

УДК 551.511.61; 536.461

РАСЧЕТ ПРОЦЕССА СМЕШЕНИЯ В ТУРБУЛЕНТНОЙ РЕАГИРУЮЩЕЙ СРЕДЕ

Фрост В.А.

*Институт проблем механики РАН им. А.Ю. Ишлинского,
Москва, 119526, пр. Вернадского, 101-1*

frost@ipmnet.ru

Аннотация

Рассматривается процесс перемешивания в условиях однородной заданной своей корреляционной функцией турбулентности. Начальное состояние смеси задается совместным распределением плотности вероятности для двух компонентов и корреляционной функцией одного из компонентов. Распределение вероятностей для третьего компонента определяется из балансного соотношения. Особенностью подхода является разделение влияния турбулентного поля скорости и молекулярного переноса на процесс перемешивания. Уравнение для корреляционной функции скалярного поля, замкнутое соотношением между третьими и вторыми двухточечными моментами, используется для расчета скорости смешения в условиях турбулентного перемешивания реагирующей примеси. Совместная плотность распределения вероятности концентрации двух компонентов пассивной примеси, позволяющая вычислить среднюю скорость химической реакции, рассчитывается с использованием полностью сбалансированного приближенного метода. Расчет позволяет определить влияние интенсивности турбулентности, внутреннего и интегрального масштабов турбулентного поля скорости и поля скаляра и реакции на время смешения. Обнаружены режимы, когда влияние молекулярного коэффициента диффузии проявляется только в начальный период процесса смешения, на котором устанавливается равновесие между молекулярным переносом и действием турбулентности.

CALCULATION OF THE MIXING PROCESS IN TURBULENT REACTING MEDIA

Frost V.A.

*Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences,
Russia, Moscow, 119526*

The process of mixing in a isotropic turbulence given by its correlation function is considered. The initial state of the mixture is given by the joint probability density for the two components and the correlation function of one of the components. The probability distribution for the third component is determined from a balanced ratio. Feature of the approach is the separation of the effect of the turbulent velocity field and molecular transport on the mixing process.

The equation for the correlation function of the scalar field closed relationship between the third and second two-points moments, is used to calculate the rate of mixing of a turbulent reactive mixture. The joint probability density function of the concentration of the two components, required for computing the average rate of a chemical reaction, is calculated using a fully balanced approximate method.

The calculation allows to obtain the effect of the turbulent intensity, micro and integral scales of turbulent velocity and scalar field, and the reaction on the time of mixing. It is found conditions when the effect of the molecular diffusivity occurs only in the initial stage of the mixing process, in which an equilibrium is established between the molecular transport and action of turbulence.

1. Введение

Моделирование химических процессов в турбулентных потоках, расчет которых при реальных значениях числа Рейнольдса с использованием прямого численного решения (DNS) невозможно или чрезвычайно затруднительно, позволяет более четко представить основные детали явления и выявить узловые моменты, требующие детального рассмотрения. Основной составляющей процессов взаимодействия химических процессов и турбулентности является турбулентное перемешивание компонентов реакции, приводящее к изменению скорости доставки компонент в зону реакции. Наиболее ярко влияние турбулентного перемешивания проявляется в различных режимах горения. Предлагаемая схема математического описания процесса перемешивания рассматривается на примере простейшего режима горения – диффузионного горения в однородных условиях. При анализе экспериментальных данных различных турбулентных развитых течений, как правило, можно пренебречь влиянием конкретных значений коэффициентов молекулярного переноса (коэффициентами диффузии, теплопроводности и вязкости), сводя все к зависимостям от чисел Рейнольдса, Прандтля или Шмидта. Однако при рассмотрении процессов, связанных с протеканием химических реакции, это надо делать осмотрительно. Так при турбулентном горении заранее подготовленной смеси скорость горения принято выражать с использованием скорости горения при отсутствии турбулентности (нормальной скорости горения) [1], величина которой определяется с использованием молекулярных коэффициентов переноса.

Рассматриваемый подход базируется на двух положениях. Первое – для вычисления средней скорости химических превращений при наличии турбулентности, проявляющейся как случайные пульсации концентраций компонентов реакции, необходимо располагать статистическими сведениями о совместном распределении вероятностей компонентов. Использование для расчета турбулентных реагирующих потоков статистических характеристик среды, таких как совместные плотности распределения компонентов (ПРВ), участвующих в химических превращениях и определяющих скорость химических превращений, позволяет использовать для скоростей химических превращений достаточно сложные закономерности. Однако уравнение для ПРВ привносит в способ описания дополнительные независимые переменные (концентрации компонентов) и при выводе его из уравнений гидродинамики – является незамкнутым. Методы замыкания предлагались различными авторами (см., например [2–4]), но скорость смешения до молекулярного состояния, для этого процесса используется термин – "микросмешение (micromixing)", остается неопределенной и должна определяться параметрами турбулентности. Схема расчета ПРВ в силу большого числа независимых переменных достаточно сложна и анализу поддаются только сильно упрощенные схемы процесса.

Второе положение связано с необходимостью подробного анализа влияния молекулярного переноса. Для этого используется уравнение для корреляционной функции одного из компонентов смеси (КФС), для которого используется термин - скаляр. Исходным является уравнение Корсина [5], дополненное слагаемым, учитывающим химическую реакцию. Для замыкания уравнения для КФС используется связь градиентного типа между моментами второго и третьего порядка. Из многих проанализированных способов замыкания [6] используется метод, в котором удается описать совместное влияние молекулярного коэффициента переноса и турбулентности. В результате появляется возможность учитывать влияние микросмешения и химических реакций непосредственно на структуру поля скаляра. Расчет КФС определяет не только изменение структуры скалярного поля, но, в первую очередь, скорость уменьшения интенсивности пульсаций скалярного поля, которую можно назвать скоростью скалярной диссипации, и которая является недостающим параметром в уравнении для ПРВ.

Данная работа является продолжением исследований середины 90-х годов прошлого столетия, в которых были рассмотрены особенности и разработаны методы расчета двукон-

центрационной ПРВ применительно к фронту пламени, в котором отсутствует подобие распределения температуры и прогресс-переменной [7 -10]. Основное внимание в этих работах обращалось на расчет многокомпонентных ПРВ для разных скоростях смешения компонентов и форм кинетических уравнений, в то время как скорость процесса оказывалась неопределенной, так как использовалась простейшая форма замыкания уравнения для КФС. В настоящей работе расчет ПРВ совмещается с расчетом уравнения для КФС.

Используемая модель замыкания для уравнения для КФС, разработанная в 2004-2007 гг., по форме практически полностью совпадает с моделью замыкания для уравнения для корреляционной функции поля скорости [11]. Теперь, следуя [12], включив в выражение для вихревой вязкости зависимость от коэффициентов молекулярного переноса [6], мы получили возможность определения реальной скорости процесса и учета влияния на него химических процессов.

Аналогичный подход развивался Е.О'Брайеном с соавторами (см., например, [13,14]). 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 [14, 15] была использована EDQNM методика замыкания уравнений для двухточечной ПРВ (ПРВ2) и КФС, 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 неудобное для описания реагирующих потоков. Это позволило в работах Е.О'Брайена, посвященных двухточечному ПРВ и КФС, получить результаты для однородных нестационарных случаев, когда зависимость коэффициентов от времени может иметь место. Интересно что, в [13] 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.

Ранее мы в [16, 17] пытались применить теорию движения пары частиц для анализа микросмешения, но также столкнулись с зависимостью рассчитываемых величин от времени движения пары частиц. Мы не рассматривали броуновское движение, поэтому наш подход приводил к сильному завышению скорости перемешивания.

