УДК 536.46→662.61

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

В. Я. БАСЕВИЧ, С. М. КОГАРКО

МЕТОД РАСЧЕТА МГНОВЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИ ТУРБУЛЕНТНОМ СМЕШЕНИИ

(Представлено академиком В. Н. Кондратьевым 10 VI 1971)

В задачах о горении, где важную роль играет турбулентное перемешивание, необходимо знать мгновенные характеристики потока, так как в этом случае осредненные характеристики потока (в частности, средняя температура) могут отличаться от мгновенных действительных в десятки и более раз и поэтому не применимы для вычисления скорости химической реакции. То же самое относится и к концептрациям. Смешение является простейшим случаем, на примере которого можно выяснить возможность расчета мгновенных характеристик потока (например, мгновенных концентраций).

1. Двухмерная задача. Рассмотрим стационарный процесс изотермического смешения двух веществ, вытекающих с одинаковой скоростью из коаксиально расположенных трубопроводов (рис. 1). При пренебрежении осевой диффузией в случае ламинарного течения процесс описывается уравнением (1)

$$u \frac{\partial n_i}{\partial x} = D\left(\frac{\partial^2 n_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n_i}{\partial z^2}\right),\tag{1}$$

где u — скорость течения, постоянная по сечению и длине, D — коэффициент молекулярной диффузии, n_i — концентрация вещества i (i = 1, 2), x, y, z — координаты. При замене

$$\partial x / u = \partial t \tag{2}$$

уравнение (1) можно записать в эквивалентной форме:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 n_i}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 n_i}{\partial z^2}\right). \tag{3}$$

Для описания смешения при турбулентном течении, имея в виду под n_i среднее значение концентраций, обычно заменяют D на коэффициент турбулентной диффузии D_{τ} (2):

$$\frac{\partial \bar{n}_{i}}{\partial t} = D_{T} \left(\frac{\partial^{2} \bar{n}_{i}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} \bar{n}_{i}}{\partial z^{2}} \right). \tag{4}$$

Таким путем можно получить распределение средних концентраций вещества $\bar{n}_i(y,z,t)$.

Для вычисления мгновенных концентраций, используя предположение о «двумерной» турбулентности, уравнение (3) следует дополнить конвективными членами, составленными для пульсационных скоростей.

тивными членами, составленными для пульсационных скоростей.
$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 n_i}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 n_i}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial v n_i}{\partial y} - \frac{\partial w n_i}{\partial z} , \tag{5}$$

где v, w — проекции мгновенной пульсационной скорости на осях y и z. Для того чтобы использовать в расчетах уравнение (5), необходимо иметь значение v(y,z,t) и w(y,z,t). При изотропной турбулентности эти значения v и w могут быть приближенно вычислены, исходя из известных пространственных и временных корреляций. Задача в такой постановке должна решаться численно на $9\mathrm{BM}$.

2. Одномерная задача. Объем вычислений при решении задачи о горении в турбулентном потоке с учетом кинетической схемы реакций даже для простейшего горючего (такого, как водород) в случае двумер-

ного приближения был бы чрезвычайно велик. При одномерной постановке задачи, как это обычно делается в теории горения, объем вычислений резко сокращается.

Однако предположение об «одномерной турбулентности» противоречит уравнению неразрывности для несжимаемой жидкости

$$\partial v / \partial y = 0 \tag{6}$$

и может быть оправдано лишь значительным упрощением вычислений.

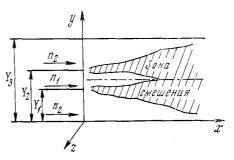


Рис. 1. Схема течения

Поэтому целесообразно выяснить качественную картипу, которую дает решение задачи в таком приближении. По аналогии с (5) однотипное с ним уравнение, не учитывающее перенос и градиенты концентраций по оси z, имеет вид:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_i}{\partial y^2} - \frac{\partial v n_i}{\partial y} . \tag{7}$$

В соответствии с (4) при такой постановке задачи средние концентрации должны описываться уравнением

$$\partial \widetilde{n}_i / \partial t = D_{\tau} (\partial^2 \overline{n}_i / \partial y^2).$$
 (8)

Ниже излагается метод и результаты численного решения уравнения (7) применительно к рис. 1

Были приняты следующие начальные и граничные условия:

при
$$t=0$$
 $n_1=0$ для y от 0 до Y_1 , от Y_2 до Y_3 ;
$$n_1=n_1, \,_0$$
 для y от Y_1 до Y_2 ;
$$\text{при }y=0, \,\,Y_3 \quad \partial n_i/\partial y=0. \tag{9}$$

