

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



В.А.Бабенко, В.А.Фрост

Зависимость скалярной
диссипации
от химических превращений в
турбулентных потоках

Препринт № 840



МОСКВА 2007 год

Аннотация

Для учета взаимного влияния химических превращений и микросмешения используется модель, основанная на уравнении для корреляционной функции скаляра. Для определения влияния химических превращений на среднее поле и корреляционную функцию производится восстановление распределения плотности вероятности, основанное на простейших предположениях о возможной форме распределения. Примесь предполагается пассивной, то есть не влияющей на параметры турбулентности и коэффициент турбулентной диффузии. Необходимые параметры однородного турбулентного поля предполагаются известными и аппроксимируются простейшими зависимостями.

Рассмотрены особенности процесса переноса в плоском слое, на границах которого заданы значения величины скаляра. Получены результаты по влиянию химических превращений на распределения средних полей и полей интенсивностей пульсаций скаляра и распределение скалярной диссипации. Проведен расчет формирования зоны реакции.

Данная работа является развитием модели, предложенной в [1, 2]

Ключевые слова: турбулентность, молекулярный перенос, скалярная диссипация, микросмешение, плотность распределения вероятности, турбулентные реагирующие потоки.

Abstract

The model based on the equation for correlation function and the presumed probability density function (PDF) are used for the taking into account of the interference of chemical reaction and micromixing in turbulent flows. The concrete form of PDF is being calculated as the mean and the variance of the scalar have been calculated from the equations for mean scalar and its correlation function. The scalar is supposed passive, that do not to cause changes of turbulence and diffusivity. The necessary parameters of a homogeneous turbulent field are assumed known and approximated by the elementary dependences. The process of scalar transfer in a plain layer, on which boundaries the values of the scalar are given, is considered. Results on the influence of chemical transformations on the distributions of average and variance fields of a scalar and the distribution of the scalar dissipation are received. Calculation of the reaction zone formation is carried out.

The given work is development of the model offered in [1, 2] .

Keywords: turbulence, molecular transfer, scalar dissipation, micromixing, density of probability distribution, PDF, turbulent reacting flows.

1 Введение

Проблема определения взаимного влияния турбулентности и статистических свойств скалярного поля является центральной при анализе турбулентных реагирующих потоков.

Интерес к статистическим характеристикам скалярного поля (температуры, концентрации) возникает во многих отраслях современной физики. Например, на распространение в атмосфере лазерных пучков и радиоволн сильно влияет распределение мелкомасштабного градиента температуры. Параметры скалярного поля, находящегося под воздействием турбулентности, определяют важнейшие процессы в целом ряде инженерных приложений, включая описание процессов в двигателях внутреннего сгорания, химических реакторах, энергетических установках, при смешении и распаде загрязняющих веществ в атмосфере. Пульсации тока зондов, применяющихся в электропроводной среде при турбулентных режимах течения, также определяются статистическими свойствами распределений токопроводящих компонентов.

Физическая картина смешения в турбулентном потоке выглядит следующим образом. В результате турбулентных движений происходит искривление и растяжение изоскалярных поверхностей, в результате чего происходит увеличение градиентов и лапласианов скалярного поля и интенсификация обменных процессов. Если бы молекулярный перенос не сглаживал возникающее поле, рост потоков происходил бы экспоненциально. В действительности молекулярный перенос сглаживает поле скаляра и возникает некоторое динамическое равновесие между искривлением и растяжением с одной стороны и сглаживанием. Для этого сглаживания применяются термины «вырождение» и «скалярная диссипация». Первый, из которых применяется для нестационарных режимов, когда в конечном состоянии перенос отсутствует. Для стационарных в среднем режимов применяется второй термин, хотя никакой собственно диссипации не происходит. Отсутствует переход кинетической энергии в тепло, как это имеет место для поля скорости. Наблюдается динамическое равновесие, интенсивность взаимодействия при котором характеризуется интенсивностью молекулярного смешения, мерой которого и является величина, называемая скалярной диссипацией. При анализе турбулентных реагирующих потоков применяется также термин «микросмешение», который будет пояснен ниже.

Для решения перечисленных выше задач предлагается несколько подходов. Наиболее общим, на наш взгляд, является использование совместной плотности распределения вероятности (СПРВ) скаляров, от которых зависит скорость химической реакции [3–11]. Для этой функции составляется уравнение баланса, которое решается с помощью стохастических моделей (см., напри-

мер [8]), кроме того, применяются более простые подходы - флеймлетный [10], предположенной формы ПРВ (далее ПФПРВ, см., например, [11], 14), замыкания условных моментов (в англоязычной литературе СМС, см. [12]). Наряду с вероятностными подходами для изучения турбулентных пламен применяются также требующие значительных вычислительных ресурсов методы прямого численного моделирования (DNS) и методы с применением подсеточного моделирования (LES). Методы LES [9,13–15] и DNS [9,16–18] применяются в системах простейшей геометрии, однако только они дают детальную информацию о структуре пламени. Тем не менее, в настоящее время расчет более или менее сложной химической реакции с применением DNS в трехмерном случае фактически невозможен. Методы LES в последнее время активно применяются для расчета сложных химических реакций по упрощенным схемам, что позволяет включить в расчет до 10 скаляров. В отличие от DNS, в LES методах требуется моделирование неизвестных членов, и точность результатов зависит от качества такого моделирования. Кроме того, толщина фронта пламени обычно мала, что вносит дополнительные усложнения в методы прямого численного интегрирования. Центральной проблемой LES является подсеточное моделирование SGS, и для ее решения применяется весь ассортимент более простых подходов, в т.ч. СПРВ и ПФПРВ.

При описании турбулентных реагирующих потоков основной проблемой является учет влияния турбулентности на скорость химических процессов, которое проявляется через изменение скорости смешения компонентов и интенсивности теплообмена, влияющих на распределения концентраций компонентов и температуры, которые непосредственно влияют на скорости химических превращений. При этом надо различать смешение, связанное с переносом по пространству (адвекция), и смешение, изменяющее состав смеси, в которой происходят химические превращения (микросмешение или смешение до молекулярного состояния). Турбулентные пульсации скорости приводят к тому, что все поля концентраций и температуры являются стохастическими и задача определения интенсивности микросмешения сводится к определению статистики соответствующих лапласианов, знание которых позволяет определять плотности распределения вероятностей (ПРВ), необходимые для вычисления средних скоростей химических превращений.

Удобно все имеющиеся подходы к описанию микросмешения в турбулентном потоке разделить на локальные или одноточечные и нелокальные, простейшими из которых являются двухточечные.

Как правило, описание процесса смешения в турбулентных реагирующих потоках основывается на уравнении для одноточечной плотности распределения вероятности скаляра, в качестве которого рассматриваются некая концентрация компонентов потока или температура среды. В уравнении для распре-

деления вероятности турбулентный перенос и химические превращения описываются точно, но для описания смешения до молекулярного уровня необходимы дополнительные предположения (модели микросмешения). К настоящему времени предложено много различных моделей микросмешения и выбор делается обычно из условий удобства вычислений. Все эти модели содержат эмпирические константы, выбираемые для конкретных условий, и не могут описать изменение микросмешения при изменении условий в потоке, в основном из-за того, что в рамках одноточечных подходов отсутствует возможность описания изменений характерных масштабов скалярного поля под действием турбулентности, в результате химических превращений и молекулярного переноса.

Для определения статистических свойств лапласианов необходимо применять более сложные методы, чем применяемые для определения ПРВ одноточечные подходы. Так в первой работе, посвященной уравнениям для ПРВ, предложенным для моделирования турбулентного горения [19], было отмечено, что условное среднее значение лапласиана, необходимое для замыкания уравнения для одноточечной ПРВ, может быть вычислено, если известно двухточечное ПРВ переносимой субстанции. Там же была предложена формула для условного среднего значения лапласиана, содержащая некий характерный размер скалярного поля.

