

## УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ И ТУРБУЛЕНТНЫЕ РЕАГИРУЮЩИЕ ПОТОКИ

В.А. Фрост

*Институт проблем механики Российской академии наук, Москва*

### Аннотация

Для учета взаимного влияния химических превращений и микросмешения в турбулентном потоке постоянной плотности используется модель, основанная на уравнении для корреляционной функции скаляра. Для замыкания уравнения для корреляционной функции используется гипотеза Прандтля для диффузионных компонент и простейшая аппроксимация для слагаемых, зависящих от химических превращений. Показана статистическая достоверность предложенного замыкания. Для определения влияния химических превращений на среднее поле и корреляционную функцию производится восстановление распределения плотности вероятности, основанное на простейших предположениях о возможной форме распределения и результатах расчета среднего поля и корреляционной функции скаляра. Примесь предполагается пассивной, то есть не влияющей на параметры турбулентности и коэффициент турбулентной диффузии. Необходимые параметры однородного турбулентного поля скорости 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.

### THE EQUATION FOR CORRELATION FUNCTION OF A SCALAR AND TURBULENT REACTION FLOWS

The model based on the equation for correlation function and the presumed probability density function (PDF) are used for the taking into account the interference of chemical reaction and micromixing in turbulent flows. The concrete PDF is calculated as the mean and the variance of the scalar calculated from the equations for mean scalar and its correlation function. The scalar is supposed passive, that do not cause changes of turbulence and diffusivity. The necessary parameters of a homogeneous turbulent field are assumed known and approximated by elementary dependences. The process of scalar transfer in a plain layer which boundary values of the scalar are given, is considered. The results of 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. The calculation of the reaction zone formation is carried out.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема определения влияния турбулентности на статистические свойства 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.

Стохастический характер турбулентного движения сводит задачу определения интенсивности микросмешения к определению статистических свойств лапласианов скалярного поля, знание которых позволяет определить 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.

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 результате возникает возможность рассмотреть неустановившиеся процессы, такие как воз-

никновение очага горения, и описать зависимость турбулентной скорости горения заранее перемешанной смеси от физико-химических характеристик горючей смеси, одной из которых является скорость нормально-го пламени. Двухточечное описание позволяет также определять характерные масштабы скалярного поля.

Двухточечное описание 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 (КФС). Близким к двухточечным подходам является использование уравнения для скалярной диссипации. Во всех случаях непосредственно получаемые уравнения оказываются незамкнутыми.

Наш интерес к уравнению для КФС возник при анализе возможностей использования для описания турбулентного горения уравнения для ПРВС2 [1, 2].

Близким по направленности нашим исследованиям является цикл работ, выполненных Е.О'Брайеном с соавторами (см., например, [3,4]). 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 [3, 4] была использована некоторая методика замыкания уравнений ПРВС2 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. Для однородных условий 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. Тем не менее, это позволило в работах Е.О'Брайена, посвященных как ПРВ2, так и КФС, получать результаты для однородных нестационарных случаев, когда зависимость коэффициентов от времени может иметь место. Кроме того, в [4] использовались линейные зависимости скорости химической реакции, 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 [7], что знание ПРВС2 позволяет определять микросмешение без дополнительных гипотез, но уравнение для ПРВС2 незамкнуто. Ранее [8, 9] мы 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 КФС [1,2]. При попытках замкнуть это уравнение появляются производные от КФС, что означает сведение проблемы замыкания уравнения для ПРВС2 к проблеме замыкания уравнения для КФС [5]. Это обстоятельство возникает также при замыкании уравнений, использующихся и в других подходах, например основанных на уравнениях для СПРВ скаляра и его градиента [10].