В исследованиях, проводимых по гранту ИНТАС # 00-353, изучалась возможность использования двухточечных распределений вероятности скаляра (ПРВ2) для уточнения моделей микросмешения. Было известно [18], что знание ПРВ2 позволяет определять микросмешение без дополнительных гипотез, но уравнение для ПРВ2 незамкнуто. При попытках найти другой способ замыкания уравнения для ПРВ2 были обнаружены связи между уравнениями для ПРВ2 и для КФС [19, 20]. Оказалось, что, для замыкания уравнения для ПРВ2 достаточно замкнуть уравнение для КФС. Была предложена некоторая процедура замыкания, в которой используемая в [14] зависимость коэффициента вихревой диффузии от времени была проигнорирована. Расчеты показали, что использование полученного уравнения для КФС позволяет получить хорошее совпадение расчетов с результатами DNS [21]. В дальнейшем оказалось [10], что полученную форму уравнения можно объяснить физическими соображениями, на базе которых можно уточнить метод замыкания уравнения для КФС. Удалось также доказать статистическую непротиворечивость предложенного замыкания.

2. Постановка задачи

Рассматривается однородная среда, в которой в начальный момент находятся объемы с различными концентрациями горючего – c_1 , окислителя – c_2 и продуктов реакции – c_3 . Предполагается, что плотность среды не изменяется и среднее движение отсутствует, наблюдаются только турбулентные возмущения. Состояние среды описывается двухкомпонентным распределением плотности вероятности (ПРВ) и корреляционной функцией скалярного поля (КФ). Уравнение возможной реакции

$$c_1 + \nu c_2 = (1 + \nu) c_3 \quad (1)$$

Здесь ν – стехиометрический коэффициент. В дальнейшем обозначения c_2 и c_3 рассматриваются как приведенные концентрации $c_2 = \nu c_2$ и $c_3 = (1 + \nu) c_3$, для которых выполняется балансное соотношение:

$$c_1 + c_2 + c_3 = 1 \quad (2)$$

В этих переменных диапазон изменения каждой из них $0 \leq c \leq 1$. Процесс смешения рассматривается на плоскости (c_1, c_2) в треугольнике ($c_1 \geq 0, c_2 \geq 0, c_1 + c_2 \leq 1$). Предполагается, что в начальный момент все компоненты разделены (черно-белый случай). В этом случае ПРВ $P(c_1, c_2, t)$ задаются в трех точках $P(1, 0, 0)$ – вероятность для горючего, $P(0, 1, 0)$ – для окислителя и из балансного соотношения для вероятностей: $P(0, 0, 0) = 1 - [P(1, 0, 0) + P(0, 1, 0)]$ – для продуктов реакции. С течением времени под действием молекулярно-диффузионного обмена компонентами, который зависит от характеристик турбулентности, и в результате реагирования происходит изменение ПРВ.

2.1. Физическая картина рассматриваемого явления

В начальный момент наблюдаются только исходные компоненты. На рис. 1а, на котором изображено сечение некоторой части исходного объема, этому соответствуют области, закрашенные чистыми цветами (RGB). Границы между каждой парой компонент соответствует поверхности раздела в рассматриваемом объеме. Поверхность может быть достаточно искривленной, что характеризуется микромасштабом скалярного поля. Точка пересечения границ на рисунке соответствует линии в рассматриваемом объеме, на которой контактируют все три компонента.

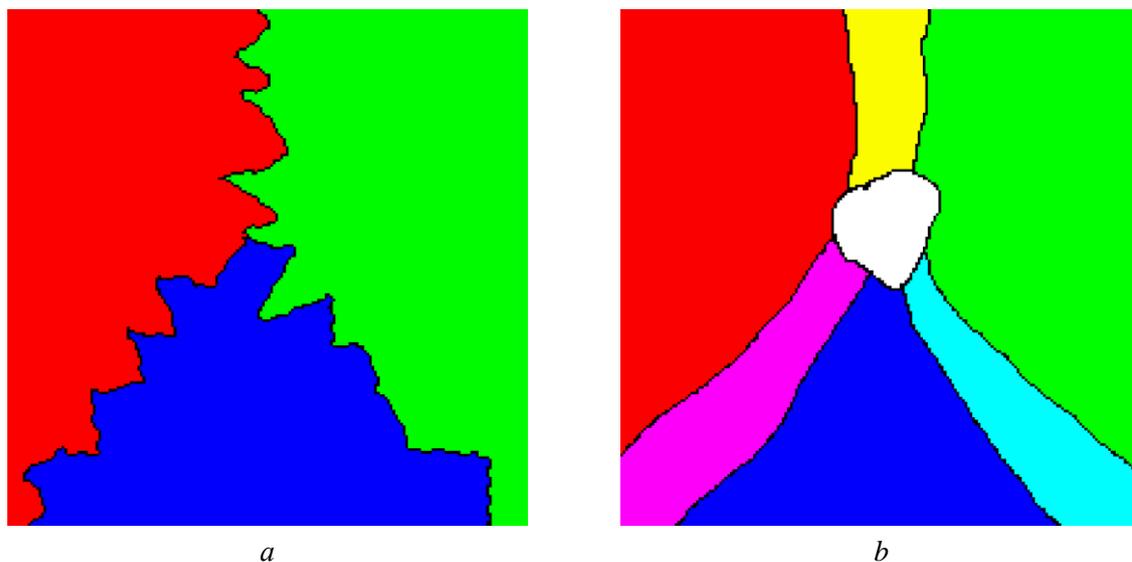


Рис. 1. Пространственное распределение компонент: (а) – исходное состояние, (б) – состояние после начала перемешивания

После начала перемешивания (рис. 1*b*) под действием молекулярной диффузии на поверхностях раздела компонент возникают слои, в которых одновременно наблюдаются оба компонента (смешанные цвета), концентрации которых зависят от положения в слое, а на линии, раздела трех компонент, образуются соответственно составы, содержащие все три компонента (белый цвет). Поверхности и линии, разделяющие компоненты, могут стать более гладкими.

2.2. Расчет плотности распределения вероятности

Расчет изменения ПРВ во времени строится на основе разработанного ранее метода для однокомпонентной ПРВ $P(c, t)$ [3, 7]. Используется уравнение

$$\frac{\partial P(c, t)}{\partial t} = \beta M[P] + \frac{\partial W(c)P(c, t)}{\partial c} \quad (3)$$

Здесь $M[P]$ – функционал, соответствующей выбранной модели микросмешения; $\beta = \beta(t)$ – а priori неизвестный коэффициент, определяющий интенсивность процесса микросмешения; $W(c)$ – выражение для скорости изменения концентрации скаляра в результате химической реакции. В литературе описано достаточно много различных моделей микросмешения для уравнений для плотности вероятности, начиная с [2] и вплоть до самого последнего времени [22, 23]. Личные пристрастия и многолетний опыт заставляют выбрать модель, предложенную в [3]. При построении этой модели предполагалось, что в процессе турбулентных перемещений элемент среды, в котором концентрация примеси равна c , оказывается в условиях некоторого слоя смешения. При этом в соседних точках среды концентрации примеси должны быть соответственно больше и меньше величины c . Вероятность такого события равна произведению вероятностей того, что концентрации примеси должны быть в пределах от величины c до соответствующих предельных значений. Эта вероятность определяет рост плотности вероятности как результат расширения слоя смешения. Кроме того, рассматриваемый элемент среды участвует в качестве соседнего элемента в аналогичных контактах, вследствие чего плотность распределения вероятности уменьшается. В результате

$$M[P] = \int_{-\infty}^c P dc' \int_c^{\infty} P dc' - \frac{P}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |c - c'| P dc' \quad (4)$$

