

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 65 за 2015 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Колесниченко А.В.

Модификация метода инвариантного моделирования Дональдсона для турбулентных сдвиговых течений реагирующих газовых смесей

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. Модификация метода инвариантного моделирования Дональдсона для турбулентных сдвиговых течений реагирующих газовых смесей // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 65. 43 с. URL: <u>http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-65</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В. Келдыша Российской академии наук

А.В. Колесниченко

Модификация метода инвариантного моделирования Дональдсона для турбулентных сдвиговых течений реагирующих газовых смесей

Колесниченко А.В.

Модификация метода инвариантного моделирования Дональдсона для турбулентных сдвиговых течений реагирующих газовых смесей.

Дано обобщение метода инвариантного моделирования Дональдсона на развитые турбулентные течения химически активных газовых сред с переменной плотностью и переменными теплофизическими свойствами. Предложена оригинальная процедура осреднения скоростей химических реакций любого порядка, выведены дифференциальные уравнения переноса для вторых корреляционных моментов турбулентных пульсаций скорости, температуры и концентраций компонентов смеси, предложена схема полуэмпирического моделирования корреляций высокого порядка, входящих в эти уравнения. Особое внимание уделено проблеме взаимовлияния химической кинетики и процессов турбулентного тепло- и массопереноса, а также разработке полуэмпирического метода расчёта коэффициентов (тензоров) турбулентного обмена, основанного на использовании локально равновесного приближения для уравнений переноса вторых корреляционных моментов.

Ключевые слова: метод инвариантного моделирования, развитая турбулентность, химически реагирующие газы.

Aleksander Vladimirovich Kolesnichenko

Modification of method of invariant modelling of Donaldson for turbulent shear flows of reacting gas mixes.

Generalization of Donaldson's invariant modelling method on the developed turbulent flows of chemically active gas medium with variable density and variable thermal physic properties is given. Procedure of averaging of speeds of chemical reactions any order is offered, the differential transport equations for the second correlation moments of turbulent pulsations of velocity, temperature and concentration of mix components are deduced, the scheme of semiempirical modelling of correlations of the high order entering into these equations is planned. The special attention is given to a problem of interference of chemical kinetics and processes of turbulent heat-and mass transfer, and also working out of semiempirical method of the turbulent exchange factors (tensors) calculation based on use of locally equilibrium approach for transport equations of second correlation moments.

Key words: method of invariant modelling, developed turbulence, chemically reacting gases.

Введение

Имеющиеся в настоящее время мощные вычислительные и экспериментальные средства позволяют решать любую хорошо и правильно поставленную конкретную задачу естествознания. В связи с этим в последнее время в механике сплошных сред, наряду с вопросами постановки и решения многих типичных или оригинальных задач в рамках традиционных моделей среды (идеальная или вязкая жидкость, упругое тело и т.п.), большое значение приобрели проблемы конструирования новых моделей среды, учитывающих разнообразные физико-химические свойства материальных континуумов и их взаимодействие при определенных условиях. Как правило, новые модели сплошной среды и их описание, по сравнению с уже известными моделями, связаны с усложнениями, вытекающими из существа рассматриваемой задачи, и учитывают углубление связей и взаимодействий механики с физикой, химией, астро- и геофизикой и др. [35].

В частности, для адекватного описания турбулентных движений многокомпонентных реагирующих газов требуется построение новых феноменологических моделей турбулентной среды, введение новых гидродинамических параметров состояния (как правило, средних, плавно меняющихся по времени и по объёму) в дополнение к нерегулярным «истинным» характеристикам, нахождение для их определения новых универсальных и частных соотношений, не зависимых от уже известных соотношений типа законов сохранения массы, энергии, количества движения и т.п. Повышенный интерес к данной проблеме определяется как её теоретической значимостью, так и весьма широким распространением турбулентного тепло- и массообмена газовых смесей в различных технических устройствах и в природе, в частности, в астрофизических аккреционных дисках и в атмосферах планет [18,19,24,26,28]. Актуальные проблемы экологии, включающие проблемы распространения в земной атмосфере таких загрязнителей антропогенного происхождения, как избыточное тепло или химически активные примеси, также обусловили рост интереса к изучению процессов турбулентного переноса в многокомпонентной реагирующей среде [15]. В связи с этим в России и за рубежом в последние годы интенсивно развиваются новые направления исследований химической турбулентности, базирующиеся на построении макроскопических и стохастических моделей и их решении с использованием численных методов (см., например, [7,9,10,13,15,24-27,36-39]).

Влияние на турбулентность многокомпонентной смеси различных специфических факторов (сжимаемость и переменность теплофизических свойств среды, наличие химических реакций, особенность воздействия массовых сил на отдельные компоненты и т.п.), приводящих к появлению дополнительных эффектов и усложняющих процессы турбулентного переноса, не позволяет в общем случае использовать при математическом описании подобных сред теоретические результаты, полученные в рамках классической теории турбулентности, развитой для однородной несжимаемой жидкости (см., например, [6,7,36, 37]). Очевидно, что необходимы новые математические модели, адекватно описывающие процессы переноса и химической кинетики в турбулентном газовом континууме. В силу сложности физико-химической картины турбулентного движения в такой среде, теоретические подходы к решению данной проблемы в значительной мере всё -ещё остаются эвристическими [7,10,13,15,18-27]. При этом проблема замыкания осреднённых гидродинамических уравнений смеси дополнительно усложняется из-за необходимости осреднения сильно нелинейных «источниковых членов» производства вещества в химических реакциях, имеющих экспоненциальный характер, а также из-за необходимости моделирования большого числа различных одноточечных корреляционных моментов второго порядка для пульсирующих в потоке скорости, температуры и концентраций химических компонентов. Другими словами, надлежит ещё учитывать и взаимовлияние турбулентности и кинетики химических реакций, протекающих в газовой среде.

