или требует большого объема вычислений из-за необходимости рассмотрения значительного числа счетных ячеек из окружения данной ячейки. Используемая ниже модель КГ (модель 2) предназначена прежде всего для определения именно локальной степени гомогенности, для нее требуется информация о состоянии минимального количества соседних ячеек. Первоначальный вариант алгоритма, реализующего модель 2, представлен в [9]. Для его тестирования используется модель 1.

Отметим также работу [10], в которой для описания интегральной степени гомогенного смешения предложена оригинальная феноменологическая модель. Однако полученные в [10] формы профилей θ (далее так обозначается степень гомогенности в слое ячеек) существенно отличаются от тех, которые получаются при использовании модели 1, общепринятой в научной среде, поэтому в работе [9] и в данной работе модель [10] не используется.

Эксперименты и расчеты показывают, что в процессе перемешивания степень гомогенности сильно зависит от того, являются вещества смешивающимися или несмешивающимися. Отметим, что модель 1 может применяться как для смешивающихся, так и несмешивающихся веществ. Например, в расчетах трехмерных (3D)

задач гравитационного перемешивания в ЗТП интегральная степень гомогенного смешения для несмешивающихся веществ $\Theta \sim 0,25 \div 0,3$, а для смешивающихся $\Theta \sim 0,75 \div 0,8$. При большом разнообразии веществ, присутствующих в реальных конструкциях, сложно классифицировать их по степени смешиваемости. Для численного моделирования, по-видимому, можно считать, что газы являются смешивающимися веществами, а конденсированные вещества и жидкости — несмешивающимися. Другой возможный подход состоит в классификации веществ по плотности (легкие — тяжелые).

Так как метод концентраций в эйлеровых расчетах по методике ЭГАК является основой для моделирования задач, содержащих как устойчивые, так и неустойчивые КГ, возникает необходимость его модификации для реализации возможности моделирования течений веществ с такими различающимися свойствами.

Метод концентраций сам по себе не предоставляет данных о состоянии веществ в ячейке. Поэтому в [9] для него при ПЧМ 2D и 3D задач турбулентного перемешивания разработан специальный алгоритм, позволяющий определять степень смешения веществ в любой смешанной ячейке. Тестирование методики с этим алгоритмом на задаче гравитационного перемешивания показало, что результаты моделирования с его использованием согласуются с моделью 1 по интегральной степени гомогенного смешения.

Однако метод концентраций в процессе расчета перемешивания на КГ может негативным образом сказаться на процессе смешения (из-за его отмеченного свойства самолокализации), так как может происходить обратный переход веществ в смешанных ячейках из состояния гомогенного смешения в гетерогенное. Поэтому в задачах, в которых необходимо знать степень гомогенного смешения в каждой смешанной ячейке в любой момент времени, обратный переход должен быть запрещен.

Далее описывается алгоритм, позволяющий учесть историю процесса перемешивания, а именно обеспечивающий, чтобы вещества, уже перешедшие в состояние гомогенного смешения, оставались в этом состоянии и при дальнейшем счете.

1. Алгоритмы метода

Реализация описанного подхода проведена в рамках 2D методики ЭГАК, используемой для

решения уравнения невязкой газовой динамики в форме Эйлера.

Соответствующий метод состоит из следующих алгоритмов:

- определения состояния смешения в смешанной ячейке (на основе модификации разработанной в [9] модели 2);
- расчета движения смесей;
- учета истории перемешивания для запрета обратного перехода смеси из гомогенного состояния в гетерогенное.

1.1. Определение состояния веществ в смешанной ячейке.

1.1.1. Случай несмешивающихся веществ. Для несмешивающихся веществ используется модель 2. Она предложена в [9] и основана на следующих двух предположениях:

1. Вещества в смешанной ячейке могут находиться только в одном из двух состояний: либо в гомогенно перемешанном, либо в неперемешанном, т. е. в виде гетерогенных фрагментов с КГ раздела. Промежуточные состояния не идентифицируются.
2. Определение степени смешения производится по критерию: возможно в данной ячейке восстановить КГ или нет. В первом случае полагается, что вещества находятся в неперемешанном состоянии, во втором случае — в гомогенно перемешанном.

Соответствующий алгоритм представляет собой упрощенный алгоритм метода концентраций, который по полю объемных концентраций может восстановить положение КГ в ячейке (если она есть). В данном случае необходимо определить лишь факт наличия или отсутствия КГ в смешанной ячейке. Подробности алгоритма описаны в [9]. Более простой способ, использованный в настоящей работе, заключается в проверке наличия хотя бы одной чистой соседней ячейки. Если такая ячейка имеется, то в рассматриваемой смешанной ячейке содержится КГ, в противном случае — смесь.

Отметим, что данный алгоритм дает возможность локального (в каждой смешанной ячейке) определения степени гомогенности при ПЧМ турбулентного перемешивания для несмешивающихся веществ на конкретный момент времени.