Несмотря на сложность выражения (4), эта модель обладает некоторыми преимуществами, например, ограниченность высших моментов при больших временах. Привлекательным также является отсутствие производных по c , что не только не увеличивает сложность системы уравнений, которую необходимо решать при использовании конечно-разностной схемы, но и позволяет без дополнительных предположений описывать существование перемежаемости – явления, связанного с ограничением диапазона изменения величины c и наличия сингулярных распределений. Пожалуй наиболее интересно существование аналитического решения задачи Коши для системы (3)–(4) при отсутствии реакции. Это решение получено В.Р.Кузнецовым и опубликовано в [24]. При черно-белом начальном распределении решение для функции распределения $F(c, t) = \int_c^{\infty} P(c', t) dc'$:

$$F(c, t) = \frac{\langle c \rangle^2 c - \langle c \rangle - c^2 e^{1/2t(-c+\langle c \rangle)} \langle c \rangle}{-c + \langle c \rangle} - \frac{(\langle c \rangle^2 - \langle c \rangle c) (-ce^{1/2t(-c+\langle c \rangle)} \langle c \rangle + \langle c \rangle c - 1)}{(-c + \langle c \rangle)^2} \quad (5)$$

Это выражение используется для проверки правильности методов расчета. Использование аналитического решения для вычисления правой части (3) при наличии химических превращений возможно при использовании разложения аналитического решения (5) в ряд

по времени. Первый член этого разложения совпадает с правой частью обычно используемого уравнения. Использование следующих членов разложения позволяет повысить порядок точности схемы расчета.

Переход к расчету двуконцентрационного ПРВ упрощается, если предположить, что смешение всех компонент происходит одновременно и с одинаковыми скоростями. Модель смешения для двухкомпонентной ПРВ приводит к выражению аналогичному (4), в котором интегралы становятся двумерными, вычисление которых необходимо производить для каждого узла используемой сетки, что весьма трудоемко. Предлагается использовать опыт расчета одноконцентрационных ПРВ, когда расчет проводится на прямой c , соединяющей предельные значения $c=0$ и $c=1$. Для этого, вместо организации регулярной сетки, двумерная область заполняется точками, образованными пересечением специальным образом проведенных прямых. Вычисление производится по каждой из линий и выполняется суммирование по всем таким линиям. Линии, на которых рассчитывается изменение ПРВ, проводятся через граничные точки треугольника ($c_1 \geq 0, c_2 \geq 0, c_1 + c_2 \leq 1$), а узлы образуются как пересечение этих линий с линиями Шваба – Зельдовича $c_1 - c_2 = var$, вдоль которых происходит изменение значений при реакции и являющимися характеристическими линиями для химико-кинетического уравнения. Точность расчета определяется количеством линий N , проходящих через катеты треугольника. Для расчета используется подход, предложенный А.Б.Рабиновичем [7], заключающийся в замене конечно-разностной аппроксимации непрерывных распределений ПРВ набором приращений функции распределения вероятностей $\delta F_i = P(c_i)dc_i, i=1, \dots, n$, где c_i и dc_i узел и размер ячейки расчетной сетки, n – количество точек на линии. Переход от поиска непрерывного распределения к поиску дискретного набора приводит к полностью сбалансированному алгоритму, в котором все законы сохранения выполняются независимо от количества расчетных точек. В этом алгоритме интегралы выражения (4) заменяются суммами и, разбивая последнее слагаемое на два интеграла, имеем:

$$\frac{d\delta F(k)}{dt} = \left\{ F_1(k) * F_2(k) - \frac{\delta F(k)}{2} * [F_3(k) + F_4(k)] \right\} / N, \quad (6)$$

где
$$F_1(k) = \sum_{i=0}^k \delta F_i; \quad F_3(k) = \sum_{i=0}^k F_1(i);$$

$$F_2(k) = \sum_{i=0}^N \delta F_i - \delta F(k-1); \quad F_4(k) = \sum_{i=0}^N (i+1)\delta F_i - F_2(k-1) \quad (7)$$

На рис. 2 приведен пример сетки для $N=2$. Расчеты проводились для $N \leq 12$. При $N=12$ количество расчетных точек в треугольнике оказывалось ~ 1600 , что соответствует равномерной сетке размерностью 55×55 . Точность алгоритма такова, что результаты расчетов дисперсий поля скаляра, выполненные с $N=4$ и $N=6$, совпадают до 4-го знака.

2.3. Определение скорости смешения. Уравнение для корреляционной функции скаляра

Необходимая для расчета ПРВ зависимость скорости смешения – параметра β от характеристик среды, параметров турбулентности и структуры скалярного поля определяется при решении уравнения для корреляционной функции скаляра $R(\zeta, t) = \langle c(x, t)c(x + \zeta, t) \rangle$ (уравнение Корсина):

$$\frac{\partial}{\partial t} R(\zeta, t) + 2 \operatorname{div}_{\zeta} \left(\langle (\mathbf{u}'_1 - \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle - d \frac{\partial}{\partial \zeta} R(\zeta, t) \right) = IW \quad (8)$$

Здесь x_1 и x_2 – точки пространства; t – время; c' – отклонение значения скаляра от соответствующего среднего; u' – пульсации скорости, индексы обозначают точки пространства, используемые для вычисления корреляции; ζ – расстояние между этими точками; d – коэффициент молекулярной диффузии; IW – член уравнения, ответственный за влияние химического превращения на КФ.

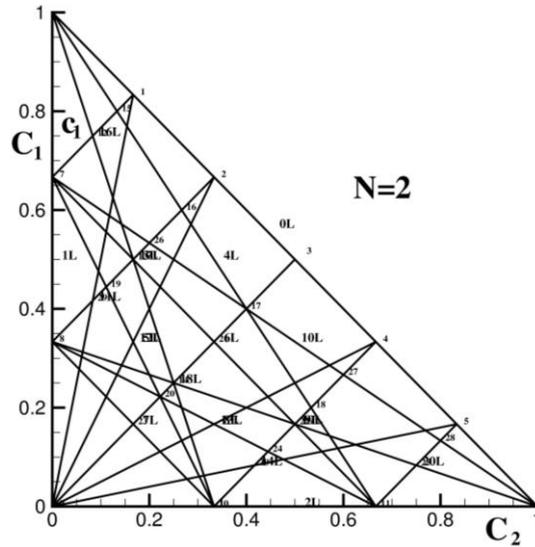


Рис. 2. Расчетная сетка. N – порядок аппроксимации. Мелкие арабские цифры – номера точек; цифры, соединенные с литерой L – номера линий. Линии 16–20 – линии Шваба – Зельдовича

Это уравнение содержит третий двухточечный момент $\langle (u'_1 - u'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle$, который не выражается через искомую функцию, – уравнение не замкнуто. Аналогичная ситуация наблюдается для уравнения для корреляционной функции поля скорости – уравнения Кармана–Ховарта, для которого предложения по замыканию весьма многочисленны. Первая наша форма замыкания уравнения Корсина была предложена [9] после анализа работы [14] и не содержала явной зависимости от молекулярного коэффициента диффузии. Только после сравнения различных подходов к замыканию уравнения Кармана–Ховарта [6] удалось включить в модель зависимости от молекулярных коэффициентов переноса. В результате

$$\frac{\partial}{\partial t} R(\zeta, t) = \frac{2}{\zeta^2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\zeta^2 \left(\frac{u'^2 (1 - f(\zeta))}{\alpha + 2\beta} + d \right) \frac{\partial}{\partial \zeta} R(r, \zeta, t) \right) + IW \tag{9}$$

Здесь $f(\zeta)$ – нормированная продольная корреляционная функция поля скорости; $\alpha = 5\nu \frac{\partial^2 f(\zeta)}{\partial \zeta^2} \Big|_{\zeta=0} + C_u \frac{u'}{L}$ – обратное характерное время для флуктуации скорости,

$\beta = \frac{3d}{R(0)} \frac{\partial^2 R(\zeta)}{\partial \zeta^2} \Big|_{\zeta=0}$ – аналогично для скаляра; ν – коэффициент кинематической вязкости;