Это означает, что, для замыкания уравнения для ПРВС2, достаточно замкнуть уравнение для КФС. Была предложена некоторая процедура замыкания, в которой зависимость коэффициента вихревой диффузии от времени была просто проигнорирована (рассматривалось значение при  $t = 0$ ). Расчеты показали, что использование уравнения для КФС позволяет получить хорошее совпадение расчетов с результатами DNS [11]. В дальнейшем оказалось [5], 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. В работах [5, 6] проведены предварительные расчеты КФС, результаты которых использовались для решения уравнения для ПРВ и определения средней скорости химической реакции.

В данной работе, как и ранее [5, 6], рассматривается задача о распределении параметров в турбулентном потоке постоянной плотности в плоском слое, на границах которого значения скаляра заданы. Учитывается влияние химических процессов на КФС как через посредство изменения среднего поля, так и непосредственно. Для учета непосредственного влияния химических превращений на КФС предлагается простейшая форма замыкания уравнения для КФС, являющаяся точной для линейных зависимостей скорости реакции и для точек  $r = 0$  и  $r = \infty$ . Для упрощения расчетов предполагается не только однородность и изотропия турбулентности, но и изотропия скалярной диссипации. При необходимости, использование гипотезы Прандтля для замыкания уравнения для КФС позволяет получить тензор вихревой вязкости и оценить влияние неизотропности диссипации скалярного поля. Для повышения надежности расчетов наряду с решением уравнения для ПРВ проводится восстановление ПРВ скаляра с использованием простейшей формы распределения, пригодной в случае отсутствия перемежаемости. Получены распределения среднего значения и дисперсии скаляра по ширине канала, а также распределения средней скорости химической реакции и скалярной диссипации. Рассчитан режим формирования зоны реакции.

## 2. ОСНОВНЫЕ ПРЕДПОЛОЖЕНИЯ

Под корреляционной функцией скаляра понимается

$$R(x_1, x_2, t) = \langle c'(x_1, t) c'(x_2, t) \rangle \quad (1)$$

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 не-

зависимым переменным:  $\boldsymbol{\eta} = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$  и  $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$  и усреднения, получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + 0.5 [(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\eta}}] R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ & + [(\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}] R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ & + 0.5 \operatorname{div}_{\boldsymbol{\eta}} \langle (\mathbf{u}'_1 + \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle + \\ & + 2 \operatorname{div}_{\mathbf{r}} \langle (\mathbf{u}'_1 - \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle = \quad (2) \\ & = Dm \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\eta}^2} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + 2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \right] \\ & + [D(\mathbf{x}_1) + D(\mathbf{x}_2)] \frac{dC(x)}{dx} \Big|_{x_1} \frac{dC(x)}{dx} \Big|_{x_2} \\ & + \langle c'(\mathbf{x}_2, t) W' \Big|_{x_1} \rangle + \langle c'(\mathbf{x}_1, t) W' \Big|_{x_2} \rangle \end{aligned}$$

Полученное уравнение не замкнуто. Это относится к слагаемым, содержащим третьи моменты и скорость химических превращений. В работе [3], используя обобщение гипотезы Прандтля, связывающее среднее от потока с градиентом переносимой скалярной величины  $F$  (многоточечное предположение предполагает зависимость переносимой величины от нескольких точек пространства)

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

к компонентам третьей и четвертой строки уравнения (2), было получено

$$\begin{aligned} & 0.5 \operatorname{div}_{\boldsymbol{\eta}} \langle (\mathbf{u}'_1 + \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle = \\ & = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\eta}_i} D(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\eta}_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & 2 \operatorname{div}_{\mathbf{r}} \langle (\mathbf{u}'_1 - \mathbf{u}'_2) c'(\mathbf{x}_1, t) c'(\mathbf{x}_2, t) \rangle = \\ & = \frac{\partial}{\partial r_i} [Dr(\boldsymbol{\eta} + \mathbf{r}/2) + Dr(\boldsymbol{\eta} - \mathbf{r}/2)] \frac{\partial}{\partial r_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \quad (5) \end{aligned}$$