1.1.2. Случай смешивающихся веществ. Как уже отмечено, моделирование смешивающихся

веществ может быть проведено при объявлении разных веществ одним компонентом с одним уравнением состояния. Однако в общем случае, очевидно, этот подход непригоден, поэтому в методике ЭГАК разработан альтернативный подход, в котором такие вещества, оставаясь индивидуальными (со своими термодинамическими параметрами и объемными долями), объявляются так называемыми компонентами смеси. В программе газовой динамики такие компоненты рассчитываются по алгоритмам, которые несколько отличаются от тех, что используются для стандартных компонентов. Отметим, что в методике ЭГАК решение уравнений газовой динамики проводится в два этапа [5]:

1. В лагранжевой газовой динамике (первый этап) расчет компонентов смеси ничем не отличается от расчета стандартных компонентов. Укажем только, что для компонентов смеси из нескольких методов замыкания уравнений газовой динамики в смешанных ячейках [11, 12], имеющихся в методике, необходимо использовать те, которые основаны на выравнивании давлений компонентов.
2. На эйлеровом (втором) этапе вычислений при расчете конвективных потоков объема из смешанной ячейки в смешанную смесевые компоненты выступают как один компонент-смесь. При этом общий поток объема смеси распределяется между ее составными компонентами донорным методом, т. е. пропорционально их объемным долям в *донорной* ячейке. Методы более высокого порядка аппроксимации для распределения компонентов смеси не применяются. Сделано это потому, что использование схем высокого порядка может приводить к существенному изменению состава смеси. Расчет потоков из смешанной ячейки со смесью в чистую ячейку осуществляется по обычным алгоритмам метода концентраций для несмешивающихся компонентов без представления смеси как отдельного компонента.

1.2. Учет истории процесса перемешивания. Ранее было отмечено свойство метода концентраций к самолокализации КГ, что корректно для задач с устойчивыми границами. Однако в задачах турбулентного перемешивания эта

особенность метода превращается в его недостаток, так как ведет к уменьшению гомогенного перемешивания, особенно в задачах со смешивающимися компонентами. Тем не менее метод дает приемлемую точность результатов по степени гомогенности в задачах с малыми конвективными потоками в численном решении. Это имеет место, когда средние массовые скорости потока малы по сравнению со скоростью звука. В этом случае относительно малы и погрешности аппроксимации потоковых членов, полученных с использованием метода концентраций.

В задачах с большими конвективными потоками погрешности метода концентраций при расчете потоков из смешанных ячеек могут оказаться существенными, так как количество таких ячеек в расчетах турбулентности сравнимо с общим количеством ячеек в задаче. В частности, это может иметь место при определении степени гомогенности в ячейках, что существенно, например, для задач горения.

Далее описывается алгоритм, позволяющий минимизировать погрешности метода концентраций при моделировании перемешивания несмешивающихся компонентов. Моделирование для смешивающихся компонентов описано в п. 1.1.2: в этом случае компоненты просто объявляются смесевыми и далее описываются как смесь.

Алгоритм моделирования несмешивающихся компонентов основан на учете истории перемешивания и следующих положениях:

1. Исходные перемешивающиеся компоненты (список этих компонентов задается пользователем при расчете начальных данных) — это обычные вещества, и их движение и взаимодействие со всеми другими компонентами рассчитываются по стандартному алгоритму метода концентраций. Для каждого из этих компонентов заводятся дополнительные компоненты, являющиеся дубликатами исходных. 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, т. е. с нулевыми объемными долями и термодинамическими параметрами. Отметим, что если дубликаты не объявлять компонентами смеси, то они будут обычными компонентами и их движение будет описываться по стандартным алгоритмам метода концен-

- траций с той лишь разницей, что количество компонентов при этом увеличится.
2. На каждом временном шаге в смешанных ячейках, содержащих исходные компоненты, указанные в заданном пользователем списке, определяется состояние смешения. Если смешение гомогенное, то все компоненты переводятся в свои смесевые дубликаты. Далее эти компоненты рассчитываются по алгоритмам, описанным в п. 1.1.2.
 3. Указанный алгоритм учета истории процесса реализован для неограниченного количества компонентов, при этом каждый тяжелый компонент может перемешиваться с любым легким, а в ячейке может быть несколько компонентов.

Еще раз подчеркнем, что проверки и переводы в смесевые дубликаты выполняются только для компонентов, указанных пользователем, и только в смешанных ячейках, содержащих эти компоненты или их дубликаты. Смешанные ячейки, содержащие какие-либо другие компоненты, даже если один из компонентов входит в указанный пользователем список, в алгоритме не рассматриваются. Таким образом, описанный алгоритм позволяет учесть историю процесса перемешивания для определения локальной (в каждой смешанной ячейке) степени гомогенного смешения при ПЧМ турбулентного перемешивания.

2. Тестирование метода на задаче о гравитационном перемешивании

Задача о гравитационном перемешивании — это классический тест, на котором проводится верификация и валидация методик для расчета турбулентного перемешивания. Имеются большая база расчетных данных, а также экспериментальные данные для одной из постановок. Достаточно подробный обзор имеющихся данных представлен в [6]. Далее приводятся результаты моделирования задачи в разных постановках расчетов, которые сравниваются как с расчетными данными других авторов, так и с экспериментальными данными.

2.1. Постановка задачи и расчетов. В начальный момент два полупространства, разделенные плоскостью $y = 0$, заполнены покоящимися идеальными газами с плотностями $\rho_1 = 1$

и $\rho_2 = 3$. Ускорение тяжести $g = -1$ направлено от тяжелого вещества к легкому. Счетная область — квадрат со стороной 2π . На границе раздела (в слое толщиной в одну ячейку) с помощью генератора случайных чисел задаются случайные возмущения плотности $\delta\rho = \pm\rho_0\delta$, где $\delta = 0,1$.

Начальный профиль давления задавался исходя из условия гидростатического равновесия по формуле

$$p(y) = p_0 - \int_{y_1}^y \rho(y) g dy.$$

Здесь координата верхней грани $y = 2,75$, нижней — $y_1 = -3,53$. Значение $p_0 = 50$ обеспечивает достаточно корректное выполнение условия несжимаемости для течения. Уравнение состояния — для идеального газа с постоянной адиабаты $\gamma = 1,4$. Счетная сетка состоит из квадратных ячеек с линейным размером $h = 2\pi/1000$. На всех границах счетной области задавалось условие *жесткая стенка*.