$C_u = .5$ – коэффициент, подобранный для устранения тренда по числу Рейнольдса при анализе различных методов замыкания уравнения Кармана–Ховарта [6]. Приведенные выражения для обратных характерных времен это коэффициенты в диссипативных членах уравнений для интенсивностей пульсаций скорости и скаляра соответственно. Коэффициенты 3 и 5 соответствуют увеличенным на единицу порядкам размерности лапласианов, входящих в эти уравнения. Дополнительное слагаемое для обратного времени для скорости

определяется процессом невязкого торможения моля, образующего флюктуацию и может быть связано с долей оборота, на которую может повернуться моль размера L и окружной скоростью u' до потери корреляции с моментом начала поворота. Это соображение используется у многих авторов, см., например, [12]. Для определения скорости перемешивания возможно также использовать модель [12], если распространить его метод на уравнение Корсина, что приведет к зависимости характерного времени от масштаба, и определить соответствующий согласующий коэффициент. В случае отказа от использования конкретных значений коэффициента молекулярного переноса при определении характерных времен возможно использовать хорошо проверенную модель Лыткина [25], распространенную на скалярное поле [26]. Наш выбор метода замыкания объясняется тем, что удалось включить молекулярные коэффициенты переноса как в описание процесса диффузии, так и в характерные времена процесса перестройки скалярного поля. Для учета непосредственного влияния химических процессов на процесс перемешивания необходимо уточнение уравнения для КФС. Для чего необходимо определить выражение $\langle c_2'W(c_1) \rangle$ – двухточечный момент, возникающий при перекрестном умножении и усреднении, используемом при получении уравнения для корреляционной функции скаляра.

2.3.1. Уравнение для двухточечного момента $\langle c_2'W(c_1) \rangle$

Искомый момент определяется по аналогии с двухточечным моментом, описывающим перенос примеси: $\langle c_1'u_2' \rangle$. Для получения момента $\langle c_1'u_2' \rangle$ используется уравнения для флюктуаций u' и c' :

$$\frac{\partial u_i'}{\partial t} = -\alpha u_i', \quad (10)$$

$$\frac{\partial c'}{\partial t} = -\beta c' - u_j' \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} - u_j \frac{\partial c'}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + W(c) \quad (11)$$

Здесь для диссипативных членов используется простейшее ланжевеновское представление. Выполняя перекрестное умножение уравнений (10) и (11), сложение и усреднение, получим

$$\frac{\partial \langle c_2 v_1 \rangle}{\partial t} = -(\alpha + \beta) \langle c_2 v_1 \rangle - \langle u_{1,i}' u_{2,j}' \rangle \frac{\partial \langle c_2 \rangle}{\partial x_{2,j}} - \left\langle u_i u_j \frac{\partial c_2'}{\partial x_{2,j}} \right\rangle \quad (12)$$

Пренебрегая третьими моментами и предполагая равновесие между порождением и диссипацией, получим (рассматриваемый момент является вектором)

$$\langle c_2 v_1 \rangle = -\frac{R(\zeta) \text{grad} \langle c_2 \rangle}{\alpha + \beta} \quad (13)$$

Это соотношение для однородного турбулентного поля скорости ($\alpha = \text{invar}$) может быть записано в форме

$$\langle c_2 v_1 \rangle = \bar{R}(\zeta) q_2 \quad (14)$$

Здесь символ надчеркивания обозначает нормировку, $q_2 = D_T \text{grad} \langle c_2 \rangle$ – поток в точке 2 и $D_T = \langle u'^2 \rangle / (\alpha + \beta)$ – коэффициент турбулентной диффузии. Полученное соотношение позволяет пересчитывать односточечные моменты в двухточечные, учитывая уменьшение момента с увеличением расстояния между точками. Применяя эти соображения к искомому моменту, содержащему скорость реакции, получим

$$IW = \langle c_2'W(c_1) \rangle + \langle c_1'W(c_2) \rangle = \bar{R}(\zeta) \left[\langle c_1'W(c_1) \rangle + \langle c_2'W(c_2) \rangle \right] \quad (15)$$

Полученное соотношение (15) является точным для линейных зависимостей скорости реакции и для точек $r=0$ и $r=\infty$. В однородном случае слагаемые в правой части совпадают и получается пропорциональное изменение КФ, что существенно упрощает вычисления. В неоднородном случае такой пропорциональности нет, изменение КФ в этом случае не является локальным. Для расчета уравнения для КФС применялся метод прогонки с использованием консервативной конечно-разностной схемы на неоднородной пространственной сетке. Шаг сетки монотонно увеличивался, начиная от точки $\zeta=0$, что позволило при 64 расчетных точках получить при малых ζ точность расчета, эквивалентную использованию 1024 точек на равномерной сетке.

2.4. Схема проведения расчета

Используется разделение вычислений по процессам. На первом шаге производится расчет уравнения для корреляционной функции скаляра без учета химических превращений, что определяет интенсивность пульсаций концентрации. На следующем этапе решается уравнение для ПРВ с единичным значением параметра β , что определяет распределение скорости изменения ПРВ по величине скаляра. Интегрирование этой скорости по концентрации позволяет подобрать значение β , приводящее к определенному из решения уравнения для КФ значению интенсивности пульсаций. При отсутствии реакций вычисления на данном шаге по времени оказываются завершенными. При наличии химических превращений выполняется перестройка ПРВ, заключающаяся в движении распределения по линиям Шваба – Зельдовича. Так при бесконечно большой скорости реакции, все значения, расположенные по линиям Шваба – Зельдовича суммируются на левых концах этих линий. При этом происходит изменение интенсивности пульсаций скаляра, что учитывается изменением величины корреляционной функции.

3. Основные закономерности процесса турбулентного перемешивания

В данном разделе основное внимание уделяется возможностям, открывающимся в связи с учетом влияния молекулярных коэффициентов и химических превращений на скорость перемешивания. Основные особенности процесса перемешивания для различных моделей микросмешения и некоторых схем химических процессах были рассмотрены в работах [7–9]. Так как интенсивность микросмешения $\beta(t)$ являлась внешним фактором, результаты, относящиеся к развитию процесса смешения и реакции по времени приведенные в этих работах, нужно рассматривать как развитие по безразмерному времени τ , определяемому соотношением $d\tau = \beta(t)dt$. В первом разделе, чтобы получить представление о деталях процесса перемешивания, результаты приводятся в размерных переменных. Диапазоны изменения: интенсивности турбулентности $0.1 \div 1$ м/с; коэффициента молекулярной диффузии $10^{-6} \div 2 \cdot 10^{-5}$ м²/с, границы диапазона примерно соответствует воздуху и воде; внутренний масштаб от .1 мм; интегральный масштаб: .1 м. Приведенные значения соответствуют диапазону чисел Рейнольдса $2 \times 10^4 \div 2 \times 10^6$. Нормализованная корреляционная функция поля скорости $f(\zeta)$ и начальная корреляционная функция скаляра $R(\zeta, 0)$ задавались в виде суммы двух распределений Гаусса, дисперсии которых задавались величинами микро и интегральных масштабов соответствующих полей. Вклад каждой из компонент варьировался. Начальное распределение вероятностей соответствовало черному-белому случаю, то есть отсутствию смеси компонентов.

На рис. 3 приведены поля ПРВ в различные моменты времени. Начальное распределение задается отличным от нуля только в точках $\delta F(1, 0, 0) = .3$, $\delta F(0, 1, 0) = .3$ и $\delta F(1, 1, 0) = .4$. Первый фрагмент рисунка – распределение сосредоточено в вершинах треугольника, следующее изображение – в основном наблюдаются двойные смеси. Распределение сосредоточено по сторонам треугольника. В дальнейшем возникают и тройные смеси,

начная с пятого изображения двойные смеси исчезают. На завершающем этапе распределение сосредотачивается вблизи точки $(c_1 = \langle c_1 \rangle, c_2 = \langle c_2 \rangle)$.