Необходимы некоторые пояснения. 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 соотношении (4) появляется коэффициент турбулентной диффузии. Главное же заключается в том, что концы отрезка рассматриваются как пара коррелированно диффундирующих материальных точек, что позволяет записать выражение (5) для вихревой диффузии, содержащее некоторый коэффициент диффузии, подлежащий определению. Если рассматривать коэффициент диффузии как отношение некоторой интенсивности турбулентности к характерному времени, то понятно, что на месте интенсивности должна находиться корреляционная функция продольной компоненты скорости. Это соответствует учету растяжения скалярного поля как основного влияния турбулентности. Характерное время может быть определено при рассмотрении случая бесконечно удаленных точек, когда точки взаимно некоррелированы и каждая из них диффундирует с

коэффициентом турбулентной диффузии. Это позволяет написать

$$Dr(\boldsymbol{\eta} \pm \mathbf{r}/2) = D(\boldsymbol{\eta} \pm \mathbf{r}/2) \left( 1 - \frac{B_{rr}(\mathbf{r})}{B_{rr}(0)} \right) \quad (6)$$

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  $r$

$$\begin{aligned} & \langle c'(\mathbf{x}_2, t) W' \Big|_{x_1} \rangle + \langle c'(\mathbf{x}_1, t) W' \Big|_{x_2} \rangle = \\ & = (\langle c' W' \rangle \Big|_{x_1} + \langle c' W' \rangle \Big|_{x_2}) \bar{R}(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \quad (7) \end{aligned}$$

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

$$\bar{R}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \frac{R(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)}{R(\mathbf{x}, 0, t)} \quad (8)$$

Полученная форма является точной при линейной зависимости скорости реакции от концентрации [4].

В итоге

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + 0.5 [(\mathbf{U}_1 + \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\eta}}] R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ & + [(\mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}] R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) = \\ & = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\eta}_i} (D(\boldsymbol{\eta}) + Dm) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\eta}_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ & + \frac{\partial}{\partial r_i} [Dr(\mathbf{x}_1) + Dr(\mathbf{x}_2) + 2Dm] \frac{\partial}{\partial r_i} R(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) + \\ & + [D(\mathbf{x}_1) + D(\mathbf{x}_2)] \frac{dC(x)}{dx} \Big|_{x_1} \frac{dC(x)}{dx} \Big|_{x_2} + \\ & + (\langle c' W' \rangle \Big|_{x_1} + \langle c' W' \rangle \Big|_{x_2}) \bar{R}(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{r}, t) \quad (9) \end{aligned}$$

## 2.1. Статистическая достоверность предложенного замыкания

Движение в среднем поле и связанные с этим деформации скалярного поля не могут приводить к появлению статистически некорректных распределений. Точно также и сглаживание скалярного поля в результате молекулярного переноса не может нарушить статистическую достоверность поля. К статистической некорректности может приводить только процесс декорреляции и химические превращения, для которых предложены некие схемы, влияние которых необходимо проверить. Поэтому для проверки выполнения требований теоремы Хинчина достаточно рассмотреть случай однородного скалярного поля в условиях стационарной однородной изотропной турбулентности при отсутствии молекулярного смешения. В этом случае безразмерная форма уравнения для КФС будет:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} R(\mathbf{r}, t) = \\ & = \frac{\partial}{\partial r_j} \left( 1 - \frac{B_{LL}(\mathbf{r})}{B_{LL}(0)} \right) \frac{\partial}{\partial r_j} R(\mathbf{r}, t) + \langle c' W' \rangle R(\mathbf{r}, t) \quad (10) \end{aligned}$$

Дальнейшие выкладки приведены для одномерного случая. Подставляя в уравнение (10) выражения для обратных преобразований Фурье:

$$B_{LL}(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} Ft(k') e^{ik'r} dk' \quad (11)$$

и

$$R(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k'', t) e^{ik''r} dk'' \quad (12)$$

и производя необходимые интегрирования, получим уравнение для преобразования Фурье от КФС:

$$\frac{\partial}{\partial t} F(k, t) = -k^2 F(k, t) + \frac{k}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k'') Ft(k - k'') k'' dk'' + \langle c'W' \rangle F(k, t) \quad (13)$$