Проведено три расчета задачи. Информация о расчетах представлена в табл. 1. Отсутствие истории процесса в расчете 1 означает, что в нем использовался метод концентраций без каких-либо модификаций. Расчеты 2 и 3 проведены с использованием разработанного метода. Расчет 2 проведен без объявления веществ компонентами смеси, т. е. в предположении несмешивающихся веществ; соответственно, он близок к расчету 1, однако с запретом перехода дубликатов в исходные вещества.

Таблица 1

Характеристики расчетов

Номер расчета	История процесса	Наличие	Тип веществ
		у веществ признака смеси	
1	Нет	Нет	Несмешивающиеся
2	Есть	Нет	Несмешивающиеся
3	Есть	Есть	Смешивающиеся

2.2. Результаты расчетов. В табл. 2 приводятся известные экспериментальные данные и результаты расчетов по интегральной (во всей ЗТП) степени гомогенности для смешивающихся и несмешивающихся веществ, полученные по

Таблица 2

Экспериментальные и расчетные данные по интегральной степени гомогенного смешения Θ для смешивающихся и несмешивающихся веществ (At — число Атвуда)

Источники данных	Смешивающиеся	Несмешивающиеся
	вещества	вещества
[8], $At \approx 0,04 \div 0,05$ (эксперимент для смешивающихся веществ)	0,6–0,7	
[13], $At = 0,5$ (эксперимент для смешивающихся веществ)	$\sim 0,7$	
[14], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,8	0,3
[15], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,7–0,75	0,25
[16], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,75–0,8	
[17], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,75–0,8	
[18], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,75–0,8	
[19], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,75–0,8	
[20], $At = 0,5$ (3D расчет)	0,75–0,8	0,25–0,3

модели 1. В расчетах разных авторов, в том числе по методике ЭГАК, интегральная степень гомогенности Θ сильно зависит от свойств перемешивающихся веществ. Для смешивающихся жидкостей $\Theta \sim 0,7 \div 0,8$, а для несмешивающихся $\Theta \sim 0,25 \div 0,3$. К сожалению, экспериментальные данные для несмешивающихся жидкостей отсутствуют, а для смешивающихся $\Theta \sim 0,6 \div 0,7$. Отметим, что результаты расчетов для смешивающихся веществ получены при описании веществ одним компонентом без наличия КГ между ними.

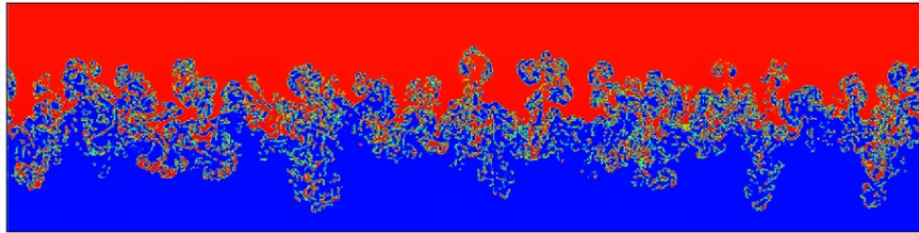
На рис. 1 показаны картины распределения плотности в расчетах 1 и 2 на момент времени $t = 4,5$, а на рис. 2 — объемные концентрации веществ-дубликатов. Из рис. 2 видно, какая

часть веществ к данному моменту времени перемешана на гомогенном уровне и перешла в новое состояние (в новое вещество-дубликат).

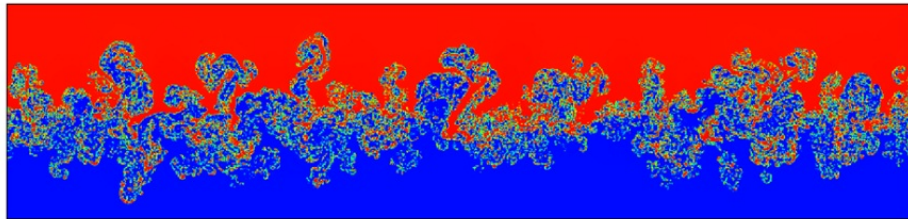
На рис. 3 приводятся профили концентраций всех веществ (напомним, что в расчете 2 вещество 3 является смесевым дубликатом вещества 1, а вещество 4 — дубликатом вещества 2).

Профили степени гомогенного смешения в расчетах 1 и 2, полученные по модели 2, показаны на рис. 4. Степень гомогенности для вещества ξ по модели 2 в каждом слое ячеек по высоте (с одинаковой ординатой) определяется по формуле

$$\theta_{\xi} = \frac{\sum_{i=1}^N M_{\xi i}^{\text{ГОМ}}}{\sum_{i=1}^N M_{\xi i}},$$



а



б

Рис. 1. Распределения плотности на момент времени $t = 4,5$: а — расчет 1; б — расчет 2