Для правильного описания процесса смешения реагирующих потоков нужно включить в него реальные значения коэффициентов переноса, что возможно только при переходе к двухточечным моделям. Причем только в рамках двухточечных подходов без привлечения дополнительных соображений можно разделить влияние турбулентности на адвекцию и микросмешение. В двухточечных подходах удастся также сохранить в модели реальные величины молекулярных коэффициентов переноса, что позволяет рассматривать неустановившиеся процессы, такие как возникновение очага горения, и описать зависимость турбулентной скорости горения заранее перемешанной смеси от физико-химических характеристик горючей смеси, одной из которых является скорость нормального пламени. Двухточечное описание, позволяющее избежать трудностей, связанных с определением характерных масштабов скалярного поля, может быть построено различными способами: на основе уравнения для двухточечной плотности распределения вероятностей скаляра (ПРВС2); уравнения для совместной вероятности скаляра и его градиента или уравнения для корреляционной функции скалярного поля (КФС2). Близким к двухточечным подходам является использование уравнения для скалярной диссипации. Во всех случаях непосредственно получаемые уравнения оказываются незамкнутыми.

При использовании для описания турбулентного горения уравнения ска-

лярной диссипации [20] эта проблема приводит к необходимости использовать различные приближения и оценки. Конкретные результаты удается получить только для предельно больших значений чисел Рейнольдса и Дамкелера и равенстве числа Льюиса единице.

Уравнение скалярной диссипации является, по сути, уравнением для КФС, рассматриваемым при равенстве расстояния между точками нулю. Возможно, по этому теряются некоторые детали, отсутствие которых при попытках замкнуть его приводит к потере необходимых при описании химических реакций в турбулентных потоках элементов. Напротив, исходное уравнение для КФС удалось замкнуть при помощи ряда физических представлений о механизме взаимодействия турбулентности и скалярного поля [1].

Одним из направлений исследований, в которых рассматривается проблема замыкания уравнения для пространственно-временной корреляционной функции скалярного поля, являются исследования процессов, происходящих на электроде, размещенном на границе турбулентного потока электропроводящей жидкости (см., например, [21, 22]. При выводе замкнутого уравнения для корреляционной функции используются как представления о структуре корреляционной функции, так и значительное число предположений о особенностях переноса электроактивных компонент среды. В результате итоговое уравнение не содержит коэффициентов молекулярного переноса, что приемлемо при описании изучаемого процесса, но не может быть использовано в тех случаях, когда зависимость от конкретных значений коэффициентов молекулярного переноса существенна.

Дальнейшему развитию модели, основанной на уравнении для корреляционной функции и в которой влияние молекулярного переноса учитывалось бы физически обоснованно, посвящен настоящий препринт.

Наш интерес к уравнению для корреляционной функции скаляра возник при анализе возможностей использования для описания турбулентного горения уравнения для двухточечной плотности распределения вероятностей скаляра [23, 24]. При попытках замкнуть это уравнение появляются производные от корреляционной функции скаляра, что означает сведение проблемы замыкания уравнения для плотности вероятности к проблеме замыкания уравнения для корреляционной функции [1]. Производные от КФС возникают при замыкании уравнений, использующихся и в других подходах, например основанных на уравнениях для СПРВ скаляра и его градиента [25].

Близким по направленности нашим исследованиям является цикл работ, выполненных Е.О'Брайеном с соавторами (см., например, [4, 26]. Общим для наших подходов является понимание того, что для совершенствования методов описания химических процессов в турбулентных потоках требуется дальнейшее уточнение описания микросмешения, что невозможно сделать, оставаясь

в рамках одноточечного описания. Общим является также понимание того, что необходимо разделить описание процессов адвекции и смешения, что позволит ввести в описание конкретные значения молекулярных коэффициентов переноса. В работах [1, 2] была использована некоторая методика замыкания уравнений ПРВС2 и КФС2, основанная на анализе движения пары частиц в турбулентном поле скорости, которые, кроме того, участвуют в броуновском движении, что, по мнению авторов, моделирует молекулярное смешение. Эта теория позволяет по известному энергетическому спектру турбулентного поля скорости вычислить коэффициент вихревой диффузии, определяющий влияние турбулентности на структуру скалярного поля. Однако, при этом получается зависимость этого коэффициента от времени, — обстоятельство, на наш взгляд, крайне неприятное. Подробнее об этом будет сказано далее. Тем не менее, это позволило в работах Е.О'Брайена, посвященных как ПРВ2 так и КФС2, получать результаты для однородных нестационарных случаев, когда зависимость коэффициентов от времени может иметь место. Кроме того, в [4] зависимость КФС от химических процессов использовалась в виде, справедливым только для линейных зависимостей скоростей химических реакций, что позволило не рассматривать проблему замыкания для соответствующего слагаемого в уравнении для КФС.

В наших исследованиях, проводимых по гранту ИНТАС # 00-353, мы изучали возможности использования двухточечных распределений вероятности скаляра (ПРВС2) для уточнения моделей микросмешения. Было известно [19], что знание ПРВС2 позволяет определять микросмешение без дополнительных гипотез, но уравнение для ПРВС2 незамкнуто. Мы в [28, 29] пытались применить теорию движения пары частиц для анализа микросмешения, но столкнулись с зависимостью рассчитываемых величин от времени движения пары частиц, что, по нашему мнению, не соответствует физической картине явления. При попытках найти другой способ замыкания уравнения для ПРВС2 были обнаружены удивительные связи между уравнениями для ПРВС2 и для КФС2 [23, 24]. Оказалось, что, для замыкания уравнения для ПРВС2 достаточно замкнуть уравнение для КФС2. Была предложена некоторая процедура замыкания, в которой зависимость коэффициента вихревой диффузии от времени была проигнорирована. Расчеты показали, что использование полученного уравнения для КФС позволяет получить хорошее совпадение расчетов с результатами DNS [27]. В дальнейшем оказалось [1], что полученную формулу уравнения можно объяснить физическими соображениями, на базе которых можно уточнить метод замыкания уравнения для КФС. Удалось также доказать статистическую непротиворечивость предложенного замыкания. В работах [1, 2] проведены предварительные расчеты КФС2, результаты которых использовались для решения уравнения для ПРВС и определения средней ско-

рости химической реакции.

Как и ранее [1, 2] для упрощения расчетов предполагается не только однородность и изотропия турбулентности, но и изотропия скалярной диссипации. Однако, при необходимости, использование гипотезы Прандтля для замыкания уравнения для корреляционной функции позволяет получить тензор вихревой вязкости, что открывает пути решения задачи о возможной неизотропности диссипации скалярного поля.

Основная задача, решаемая в данной работе, это уточнение уравнения для корреляционной функции скалярного поля за счет учета непосредственного влияния химических процессов на это уравнение. Для членов этого уравнения, зависящих от скорости химических превращений, предлагается простейшая форма замыкания. В результате получаемая форма этих членов оказывается точной для линейных зависимостей скорости реакции и для точек $r = 0$ $r = \infty$. Для повышения надежности расчетов наряду с решением уравнения для ПРВ, проводится восстановления ПРВ скаляра с использованием простейшей формы ПРВ, справедливой в случае отсутствия перемежаемости. Как и ранее [1, 2] рассматривается задача о распределении параметров в плоском слое, на границах которого значения скаляра заданы, а турбулентный перенос отсутствует. С учетом влияния химических процессов на корреляционную функцию через посредство изменения среднего поля и непосредственно получены распределения среднего значения и дисперсии скаляра по ширине канала, а также распределения средней скорости химической реакции и скалярной диссипации.

2 Основные предположения.

Описание турбулентных реагирующих потоков строится на основе уравнения для корреляционной функции скаляра. Для определения плотности распределения вероятности скаляра (ПРВ), необходимой для вычисления скорости реакции, наряду с использованием уравнения для ПРВ, замыкаемого простейшей гипотезой о микросмещении, используется алгоритм восстановления ПРВ по известным среднему значению и дисперсии скаляра, вычисляемым по уравнениям для среднего поля и корреляционной функции соответственно. Плотность среды предполагается постоянной. Скаляр предполагается пассивным, что означает отсутствие его влияния на турбулентность и коэффициент турбулентной диффузии. Все необходимые параметры турбулентного поля, которые понадобятся в дальнейшем, предполагаются известными и аппроксимируются простейшими зависимостями. Коэффициент молекулярной диффузии примеси Dm также предполагается постоянным.