Для дальнейшего анализа удобно перейти к уравнению для спектра  $Es(k, t) = 2F(k, t)$  ( $k > 0$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t} Es(k, t) = (\langle c'W' \rangle - k^2) Es(k, t) + \frac{k}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} Es(k'') Ft(k - k'') k'' dk'' \quad (k > 0) \quad (14)$$

В силу неотрицательности и симметрии функции  $Ft(k'')$  второе слагаемое в уравнении (14) неотрицательно при всех  $k$ , что обеспечивает неотрицательность спектра  $E(k, t)$ . Таким образом, уравнение для КФС, получаемое подстановкой выражений для коэффициентов  $Dt$  и  $Dr$  в уравнение (4), представляет статистически корректное описание процессов переноса и смешения, происходящих в турбулентных потоках.

### 2.2. Уравнение для среднего поля скаляра

При принятых предположениях уравнение для среднего будет

$$\frac{\partial}{\partial t} C(z, t) + (U \cdot \nabla_z) C(z, t) = \nabla_z \left[ (D(z, t) + Dm) \text{div}_z C(z, t) \right] + \langle W(c) \rangle \quad (15)$$

### 2.3. Определение плотности распределения вероятности скаляра

Для расчета химических превращений необходимо располагать ПРВ скаляра  $P(z, c)$ . В предыдущих исследованиях для этого использовалось уравнение для ПРВ с простейшей моделью микросмешения, что позволяло простым интегрированием определять как среднее поле скаляра, необходимое для вычисления источникового члена в уравнении для КФС, так и коэффициенты в слагаемых, определяющих зависимость КФС от химических процессов. В настоящем исследовании ПРВ 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 ПРВ 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

$$F(z, c) = \frac{\text{erf}\left(\frac{c - C(z)}{\sqrt{2 \text{disp}(z)}}\right) + \text{erf}\left(\frac{1 - C(z)}{\sqrt{2 \text{disp}(z)}}\right)}{\text{erf}\left(\frac{C(z)}{\sqrt{2 \text{disp}(z)}}\right) + \text{erf}\left(\frac{1 - C(z)}{\sqrt{2 \text{disp}(z)}}\right)}$$

Все необходимые средние определяются интегрированием функции  $F(z, c)$ .

### 3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Одно из существенных затруднений, связанное с использованием уравнения для КФС, это большое число независимых переменных. В общем случае КФС зависит от шести пространственных переменных и времени. В однородных условиях при изотропии стационарного решения число переменных уменьшается до двух. Наименьшее количество переменных в неоднородных стационарных условиях можно получить, если рассматривать канал постоянной ширины, на стенках которого значения скаляра заданы, предполагая дополнительно, что неоднородность наблюдается только по одной переменной.

Это соответствует течению Куэтта между двумя плоскими бесконечными пластинами, одна из которых движется с некоторой постоянной скоростью. В качестве скаляра рассматривается температура. Температуры пластин постоянны, но отличаются. Существует поток тепла, если коэффициент молекулярной теплопроводности не равен нулю. В зоре 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.

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 КФС. В точке, лежащей на границе, значение пульсации скаляра известно, оно равно нулю, что приводит к нулевым граничным условиям.

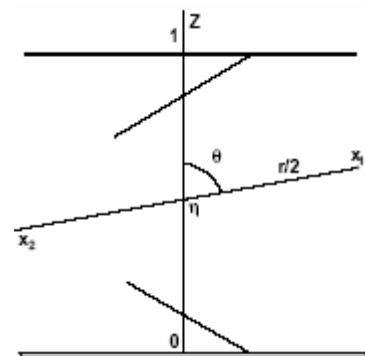


Рис. 1. Расчетная область и независимые переменные

Тогда для установившегося режима для КФС нужно было бы оставить три независимых переменных:  $z$