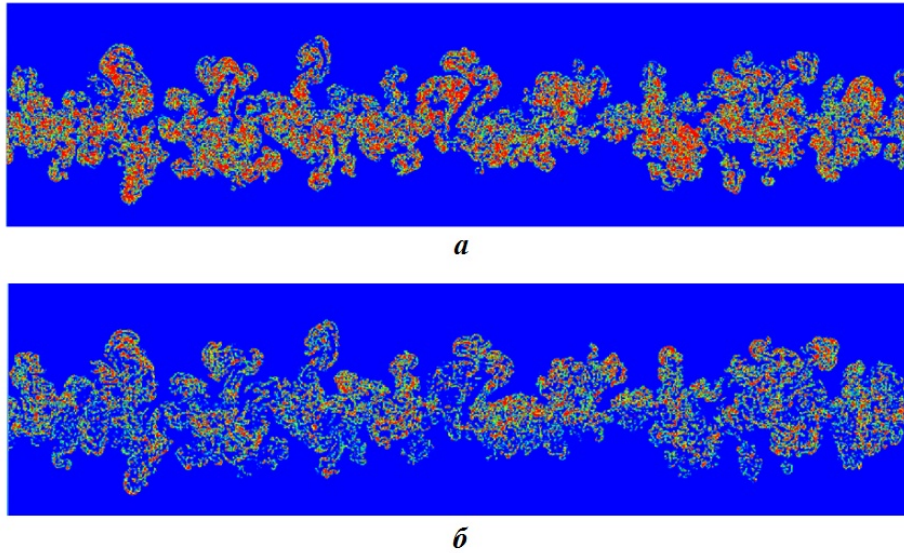


Рис. 2. Распределения объемной концентрации веществ-дубликатов в расчете 2 на момент времени $t = 4,5$: a — вещество 3 (дубликат вещества 1); b — вещество 4 (дубликат вещества 2)

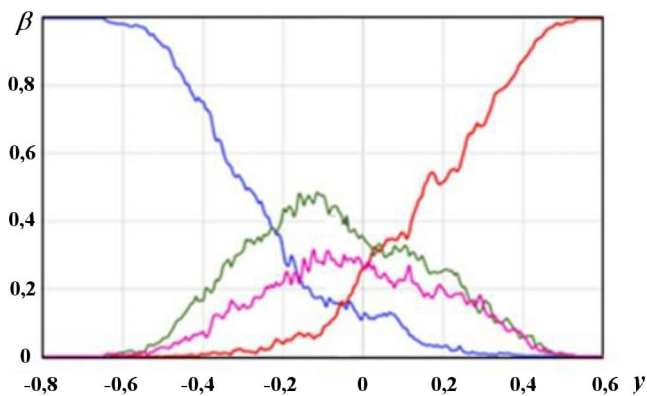


Рис. 3. Профили средних объемных концентраций веществ в расчете 2: — — вещество 1; — — вещество 2; — — вещество 3; — — вещество 4

где $M_{\xi i}$ — масса вещества ξ в ячейке i ; $M_{\xi i}^{\text{гом}}$ — масса вещества ξ в ячейке i , в которой оно считается гомогенно перемешанным; суммирование проводится по всем смешанным ячейкам $i = 1, \dots, N$ соответствующего одномерного слоя, содержащим данное вещество. Для среды, состоящей из двух веществ, в целом степень гомогенности определяется по формуле

$$\theta = \frac{\sum_{\xi=1}^2 \theta_{\xi} M_{\xi}}{\sum_{\xi=1}^2 M_{\xi}}.$$

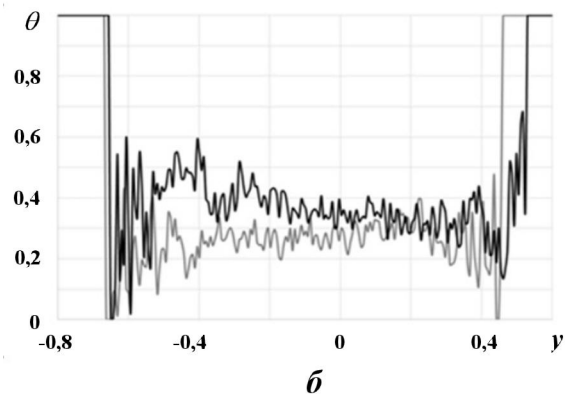
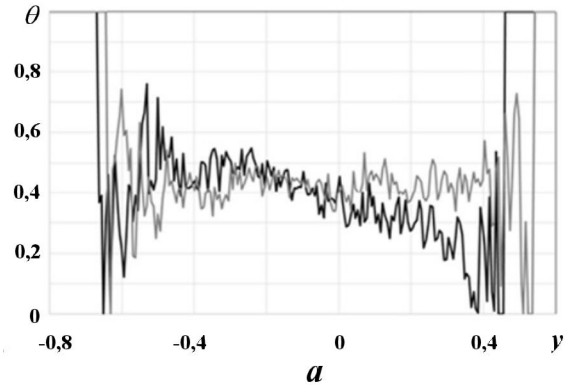


Рис. 4. Профили степени гомогенного смешения: a — для вещества 1 из расчета 1 (—) и вещества-дубликата 3 из расчета 2 (---); b — для вещества 2 из расчета 1 (—) и вещества-дубликата 4 из расчета 2 (---)

Отметим достаточно близкие распределения; значительные отличия имеются лишь на краях ЗТП, где перемешивается малое количество веществ. Это подтверждает рис. 5, на котором приводятся профили массы гомогенно перемешанных веществ из состава смеси.

Интегральные (по всей ЗТП) степени гомогенного смешения, полученные в расчетах 1 и 2, приводятся в табл. 3. При этом Θ_1 , Θ_2 , Θ — гомогенно перемешанные доли веществ и в среднем для среды; $M_1^{\text{ГОМ}}$, $M_2^{\text{ГОМ}}$ — гомогенно перемешанные массы веществ. Из табл. 3 видно, что в случае несмешивающихся веществ использование нового метода с учетом истории процесса (расчет 2) незначительно сказывается на интегральной степени гомогенности по сравнению с расчетом без учета истории процесса (расчет 1), однако значительно увеличивает количество гомогенно перемешанных масс.

Рассмотрим результаты расчета 3, в котором моделировались смешивающиеся вещества. На рис. 6 представлены картины распределения

средней плотности и объемной концентрации веществ 3 и 4 в расчете 3 на момент времени $t = 4,5$. На рисунке наглядно виден эффект от использования алгоритма со смесевыми компонентами. По сравнению с расчетом без использования алгоритма в ЗТП почти отсутствуют мелко-масштабные вихри, что и должно быть для смешивающихся веществ.