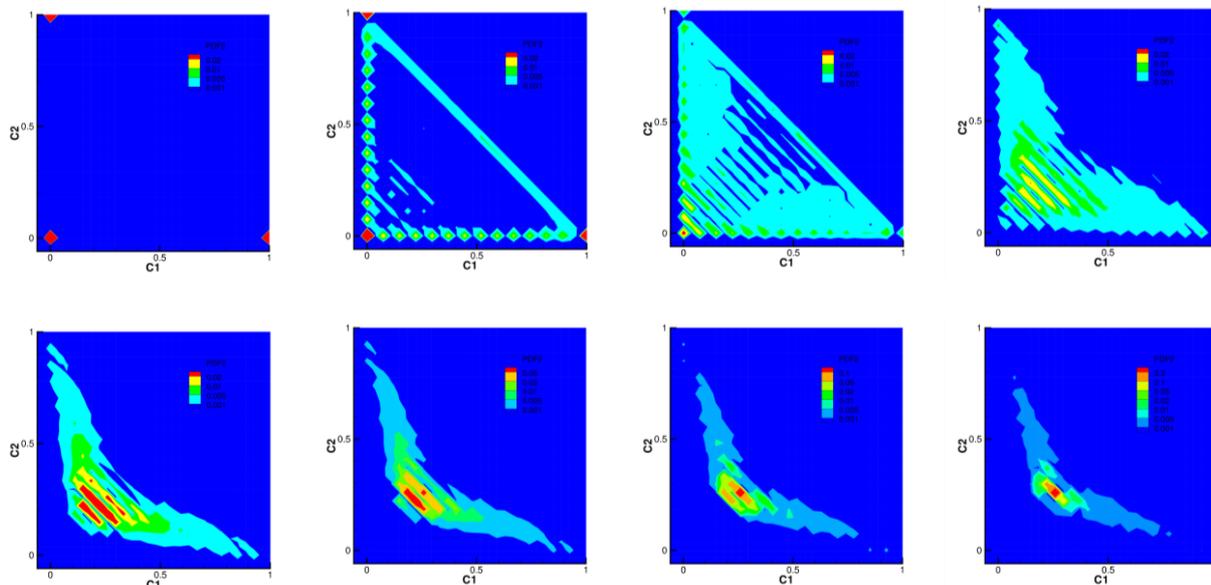


Рис. 3. Поля $\delta F(c_1, c_2)$ в различные моменты времени. Начальное распределение сверху слева, конечное внизу справа

3.1 Влияние параметров турбулентности на процесс перемешивания

На рис. 4 приведены результаты для режимов отличающихся интенсивностью турбулентности. На этом примере удобно рассмотреть особенности используемого описания. В этом и следующих примерах начальное распределение вероятностей отлично от нуля только в двух точках: $\delta F(1,0,0) = .5$ и $\delta F(0,1,0) = .5$. Этому распределению соответствует начальная интенсивность пульсаций $\langle c'^2 \rangle = .25$. Естественно, что увеличение интенсивности (черные линии) приводит к ускорению вырождения.

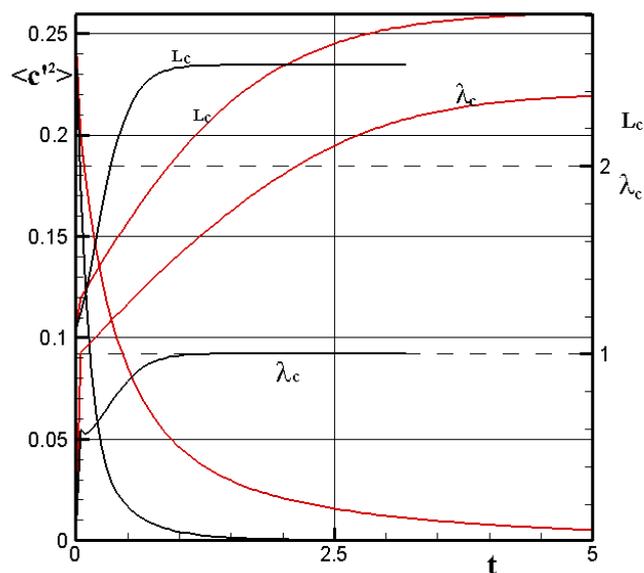


Рис. 4. Влияние интенсивности турбулентности на процесс смешения. Красные линии – вдвое уменьшенная интенсивность турбулентности

Изменение внутреннего масштаба скаляра слабое, за исключением начального участка, на котором происходит быстрое изменение. Значительное увеличение интегрального масштаба может объясняться влиянием коэффициента турбулентной диффузии (см. (3.1)) или влиянием используемой модели для вихревой вязкости. Ранее [6] при сравнении различных моделей для уравнения Кармана–Ховарта было отмечено, что модель [11], аналогичная используемой для уравнения Корсина, при больших значениях ζ приводит к отклонениям от экспериментальных данных.

На рис. 5 приведено сравнение затухания пульсаций и изменение микромасштаба скаляра при изменении внутреннего масштаба турбулентного поля скорости в два раза (черные линии относятся к увеличенному значению). Уменьшение внутреннего масштаба турбулентности приводит к более быстрому затуханию и к уменьшению внутреннего масштаба скаляра на основном участке процесса. Сравнение отношения внутренних масштабов скалярного поля (при $t=2.5$ $\lambda_c=1.23$ и 1.43 и при $t=5$ $\lambda_c=1.64$ и 1.83 , соответственно) указывает на то, что отношение этих величин изменяется с течением времени, тогда как соответствующее отношение для поля скорости остается неизменным. В начале процесса перемешивания происходит существенная перестройка скалярного поля, которая проявляется как очень быстрое изменение интенсивности пульсаций. В рассматриваемом случае происходит уменьшение до значения $\langle c'^2 \rangle = .225$. Изменение параметров на начальном участке не зависит от микромасштаба турбулентного поля.

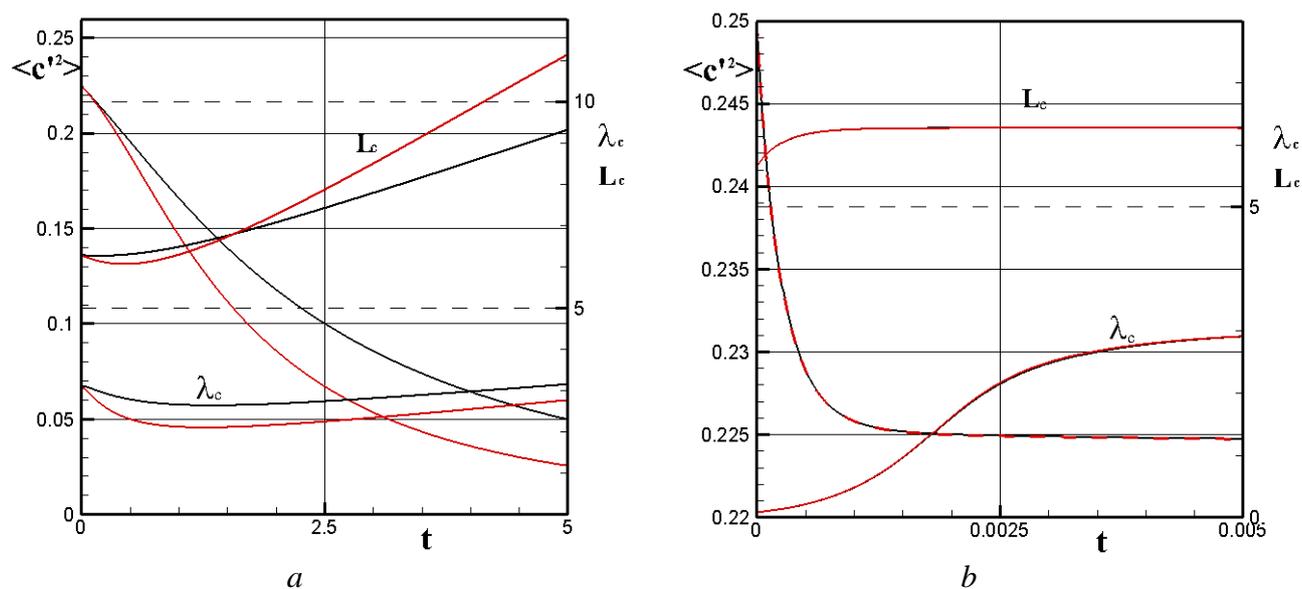


Рис. 5. Влияние мелкомасштабной компоненты турбулентного поля скорости: *a* – основной участок процесса перемешивания; *b* – начальный участок