В данной работе рассмотрен современный подход к полуэмпирическому моделированию развитых турбулентных течений многокомпонентных химически активных газов, применительно к специфике моделирования сдвиговых потоков. Обсуждается модификация метода инвариантного моделирования Дональдсона [8-10,25] на случай течений реагирующих газовых смесей¹⁾. Основное внимание уделено проблеме описания взаимовлияния химической кинетики и процессов турбулентного переноса, а также развитию полуэмпирического метода расчёта тензоров турбулентного обмена в стратифицированных средах, основанного на использовании дифференциальных уравнений переноса для вторых моментов пульсирующих термогидродинамических параметров смеси. Предложена оригинальная процедура осреднения скоростей химических реакций любого порядка, выведены дифференциальные уравнения переноса, описывающие эволюцию одноточечных вторых моментов турбулентных пульсаций скорости, температуры и концентраций отдельных компонентов смеси и намечена схема полуэмпирического моделирования корреляций высоких порядков, входящих в эти уравнения. Всё это позволяет обобщить метод инвариантного моделирования Дональдсона, развитый в литературе для турбулентности однородной жидкости [8-10,36], на многокомпонентные химически активные среды с переменной плотностью и переменными теплофизическими свойствами.

Предложенная в работе модель *реагирующей турбулентности* второго порядка замыкания может быть использована при расчётах сложных течений многокомпонентных химически активных газов, когда существенны конвективный и «диффузионный» перенос турбулентности (важна предыстория пото-

¹) Данный подход называется инвариантным моделированием в том смысле, что искомая модель, оставаясь полуэмпирической, не должна иметь изменяемых эмпирических констант, значения которых необходимо подбирать заново для каждого нового течения.

ка), т.е. при расчётах течений, для которых оказываются неадекватными более простые классические модели, основанные на *градиентной гипотезе* замыкания. Одновременно, полученными здесь дифференциальными уравнениями для моментов, можно воспользоваться для нахождения коэффициентов (тензоров) турбулентного обмена в стратифицированных течениях многокомпонентных смесей с поперечным сдвигом, в том числе применительно к специфике моделирования атмосфер планет [22,27].

1. Осреднённые гидродинамические уравнения многокомпонентной газовой смеси

Главной задачей гидродинамики турбулизованных смесей является расчёт осреднённых полей и временных вариаций скорости, температуры и концентраций отдельных химических компонентов. В классических теориях турбулентности однородных несжимаемых жидкостей, разработанных в настоящее время достаточно полно (см., например, [6]), обычно для всех без исключения гидродинамических параметров осреднения вводятся некоторым одинаковым способом и, как правило, без весовых коэффициентов. Вместе с тем для турбулентных многокомпонентных континуумов с переменной массовой плотностью ρ подобное одинаковое для всех переменных осреднение приводит не только к громоздким уравнениям осреднённого движения, но и к затруднениям физической интерпретации каждого отдельного члена таких уравнений. Поэтому для них удобно использовать, наряду с «обычным» средним $\overline{\mathcal{A}}$ (например, по ансамблю возможных реализаций) значением некоторой пульсирующей величины \mathcal{A} , так называемое соотношением

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \overline{\rho \mathcal{A}} / \overline{\rho} = \lim_{M \to \infty} \frac{1}{M} \sum_{p=1}^{M} \rho^{[p]} \mathcal{A}^{[p]} / \lim_{M \to \infty} \frac{1}{M} \sum_{p=1}^{M} \rho^{[p]}.$$
(1)

Здесь суммирование ведётся по набору возможных реализаций $[p], 1 \le [p] \le M$; $\mathcal{A} = \langle \mathcal{A} \rangle + \mathcal{A}'', \quad (\overline{\mathcal{A}''} \ne 0, \overline{\rho \mathcal{A}''} = 0), \quad \mathcal{A}'' - \text{соответствующая турбулентная пуль$ сация. Свойства средневзвешенного осреднения физических величин, которыелегко выводятся из определения (1), а также из известных постулатов Рейнольдса, можно найти, например, в монографиях [6,18].

Система точных уравнений многокомпонентной гидродинамики масштаба среднего движения, полученная путём *осреднения по Рейнольдсу* (с использованием средневзвешенного осреднения для некоторых параметров) справедливых в микромасштабе уравнений сохранения и уравнения состояния смеси, имеет следующий вид [27]:

$$\overline{\rho} \frac{D\langle 1/\overline{\rho}\rangle}{Dt} = \partial_j \langle u_j \rangle, \qquad (2)$$

$$\overline{\rho} \frac{D\langle z_{\alpha} \rangle}{Dt} = -\partial_j \left(\overline{J}_{\alpha j} + J_{\alpha j}^T \right) + \sum_{s=1}^r v_{\alpha s} \overline{\xi}_s, \quad (\alpha = 1, 2, ..., N-1),$$
(3)

$$\overline{\rho}\frac{D\langle u_j\rangle}{Dt} = -\partial_j \overline{p} + \partial_i \left(\overline{\pi}_{ij} + R_{ij}\right) + \overline{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \langle z_\alpha \rangle F_{\alpha j}, \qquad (4)$$