На рис. 7, а приведены профили осредненных объемных концентраций на момент времени $t = 4,5$, а на рис. 7, б — степени гомогенности перемешивания всех веществ в задаче. Видно, что они резко отличаются от профилей для несмешивающихся веществ: степени гомогенности отдельных веществ, а также в среднем для среды меняются от $\sim 0,6$ до $0,9$.

Сравним теперь интегральные характеристики всех расчетов; отметим, что в расчетах 2 и 3 в дополнение к модели 2 использовался алгоритм учета истории процесса.

На рис. 8, а показаны профили средней плотности в ЗТП из расчетов 1—3 на момент времени

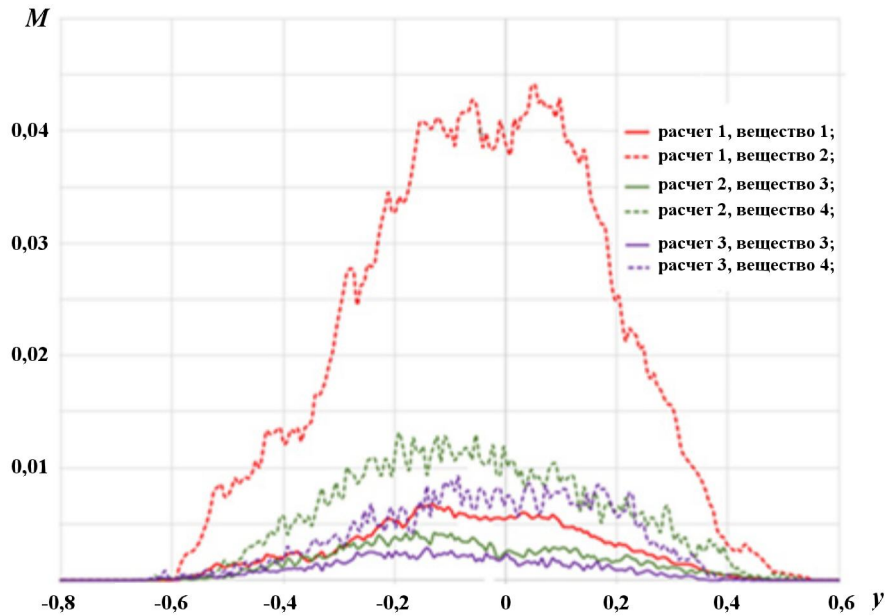


Рис. 5. Профили массы гомогенно перемешанных веществ из состава смеси

Таблица 3

Интегральные характеристики перемешивания в ЗТП, полученные по модели 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

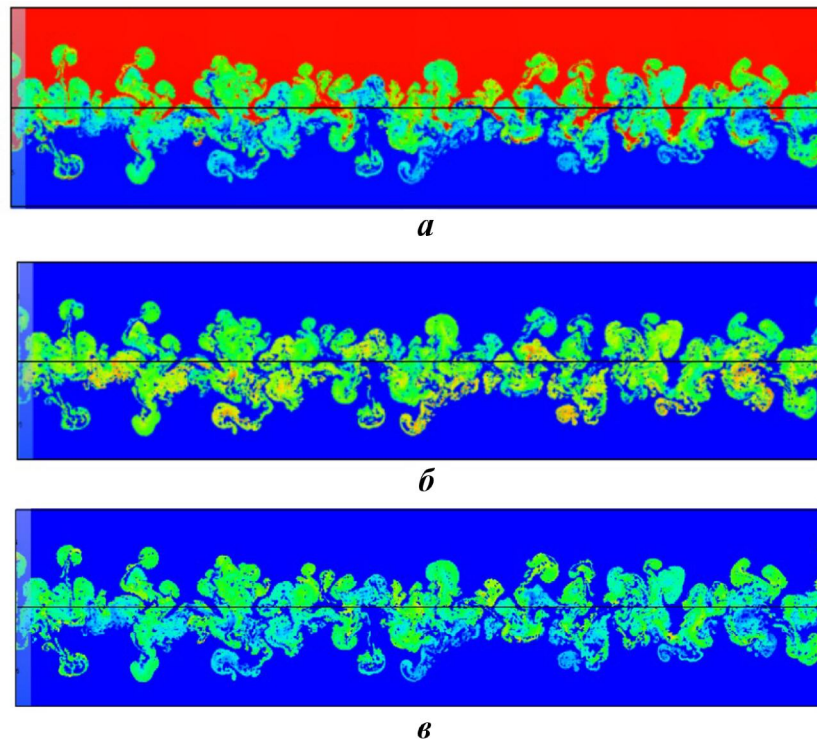


Рис. 6. Растровые картины в расчете 3 на момент времени $t = 4,5$: *a* — средняя плотность; *б* — объемная концентрация вещества 3 (смесевой дубликат вещества 1); *в* — объемная концентрация вещества 4 (смесевой дубликат вещества 2)