Под корреляционной функцией скаляра понимается

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \langle c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle \quad (1)$$

Здесь \mathbf{x}_1 и \mathbf{x}_2 - точки пространства, t - время и c' - отклонение (пульсация) от среднего значения скаляра $C(\mathbf{x})$. Так что реальное значение скаляра является суммой среднего значения и пульсации $c(\mathbf{x}, t) = C(\mathbf{x}) + c'(\mathbf{x}, t)$. Угловые скобки означают усреднение по реализациям. В дальнейшем нижний индекс используется для обозначения компоненты векторного аргумента, например $u_1 = u(\mathbf{x}_1, t)$.

В отличие от работ [2, 1], где рассматривалась корреляционная функция для значений скаляра без вычитания соответствующих средних значений, в настоящей работе используется традиционная форма корреляционной функции. Это облегчает расчет при малых значениях коэффициента Dm за счет упрощения граничных условий, но требует вычисления источников членов в уравнении для корреляционной функции, которые отсутствовали в уравнении для КФС, использовавшемся в [1].

Корреляционная функция является двухточечной характеристикой. Поэтому уравнение для КФС можно получить, если умножить уравнение переноса для пульсаций скаляра, взятое в одной из точек (первой), на значение скаляра во второй точке и аналогично для второй точки и сложить. После перехода к новым независимым переменным: $\boldsymbol{\eta} = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$ и $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ и усреднения, получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} ((\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\eta}}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + ((\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ & + \frac{1}{2} \text{div}_{\boldsymbol{\eta}} \langle (\mathbf{u}'_1 + \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle + 2 \text{div}_{\mathbf{r}} \langle (\mathbf{u}'_1 - \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle = \\ & Dm \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + 2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \right) + \\ & (D_t(\mathbf{x}_1) + D_t(\mathbf{x}_2)) \frac{dC(\mathbf{x})}{dx} \Big|_{\mathbf{x}_1} \frac{dC(\mathbf{x})}{dx} \Big|_{\mathbf{x}_2} + \langle c'(\mathbf{x}_2, t) W' |_{\mathbf{x}_1} \rangle + \langle c'(\mathbf{x}_1, t) W' |_{\mathbf{x}_2} \rangle \quad (2) \end{aligned}$$

Здесь \mathbf{r} и $\boldsymbol{\eta}$ - вектора, соединяющий между собой точки и указывающий на его середину, \mathbf{U} и \mathbf{u}' - средняя и пульсационная составляющие скорости в соответствующих точках; $D_t(\mathbf{x})$ - коэффициент турбулентной диффузии; W' - отклонение скорости реакции от своего среднего значения в рассматриваемой точке из-за того, что реальное значение скаляра является случайной величиной; индекс при операторах указывает на переменные, по которым производится дифференцирование. Последние два члена в правой части представляют возникновение пульсаций вследствие наличия среднего градиента поля скаляра и влияние химических процессов. На этой стадии произошло расщепление

процесса переноса (слагаемое с $\mathbf{u}'_1 + \mathbf{u}'_2$), деформации скалярного поля под действием турбулентности (слагаемое с $\mathbf{u}'_1 - \mathbf{u}'_2$) и действия молекулярного переноса (первый член в правой части). Использование уравнения для корреляционной функции в традиционной форме привело к появлению в нем источников членов (слагаемые, не содержащие искомую функцию). Последние два слагаемых в правой части представляют влияние химических превращений.

Полученное уравнение не замкнуто. Это относится к слагаемым, содержащим третьи моменты и скорость химических превращений. Кроме того, для вычисления источников членов необходимо знание среднего поля.

В работе [1], используя обобщение гипотезы Прандтля, связывающее среднее от потока с градиентом переносимой скалярной величины F (многоточечное предпологает зависимость переносимой величины от нескольких точек пространства)

$$\langle (u'_i F(\mathbf{x}_1, \dots)) \rangle = \langle u'_i l \rangle \frac{\partial}{\partial x_i} F(\mathbf{x}_1, \dots) \quad (3)$$

к компонентам второй строки уравнения (2), была получена замкнутая форма уравнения для корреляционной функции скаляра при отсутствии химических превращений

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} ((\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\eta}}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + ((\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) = \\ \frac{\partial}{\partial \eta_i} (D_t(\mathbf{x}) + Dm) \frac{\partial}{\partial \eta_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ \frac{\partial}{\partial r_i} (Dr(\boldsymbol{\eta} + \mathbf{r}/2) + Dr(\boldsymbol{\eta} - \mathbf{r}/2) + 2Dm) \frac{\partial}{\partial r_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $D_t(\mathbf{x})$ и $Dr(\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta})$ - коэффициенты турбулентной и "вихревой диффузии", которые в неоднородных условиях могут являться тензорами. По повторяющимся индексам производится суммирование. Термин коэффициент вихревой диффузии заимствован из [26]. Эта часть уравнения выписана в виде, использованном для расчетов в [1, 2].

Необходимы некоторые пояснения. В наших прошлых исследованиях [28, 29] и в работах O'Brien *et al* [4, 26] проблема определения воздействия турбулентности на скалярное поле связывалась с характеристиками движения пары частиц в турбулентном потоке. Это приводило к зависимости параметров от времени движения, а в наших исследованиях также к отсутствию сглаживающего влияния молекулярного переноса. Мы, в отличие от O'Brien *et al*, не вводили в теорию броуновское движение частиц, которое позволило бы смоделировать микросмешение. Возникающая в обоих случаях зависимость коэффициентов от времени не соответствует представлениям о процессе. Действитель-

но в стационарном в среднем потоке отсутствует точка, которую можно принять за начальную. Особенно трудно определить эту точку для возникающих и исчезающих при реакции компонентов. Тем не менее, при замыкании уравнения для корреляционной функции незримо соображения о диффузии пары частиц присутствуют. Предполагается, что корреляционная функция связана со средой как некоторое образование (облако) и это образование перестраивается под действием турбулентности так, как это имеет место для точек среды. При этом основное внимание уделяется характерным точкам этого образования, обозначенным аргументами КФС, например, центру облака. Поэтому для описания турбулентного движения центра отрезка в уравнении (4) появляется коэффициент турбулентной диффузии. Главное же заключается в том, что концы отрезка отождествлены с парой диффундирующих материальных точек, что и позволяет прийти к приведенной выше форме вихревой диффузии.

Для членов, описывающих влияние химических превращений на корреляционную функцию, предлагается следующее. При $r = 0$ оба эти слагаемых совпадают и могут быть вычислены по известной ПРВ, при $r \rightarrow \infty$ эти слагаемые равны нулю. Поэтому предлагается следующая аппроксимация этих слагаемых, использующая симметрию корреляционной функции по переменной r

$$\begin{aligned} \langle c'(\mathbf{x}_2, t) W' |_{\mathbf{x}_1} \rangle + \langle c'(\mathbf{x}_1, t) W' |_{\mathbf{x}_2} \rangle = \\ (\langle c' W' \rangle |_{\mathbf{x}_1} + \langle c' W' \rangle |_{\mathbf{x}_2}) \bar{R}(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $\bar{R}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$ нормированная корреляционная функция, при $r = 0$ равная единице.

$$\bar{R}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \frac{R(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)}{R(\mathbf{x}, 0, t)} \quad (6)$$

Иногда в приводимых выражениях используются независимые переменные двух разных систем координат, что вызвано желанием придать им больший физический смысл. Полученная форма является точной при линейной зависимости скорости реакции от концентрации [4]. Предлагаемая аппроксимация

удовлетворяет требованиям теоремы Хинчина. В итоге

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} ((\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\eta}}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + ((\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) = \\
& \quad \frac{\partial}{\partial \eta_i} \left(D_t(\boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{2} Dm \right) \frac{\partial}{\partial \eta_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\
& \quad \frac{\partial}{\partial r_i} (Dr(\mathbf{x}_1) + Dr(\mathbf{x}_2) + 2Dm) \frac{\partial}{\partial r_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\
& \quad (D_t(\mathbf{x}_1) + D_t(\mathbf{x}_2)) \frac{dC(\mathbf{x})}{dx} \Big|_{\mathbf{x}_1} \frac{dC(\mathbf{x})}{dx} \Big|_{\mathbf{x}_2} + \\
& \quad (\langle c'W' \rangle|_{\mathbf{x}_1} + \langle c'W' \rangle|_{\mathbf{x}_2}) R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{7}$$

В полученном уравнении (7) воздействие турбулентности и молекулярной диффузии на скалярное поле описываются различными членами уравнения, что позволяет проанализировать влияние турбулентности на структуру скалярного поля и смешение до молекулярного состояния.