$$\overline{\rho}\langle c_{p}\rangle \frac{D\langle T\rangle}{Dt} = -\partial_{j} \left\{ \overline{q}_{j} + q_{j}^{T} - \overline{p'u_{j}''} - \sum_{\alpha=1}^{N} \langle h_{\alpha}\rangle (\overline{J}_{\alpha j} + J_{\alpha j}^{T}) \right\} + \frac{D\overline{p}}{Dt} + \overline{\pi}_{ij}\partial_{j}\langle u_{i}\rangle - \overline{p'\partial_{j}u_{j}''} - \sum_{\alpha=1}^{N} c_{p\alpha}(J_{\alpha j} + J_{\alpha j}^{T})\partial_{j}\langle T\rangle - \sum_{s=1}^{r} \langle Q_{s}\rangle \overline{\xi}_{s} + J_{(v)j}^{T}\partial_{j}\overline{p} + \sum_{\alpha=1}^{N} \overline{J}_{\alpha j}F_{\alpha j} + \overline{\rho}\langle \varepsilon_{b}\rangle,$$
(5)

$$\overline{p} = \overline{\rho} \boldsymbol{k} \langle T \rangle \sum_{\alpha=1}^{N} \langle z_{\alpha} \rangle \Big[1 + \langle z_{\alpha} T'' \rangle / \langle z_{\alpha} \rangle \langle T \rangle \Big].$$
(6)

Здесь $D(..)/Dt = \partial_t(..) + \langle u_j \rangle \partial_j(..)$ – субстанциональная производная для осреднённого движения; $Q_s(T) = \sum_{\alpha} h_{\alpha} v_{\alpha s}$ – теплота реакции s, равная разности между суммой произведений парциальных энтальпий h_{α} продуктов реакции на соответствующие стехиометрические коэффициенты $\eta_{\alpha s}$ и аналогичной суммой для реагентов ($v_{\alpha s} = \eta_{\alpha s} - \beta_{\alpha s}$); $h_{\alpha}(T) = \int_{0}^{T} c_{p\alpha} dT + h_{\alpha}^{0}$, $c_{p\alpha}$, h_{α}^{0} – соответственно парциальная (на одну частицу) энтальпия, парциальная теплоёмкость и теплота образования компоненты α ; $c_p = \sum_{\alpha} c_{p\alpha} z_{\alpha}$ – удельная теплоёмкость смеси; k – постоянная Больцмана.

Осреднённые физические параметры турбулизованного континуума (такие как $\langle u_j \rangle$, $\langle h \rangle$, $\langle z_{\alpha} \rangle \equiv \overline{n}_{\alpha} / \overline{\rho}$ и т.п.) вводятся здесь как средневзвешенные значения соответствующих микрохарактеристик, однако давление p, массовая плотность ρ , молекулярные потоки диффузии $J_{\alpha j}$ ($\alpha = 1, 2, ..., N$) и тепла q_j , молекулярный тензор вязких напряжений π_{ij} , а также скорости химических реакций ξ_s (s = 1, 2, ..., r) удобно осреднять без использования весового коэффициента [18].

Осреднённая система уравнений реагирующей газовой смеси (2)-(6) оказывается незамкнутой, поскольку содержит, наряду со средними значениями термогидродинамических параметров $\bar{\rho}$, \bar{p} , $\langle T \rangle$, $\langle u_j \rangle$, $\langle z_{\alpha} \rangle$ и их производными, новые неизвестные величины (одноточечные парные корреляции), возни-

кающие вследствие нелинейности исходных гидродинамических уравнений для мгновенных движений. Из системы (2)-(6) видно, что осреднённое движение смеси характеризуется, во-первых, различными осреднёнными молекулярными потоками $\bar{q}_i, \bar{\pi}_{ij}, \bar{J}_{\alpha j}$ (определяющие соотношения для которых могут быть получены методами осреднённой неравновесной термодинамики [17]), во-вторых, смешанными одноточечными корреляционными моментами второго порядка, представляющими собой перенос термогидродинамических характеристик среды турбулентными пульсациями. Это, прежде всего, турбулентный поток $J_{(v)j}^T \equiv \overline{\rho} \langle v'' u_j'' \rangle = -\overline{\rho' u_j''} / \overline{\rho}$ удельного объёма $v = 1/\rho$, потоки турбулентной диффузии $J_{\alpha j}^{T} \equiv \overline{\rho} \langle z_{\alpha}'' u_{j}'' \rangle$ частиц сорта α ($\alpha = 1, 2, ..., N$), турбулентный поток тепла $q_j^T \equiv \overline{\rho} \langle h'' u_j \rangle \cong \overline{\rho} \langle c_p \rangle \langle T'' u_j'' \rangle + \sum_{\alpha=1}^N \langle h_\alpha \rangle J_{\alpha j}^T$, тензор турбулентных напряжений Рейнольдса $R_{ij} = -\overline{\rho} \langle u_i'' u_j'' \rangle$, а также большое число парных корреляций типа $\langle z_{\alpha}'' T'' \rangle$ и $\langle z''_{\alpha} z''_{\beta} \rangle$ ($\alpha, \beta=1,2,...,N$), которые появляются в диффузионных уравнениях (3) для удельных концентраций $z_{\alpha}(=n_{\alpha}/\rho)$ при осреднении «источниковых членов» и явно входят в осреднённое уравнение состояния (6) для давления р. Таким образом, для замыкания системы уравнений (2)-(6) требуется определение всех перечисленных моментов. Кроме этого, для её полного замыкания необходимо знание статистических корреляционных членов, включающих пульсации $(p'\partial_j u''_j$ и $\overline{\partial_j (p'u''_j)})$, а также скорости вязкой диссипации давления $\langle \varepsilon_b \rangle \equiv \tau_{ij} \partial_j u''_i / \overline{\rho}$ турбулентной кинетической энергии в тепло под действием молекулярной вязкости.