На следующем рисунке (рис. 6) приведены зависимости для режимов, отличающихся величинами интегрального масштаба турбулентности. Красные линии соответствуют увеличенной вдвое величине масштаба. Увеличение масштаба замедляет вырождение на основном участке и приводит к увеличению внутреннего и микромасштабов скалярного поля. Изменение на начальном участке масштабов скалярного поля не зависит от величины интегрального масштаба поля скорости.

Для представления результатов влияния параметров скалярного поля на процесс перемешивания удобно рассмотреть безразмерную форму уравнения для КФС.

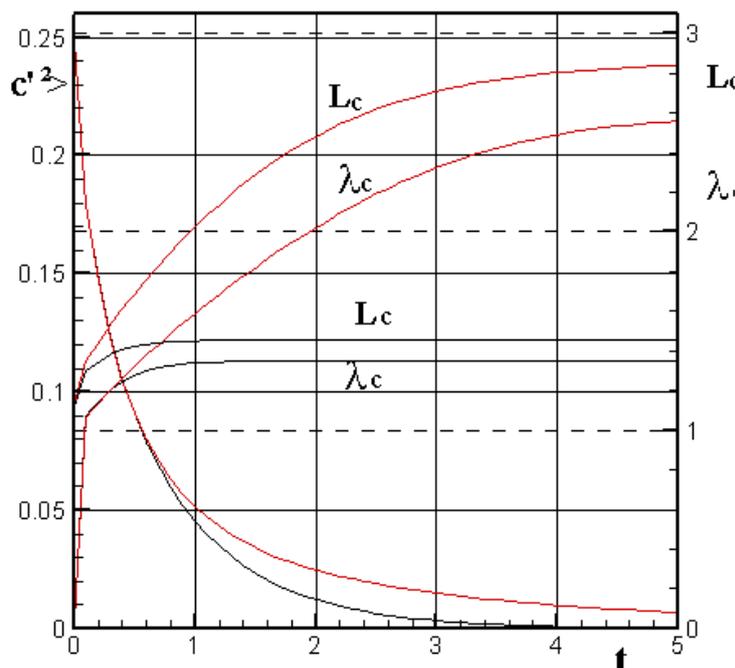


Рис. 6. Влияние крупномасштабной компоненты турбулентного поля скорости на процесс смешения: 1 – $\lambda_u = 0.00088$; 2 – 0.00176

3.2. Безразмерная форма уравнения для корреляционной функции скаляра

Выбирая в качестве единичных значений величину интегрального масштаба и интенсивность турбулентности получим:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} R(\rho, \tau) = \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho^2 \left(\frac{1 - f(\rho)}{\frac{12}{Re_d \bar{\lambda}_c(\tau)^2} + \frac{10}{Re \bar{\lambda}_u^2} + 1/2} + Re_d^{-1} \right) \frac{\partial}{\partial \rho} R(\rho, t) \right] \rho^{-2} \quad (16)$$

Здесь $\rho = \zeta L_u$, $Re = u' L / \nu$ – число Рейнольдса; $Re_d = u' L / d = Re Sc$ – диффузионное число Рейнольдса, названное так по аналогии с иногда применяемым названием "диффузионное число Прандля" для числа Шмидта $Sc = \nu / d$. $\tau = tu' / L_u$, $\bar{\lambda}_c(\tau) = \lambda_c(\tau) / L_u$, $\bar{\lambda}_u = \lambda_u / L_u$. Особенностью полученного уравнения является зависимость от времени параметра $\bar{\lambda}_c(\tau)$. Кроме этого начальные условия приводят к появлению параметра $N_c = L_c(0) / L_u$. Используя безразмерную форму уравнение удобно проиллюстрировать зависимость решения от размерности сетки, используемой при расчете ПРВ. На рис. 8 приведены результаты для $N = 4$ и $N = 6$ (верхние кривые). Небольшое отличие наблюдается только на завершающей стадии, когда распределение сосредотачивается вблизи финальной точки

$$P(c_1, c_2) = \delta(c_1 - \langle c_1 \rangle) \delta(c_2 - \langle c_2 \rangle),$$

что приводит к незначительной потере точности.

3.3. Влияние коэффициента молекулярного переноса

Наибольший интерес представляет определение диапазона влияния конкретных значений коэффициента молекулярной диффузии. Это связано с тем, что, если обнаружатся ре-

жимы, при которых влияние конкретных значений коэффициента молекулярной диффузии не наблюдается, несмотря на то, что эти значения используются в расчете, возникнет проблема упрощения уравнения для КФС таким образом, чтобы не использовать в нем конкретных значений коэффициента молекулярной диффузии. При определенном соотношении характерных параметров полей скорости и скаляра такие режимы наблюдаются. На рис. 7а изображен начальный участок зависимостей дисперсии скаляра и микромасштаба для двух значений коэффициента молекулярной диффузии, отличающихся в 10 раз. Влияние коэффициента молекулярной диффузии на величину дисперсии наблюдается до момента времени $t = 0.025$, после чего кривые практически совпадают. Это может трактоваться как наличие участка установления некоторого квазистационарного состояния, в котором градиенты или что то же внутренний масштаб скалярного поля устанавливаются в соответствии с параметрами турбулентности и коэффициентом молекулярной диффузии. На начальном участке в нашем случае происходит исчезновение мелкомасштабной компоненты скалярного поля. С развитием процесса структура скалярного поля изменяется, в то время как структура поля скорости остается неизменной. На рис. 7б изображен основной участок процесса для режима, отличающегося большим внутренним масштабом поля скаляра. Влияние коэффициента d не заметно в начале процесса, но проявляется на большей его протяженности, что может объясняться рассогласованием полей скорости и скаляра. Внутренний масштаб скалярного поля оказывается чрезвычайно чувствителен к изменению коэффициента молекулярной диффузии.