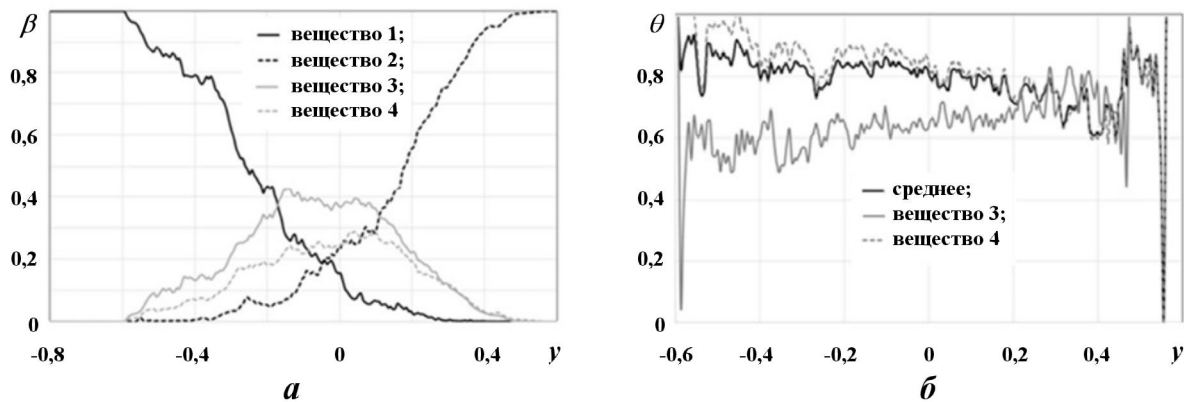


Рис. 7. Профили величин в расчете 3 на время $t = 4,5$: *a* — осредненные объемные концентрации β ; *б* — степень гомогенного смешения для веществ и среды в целом

$t = 4,5$. На рис. 8, *б* приведены графики зависимости от приведенного времени τ функции F ширины ЗТП, определяемой по формуле

$$F \equiv \frac{1}{t_x} \sqrt{\frac{L_T}{Ag}}, \quad \tau \equiv \frac{t}{t_x}, \quad t_x \equiv \sqrt{\frac{L_x}{g}},$$

где L_T — ширина ЗТП, определенная по значениям δ и $1 - \delta$ ($\delta = 0,01$) средней объемной

концентрации. На автомодельной стадии течения эти графики должны быть линейными. На рис. 8, *в* — зависимости координаты проникания легкой жидкости в тяжелую (константы автомодельности α_b) от приведенного времени τ .

Видно, что в расчетах все профили достаточно близки друг к другу, т. е. на таких интегральных характеристиках применяемые модели перемешивания сказываются незначительно.

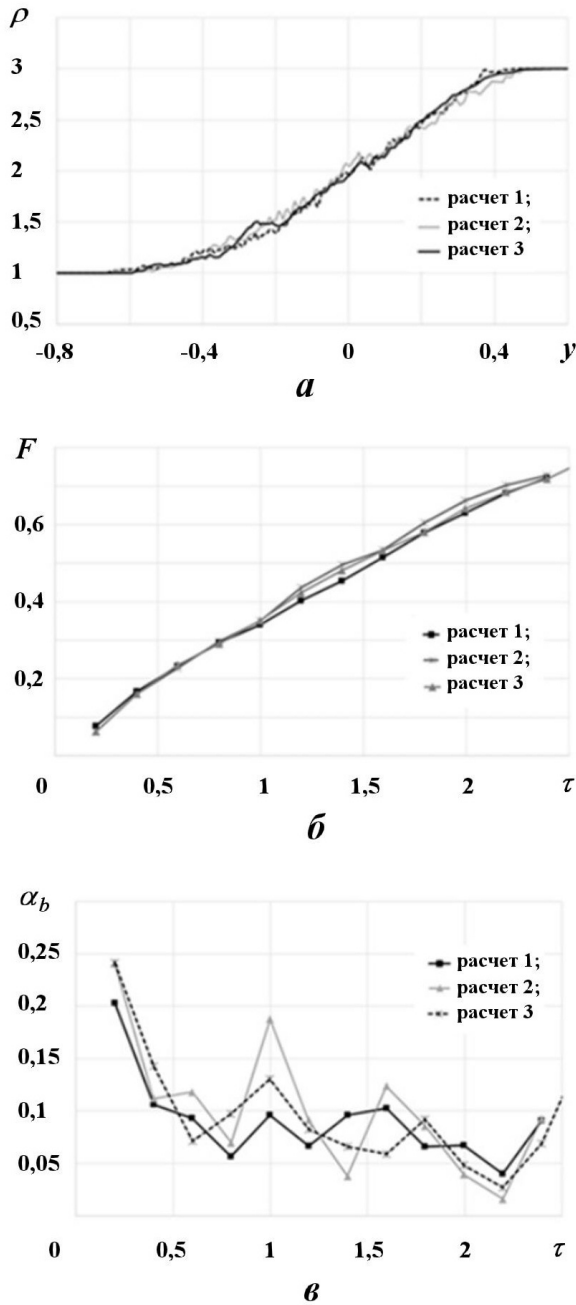


Рис. 8. Сравнение интегральных расчетных характеристик: a — профили средней плотности вдоль координаты y в ЗТП на момент времени $t = 4,5$; $б$ — зависимости функции ширины ЗТП от приведенного времени τ ; $в$ — зависимости константы автомодельности α_b от приведенного времени τ для зоны проникания легкой жидкости в тяжелую

Профили массы гомогенно перемешанных веществ из состава смеси на момент времени $t = 4,5$ показаны на рис. 5. Интегральные массы этих веществ во всей ЗТП были приведены в табл. 3.

Из представленных данных видно, что расчеты 1 и 2 для несмешивающихся веществ дают близкие между собой значения интегральной степени гомогенности и удовлетворительно согласуются с известными данными.

Отметим еще раз, что все известные расчетные данные по степени гомогенности в табл. 2 получены по модели 1, отличающейся от предлагаемой модели 2 и не учитывающей историю перемешивания. В расчете 2 (с моделью 2 и с учетом истории перемешивания) получено чуть большее значение степени гомогенного смешения для обоих веществ, чем в расчете 1. Это связано с тем, что при использовании смесевых дубликатов веществ не происходит отмеченного выше обратного перехода части гомогенно перемешанной смеси в гетерогенное состояние. Последнее обстоятельство способствует значительному увеличению массы гомогенно перемешанных веществ.