В моделях турбулентности однородной несжимаемой жидкости наиболее широкое распространение получили простейшие схемы замыкания, основанные на *градиентной гипотезе Буссинеска*, позволяющие линейно связать турбулентные потоки q_j^T , R_{ij} , $J_{\alpha j}^T$ с градиентами осреднённых значений соответствующих характеристик среды $\langle h \rangle$, $\langle u_j \rangle$, $\langle z_{\alpha} \rangle$ через некоторые локальные коэффициенты пропорциональности – коэффициенты турбулентного обмена (переноса). Для сжимаемой многокомпонентной смеси градиентные определяющие соотношения в наиболее общем виде были получены автором данной статьи методами необратимой термодинамики в работе [20]. Использование градиентных замыкающих соотношений для турбулентных потоков позволяет привести гидродинамические уравнения масштаба среднего движения к форме, которую имеют аналогичные уравнения для ламинарного течения смеси. Это позволяет совместно решать сопряжённые задачи как для вязкого ламинарного, так и для турбулентного режимов течения (например, в области турбулентного пограничного слоя на плоской пластинке). Следует, однако, подчеркнуть, что градиентная гипотеза не решает проблемы замыкания, если относительно коэффициентов турбулентного обмена не приняты некоторые предположения и не указаны способы их расчёта. Кроме этого, подобный подход полностью не оправдан в тех важных случаях, когда существенно влияние конвективного и диффузионного переносов энергии турбулентности (т.е. когда существенна предыстория процесса турбулизации течения) на характеристики потока в отдельной точке; при этом, как отметил В.М. Иевлев [13], локальные коэффициенты турбулентного обмена вообще нельзя ввести адекватным образом.

Вместе с тем, следуя методу Фридмана-Келлера [14], развитому для турбулентной однородной жидкости, можно получить дифференциальные уравнения и для химически активной смеси [18], описывающие пространственновременную эволюцию вторых корреляционных моментов q_j^T , R_{ij} , $J_{\alpha j}^T$ и т.п. через моменты третьего порядка, для нахождения которых, однако, снова потребуются дополнительные эволюционные уравнения, содержащие, в свою очередь, корреляции более высоких порядков. Ясно, что проблема построения модели многокомпонентной турбулентности заключается тогда в установлении какой-либо гипотезы замыкания, с помощью которой иерархия подобных уравнений и неизвестных обрывается введением алгебраических связей между моментами порядка (m+1) и m. Одно из возможных предположений, которое известно как гипотеза Миллионщикова [31], состоит в том, что четвёртые моменты (например, для пульсаций скорости u_j^m) так связаны со вторыми моментами, как если бы пульсации u_j^m были гауссовскими случайными величинами. Однако у этой гипотезы нет достаточного физического обоснования, и, кроме того, она

не учитывает так называемых *условий реализуемости*, налагаемых моментами низших порядков [32]. Тем не менее, существует большое число турбулентных течений, которые могут быть изучены при помощи какой-либо ограниченной процедуры замыкания, и ключевая проблема состоит в нахождении замыканий, адекватных физической природе рассматриваемой турбулентности.

В последние несколько лет наблюдается интенсивный прогресс в развитии и применении моделей сдвиговой турбулентности второго порядка для однородной жидкости, имеющих, по мнению ряда авторов (см., например, [36-38]), оптимальный на сегодняшний день уровень сложности. В этих схемах все входящие в осреднённые гидродинамические уравнения корреляционные моменты второго порядка описываются системой дифференциальных уравнений переноса, замыкание которых также основано на использовании *градиентной гипотезы* для аппроксимации корреляционных моментов третьего и более высоких порядков. В частности, дифференциальные уравнения переноса для составляющих тензора рейнольдсовых напряжений, в которых величины R_{ij} являются

новыми зависимыми переменными системы уравнений в частных производных, принадлежат к моделям подобного типа. Получаемые из общего эволюционного уравнения для одноточечных парных моментов [см. ниже], эти уравнения являются точными, однако привлечение аппроксимационных соотношений (с эмпирическими константами связи) для определения ряда входящих в них неизвестных корреляций делает их модельными, справедливыми только для определённого класса течений. Разнообразие достаточно обоснованных гипотез замыкания, существующее в настоящее время, привело, в конечном счёте, к разработке в литературе огромного числа математических моделей подобного рода (см., например, [19,32,36-38]).

Данная работа посвящена проблеме конструирования полуэмпирических моделей турбулентности второго приближения для реагирующей смеси газов. Здесь дан вывод дифференциальных уравнений переноса для следующих одноточечных вторых моментов пульсирующих параметров состояния смеси: R_{ii} , q_i^T , $J_{\alpha j}^T$, $\langle h''^2 \rangle$, $\langle z''_{\alpha} h'' \rangle$, $\langle z''_{\alpha} z''_{\beta} \rangle$ ($\alpha, \beta = 1, 2, ..., N$). Именно эти уравнения, рассматриваемые совместно с осреднёнными уравнениями многокомпонентной гидродинамики с переменной плотностью и переменными теплофизическими свойствами, а также с уравнениями для турбулентной энергии $\langle b \rangle = \frac{1}{2} \langle u''_i u''_i \rangle$ и для масштаба турбулентности *L* (или скорости диссипации $\langle \varepsilon_b \rangle = K_{b1} \langle b \rangle^{3/2} / L$), позволяют обобщить метод инвариантного моделирования турбулентности однородной жидкости [36] на сжимаемые многокомпонентные химически активные среды. Несмотря на полуэмпирический характер этих дополнительных уравнений (в которых при аппроксимации неизвестных корреляций используются приближённые выражения, содержащие эмпирические константы), следует признать достаточную гибкость основанных на них моделей турбулентности. В частности, они позволяют учесть воздействие механизмов конвекции, диффузии, возникновения, перераспределения и диссипации перечисленных статистических характеристик турбулентного поля на пространственно-временное распределение осреднённых термогидродинамических параметров среды. С другой стороны, ими также можно воспользоваться для получения наиболее достоверных алгебраических соотношений для тензоров турбулентного обмена в течениях реагирующей смеси с поперечным сдвигом (в том числе применительно к специфике моделирования природных и космических сред).