Смысл отдельных слагаемых, входящих в уравнение (7) достаточно ясен. Первое слагаемое в левой части описывает эволюцию, второе – перенос по пространству без изменения структуры поля, следующее – деформации (растяжение и кручение) скалярного поля из-за неоднородности среднего движения. Первое слагаемое в правой части – это перенос по пространству в результате турбулентных пульсаций (турбулентная диффузия) и, как будет видно из дальнейшего, в результате молекулярного движения, выравнивающего распределение скаляра в пространстве. Следующее слагаемое описывает собственно смешение в турбулентном потоке. Здесь действие параметра Dr приводит к изменению структуры скалярного поля под действием турбулентных пульсаций. Возникающие при этом деформации приводят к росту градиентов скалярного поля, что проявляется как уменьшение внутреннего масштаба скалярного поля и усиление процесса смешения. Так как коэффициент вихревой диффузии при $r = 0$ равен нулю, то к уменьшению интенсивности пульсаций это не приводит. Поэтому при отсутствии молекулярного переноса значение $R(\boldsymbol{\eta}, r)|_{r=0}$ изменяется только в результате переноса по пространству. Для этого процесса удобно использовать термин "декорреляция". В тоже время, ненулевой коэффициент молекулярного переноса приводит к уменьшению величины $R(\boldsymbol{\eta}, r)|_{r=0}$, что может рассматриваться как сглаживание скалярного поля под действием молекулярной диффузии. Собственно последний из рассмотренных процессов и есть микросмешение, которое уменьшает интенсивность пульсаций скаляра и создает условия для протекания химических реакций.

2.1 Уравнение для среднего поля скаляра.

Как обычно к уравнению для корреляционной функции необходимо добавить уравнение для среднего поля $C(\mathbf{x}, t)$. В дальнейшем удобно для пространственной переменной в уравнении для среднего и для переменной, соответствующей центру отрезка, использовать одинаковое обозначение \mathbf{z} . При принятых предположениях уравнение для среднего будет

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{z}, t) + (\mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{z}}) C(\mathbf{z}, t) = \text{grad}_{\mathbf{z}} ((D(\mathbf{z}, t) + Dm) \text{div}_{\mathbf{z}} C(\mathbf{z}, t)) + \langle W(c) \rangle \quad (8)$$

Здесь $D(\mathbf{z}, t)$ – коэффициент турбулентной диффузии, понимаемый в обычном смысле; $\langle W(c) \rangle = \bar{W}(\mathbf{z})$ – средняя скорость химических превращений в соответствующей точке.

2.2 Об уравнении для плотности распределения вероятности скаляра.

Для расчета химических превращений необходимо располагать ПРВС скаляра $P(z, c)$. В предыдущих исследованиях для этого использовалось соответствующее уравнение, что позволяло простым интегрированием определять как среднее поле скаляра, необходимое для вычисления источникового члена в уравнении для корреляционной функции, так и коэффициенты в слагаемых, определяющих зависимость корреляционной функции от химических процессов. Уравнение для ПРВС использовалось в форме уравнения для функции распределения

$$F(z, c) = \int_c^\infty P(z, c') dc' \quad (9)$$

В этом случае результат интегрирования ограничен по величине и изменяется монотонно. Уравнение для $F(z, c)$ будет

$$\frac{\partial}{\partial z_i} (D_t(\mathbf{z}) + Dm) \frac{\partial}{\partial z_i} F(\mathbf{z}, c) + W(c) \frac{\partial F(\mathbf{z}, c)}{\partial c} + \beta(z) \text{Micromixingmodel}[F] = 0 \quad (10)$$

Здесь $W(c)$ – выражение для скорости химической реакции, $\beta(\mathbf{z})$ – интенсивность скалярной диссипации, которая вычисляется по результатам расчета корреляционной функции.

Проведенные расчеты показали как достоинства, так и недостатки использования уравнения для ПРВ. Главный недостаток заключается в произвольности выбора модели микросмешения.

В нашем случае в качестве модели микросмешения используется простейшая ланжевенновская релаксационная модель [19]:

$$Micromixingmodel[F] = -(c - C(z)) \frac{\partial F(\mathbf{z}, c)}{\partial c} \quad (11)$$

Это позволяет связать коэффициент β в уравнении для ПРВС со скалярной диссипацией, определяемой по корреляционной функции

$$\beta(\mathbf{z}) = 2Dm \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(\mathbf{z}, r) \Big|_{r=0} / R(\mathbf{z}, 0) \quad (12)$$

Однако, не для всех моделей микросмешения возможно точно связать коэффициент в уравнении для ПРВС со скалярной диссипацией.

Кроме того, уравнение для ПРВС очень неудобно для проведения расчетов. Смешение приводит к возникновению резких изменений искомых функций, что требует специальных методов решения. Было испробовано достаточно много методов решения, но ни один из них нас не удовлетворил. Требования независимости решения от параметров сетки, способности решать двумерные задачи при отсутствии переноса по одной из координат и, главное, устойчивость метода, оказались невыполнимыми для более двадцати программ и пакетов.

В настоящем исследовании ПРВС определяется на основе предположенной формы распределения. Этому изменению метода расчета способствовало то, что получаемые нами режимы соответствуют так называемым режимам сильного смешения. При этих режимах перемежаемость практически отсутствует, что позволяет предложить, что ПРВС близко к нормальному распределению, которое переписано в форме, учитывающей, что величина независимой переменной изменяется в пределах 0 и 1. Это урезанная форма нормального распределения, причем вместо введения перемежаемости на границах 0 и 1, производится нормировка распределения. Функция распределения при этом будет

$$F(\mathbf{z}, c) = \frac{\left(-1/2 \operatorname{erf} \left(1/2 \frac{(c-C(\mathbf{z}))\sqrt{2}}{\sqrt{\operatorname{disp}(\mathbf{z})}} \right) + 1/2 \operatorname{erf} \left(1/2 \frac{(1-C(\mathbf{z}))\sqrt{2}}{\sqrt{\operatorname{disp}(\mathbf{z})}} \right) \right)}{\left(1/2 \operatorname{erf} \left(1/2 \frac{C(\mathbf{z})\sqrt{2}}{\sqrt{\operatorname{disp}(\mathbf{z})}} \right) + 1/2 \operatorname{erf} \left(1/2 \frac{(1-C(\mathbf{z}))\sqrt{2}}{\sqrt{\operatorname{disp}(\mathbf{z})}} \right) \right)} \quad (13)$$

Здесь $C(\mathbf{z})$ и $\operatorname{disp}(\mathbf{z})$ среднее значение скаляра и его дисперсия

$$C(\mathbf{z}) = - \int_0^1 c \frac{\partial F(\mathbf{z}, c)}{\partial c} dc = \int_0^1 F(\mathbf{z}, c) dc \quad (14)$$

$$disp(\mathbf{z}) = - \int_0^1 (c - C(\mathbf{z}))^2 \frac{\partial F(\mathbf{z}, c)}{\partial c} dc = 2 \int_0^1 c F(\mathbf{z}, c) dc - C(\mathbf{z})^2 \quad (15)$$

Все необходимые средние определяются интегрированием функции $F(\mathbf{z}, c)$

$$\langle W \rangle(\mathbf{z}) = - \int_0^1 W(c) \frac{\partial F(\mathbf{z}, c)}{\partial c} dc \quad (16)$$

$$\langle c'W' \rangle(\mathbf{x}) = - \int_0^1 (c - C(\mathbf{x})) W(c) \frac{\partial F(\mathbf{x}, c)}{\partial c} dc \quad (17)$$

Соотношения (14) и (15), так же как интегрирование уравнения (10) используются только для контроля правильности восстановления ПРВС.