– положение центра по ширине слоя;  $\theta$  – направление и  $r$  – длина отрезка, соединяющего рассматриваемые точки. Причем переменные  $r$  и  $\theta$  должны рассматриваться как переменные сферической системы координат при условии отсутствия зависимости от третьей переменной  $\phi$ . С целью уменьшения числа независимых переменных предполагается, что КФС не зависит от направления  $\theta$ . Это очень сильное предположение, допустимое только в режиме иллюстрирующем возможности рассматриваемого подхода. Оценки, сделанные на предыдущем этапе [5], показали допустимость такого упрощения.

В итоге имеем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} [D(z) + Dm] \frac{\partial}{\partial z} R + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 Dm \frac{\partial}{\partial r} R + \\ & + \left[ D\left(z + \frac{r}{2}\right) + D\left(z - \frac{r}{2}\right) \right] \frac{dC(z)}{dz} \Big|_{z+\frac{r}{2}} - \frac{dC(z)}{dz} \Big|_{z-\frac{r}{2}} + \\ & + \langle c'W(c) \rangle \bar{R} = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь  $Dm$  – коэффициент, содержащий коэффициенты вихревой диффузии и молекулярного переноса

$$Dm = \left[ D\left(z + \frac{r}{2}\right) + D\left(z - \frac{r}{2}\right) \right] \left( 1 - \frac{B_{LL}(r)}{B_{LL}(0)} \right) + 2Dm \quad (18)$$

Зависимость для корреляционной функции поля скорости использовалась в виде:

$$\frac{B_{LL}(r)}{B_{LL}(0)} = \exp(-r^2/4\lambda^2) \quad (19)$$

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

$$W(c) = \begin{cases} Da * (c - c_{\min}) * (c_{\max} - c) & c_{\min} < c < c_{\max} \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (20)$$

и величиной параметра  $Da$ , представляющего число Дамкёлера.

Величина коэффициента турбулентной диффузии задавалась соотношениями

$$D(z) = D_0 D_1(z) D_1(1-z) \quad (21)$$

$$D_1(z) = \frac{z^3/\delta^3}{D_{1m}(1+z^3/\delta^3)} \quad (22)$$

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  $D_m \neq 0$ , 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  $D_m = 0$  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  $D_m \rightarrow 0$  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 (22) 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

$$\frac{\partial}{\partial z} [D(z) + Dm] \frac{\partial}{\partial z} C(z) + \langle W(c) \rangle = 0 \quad (23)$$

### 3.1. Безразмерные переменные

Для обезразмеривания задачи использовался характерный размер равный реальной ширине канала и значение коэффициента турбулентной диффузии в его центре. Это превращает величину  $Dm$  в комбинацию чисел Рейнольдса и Прандтля или Шмидта:

$$Dm = \frac{k}{Pr Re} \quad (24)$$

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

$$D = k_T u' l \quad (25)$$

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:

$$\begin{aligned} z=0: C(0) = 0, F(0,c) \equiv 0 \\ z=1: C(0) = 1, F(0,c) \equiv 1 \end{aligned} \quad (26)$$

Дополнительно для функции распределения:

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

И, наконец, для КФС:

$$\begin{aligned} z+r/2=1: R(z,r/2) = 0 \\ z-r/2=0: R(z,r/2) = 0 \end{aligned} \quad (28)$$

Взаимосвязь между уравнениями такова. Среднее поле определяет граничное условие для КФС, когда одна из точек попадает на границу области. Корреляционная функция определяет распределение дисперсии и скорость микросмещения (скалярную диссипацию). Дисперсия используется при восстановлении ПРВ, по которой определяется средняя скорость реакции, что позволяет учесть влияние реакции на среднее поле, и параметры, определяющие зависимость КФС 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 значений параметров  $Da$  и  $Dm$  количество узлов менялось от 50 до 2000. Параметр, определяющий сходимость уравнения для среднего, задавался равным  $10^{-9}$ . 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 КФС и восстановлении функции распределения.