Можно отметить, что по сравнению с несмешивающимися веществами (расчет 2) в расчете со смешивающимися веществами (расчет 3) происходит рост интегральной степени гомогенности для веществ от $\Theta_{1,2} \approx 0,35 \div 0,4$ до $\Theta_{1,2} \approx 0,6 \div 0,8$. Интегральная степень гомогенности для среды в целом составляет $\Theta \approx 0,77$ (см. табл. 3). Полученные результаты качественно согласуются с известными расчетными и экспериментальными данными, представленными в табл. 2.

Заключение

В работе предложен новый подход к ПЧМ турбулентного перемешивания. Основная идея подхода — определить состояние перемешивания веществ в смешанных ячейках; вещества ячейки, образовавшие гомогенную смесь, при дальнейшем расчете рассматриваются как одно вещество.

На основе этого подхода проведена соответствующая модификация метода концентраций в рамках эйлеровой методики ЭГАК, для которой этот метод является базовым при моделировании течений многокомпонентной среды. Предпосылки модификации метода концентраций заключаются в том, что в являющихся его основой алгоритмах анализа и расчета потоков на эйлеровом этапе газовой динамики используются математические механизмы, искусственно препятствующие гомогенному перемешиванию ве-

ществ в процессе счета. В новом методе состояние перемешивания веществ в ячейке определяется по окружающему полю концентраций; далее вещества ячейки, образовавшие гомогенную смесь, переводятся в новые вещества (смесевые дубликаты), движение которых рассчитывается по специально разработанному алгоритму. Такая модификация метода концентраций учитывает историю перемешивания, а именно обеспечивает, чтобы вещества, уже перешедшие в состояние гомогенного смешения, оставались в таком состоянии и при дальнейшем счете. Таким образом, удастся учесть историю процесса перемешивания для определения локальной (в каждой смешанной ячейке) степени гомогенного смешения при ПЧМ турбулентного перемешивания. Методика ЭГАК с описанным методом дает возможность использования ПЧМ для моделирования течений с учетом химического или термоядерного горения, в которых важно знать состояние смешения в каждой смешанной ячейке. Методика позволяет описывать перемешивание как для несмешивающихся, так и для смешивающихся веществ.

Тестирование методики на задаче о гравитационном перемешивании показало, что полученные результаты по оценке степени гомогенного смешения качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчетов других исследователей. Однако при этом интегральная степень гомогенного смешения для несмешивающихся веществ составляет $\Theta \approx 0,35 \div 0,4$, что несколько больше известных расчетных данных, полученных без учета истории перемешивания. Для смешивающихся веществ получена интегральная степень гомогенного смешения $\Theta \approx 0,6 \div 0,8$, что, наоборот, несколько меньше предыдущих численных оценок (см. табл. 2). И то, и другое вполне логично, и представляется, что результаты с учетом истории процесса перемешивания являются более точными по степени гомогенности. Это подтверждается лучшим согласием значений Θ , полученных в расчете с учетом истории перемешивания, с экспериментом. Отметим также, что в случае несмешивающихся веществ учет истории процесса перемешивания значительно увеличивает массы гомогенно перемешанных веществ по сравнению с расчетом без учета истории.

Вне данной работы остался вопрос о влиянии предложенного подхода на результаты расчетов в трехмерном случае, что предполагается изучить в дальнейшем. Отметим, что все исследова-

ния в настоящей работе проведены с использованием LES-моделирования, однако данный подход может быть использован и для DNS- и LES-моделирования.

Список литературы

1. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С., Фролов В. Д., Яненко Н. Н., Янилкин Ю. В. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 276, № 4. С. 466–469.
Bakhrakh S. M., Glagoleva Yu. P., Samigulin M. S., Frolov V. D., Yanenko N. N., Yanilkin Yu. V. Raschet gazodinamicheskikh techeniy na osnove metoda kontsentratsiy // Dokl. AN SSSR. 1981. T. 276, No 4. S. 466–469.
2. Hirt C. W., Nichols B. D. Volume of fluid (VOF) method for dynamics of free boundaries // J. Comp. Phys. 1981. Vol. 39. P. 201–225.
3. Dyadechko V., Shashkov M. Reconstruction of multi-material interfaces from moment data // Ibid. 2008. Vol. 227. P. 5361–5384.
4. Скрыпник С. И., Рудько Н. М., Королёв Р. А., Ляпин В. В., Попов А. В. Численное решение двумерных уравнений газодинамики с теплопроводностью с использованием переменного по размеру разностного шаблона // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 14–26.
Skrypnik S. I., Rudko N. M., Korolyev R. A., Lyapin V. V., Popov A. V. Chislennoe reshenie dvumernykh uravneniy gazodinamiki s teploprovodnostyu s ispolzovaniem peremennogo po razmeru raznostnogo shablona // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2007. Vyp. 1. S. 14–26.
5. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А., Гаврилова Е. С., Гончаров Е. А., Горбенко А. Д., Городничев А. В., Губков Е. В., Гужова А. Р., Дегтяренко Л. И., Жарова Г. В., Колобянин В. Ю., Софронов В. Н., Стадник А. Л., Ховрин Н. А., Чернышова О. Н., Чистякова И. Н., Шемяков В. Н. Эйлеровы численные мето-