3 Постановка задачи.

Одно из существенных затруднений, связанное с использованием уравнения для корреляционной функции, это большое число независимых переменных. В общем случае корреляционная функция зависит от шести пространственных переменных и времени. В однородных условиях при изотропии решения число переменных уменьшается до двух

Наименьшее количество переменных в неоднородных условиях можно получить, если искать стационарное решение в канале постоянной ширины, на стенках которого значения скаляра заданы. Это соответствует течению Куэтта между двумя плоскими бесконечными пластинами, одна из которых движется с некоторой постоянной скоростью. Температуры пластин постоянны, но отличаются. Существует поток тепла, если коэффициент молекулярной теплопроводности не равен нулю. В зазоре наблюдается турбулентность, что приводит к возникновению турбулентного переноса. С целью разделить молекулярный и турбулентные переносы предполагается, что турбулентный перенос скаляра от стенок равен нулю, что естественно, так как скорости среды по нормали к стенке на стенках равны нулю.

Упрощение заключается в предположении о однородности турбулентности, что не позволяет провести апробацию подхода на реальных экспериментальных данных. На рис. [1] схематически изображены используемые переменные. Вертикальная линия представляет пространственную координату, соответствующую изменению положения центра, наклонные линии соответствуют линиям, связывающим точки x_1 и x_2 . Линии, оканчивающиеся на границах, поясняют образование граничных условий для корреляционной функции. В точке, лежащей на границе, значение пульсации скаляра известно, оно равно нулю, что приводит к нулевым граничным условиям.

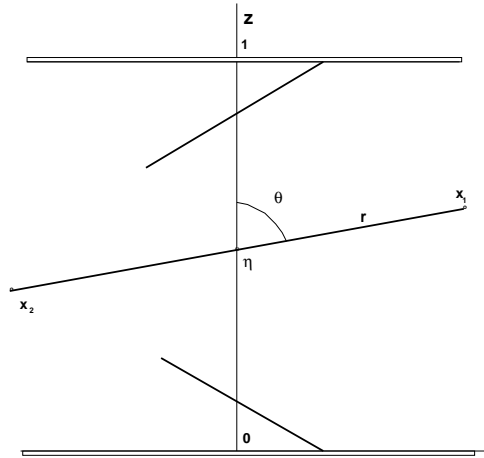


Рис. 1: Расчетная область и независимые переменные.

Среднее движение не вносит вклада в решение из-за однородности решения по продольной координате, турбулентный перенос описывается турбулентным коэффициентом диффузии, не зависящим от времени но изменяющемся по ширине слоя.

Тогда для установившегося режима для корреляционной функции нужно было бы оставить три независимых переменных: z – положение центра по ширине слоя, θ – направление и r – длина отрезка, соединяющего рассматриваемые точки. Причем переменные r и θ должны рассматриваться как переменные сферической системы координат при условии отсутствия зависимости от третьей переменной ϕ . С целью уменьшения числа независимых переменных предполагается, что корреляционная функция не зависит от направления θ . Это очень сильное предположение, допустимое только в режиме иллюстрирующем возможности рассматриваемого подхода. Оценки, сделанные на предыдущем этапе [1], показали допустимость такого упрощения.

В итоге имеем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (D(z) + Dm) \frac{\partial}{\partial z} R + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 Dm \frac{\partial}{\partial r} R \\ & + (D(z + r/2) + D(z - r/2)) \frac{dC(z)}{dz} \Big|_{z+r/2} - \frac{dC(z)}{dz} \Big|_{z-r/2} + \langle c' W(c) \rangle \bar{R} = 0 \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь Dm - коэффициент, содержащий коэффициенты вихревой диффузии и молекулярного переноса и зависящий от корреляционной функции продольной компоненты скорости изотропного поля $B_{LL}(r)$.

$$Dm = [D(z + r/2) + D(z - r/2)] \left(1 - \frac{B_{LL}(r)}{B_{LL}(0)} \right) + 2Dm \quad (19)$$

Зависимость для корреляционной функции поля скорости использовалась в виде [1, 2]

$$\frac{B_{LL}(r)}{B_{LL}(0)} = \exp\left(\frac{-r^2}{4\lambda^2}\right) \quad (20)$$

Решение поставленной задачи определяется следующими параметрами: D_0 – значение коэффициента турбулентной диффузии в центре слоя; δ – параметр, определяющий толщину пограничного слоя, в котором коэффициент турбулентной диффузии изменяется от нулевого значения на границах слоя до максимального значения D_0 ; λ – величина внутреннего масштаба турбулентного поля скорости; Dm – величина коэффициента молекулярного переноса скаляра; выражением для скорости химической реакции:

$$W(c) = \begin{cases} Da * (c - cmin) * (cmax - c) & cmin < c < cmax \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (21)$$

и величиной параметра Da , представляющего число Дамкелера.

Величина коэффициента турбулентной диффузии задавалась соотношениями

$$D(z) = D_0 D_1(z) D_1(1 - z) \quad (22)$$

$$D_1(z) = \frac{z^3 / \delta^3}{D_{1m} (1 + z^3 / \delta^3)} \quad (23)$$

где D_{1m} – значение $D_1(z)$ в центре слоя.

Выбор такой зависимости определяется рядом причин. Первая – обращение коэффициента турбулентной диффузии в ноль на границах слоя принципиально, так как только в этом случае удастся разделить действие турбулентного и молекулярного переносов на распределение среднего значения. Только, если на границах $Dm \neq 0$, возникают потоки вещества скаляра с границ и происходит обмен веществом между потоком и границами. В потоке же происходит только перенос и смешение. В результате оказывается, что при $Dm = 0$ отсутствуют поступления от границ свежих порций скаляра и решение для среднего не зависит от граничных условий и может принимать любое постоянное значение. В то же время предел при $Dm \rightarrow 0$ имеется. При этом среднее значение постоянно и равно $(C(0) + C(1))/2$. Эти соображения могут быть формализованы. При $C(0) = 0$ и $C(1) = 1$ решение представимо в виде $C(z) = (Heaviside(z) - Heaviside(z - 1))/2$; источниковый член будет сосредоточен в точках $z = 0$ и $z = 1$ и может быть вычислен формальным дифференцированием $Dm(\delta(z) - \delta(z - 1))^2$. Так как в уравнении для корреляционной функции при $Dm = 0$ остается только вторая производная по z и источниковый член, то формальное интегрирование с учетом того, что точки $z = 0$ и $z = 1$ являются точками сосредоточений особенностей, получаем $R(z, 0) = 0.25$, что соответствует обнаружению в потоке только предельных значений скаляра.

Третья степень в зависимости (23) выбрана в соответствии с условиями, накладываемыми на нормальную к стенке компоненту скорости и масштаб, на твердой стенке. Естественно, что при выполнении условия $D(z) = 0$ на границах, большое влияние на распределение скаляра оказывает пограничный слой, в котором происходит рост коэффициента турбулентной диффузии.

В этом случае уравнение для среднего $C(z)$ будет

$$\frac{\partial}{\partial z} (D(z) + Dm) \frac{\partial}{\partial z} C(z) + \langle W(c) \rangle = 0 \quad (24)$$

3.1 Безразмерные переменные

Во всех расчетах величина D_0 полагалась равной единице, что вместе с равенством единице толщины рассматриваемого слоя эквивалентно некоторому обезразмериванию задачи. При этом используется масштаб длины равный реальной толщине слоя и коэффициент турбулентной диффузии для обезразмеривания коэффициента в (24). Это превращает величину Dm в комбинацию чисел Рейнольдса и Прандтля или Шмидта:

$$Dm = \frac{k}{PrRe} \quad (25)$$

где число Рейнольдса вычисляется по пульсационной компоненте скорости и ширине канала, а величина k зависит от отношения интегрального масштаба турбулентности к ширине канала и от коэффициента k_T в выражении:

$$Dt = k_T u' l \quad (26)$$

Для характерной для дальнейших расчетов величины $Dm = 0.0005$ и числа $Pr = 0.7$, число Рейнольдса оказывается порядка 70000.

3.2 Граничные условия и схема расчета.