Сделаем еще несколько вводных замечаний, касающихся отличительных особенностей метода инвариантного моделирования применительно к многокомпонентной турбулентности. Как известно, наличие градиентов плотности составляет одно из специфических свойств химически реагирующих течений, которое, как правило, не рассматривалось классическими моделями однородной турбулентности. Однако градиенты плотности, температуры и концентраций, возникающие, в частности, из-за локального тепло- и массо выделения в химических реакциях, могут сильно изменить поле гидродинамической скорости, осуществляя тем самым обратную связь химической кинетики с гидродинамикой. Одновременно и сами химические реакции в турбулизованной среде протекают иначе, чем в ламинарном потоке. Другими словами, необходимо учитывать взаимовлияние турбулентности и аррениусовой неравновесной кинетики. В случае турбулизации движения многокомпонентной смеси, в дополнение к пульсациям скорости, возникают пульсации массовой плотности, температуры и концентраций отдельных компонентов. Собственно по этой причине для замыкания турбулентно осреднённых гидродинамических уравнений смеси необходимо в общем случае привлекать к рассмотрению дополнительные дифференциальные уравнения переноса для одноточечных вторых моментов пульсирующих в потоке термогидродинамических параметров состояния.

2. Неравновесная аррениусова кинетика в турбулентном потоке

Рассмотрим теперь процедуру осреднения мгновенных значений интенсивности источника $\bar{\sigma}_{\alpha} = \sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s} \bar{\xi}_{s}$ в уравнении (3), которая позволит получить соответствующие кинетические законы в условиях турбулентного движения смеси.

В простых градиентных моделях турбулентности для реагирующей смеси обычно принимается приближение, согласно которому под величиной осреднённой скорости $\overline{\xi_s}(T, z_\alpha)$ подразумевается функция $\overline{\xi}_s \equiv \xi_s(\langle T \rangle, \langle z_\alpha \rangle)$, в которой все аргументы являются осреднёнными. В более точных моделях реагирующей турбулентности корреляционные вторые моменты, связанные с пульсациями температуры и состава, конечно, не могут быть отброшены и должны учитываться в структуре гидродинамических уравнений масштаба среднего движения. Это происходит из-за того, что осреднённые скорости химических реакций в условиях турбулентного течения не определяются, вообще говоря, аррениусовой кинетикой для осреднённых параметров, а существенным образом зависят от их пульсаций (см., например, [11,12]). Тепловая энергия, выделяемая химическими реакциями, инициирует расширение среды и, если течение существенно экзотермическое, может индуцировать дополнительную силу плавучести. Именно таким способом химическая кинетика реализует обратную связь с гидродинамикой.

Таким образом, при моделировании химической турбулентности возникают дополнительные трудности, связанные не только с нахождением явного вида источников $\bar{\sigma}_{\alpha}$ химических веществ в осреднённых уравнениях неразрывности (3) для частиц сорта α и определением точной величины тепловыделения (теплопоглощения) $\sum_{s=1}^{r} \langle Q_s \rangle \overline{\xi}_s$ в осреднённом уравнении притока тепла (5), но также и с моделированием целого ряда стохастических корреляционных членов, типа $\langle h'' z''_a \rangle$ и $\langle z''_\alpha z''_\beta \rangle$, входящих в соответствующие уравнения переноса вторых корреляционных моментов. В конечном счете, собственно с наличием

подобного рода корреляционных членов и связаны эффекты взаимодействия химической кинетики и различных процессов переноса в турбулентной многокомпонентной среде.

Процедура осреднения величин $\overline{\xi_s(T,z_{\alpha})}$ не тривиальна и требует специального рассмотрения. Осреднённая скорость химической реакции в условиях турбулентного течения не определяется, вообще говоря, аррениусовой кинетикой для осреднённых параметров, а существенным образом зависит от их пульсаций [24]. Трудности осреднения обусловлены тем, что аналитические выражения, связывающие мгновенные скорости реакций с пульсирующими характеристиками течения (такими как плотность, температура и концентрации компонентов), всегда существенно нелинейны, причём степень усложнения, очевидно, зависит от суммарного порядка химической реакции, а также от наличия нелинейной зависимости константы скорости реакции от температуры. Этот существенный аспект теории многокомпонентной турбулентности до настоящего времени остаётся не разработанным в литературе для химических реакций любого порядка.