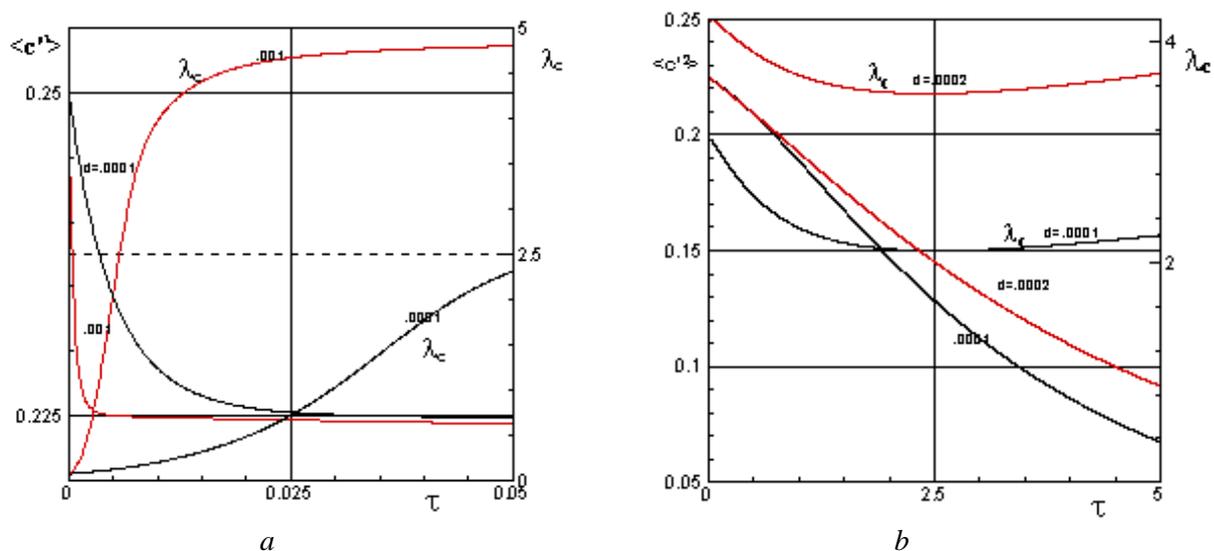


Рис. 7: Влияние коэффициента молекулярной диффузии на процесс перемешивания: a – начальный участок $\lambda_c = 0.1$; b – основной участок процесса $\lambda_c = 0.25$

3.4. Влияние химических превращений

Несмотря на то, что основной целью работы было исследование характера влияния химических процессов на структуру поля скаляра, результат оказался очень ограниченным. В соответствии с (15) при химических превращениях происходит пропорциональное изменение корреляционной функции скаляра, что позволило упростить организацию вычислений, но не привело к выявлению физических механизмов влияния реакции на поле скаляра. Ожидаемого изменения поля градиентов концентрации и изменения мелкомасштабной компоненты поля скаляра не произошло. Это влияние должно было быть вызвано скоростью распространения волны реакции по среде, но в однородных условиях учесть влияние волны реакции на ПРВ затруднительно. Тем не менее, влияние химических превращений обнаружено, при чем влияние совершенно неожиданное. Казалось, что химические превра-

щения, уменьшая содержание некоторых компонент, должны приводить к более равномерному распределению и уменьшению интенсивности пульсаций, но в действительности в результате превращений происходит не только выравнивание, но и изменение соотношений концентраций, что приводит к росту неоднородности и дисперсии. На рис. 8 приведены результаты для чисел Дамкёлера равных нулю и бесконечности (верхние кривые). Начальное распределение вероятностей отлично от нуля только в трех точках: $\delta F(1,0,0)=.3$, $\delta F(0,1,0)=.3$ и $\delta F(0,0,0)=.4$. Для рассмотренного режима получено незначительное замедляющее влияние реакции на скорость перемешивания. Пары кривых для коэффициента, определяющего интенсивность микросмешения $\beta(t)$, получены с разной дискретностью сетки, используемой при расчете ПРВ. Незначительное изменение параметра $\beta(t)$ определяется тем, что этот параметр является внутренним и используется только для согласования результатов расчета корреляционной функции и ПРВ. Скорость перемешивания определяется уравнением КФС, на которую может повлиять только реагирование, но это влияние в рассмотренном случае не сильное.

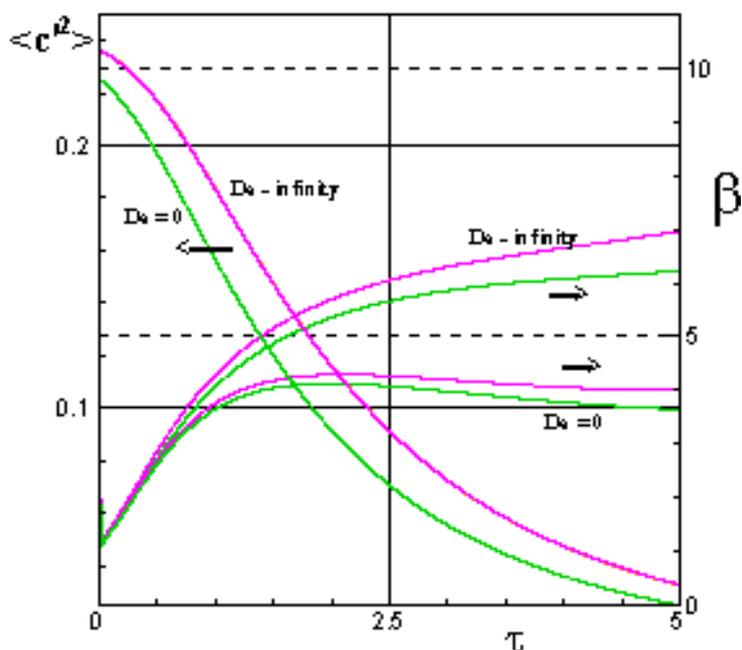


Рис. 8: Влияние числа Дамкёлера на процесс смешения

Интерес представляет также изменение смешанных моментов $\langle c_1 c_2 \rangle$ и $\langle c_1 c_2 c_3 \rangle$, изменение которых по времени характеризуют чувствительность среды к инициации реакции. На рис. 9 приведена типичная зависимость для нормированного значения момента $\langle c_1 c_2 \rangle$ (красная линия). В начальный момент количество смешавшегося до молекулярного состояния равно нулю. Затем оно увеличивается и в конце процесса перемешивания достигает максимального значения равного $\langle c_1 \rangle \langle c_2 \rangle$. На рисунке приведено также изменение по времени предполагаемой (на самом деле реакция не происходит) средней скорости реакции, описываемой зависимостью арренисовского типа с достаточно большой энергией активации (зеленая кривая), в которой роль температуры играет третья компонента. В начальный момент наибольшую роль играет мелкомасштабная компонента поля скаляра, обеспечивающая быстрое, практически скачком, образование зоны вблизи точки $(0, 0, 0)$ (см. рис. 3, второй фрагмент) где скорость реакции максимальна. Эта зона увеличивается (третий фрагмент рисунка 3), но затем вся среда приобретает среднюю температуру, при которой скорость реакции невелика. Колебания этой кривой объясняются особенностями используемой дискретизации уравнений и не учитывались в приведенном объяснении.

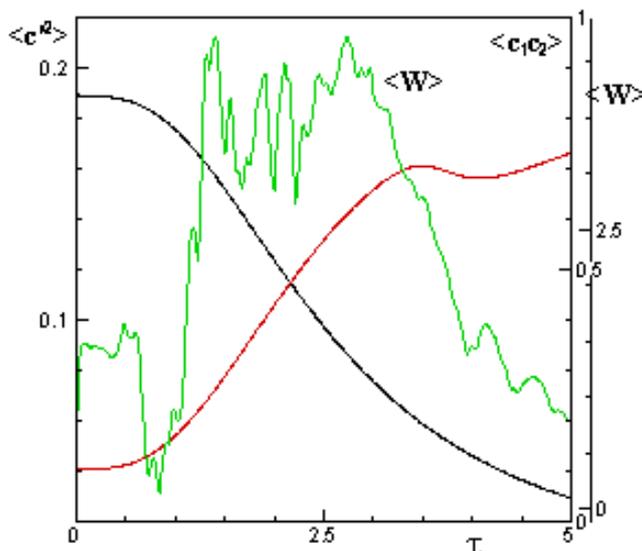


Рис. 9. Изменение реакционной способности в процессе перемешивания. $\langle c_1 c_2 \rangle$ – красная линия, Средняя возможная скорость реакции– зеленая

Интересно, что зависимость дисперсии от времени (черная кривая) отличается от аналогичных результатов, приведенных ранее. В начальный момент происходит, как и ранее, быстрое уменьшение дисперсии, но затем вместо более медленного уменьшения наблюдается практически постоянное значение до $t=0.5$.