Необходимость одновременного расчета системы уравнений с различными наборами независимых переменных приводит к тому, что граничные условия распадаются на группы. Первая для среднего поля и функции распределения:

$$\begin{aligned} z = 0 : \quad C(0) = 0, \quad F(0, c) &\equiv 0 \\ z = 1 : \quad C(0) = 1, \quad F(0, c) &\equiv 1 \end{aligned} \quad (27)$$

Дополнительно для функции распределения:

$$\begin{aligned} c = 0 : \quad F(z, 0) &\equiv 1 \\ c = 1 : \quad F(z, 1) &\equiv 0 \end{aligned} \quad (28)$$

И, наконец, для корреляционной функции:

$$\begin{aligned} z + r/2 = 1 : \quad R(z, r/2) &= 0 \\ z - r/2 = 0 : \quad R(z, r/2) &= 0 \end{aligned} \quad (29)$$

Взаимосвязь между уравнениями такова. Среднее поле определяет граничное условие для корреляционной функции, когда одна из точек попадает на границу области. Корреляционная функция определяет распределение дисперсии и скорость микросмещения (12), из которых дисперсия используется при восстановлении ПРВС, по которой определяется средняя скорость реакции, что позволяет учесть влияние реакции на среднее поле, и параметры, определяющие зависимость корреляционной функции от химических превращений.

Все расчеты производились с двойной точностью. Расчеты среднего поля производились с использованием процедуры DBVPFD из IMSL библиотеки, работающей по методу Ньютона с автоматическим выбором сетки. В зависимости от режима количество узлов менялось от 50 до 2000 в зависимости от значения параметров Da и Dm . Параметры, определяющие окончание сходимость уравнения для среднего, задавались как 10^{-9} . Попытки считать с

меньшей точностью неоднократно приводили к получению физически необъяснимых результатов. В основном рассматривались режимы, в которых число автоматически выбранных узлов было порядка 200. Это значение использовалось для задания числа узлов при расчете корреляционной функции и восстановлении функции распределения.

Расчет корреляционной функции проводился с использованием процедуры DLSLXG библиотеки IMSL, реализующей метод решения линейной системы на основе LU факторизации и симметричной стратегии Марковица. Метод реализован для разреженных матриц. Расчеты проводились на переменной сетке размерностью от 8x8 до 256x256. Несмотря на то, что условия симметрии позволяют проводить расчеты корреляционной функции в треугольной области $0 < z < 0.5$, $0 < r < z$, наш предыдущий опыт вызывал недоверие при использовании условий Неймана, возникающим при $z = 0.5$. Поэтому расчеты корреляционной функции проводились в прямоугольной области $0 < z < 1.0$, $0 < |r| < z$ при $z < 0.5$ и $0 < |r| < 1 - z$ при $0.5 < z < 1.0$ с нулевыми граничными условиями. Расположение этой области под углом 45° накладывало ограничения на использование сеток с переменным шагом. Распределение узлов по обеим координатам должно было позволять проводить границы области непосредственно по узлам сетки. Пример решения уравнения для корреляционной функции, иллюстрирующий особенности рассматриваемой зоны, приведен на рис. 2.

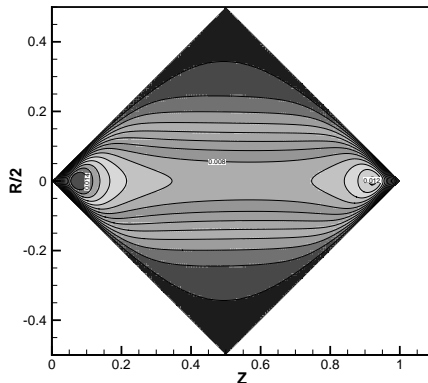


Рис. 2: Расчетная область для уравнения для корреляционной функции. Пример найденного решения.

4 Результаты расчетов.

Предварительные результаты расчетов корреляционной функции и плотности распределения вероятностей приведены в [1, 2]. В первой из этих работ основное внимание уделялось уравнению для корреляционной функции и характеру получаемых решений этого уравнения. Было показано, что возможны решения с разными уровнями дисперсии $\langle c'^2 \rangle$. При значениях близких 0.25 ($0 < c < 1$) должна наблюдаться заметная перемежаемость. В [2] требования точности и сходимости при расчете ПРВ привели к тому, что все полученные результаты относятся к случаям малой дисперсии, что соответствует отсутствию перемежаемости. Повышение надежности расчетов корреляционной функции скаляра можно проиллюстрировать на примере распределения скалярной диссипации вблизи стенки. На рис. 3, где приведено такое распределение, заметен характерный провал, который проявляется при всех достаточно мелких расчетных сетках. Для объяснения этого эффекта необходимо проведение расчетов, в которых учитывается неизотропия диссипации.

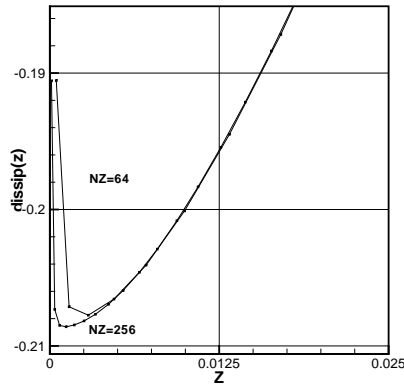


Рис. 3: Распределение скалярной диссипации в пристеночной области (NZ - используемое количество узлов по каждой из координат).

4.1 Изменение скалярной диссипации в результате изменения среднего поля скаляра

Одной из целей расчетов было определение влияния химических процессов на микросмешение, которое в рассматриваемом случае характеризуется распре-

делением скалярной диссипации. Это влияние носит двойственный характер. Во-первых, влияние из-за изменения среднего поля скаляра, которое проявляется через изменение источникового члена в уравнении для корреляционной функции. Во-вторых, непосредственное влияние химических превращений на это уравнение. Анализ последнего эффекта является основной целью данной работы. В данном разделе приведены результаты влияния изменений среднего поля на распределение скалярной диссипации. Для этого слагаемые, содержащие члены с $\langle c'W(c) \rangle$ в уравнении для корреляционной функции, в данных расчетах опущены.

На рис. 4 приведены распределения средних значений скаляра по ширине канала, рассчитанные при различных значениях числа Дамкёлера. Наблюдается

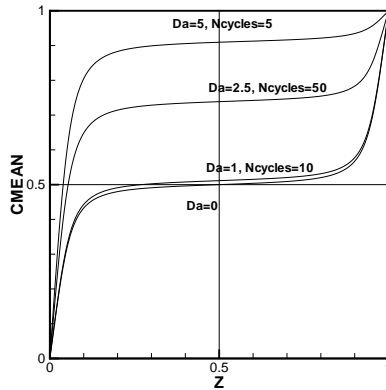


Рис. 4: Среднее поле скаляра при различных интенсивностях химических процессов ($Da = var$).

сильное влияние числа Дамкёлера на распределение среднего поля скаляра. Особенно это влияние существенно вблизи границ канала, где происходит заметное изменение градиентов скаляра. У поверхности $z = 0$ градиент увеличивается, что объясняется тем, что среднее значение скаляра в канале увеличивается. Растет и поток скаляра от этой границы. У границы $z = 1$ градиент скаляра уменьшается по сравнению со случаем отсутствия реакции, что объясняется исчезновением части переносимого компонента в химической реакции. Оказалось, что при числах Дамкелера больших 2.5 процесс итераций не сходится. Возникает релаксационный режим, при котором имеется два состояния (решения), наблюдающиеся по очереди. В результате проведения расчетов по

методу установления удалось установить, что такое поведение решения объясняется неустойчивостью метода поиска стационарного решения.