Элементы неравновесной аррениусовой кинетики. Получим выражение для среднего значения скорости $\overline{\xi}_s$ гомогенной химической реакции *s* в условиях турбулентного течения. Но сначала рассмотрим некоторые, необходимые для дальнейшего, сведения из формальной теории кинетики химических реакций. Результирующая скорость *s*-ой реакции

$$\beta_{1s} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} + \beta_{2s} \begin{bmatrix} 2 \end{bmatrix} + \dots \Leftrightarrow \prod_{r_s} \eta_{1s} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} + \eta_{2s} \begin{bmatrix} 2 \end{bmatrix} + \dots \qquad (s = 1, 2, \dots, r)$$
(7)

для идеальных термодинамических смесей определяется через параметры скорости прямой реакции ω_{fs} и константу равновесия \mathcal{K}_s формулой [34]

$$\xi_{s} = \mathcal{K}_{fs} \prod_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha}^{\beta_{\alpha s}} \left\{ 1 - \frac{1}{\mathcal{K}_{s}} \prod_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha}^{\nu_{\alpha s}} \right\} = \omega_{fs} \left[1 - \exp(-A_{s} / \mathbf{k}T) \right].$$
(8)

В (7) и (8) приняты следующие обозначения: $\beta_{\alpha s}$, $\eta_{\alpha s}$ – стехиометрические коэффициенты компоненты α по отношению к *s*-й химической реакции, $[\alpha]$ – химические символы реагирующих веществ, \mathcal{K}_{fs} , \mathcal{K}_{rs} – константы скоростей, соответственно, для прямой и обратной реакции, $\mathcal{K}_{s} = \mathcal{K}_{fs} / \mathcal{K}_{rs}$, $\nu_{\alpha s} = \eta_{\alpha s} - \beta_{\alpha s}$,

 $\omega_{fs} = \mathcal{K}_{fs} \prod_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha}^{\beta_{\alpha s}}$ и $A_s = -\sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha s} \mu_{\alpha}$ – скорость и химическое сродство *s*-й реакции, соответственно; знак \Leftrightarrow означает, что реакция может протекать в обоих

направлениях. Суммарный порядок прямой реакции ω_{fs} определяется как $\Delta\beta_s = \sum_{\alpha} \beta_{\alpha s}$.

В приближении аррениусовой кинетики константа скорости
$$\mathcal{K}_{fs}$$
 аппрок-
симируется выражением $\mathcal{K}_{fs} = \mathcal{K}_{fs}^0 T^{a_{fs}} \exp(-E_{fs} / kT)$, в котором через \mathcal{K}_{fs}^0 и a_{fs}
обозначены, соответственно, постоянная частотного фактора (предэкспонент) и
температурный показатель частотного фактора химической реакции, а через
 E_{fs} – энергия активации. Рассматривая далее идеальные многокомпонентные
системы, возьмём химический потенциал α -компоненты μ_{α} в следующем об-
щем виде [34]

$$\mu_{\alpha} = \mu_{\alpha}^{0}(T, p) + kT \ln(x_{\alpha}), \quad (\alpha = 1, 2, ..., N),$$
(9)

где

$$\mu_{\alpha}^{0}(T,p) = \mathbf{k}T \ln p + h_{\alpha}^{0} - Tc_{p\alpha}^{0} \ln T - T\int_{0}^{T} \frac{dT}{T} \int_{0}^{T} c_{p\alpha}^{\bullet}(T) dT - \mathbf{k}T\gamma_{\alpha}$$
(10)

– химический потенциал чистой компоненты α при данных температуре T и давлении p смеси, γ_{α} – химическая постоянная частиц α -го сорта, $c_{p\alpha}^{0}$, $c_{p\alpha}^{\bullet}(T)$ – соответственно, поступательная и колебательная составляющие теплоёмкости $c_{p\alpha} \equiv (\partial h_{\alpha} / \partial T)_{p,\{n_{\beta}\}}$, h_{α}^{0} – экстраполированная на нулевую температуру парциальная энтальпия α -компоненты. Тогда константа равновесия \mathcal{K}_{s} и химическое сродство A_{s} *s*-й реакции могут быть записаны следующим образом

$$A_{s} = -\sum_{\alpha=1}^{N} \nu_{\alpha s} \mu_{\alpha} = kT \ln \left[\mathcal{K}_{s}(T) / \prod_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha}^{\nu_{\alpha s}} \right], \quad (s = 1, 2, ..., r), \tag{11}$$

$$\mathcal{K}_{s}(T) = n^{\Delta v_{s}} \exp\left[-\sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha s} \mu_{\alpha}^{0} / kT\right] = \Delta v_{s} \ln(kT) - Q_{s}^{0} / kT + \frac{1}{k} \sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha s} c_{p\alpha}^{0} \ln T + \frac{1}{k} \int_{0}^{T} \frac{dT}{T} \int_{0}^{T} \sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha s} c_{p\alpha}^{\bullet}(T) dT + \sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha s} \gamma_{\alpha},$$
(12)

где $\Delta v_s = \sum_{\alpha} v_{\alpha s}$ – алгебраическая сумма стехиометрических коэффициентов *s*й реакции, $Q_s^0 = \sum_{\alpha} v_{\alpha s} h_{\alpha}^0$ – теплота *s*-й реакции, экстраполированная к абсолютному нулю температуры. Следует заметить, что выражение в квадратных скобках в правой части (11) имеет исключительно важное значение. Поскольку при равновесии как ξ_s , так и A_s обращаются в нуль (что следует из чисто термодинамических соображений), то из соотношения (11) в этом случае следует уравнение (закон дей-

ствующих масс) $\left[\mathcal{K}_{s}(T) / \prod_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha}^{v_{\alpha s}} \right] = 1, \quad (s = 1, 2, ..., r),$ позволяющее определить

состав смеси при химическом равновесии.