Расчет КФС проводился с использованием процедуры DLSLXG библиотеки IMSL, реализующей метод решения линейной системы на основе LU факторизации и симметричной стратегии Марковца. Метод реализован для разреженных матриц. Расчеты проводились на переменной сетке размерностью от  $8 \times 8$  до  $256 \times 256$ . Несмотря на то, что условия симметрии позволяют проводить расчеты КФС в треугольной области  $0 < z < 0.5, 0 < r < z$ , предварительные расчеты показали, что при использовании условий Неймана, возникающих при  $z=0.5$ , возможно возникновение неустойчивости вычислений. Поэтому расчеты КФС 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  $45^\circ$  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 КФС, иллюстрирующий особенности рассматриваемой зоны, приведен на рис. 2.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

##### 4.1. Изменение скалярной диссипации в результате изменения среднего поля скаляра

Одной из целей расчетов было определение влияния химических процессов на микросмещение, кото-

рое в рассматриваемом случае характеризуется распределением скалярной диссипации.

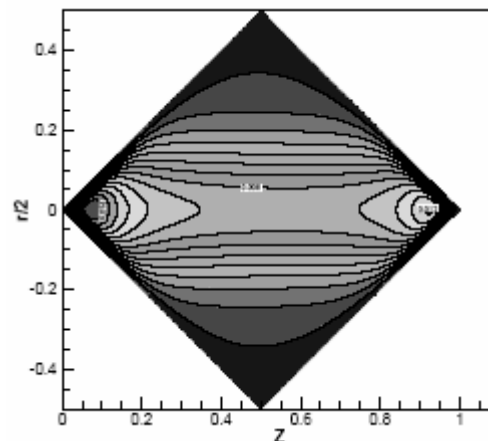


Рис. 2. Расчетная область для уравнения для корреляционной функции. Пример найденного решения

Скалярная диссипация изменяется, во-первых, из-за изменения среднего поля скаляра и связанного с ним источникового члена в уравнении для КФС. Во-вторых, имеется также непосредственное влияние химических превращений на уравнение для КФС. 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  $c < c'W(c) >$  в уравнении для КФС, в данных расчетах опущены. На рис. 3 приведены распределения средних значений скаляра по ширине канала, рассчитанные при различных значениях числа Дамкёлера.

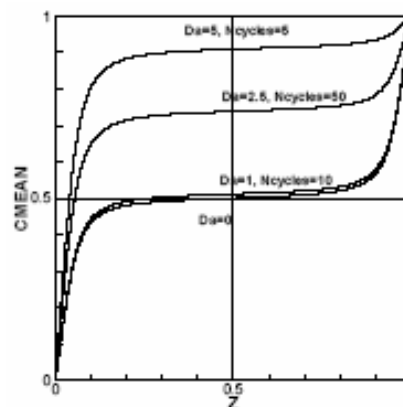


Рис. 3. Среднее поле скаляра при различных интенсивностях химических процессов ( $Da = \text{var}$ ). Величины  $c_{\min}=0.6, c_{\max}=0.9$

Наблюдается сильное влияние числа Дамкёлера на распределение среднего поля скаляра. Особенно сильно проявляется это влияние 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 Дамкёлера больших 2.5 процесс итераций не сходится.

Возникает релаксационный режим, при котором имеется два состояния (решения), наблюдающиеся по очереди. Проведение расчетов по методу установления позволило объяснить такое поведение решения неустойчивостью метода поиска стационарного решения при числах Дамкёлера больших 2.5.

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 КФС 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. 4 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 10 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.