Для задания $v\left(y,t
ight)$ воспользуемся аппроксимацией коэффициента пространственной $R_y = \exp(-y/L)$ и временной корреляции $=\exp\left(-t/T
ight)$, где L- масштаб Эйлера, T- временной масштаб Лагранжа. Используя предположение об изотропности, однородности и квазистационарности турбулентного движения при значении среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{v} для точки y=0 в момент времени t=0, можскорости v(0, 0), $\mathbf{p}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \, \tilde{v}} \times$ но разыграть значение мгновенной пульсационной нормальному распределению Гаусса \times exp $(-v^2/2\bar{v}^2)$. Тогда для соседней точки, соответствующей одному расчетному шагу по координате Δy , вычисляется коэффициент корреляции $R_{\Delta y} = \exp\left(-\Delta y/L\right)$. Далее разыгрывается значение пульсационной скорости $v(0, \Delta y)$ в соответствии с нормальным распределением Гаусса, причем за среднюю величину пульсационной скорости берется значение $R_{\Delta y} v (0,0)$, а за величину дисперсии в соответствии с законом нормальной корреляции — $\bar{v}^2(1-R_{\Delta y}^2)$.

В точке y=0 в следующий момент времени Δt разыгрывается значение пульсационной скорости для коэффициента корреляции $R_{\Delta t}=\exp\left(-\Delta t/T\right)$: со средней $R_{\Delta t}v\left(0,0\right)$ и дисперсией $\overline{v}^{2}(1-R_{\Delta t}^{2})$. Пульсационная скорость $v\left(\Delta t,\Delta y\right)$ определяется, в соответствии с коэффициентом корреляции $R_{\Delta t}R_{\Delta y}$, дисперсией $\overline{v}^{2}(1-R_{\Delta t}^{2})$, средней $R_{\Delta y}v\left(0,\Delta y\right)+R_{\Delta t}v\left(0,\Delta t\right)+R_{\Delta y}R_{\Delta t}v\left(0,0\right)$ и т. д.

Как известно, аппроксимация коэффициентов корреляции экспонентной занижает их значение при малых Δy и Δt . Частично это искажение устранялось тем, что производилось некоторое сглаживание: в расчет вводились

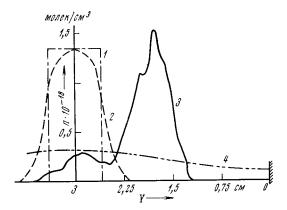


Рис. 2. Профили концентраций для t=8 мсек.: I- начальный (t=0), 2- расчет для ламинарного потока, 3- расчет мгновенных концентраций для турбулентного потока, 4- расчет средних концентраций для турбулентного потока

не первоначально полученные значения v(y,t), а величина $^{1}/_{2}(y,t)+^{1}/_{4}v(y+\Delta y,t)+^{1}/_{4}v(y-\Delta y,t)$. Расчет смешения велся для следующих условий. По центральному каналу подается водород, по боковым — воздух; давление 0,5 ат; температура 293° K; $Y_{1}=Y_{3}-Y_{2}=2,6$ см, $Y_{2}-Y_{1}=0,8$ см; $\bar{v}=1,3$ м/сек, L=1,5 см, $T=10^{-2}$ сек., $D_{\tau} \approx \bar{v}^{2}T=164$ см²/сек, D=1,6 см²/сек.

Полученное решение уравнения (7) с граничными условиями (9) иллюстрируется (рис. 2) распределением n при t=8 мсек. для ламинарно-

го ($v \equiv 0$, кривая 2) и турбулентного (кривая 3) потоков. В обоих случаях профиль I дает начальное распределение n при t = 0. Профиль 4 представляет средние концентрации \bar{n} , вычисленные по (8). На рис. 3 представлены значения n на оси центрального канала в зависимости от времени.

Как можно видеть, наличие в уравнении (7) конвективного члена, соответствующего переносу мгновенной пульсационной скоростью потока, существенно увеличивает скорость смешения и, по-видимому, качественно правильно описывает характер распределения мгновенных

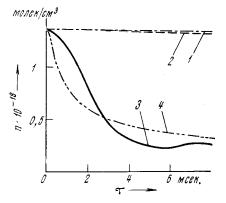


Рис. 3. Концентрации на оси потока. Обозначения см. рис. 2

концентраций (вариации по t, асимметрия по y, что соответствует индивидуальной реализации v(t, y)). Как оказывается, мгновенные концентрации много больше средних, однако максимальные величины n, большие начальных, следует приписать ошибке, вносимой невыполнением (6).

По аналогии между распространением вещества и тепла при наличии в начальный момент времени температурной неоднородности, последняя, так же как и неоднородность по составу, сохранится в течение длительного времени, и мгновенные температуры будут резко отличаться от средних. Это важное для кинетики процессов горения обстоятельство. Можно предполагать, что вычисления по (5) дадут более точную количественную картину.

Авторы благодарны Е. И. Динабургу и С. Л. Каменомостской за программирование и расчеты на ЭВМ.

Институт химической физики Академии наук СССР Москва Поступило 31 V 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ В. Н. Кондратьев, Кинетика химических газовых реакций, Изд. АН СССР, 1958. ² Е. N. Frenkiel, Adv. Appl. Mech., 3, 61, 563 (1953).