Осреднение скоростей неравновесных химических реакций. Как уже было отмечено выше, осреднение результирующей мгновенной скорости ξ_s (8) (с последующим отбрасыванием членов, содержащих моменты третьего и более высоких порядков) представляет в общем случае сравнительно сложную задачу. Трудности связаны, во-первых, с сильной нелинейностью выражения (8), причём степень усложнения, очевидно, зависит от суммарного порядка реакции $\Delta\beta_s$, а также от наличия нелинейной зависимости константы скорости реакции \mathcal{K}_{fs} от температуры; во-вторых, – с необходимостью последующего моделирования большого числа корреляционных членов, содержащих турбулентные пульсации температуры и состава. Эти корреляционные члены должны определяться, вообще говоря, из соответствующих эволюционных уравнений переноса (см. ниже), содержащих, в свою очередь, корреляции высоких порядков. Замыкание подобных уравнений возможно только при дополнительных предположениях о связи корреляционных членов высоких порядков с «известными» корреляциями более низкого порядка.

Прежде чем получить осреднённое значение скорости химической реакции, записанной в самом общем виде, рассмотрим в качестве примера, показывающего сложность проблемы, типичную химическую реакцию второго порядка $[1]+[2] \xrightarrow{\kappa_f} [3]$, протекающую только в прямом направлении. Осреднённое значение скорости исчезновения компоненты [1] можно записать в виде

$$-\overline{\sigma}_{1} = \overline{\mathcal{K}_{f} n_{1} n_{2}} = \overline{\rho^{2} \mathcal{K}_{f} z_{1} z_{2}} = \langle \rho \, \mathcal{K}_{f} \rangle \overline{\rho} \langle z_{1} \rangle \langle z_{2} \rangle + \langle \rho \, \mathcal{K}_{f} \rangle \overline{\rho z_{1}'' z_{2}''} + \langle z_{1} \rangle \overline{\rho(\rho \, \mathcal{K}_{f})'' z_{2}''} + \langle z_{2} \rangle \overline{\rho(\rho \, \mathcal{K}_{f})'' z_{1}''} + \overline{\rho(\rho \, \mathcal{K}_{f})'' z_{1}'' z_{2}''} .$$

$$(*)$$

Первый член справа в этом выражении содержит произведение осреднённых величин и может быть получен путем подстановки в выражение для источника σ_1 соответствующих средних параметров течения, второй член описывает неоднородность распределения концентраций реагентов при эффективной величине константы скорости реакции (соответствующей принятому способу осреднения), остальные члены обусловлены влиянием пульсаций концентраций и константы скорости реакции. Поскольку константа скорости химической реакции зависит от температуры, то в случае неизотермического процесса пульсация константы скорости чрезвычайно сложным образом зависит от пульсаций температуры, что вносит значительные осложнения в формулу (*). Более того, даже в случае изотермического процесса в сильно разбавленных системах, когда можно с достаточной степенью точности считать постоянными плотность и коэффициент скорости реакции, выражение (*) содержит дополнительный член, приводящий к изменению скорости химической реакции по сравнению с её значением, вычисленным по средним величинам.

Перейдём теперь к рассмотрению общего случая. Будем далее считать, что соотношения (7)-(12) описывают мгновенное состояние химически активного течения турбулентной газовой смеси. Тогда физические величины T, p и n_{α} в соответствии с допущением Рейнольдса могут быть представлены в виде суммы осреднённых значений $\langle T \rangle$, $\langle p \rangle$ и $\langle n_{\alpha} \rangle$, а также их турбулентных пульсаций δT , δp , δn_{α} . Так как $\xi_s = \xi_s(T, n_{\alpha})$, то можно, ограничиваясь приближением только второго порядка малости, принять

$$\xi_s(T, n_\alpha) \approx \xi_s(\langle T \rangle, \langle n_\alpha \rangle) + \delta \xi_s + \frac{1}{2} \delta^2 \xi_s, \tag{13}$$

где

$$\delta\xi_{s} = \left(\frac{\partial\xi_{s}}{\partial T}\right)_{0} \delta T + \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{\partial\xi_{s}}{\partial n_{\alpha}}\right)_{0} \delta n_{\alpha}, \qquad (14)$$

$$\delta^{2}\xi_{s} = \left(\frac{\partial^{2}\xi_{s}}{\partial T^{2}}\right)_{0} (\delta T)^{2} + \sum_{\beta=1}^{N} \left(\frac{\partial^{2}\xi_{s}}{\partial T \partial n_{\beta}}\right)_{0} \delta T \delta n_{\beta} + \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{N} \left(\frac{\partial^{2}\xi_{s}}{\partial n_{\alpha} \partial n_{\beta}}\right)_{0} \delta n_{\alpha} \delta n_{\beta} .$$
(15)

Здесь индексом "0" отмечены значения производных, которые вычислены при $T \equiv \langle T \rangle$, $n_{\alpha} \equiv \langle n_{\alpha} \rangle$ (далее, и только в этом разделе, для упрощения записи формул, будет опущен знак осреднения для осреднённых составляющих параметров состояния турбулентной среды).