Расчеты среднего поля по методу установления проводились с использованием процедуры DMOLCH библиотеки IMSL, реализующей метод линий для решения нестационарных задач с использованием сплайн аппроксимаций 3-го порядка. В качестве начального условия выбиралось линейное распределение среднего значения по ширине канала, что соответствует случаю отсутствия турбулентности и химических превращений. Уравнение для корреляционной функции скаляра решалось так же, как при поиске стационарного решения, то есть в квазистационарной постановке. Это соответствует предположению, что дисперсия скалярного поля устанавливается быстрее, чем происходит изменение самого поля. На рис.5 приведен пример расчета установления режима для числа Дамкёлера равного 5. Весь процесс можно разделить на три этапа: начальный участок до характерного времени примерно 0.8, на котором формируется турбулентное поле с заметным уровнем дисперсии, но влияния реакции еще не наблюдается; основной участок до характерного времени $\tilde{t}0$ единиц, на котором происходит собственно формирование зоны реакции; завершающий процесс установившийся режим реагирования, соответствующий всем ранее приведенным примерам, при расчете которых применялся итерационный метод. На приведенном рисунке видно, что максимальная средняя скорость реакции, сначала наблюдается вблизи границы $z = 1$, затем максимум смещается к противоположной границе, несмотря на используемую зависимость для скорости реакции, предполагающую, что максимум скорости реакции лежит при значении скаляра равном 0.75.

При применяемой схеме расчета (восстановление ПРВ) основное влияние решения уравнения для корреляционной функции проявляется через влияние распределения дисперсии $\langle c'^2 \rangle$. На рис.6 приведены соответствующие распределения. Если сравнить наблюдаемые зависимости на этом рисунке и на рис.4, то можно заметить, что большие значения дисперсии наблюдаются в области больших градиентов среднего поля. Особенно заметно уменьшение дисперсии при уменьшении градиентов при больших z и больших значениях числа Дамкелёра. Все это совершенно естественно, так как только распределение средних оказывает влияние на результаты решения уравнения для корреляционной функции через изменение источникового члена в этом уравнении. На рис.7 приведены распределения скалярной диссипации (??) при различных числах Дамкёлера. Эти данные используются при расчете уравнения для ПРВ. Возможность вычисления скалярной диссипации является центральным моментом всей нашей работы по моделированию турбулентных реагирующих потоков.

Для иллюстрации возможностей развиваемого подхода приведены распре-

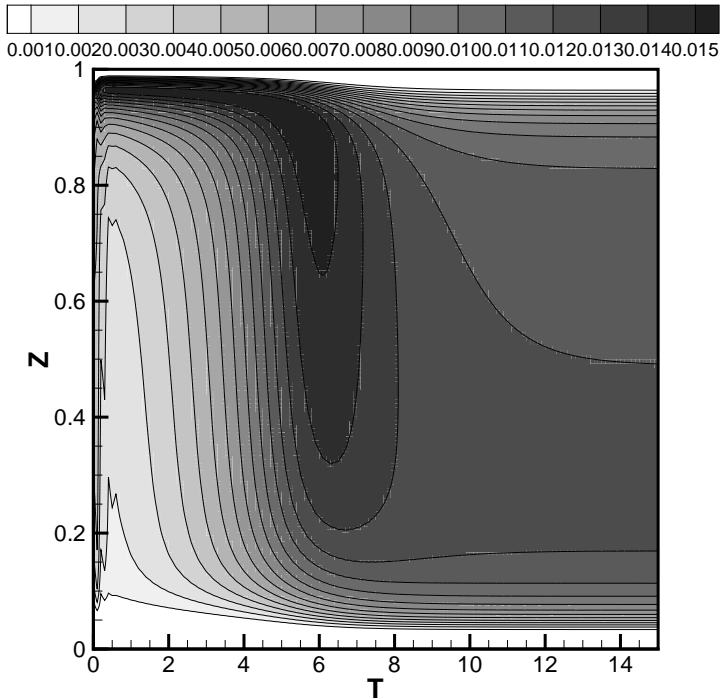


Рис. 5: Формирование по времени зоны реакции при числе Дамкёлера равном 5.

деления средней скорости реакции (рис.8) для чисел Дамкёлера до 2.5. Наблюдается переход от режимов, похожих на режимы, наблюдающихся при отсутствии турбулентности, когда реакция происходит вблизи $z = 1$, к режимам, когда реакция происходит практически по всему каналу. Как отмечалось ранее, максимум средней скорости реакции расположен даже ближе к границе $z = 0$.

Результаты этого параграфа иллюстрируют возможности развиваемого нами подхода. Все свойства турбулентного реагирующего потока могут быть вычислены. Не только распределения средней скорости реакции, но также характерные масштабы распределения скаляра могут быть вычислены по известной из решения корреляционной функции.

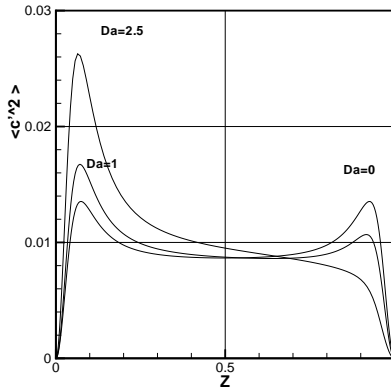


Рис. 6: Распределение интенсивности пульсаций скаляра при различных числах Дамкёлера.

4.2 Изменение скалярной диссипации при учете влияния химических процессов на уравнение для корреляционной функции скаляра

Основной задачей настоящего исследования является выяснение того, насколько сильно химические процессы непосредственно влияют на структуру скалярного поля. В предыдущем параграфе показано, что химическая реакция, приводя к изменению среднего поля, приводит к сильному изменению корреляционной функции и, соответственно, к сильному изменению распределения таких параметров как дисперсия и скалярная диссипация. Но это влияние не прямое, а опосредствованное через изменение среднего поля. Если среднее поле изменяется в результате изменения геометрии течения, появления препятствий и т. п., то все параметры, определяемые через корреляционную функцию, также изменятся.

Для выяснения степени непосредственного влияния химических процессов на структуру скалярного поля были проведены расчеты с использованием уравнения (7). На рис.9 приведены распределения средней скорости реакции, полученные при учете и пренебрежении теми слагаемыми в уравнении для корреляционной функции, которые непосредственно зависят от химических процессов. Вопреки ожиданиям, наблюдаемая разница в результатах чрезвычайно мала. Это связано, в первую очередь, с тем, что рассматриваемые режимы характеризуются зонами больших градиентов средних значений. В этих зонах

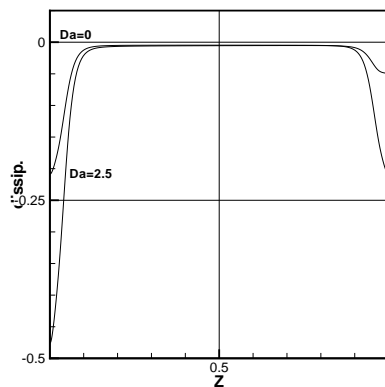


Рис. 7: Распределение скалярной диссипации при различных числах Дамкёлера. .

источниковые члены в уравнении для корреляционной функции очень велики и их влияние на всю область решения маскирует непосредственное влияние химических процессов.

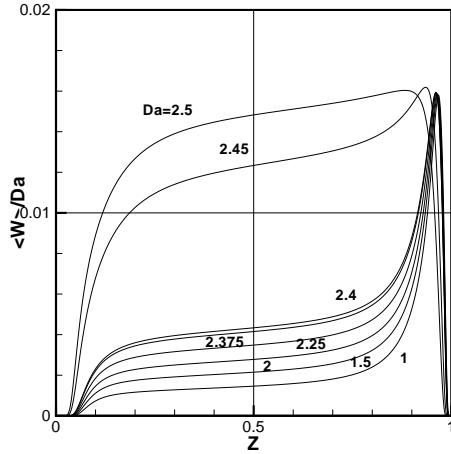


Рис. 8: Распределение относительной средней скорости реакции при различных числах Дамкёлера.

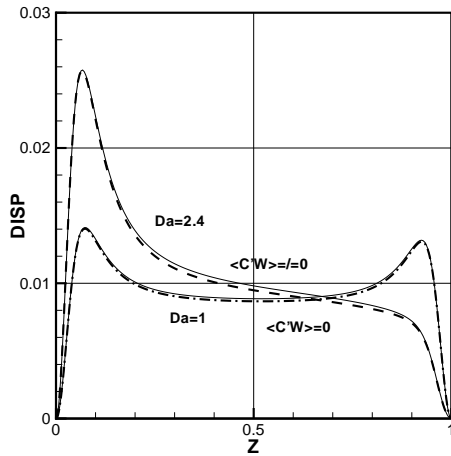


Рис. 9: Распределение интенсивности пульсаций скаляра при различных числах Дамкёлера с учетом и без учета слагаемых с $\langle c'W \rangle$ в уравнении для корреляционной функции.