- дики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–65.
- Yanilkin Yu. V., Belyaev S. P., Bondarenko Yu. A., Gavrilova E. S., Goncharov E. A., Gorbenko A. D., Gorodnichev A. V., Gubkov E. V., Guzhova A. R., Degtyarenko L. I., Zharova G. V., Kolobyenin V. Yu., Sofronov V. N., Stadnik A. L., Khovrin N. A., Chernyshova O. N., Chistyakova I. N., Shemyakov V. N.* Eylerovy chislennye metodiki EGAK I TREK dlya modelirovaniya mnogomernykh techeniy mnogokomponentnoy sredy // Trudy RFYaTs-VNIEEF. 2008. Vyp. 12. S. 54–65.
6. Янилкин Ю. В., Стаценко В. П., Козлов В. И. Математическое моделирование турбулентного перемешивания в сжимаемых средах. Курс лекций в 2 томах. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2020.
Yanilkin Yu. V., Statsenko V. P., Kozlov V. I. Matematicheskoe modelirovanie turbulentnogo peremeshivaniya v szhimaemykh sredakh. Kurs lektsiy v 2 tomakh. Sarov: RFYaTs-VNIEEF, 2020.
 7. Стаценко В. П., Янилкин Ю. В., Силькова О. Г., Стадник А. Л. Степень гомогенного смешения по результатам 3D численных расчетов гравитационного турбулентного перемешивания // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 2–3. С. 32–40.
Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Sinkova O. G., Stadnik A. L. Stepen gomogenno smesheniya po rezultatam 3D chislennykh raschetov gravitatsionnogo turbulentnogo peremeshivaniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 2007. Vyp. 2–3. S. 32–40.
 8. *Linden P. F., Redondo J. M.* Molecular mixing in Rayleigh–Taylor instability // J. Fluid Mech. 1991. Vol. A 3(5). P. 1269–1277.
 9. Янилкин Ю. В., Гужова А. Р., Дегтяренко Л. И., Силькова О. Г. Определение локальной степени гомогенного смешения при прямом численном моделировании турбулентного перемешивания // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2020. Вып. 3. С. 3–11.
Yanilkin Yu. V., Guzhova A. R., Degtyarenko L. I., Sinkova O. G. Opredelenie lokalnoy stepeni gomogenno smesheniya pri pryamom chislennom modelirovanii turbulentnogo peremeshivaniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2020. Vyp. 3. S. 3–11.
 10. *Kozlovskih A. S., Neuvazhayev D. V.* Coefficient of heterogeneity in turbulent mixing zone // Laser and Particle Beams. 2000. Vol. 18. P. 207–212.
 11. Янилкин Ю. В. Модели замыкания уравнений лагранжевой газодинамики и упругопластики в многокомпонентных ячейках. Часть 1. Изотропные модели // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2017. Вып. 3. С. 3–21.
Yanilkin Yu. V. Modeli zamykaniya uravneniy lagranzhevoy gazodinamiki i uprugoplastiki v mnogokomponentnykh yacheykakh. Chast 1. Izotropnye modeli // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2017. Vyp. 3. S. 3–21.
 12. Янилкин Ю. В., Топорова О. О., Колобянин В. Ю. Модели замыкания уравнений лагранжевой газодинамики и упругопластики в многокомпонентных ячейках. Часть 2. Анизотропные модели // Там же. С. 22–38.
Yanilkin Yu. V., Toporova O. O., Kolobyenin V. Yu. Modeli zamykaniya uravneniy lagranzhevoy gazodinamiki i uprugoplastiki v mnogokomponentnykh yacheykakh. Chast 2. Anizotropnye modeli // Tam zhe. S. 22–38.
 13. Кучеренко Ю. А., Пылаев А. П., Мурзаков В. Д., Беломестных А. В., Попов В. Н., Тяктев А. А. Экспериментальное определение доли молекулярного перемешивания на стадии развития рэлей-тейлоровской неустойчивости методикой химического индикатора // VII Забабахинские науч. чтения. Снежинск, 2005.
Kucherenko Yu. A., Pylaev A. P., Murzakov V. D., Belomestnykh A. V., Popov V. N., Tyaktev A. A. Eksperimentalnoe opredelenie doli molekulyarnogo peremeshivaniya na stadiya razvitiya reley-teylovovskoy neustoychivosti metodikoy khimicheskogo indikatora // VII Zababakhinskije nauch. chteniya. Snezhinsk, 2005.

14. *Dimonte G., Youngs D. L., Dimits A., Weber S., Marinak M., Garasi S., Robinson A., Ramaprabhu M. J., Calder A. C., Fruxell B., Biello J., Dursi L., MacNeice P., Olson K., Richer R., Rosner R., Timmes F., Tofo 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.
15. *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.
16. *Cook A. W., Cabot W., Miller P. L.* The mixing transition in Rayleigh–Taylor instability // *J. Fluid Mech.* 2004. Vol. 511. P. 333–362.
17. *Youngs D. L.* Numerical simulation of mixing by Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instabilities // *Laser and Particle Beams*. 1994. Vol. 12, No 4. P. 725–750.
18. *Mellado J. P., Sarkar S.* Large-eddy simulation of Rayleigh–Taylor turbulence with compressible miscible fluids // *Phys. Fluids*. 2005. Vol. 17. Paper 076101.
19. *Янилкин Ю. В., Стаценко В. П., Ребров С. В., Синькова О. Г., Стадник А. Л.* Исследование гравитационного турбулентного перемешивания при больших разноточностях с помощью прямого трехмерного численного моделирования // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2002. Вып. 2. С. 3–9.
20. *Янилкин Ю. В., 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.
21. *Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V.* Uchet molekulyarnoy vyazkosti pri pryamom chislennom modelirovanii gravitatsionnogo turbulentnogo peremeshivaniya // *Tam zhe. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika*. 2005. Вып. 1–2. С. 74–83.

Статья поступила в редакцию 05.08.22.