3.5. Интенсивность микросмешения

У используемой модели микросмешения (4) имеется один известный дефект. Коэффициент β , определяющий интенсивность процесса микросмешения, имеет размерность $1/(time\ c)$, а не $1/time$. Это означает, что этот коэффициент зависит от конкретного распределения плотности вероятности и, возможно, от значения коэффициента молекулярной диффузии. На следующем рис. 10 для различных значений коэффициента молекулярной диффузии приведены величины β , характеризующие интенсивность процесса смешения. Сложный характер этих зависимостей показывает, что расчеты с постоянным значением коэффициента β должны приводить к неправильным скоростям процесса перемешивания.

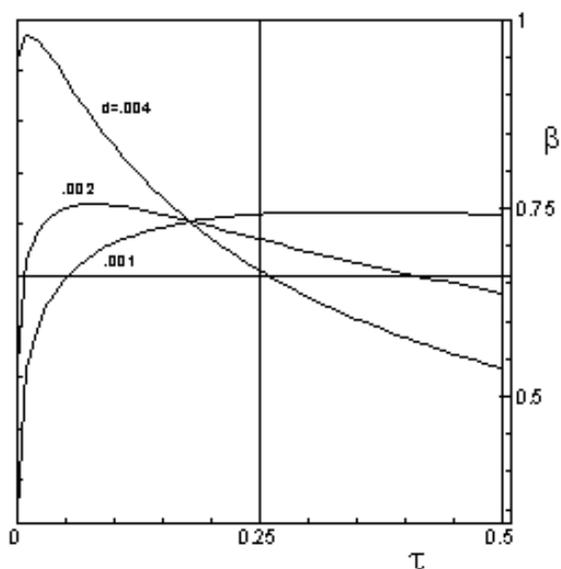


Рис. 10: Изменение по времени коэффициента β для различных значений коэффициента молекулярной диффузии.

Заключение

Методика расчета процесса турбулентного перемешивания, основанная на использовании уравнений для двуконцентрационной плотности распределения вероятностей концентраций компонентов химической реакции и уравнения для корреляционной функции поля скорости, позволяет получить основные параметры процесса перемешивания. Определяются как микро и интегральный масштабы скалярного поля, изменение которых характеризует перестройку структуры поля, интенсивности пульсаций компонент смеси и способность смеси к реагированию для любых трехкомпонентных зависимостей скорости реакции. Использование модели, связывающую третий и второй двухточечные моменты и содержащую характерные значения диссипативных процессов, зависящие от конкретных значений молекулярных коэффициентов переноса, позволило объяснить появление интервалов процесса перемешивания не зависящих от конкретных значений молекулярных коэффициентов, как установление некоторого равновесия между молекулярной диффузией и турбулентностью. На некоторых режимах получен сильный рост интегрального масштаба скалярного поля, что требует тщательности проверки модели, связывающую третий и второй двухточечные моменты, и, возможно, ее уточнения. Возможными альтернативными моделями является модель [26] и модель [12].

Работа выполнена при поддержке РФФИ гранты 10-08-90040-Бел_а и 13-01-12058-ОФИ_М.

Литература

1. Козлов В. Е., Лебедев А. Б., Секундов А. Н., Якубовский К. Я. Моделирование скорости турбулентного гомогенного горения на основе "квазиламинарного" подхода// Теплофизика высоких температур, 2009, Т. 47, № 6, С. 946–953.
2. Curl R.L. Dispersed phase mixing//1. Theory and effects in simple reactions//AICHE J., 1963, V. 9, No.2, P.175.
3. Фрост В.А. Модель турбулентного диффузионного факела пламени// Изв. АН СССР, энерг. и.транс., 1973, № 6, С. 108-116.
4. Pope S. B. An improved turbulent mixing model// Combust. Sci. Technol., 1982, V. 28, P. 131.
5. Corrsin, S. Statistical behavior of a reacting mixture in isotropic turbulence// Physics Fluids, 1958, 1(1):42.
6. Vabenko V.A., Frost V.A. Approximation accuracy of the two-point third moments of the velocity field in the homogeneous turbulence//International Journal of Heat and Mass Transfer, 2012, V. 55, Pp. 2676–2683.
7. Каминский В.А., Рабинович А.Б., Фрост В.А. Многомерные интегральные модели микросмешения. Моделирование турбулентного горения предварительно перемешанной смеси. Препринт №556.М.: ИПМехРАН, 1995 г., С. 48.
8. Каминский В.А., Рабинович А.Б., Фрост В.А. Моделирование турбулентного микросмешения// ТОХТ, 1997, Т. 31, № 3, С. 243–249.
9. Каминский В.А., Рабинович А.Б., Фрост В.А. Моделирование турбулентного микросмешения и уравнение для корреляционной функции скалярного поля// Химическая физика, 2005, Т. 24, № 5, С. 47–58.
10. Красицкий В.П., Фрост В.А. Молекулярный перенос в турбулентных потоках//Изв. РАН, Механика жидкости и газа, 2007, № 2, 46–58. Molecular Transfer in Turbulent Flows//Fluid Dynamics, 2007, Vol. 42, No. 2, Pp. 190–200.
11. Акатнов Н.И., Быстрова Е.Н. Расчеты некоторых характеристик однородной турбулентности на основе уравнения Кармана – Ховарта, замкнутого посредством полуэмпирической модели // ТВТ. 1999, Т. 37, № 6, С. 895–903.
12. Hasselmann K. Zur Deutung der dreifachen Geschwindigkeitskorrelationen der isotropen Turbulenz // Deutsche Hydrographische Zeitschrift, 1958, B. 11, H. 5, S. 207–217.
13. Tsai K., O'Brien E. E. A hybrid one- and two-point approach for isothermal reacting flows in homogeneous turbulence //Phys. Fluids, 1993, A5, No. 11, Pp. 2902–2910.

14. 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, Pp. 1–18.
15. Tai-Lun Jiang, O'Brien E. Simulation of scalar mixing by stationary isotropic turbulence// *Phys. Fluids*, 1991, A 3(6), Pp. 1612–1624.
16. Krasitskii V.P. Approximate calculation of lagrangian statistic functions of fluid particle pairs in isotropic turbulence.//*Boundary-Layer Meteorology*, 1991, V. 54, Pp. 231–247.
17. Фрост В.А. Ускорение процессов молекулярного переноса в турбулентных потоках.//*Докл. Акад. На-ук*, 1967, Т. 176, № 4, С. 794–796.
18. Frost V.A. Математическая модель турбулентного горения. Труды третьего Всесоюзного совещания по теории горения. М., 1960, С. 122–125.
19. 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.: ИПМехРАН, 2002 г., С.26.
20. 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 г., С. 28.
21. Frost V.A., Krasitskii V.P., Hierro J. Description of molecular mixing in turbulent flows based on two-point PDF equation for passive scalar. *Micromixing in turbulent reactive flows*. Ed. S.Frolov, Pp. 57–63.
22. Sabelnikov, V., Gorokhovski, M., Extended LMSE and Langevin models of the scalar mixing in the turbulent flow. *Second International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, Royal Institute of Technology (KTH), Stockholm, Sweden, 2001.
23. Sabelnikov, V., Soulard, O., Rapidly decorrelating velocity field model as a tool for solving one-point Fokker-Planck equations for probability density functions of turbulent reactive scalars.// *Physical Review*, 2005, E 72: 016301.
24. Недоруб С.А., Фрост В.А., Щербина Ю.А. Расчет турбулентной диффузии и гомогенного турбулентного факела на основе статистической модели. Депонировано в ВИНТИ 1979, №3405-79, С. 57.
25. Лыткин Ю.М., Черных Г.Г. Об одном способе замыкания уравнения Кармана–Ховарта. В сб.: "Динамика сплошной среды". Вып. 27, Новосибирск, 1976, С. 124–.
26. Baev M.K., Chernykh G.G. On Corrsin Equation Closure// *J. of Eng. Thermophysics*, V. 19, No. 3, Pp. 154–169.