5 Заключение.

Ранее [1], было показано, что модель микросмешения, основанная на уравнении для корреляционной функции скалярного поля, позволяет описать явления, происходящие при вырождении скалярного поля, и особенности процесса смешения в плоском канале. Для применения разработанного подхода к описанию турбулентных реагирующих потоков уравнение для корреляционной функции дополнено алгоритмом восстановления ПРВС. Это позволило при расчете средних параметров, зависящих от скорости химических превращений, отказаться от моделей микросмешения. Удастся описать влияние интенсивности химических процессов (число Дамкелера) на распределения среднего значения скаляра, дисперсии, скалярной диссипации. Особое внимание уделено уточнению уравнения для корреляционной функции скаляра с целью учета непосредственного влияния химических процессов на это уравнение.

Работа поддержана программой ОЭММПУ №1 "Интегрированные модели физической механики".

Список литературы

1. Красицкий В.П., Фрост В.А. Молекулярный перенос в турбулентных потоках. //Изв. РАН, Механика жидкости и газа. 2007. №2, 46-58.
2. Красицкий В.П., Фрост В.А. Уравнение для корреляционной функции и плотность распределения вероятности скаляра в турбулентных реагирующих потоках. //Препринт ИПМех РАН №833, 2007, С. 20.
3. T. L. Jiang, E. E. O'Brien Schmidt, Damkohler and Reynolds number effects on second-order reactions in isotropic turbulence //Chem. Eng. Commun. 106, 185, 1991.
4. K. Tsai, E. E. O'Brien A hybrid one- and two-point approach for isothermal reacting flows in homogeneous turbulence //Phys. Fluids A5, 11, 1993.
5. Pope S.B PDF methods for turbulent reactive flows //Prog. Energy Combust. Sci.- 1985.- N11.- P.119-192.
6. S.B. Pope. Turbulent flows. Cambridge University Press, 2000.
7. Libby P.A., Williams F.A., editors. Turbulent reacting flows, New York: Academic Press, 1994.
8. Кузнецов В.Р., Сабельников В.А. Турбулентность и горение. - М.: Наука, 1986. 287с.

9. *Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл* Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003, 352 с.
10. *Fox R.O.* Computational models for turbulent reacting flows //Cambridge Univ. Press, 2003, 417 pp.
11. *D. Veynante, L. Vervish* Turbulent Combustion Modeling //Progress in Energy and Combustion Science V.28, 193-266, 2002
12. *Peters N.* Turbulent Combustion, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000, 304 pp.
13. *Асланян Г.С., Майков И.Л.* //Физика горения и взрыва, т.34, N4, 1998.
14. *A.Y. Klimenko, R.W. Bilger* Conditional moment closure for turbulent combustion //Progress in energy and combustion science v.25, p. 595-687, 1999.
15. *F. A. Jaberi, P. J. Colucci* Large eddy simulation of heat and mass transport in turbulent flows. Part 2: Scalar field //International Journal of Heat and Mass Transfer 46 (2003) 1827–1840.
16. *J. Janicka, A. Sadiki* Large eddy simulation of turbulent combustion systems //Proceedings of the Combustion Institute V. 30, Issue 1 , P. 537-547, 2005.
17. *P. Moin.* Advances in large eddy simulation methodology for complex flows //International Journal of Heat and Fluid Flow 23 (2002) 710–720.
18. *Givi P.* Model-free simulations of turbulent reactive flows // Prog. Energy Combust. Sci. 1989, Vol. 15, pp. 1-107.
19. *Frost V.A.* The mathematical model of turbulent combustion. //In Proceedings of the 3th USSR Meeting on theory of combustion/ М., 1960, pp. 122-125.
20. *Mantel T., Borghi R.* A New Model of Premixed Wrinkled Flame Propagation Based on a Scalar Dissipation Equation. //Combust. and Flame. 1994. V.96. №4. P. 443-457.
21. *Skurygin E.F., Vorotintsev M.A., Martem'yanov S.A.* Space-time fluctuation of a passive impurity concentration within the diffusion boundary layer in the turbulent flow of a fluid//J. Electroanal. Chem. 1989. V.259. №1–2. P. 285-293.

22. *Скурыгин Е.Ф.* Спектр автокорреляции пульсаций тока электрода в условиях хаотического турбулентного течения электролита. //Теоретические основы химической технологии. 2001. Т.35. №6. С. 547-581.
23. *Frost V.A., Ivenskikh N.N., Krasitskii V.P.* The problems of stochastic description of turbulent micromixing and combustion on the base of two-point probability distribution functions: Препринт №699. М.: ИПМех РАН, 2002. 26 с.
24. *Ивенских Н.Н., Красицкий В.П., Патрикеев Д.О., Фрост В.А.* Моделирование влияния турбулентности на молекулярный перенос на основе двухточечного описания: Препринт №711. М.: ИПМех РАН, 2002. 28 с.
25. *Sosinovich V.A., Babenko V.A., Zhukova J.V.* The closed equations for the joint PDF of fluctuations of turbulent reacting scalar and its gradient.// Ing.-Phys. J., 71(5), 827-849, 1998.
26. *Eswaran V., O'Brien E.E., Deckert A.* The modeling of the two-point probability density function of a reacting scalar in isotropic turbulence. // Combust. Sci. Technol. 1989. V. 65. №1. P. 1-18.
27. *Frost V.A., Krasitskii V.P., Hierro J.* Description of molecular mixing in turbulent flows based on twopoint PDF equation for passive scalar//Micromixing in turbulent reactive flows.Ed. S.Frolov, V.Frost, D. Roekaerts. Moscow, Russia: TORUS PRESS. 57-63, 2004.
28. *Krasitskii V.P.* Approximate calculation of lagrangian statistic functions of fluid particle pairs in isotropic turbulence//Boundary-Layer Meteorology 54, 231-247.
29. *Фрост В.А.* Ускорение процессов молекулярного переноса в турбулентных потоках. //Доклады АН СССР. 1967. т. 176. №4. стр. 794-796.

Список иллюстраций

1	Расчетная область и независимые переменные.	16
2	Расчетная область для уравнения для корреляционной функции. Пример найденного решения.	20
3	Распределение скалярной диссипации в пристеночной области (NZ - используемое количество узлов по каждой из координат).	21
4	Среднее поле скаляра при различных интенсивностях химических процессов ($Da = var$).	22

5	Формирование по времени зоны реакции при числе Дамкёлера равном 5.	24
6	Распределение интенсивности пульсаций скаляра при различных числах Дамкёлера.	25
7	Распределение скалярной диссипации при различных числах Дамкёлера.	26
8	Распределение относительной средней скорости реакции при различных числах Дамкёлера.	27
9	Распределение интенсивности пульсаций скаляра при различных числах Дамкёлера с учетом и без учета слагаемых с $\langle c'W \rangle$ в уравнении для корреляционной функции.	27

Содержание

1	Введение	3
2	Основные предположения.	8
2.1	Уравнение для среднего поля скаляра.	13
2.2	Об уравнении для плотности распределения вероятности скаляра.	13
3	Постановка задачи.	15
3.1	Безразмерные переменные	18
3.2	Граничные условия и схема расчета.	19
4	Результаты расчетов.	21
4.1	Изменение скалярной диссипации в результате изменения среднего поля скаляра	21
4.2	Изменение скалярной диссипации при учете влияния химических процессов на уравнение для корреляционной функции скаляра	25
5	Заключение.	28

Валерий Александрович Бабенко¹, Владимир Андреевич Фрост²
¹Институт тепло- и массообмена им. А.В.Лыкова НАН Белоруссии
²Институт проблем механики, РАН

Зависимость скалярной диссипации
от химических превращений в турбулентных потоках

Подписано к печати 31.10.2007. Заказ № 22-2007. Тираж 30 экз.

Отпечатано на ризографе Института проблем механики РАН
119526, Москва, пр-т Вернадского, 101, к. 1.

Бесплатно