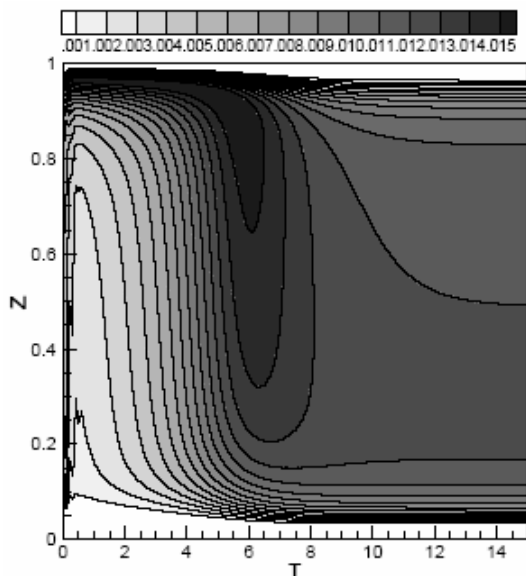


Рис.4. Формирование по времени зоны реакции при числе Дамкёлера равном 5 ( $c_{min}=0.6$   $c_{max}=0.9$ )

При применяемой схеме расчета (восстановление ПРВ) основное влияние решения уравнения для КФС проявляется через влияние распределения дисперсии

$\langle c'^2 \rangle$ . На рис. 5 приведены соответствующие распределения. Если сравнить наблюдаемые зависимости на этом рисунке и на рис. 3, можно заметить, что большие значения дисперсии наблюдаются в области больших градиентов среднего поля. Особенно заметно уменьшение дисперсии из-за уменьшения градиентов при больших  $z$  и больших значениях числа Дамкёлера. Все это совершенно естественно, так как только распределение средних оказывает влияние на результаты решения уравнения для КФС через изменение источника члена в этом уравнении. Эти распределения являются исходными при восстановлении ПРВ.

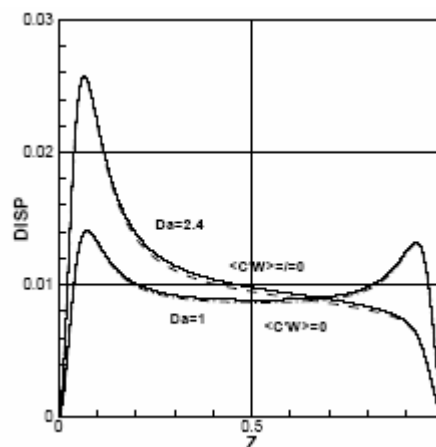


Рис. 5. Распределение интенсивности пульсаций скаляра при различных числах Дамкёлера с учетом (сплошные линии) и без учета слагаемых с  $\langle c'W(c) \rangle$  в уравнении для корреляционной функции

Возможность вычисления скалярной диссипации является центральным моментом всей нашей работы по моделированию турбулентных реагирующих потоков. Распределения диссипации являются необходимыми при интегрировании уравнения для ПРВ. На рис. 6 приведены распределения скалярной диссипации при различных числах Дамкёлера. Особенностью рассматриваемого случая является сосредоточение диссипации в пристеночных областях, где градиенты средних преобладают.

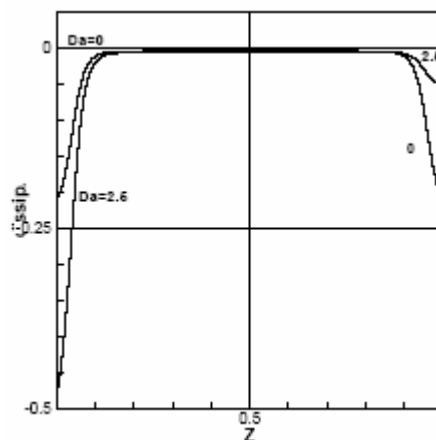


Рис. 6. Распределение скалярной диссипации при различных числах Дамкёлера

#### 4.2. Изменение скалярной диссипации при учете непосредственного влияния химических процессов на корреляционную функцию скаляра

Для выяснения степени непосредственного влияния химических процессов на структуру скалярного поля были проведены расчеты с использованием уравнения (9). На рис. 5 приведены распределения интенсивности пульсаций, полученные при учете и пренебрежении теми слагаемыми в уравнении для КФС, 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 узкими зонами больших градиентов средних значений. В этих зонах источниковые члены в уравнении для КФС очень велики и их влияние на всю область решения маскирует непосредственное влияние химических процессов.

#### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Ранее [5] 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 КФС дополнено алгоритмом восстановления ПРВ. Это позволило при расчете средних параметров, зависящих от скорости химических превращений, отказаться от моделей микросмешения. Удается описать влияние интенсивности химических процессов (число Дамкёлера) на распределения среднего значения скаляра, дисперсии, скалярной диссипации. Особое внимание уделено уточнению уравнения для КФС с целью учета непосредственного влияния химических процессов на КФС.

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

#### СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

$B_{rr}(x)$  – корреляционная функция продольной компоненты турбулентной скорости

$c(x_{12}, t)$  – мгновенное значение скаляра

$C(x_{12})$  – среднее значение скаляра

$c'(x_{12}, t) = c(x_{12}, t) - C(x_{12})$  – отклонение мгновенного значения скаляра от среднего

$D(x_{12}, t)$  – коэффициент турбулентной диффузии

$\text{div}_{r_{i\eta}}(u)$  – дивергенция вектора аргумента по переменной, обозначенной индексом

$\text{disp}(z)$  – дисперсия распределения  $P(z, c)$

$Dm$  – молекулярный коэффициент диффузии

$D_r(x_{12}, t)$  – коэффициент "вихревой" диффузии

$F(z, c) = \int_c^{+\infty} P(z, c') dc'$  – функция распределения вероятности для значений скаляра в точке  $z$

$P(z, c)$  – плотность распределения вероятности для значений скаляра в точке  $z$

$r = x_1 - x_2$  – вектор, связывающий точки  $x_1$  и  $x_2$

$r, \theta$  – сферические переменные

$R(x_1, x_2, t)$  – корреляционная функция скалярного поля

$t$  – время

$U_{12}$  – средняя скорость в соответствующих точках

$W(c)$  – выражение для скорости химической реакции

$\langle W(c) \rangle$  – средняя скорость химической реакции

$W'$  – отклонение скорости химической реакции от средней

$x_{12}$  – пространственная координата рассматриваемых точек

$z|\eta = (x_1 + x_2)/2$  – положение центра отрезка, связывающего точки  $x_1$  и  $x_2$

$\lambda$  – микромасштаб турбулентного поля скорости

$\langle \dots \rangle$  – усреднение по реализациям или по времени для стационарных в среднем величин.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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. 26с.
2. 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.
3. 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. V. 65. \_1. 1989. pp. 1–18.
4. Tsai K., O'Brien E. E. A hybrid one- and twopoint approach for isothermal reacting flows in homogeneous turbulence //Phys. Fluids V. A5. \_11ю 1993. pp. 2901–2910.
5. Красицкий В.П., Фрост В.А. Молекулярный перенос в турбулентных потоках. //Изв. РАН, Механика жидкости и газа. \_2. 2007. С. 46–58
6. Красицкий В.П., Фрост В.А. Уравнение для корреляционной функции и плотность распределения вероятности скаляра в турбулентных реагирующих потоках. Препринт \_833. М.: ИПМех РАН, 2007. 20 с. 7.
7. Фрост В.А. Математическая модель турбулентного горения. //Труды 3-го Всесоюзного совещания по теории горения. Т.1. М.: Наука. 1960, С. 122-125.
8. Krasitskii V.P. Approximate calculation of lagrangian statistical functions of fluid particlepairs in isotropic turbulence//Boundary-Layer Meteorology. V. 54. 1991. pp. 231-247.
9. Фрост В.А. Ускорение процессов молекулярного переноса в турбулентных потоках. // Доклады АН СССР. Т. 176. \_4. 1967. С. 794-796.
10. 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. V. 71(5). 1998. pp. 827–849.
11. 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. Russia, M.: TORUS PRESS. 2004. pp. 57–63.