Из выражения (8) варьированием независимых переменных T и n_{β} легко получить первую вариацию результирующей скорости $\xi_s = \xi_s(T, n_{\alpha})$, которую запишем в виде

$$\delta\xi_{s} = \left[1 - \exp(-A_{s} / kT)\right] \delta\omega_{fs} + \omega_{fs} \exp(-A_{s} / kT) \delta(A_{s} / kT), \quad (16)$$

где

$$\delta\omega_{fs} = \omega_{fs} \left(\frac{E_{fs} + kTa_{fs}}{kT^2} \delta T + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\beta_{\alpha s}}{n_{\alpha}} \right).$$
(17)

Для получения вариации $\delta(A_s/kT)$ воспользуемся известными термодинамическими соотношениями [8]

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial(A_s/T)}{\partial T} \end{pmatrix}_p = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{v}_{\alpha s} \left(\frac{\partial(\mu_\alpha/T)}{\partial T} \right)_p = \frac{Q_s(T,p)}{T^2}, \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial A_s}{\partial p} \end{pmatrix}_T = -\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{v}_{\alpha s} \left(\frac{\partial\mu_\alpha}{\partial p} \right)_T = \mathcal{V}_s(T,p), \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial A_s}{\partial n_\alpha} \end{pmatrix}_{T,p} = -\sum_{\beta=1}^N \mathbf{v}_{\beta s} \left(\frac{\partial\mu_\beta}{\partial n_\alpha} \right)_{T,p} = -\sum_{\beta=1}^N \mathbf{v}_{\beta s} \mu_{\beta \alpha} = \sum_{\beta=1}^N \mu_{\beta \alpha} n_\beta \left(\frac{\mathbf{v}_{\beta s}}{n_\beta} - \frac{\mathbf{v}_{\alpha s}}{n_\alpha} \right),$$

в которых введены обозначения [15]

$$Q_{s}(T,p) = \sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{v}_{\alpha s} h_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{v}_{\alpha s} \int_{0}^{T} c_{p\alpha}(T) dT + Q_{s}^{0},$$
$$\mathcal{V}_{s}(T,p) = \sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{v}_{\alpha s} v_{\alpha}, \quad \mu_{\beta \alpha} = \left(\frac{\partial \mu_{\beta}}{\partial n_{\alpha}}\right)_{T,p,\{n_{\beta}\} (\beta \neq \alpha)},$$

где $\sum_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha} \mu_{\beta\alpha} = 0$; v_{α} – парциальный молярный объём компоненты α ; Q_s – теплота реакции *s* при постоянных *T* и *p*; $V_s(T,p)$ – величина изменения объёма при протекании *s*-ой реакции; $\mu_{\beta\alpha}$ – частная производная от химического потенциала μ_{β} по числовой плотности n_{α} при постоянных температуре и давлении и всех прочих $\{n_{\beta}\}$ числовых плотностей.

Для случая смеси совершенных газов (которым мы далее ограничимся) имеем: $v_{\beta} = 1/n$, $\mu_{\beta\alpha} = kT(\delta_{\beta\alpha}/n_{\alpha} - 1/n)$; тогда

$$\delta\left(\frac{A_s}{kT}\right) = \frac{Q_s(T,p)}{kT^2} \delta T - \frac{\mathcal{V}_s(T,p)}{kT} \delta p + \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{\Delta v_s}{n} - \frac{v_{\alpha s}}{n_{\alpha}}\right) \delta n_{\alpha} =$$
$$= \frac{Q_s(T,p) - \Delta v_s kT}{kT^2} \delta T - \sum_{\alpha=1}^N \frac{v_{\alpha s}}{n_{\alpha}} \delta n_{\alpha}. \tag{18}$$

Тогда, с учётом формул (17) и (18), первая вариация $\delta \xi_s$ скорости ξ_s химической реакции *s* может быть записана в виде

$$\delta\xi_{s} = \mathscr{L}_{s0}\delta T + \sum_{\beta=1}^{N}\mathscr{L}_{s\beta}\delta n_{\beta}, \qquad (19)$$

где

$$\mathcal{L}_{s0} = \omega_{fs} \left\{ \frac{E_{fs} + a_{fs} kT}{kT^2} \left(1 - \frac{1}{\mathcal{K}_s} \prod_{\alpha=1}^N n_\alpha^{\nu_{\alpha s}} \right) + \frac{Q_s - \Delta \nu_s kT}{kT^2 \mathcal{K}_s} \prod_{\alpha=1}^N n_\alpha^{\nu_{\alpha s}} \right\}, \quad (^1)$$
$$\mathcal{L}_{s\gamma} = \omega_{fs} \left(\frac{\beta_{\gamma s}}{n_\gamma} - \frac{\eta_{\gamma s}}{n_\gamma \mathcal{K}_s} \prod_{\alpha=1}^N n_\alpha^{\nu_{\alpha s}} \right). \quad (^2) \quad (20)$$

Для получения второй вариации $\delta^2 \xi_s$ скорости $\xi_s \equiv \omega_{fs} - \omega_{rs}$ (где $\omega_{rs} = \omega_{fs} \exp(-A_s/kT)$), которую далее удобно записать в виде

$$\delta^{2}\xi_{s} = \delta(\delta\omega_{fs} - \delta\omega_{rs}) = \delta\left[\omega_{fs}\delta(\ln\omega_{fs}) - \omega_{rs}\delta(\ln\omega_{rs})\right] =$$
$$= \omega_{fs}\left[(\delta\ln\omega_{fs})^{2} + \delta^{2}(\ln\omega_{fs})\right] - \omega_{rs}\left[(\delta\ln\omega_{rs})^{2} + \delta^{2}(\ln\omega_{rs})\right],$$

используем формулу (17), а также следующие соотношения (легко выводимые с учётом (17) и (18))

$$\delta(\ln\omega_{rs}) = \frac{E_{fs} + a_{fs}kT - Q_s + \Delta\nu_s kT}{kT^2} \delta T + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\eta_{\alpha s}}{n_{\alpha}} \delta n_{\alpha}, \qquad (21)$$

$$\delta^2(\ln\omega_{fs}) = -\frac{2E_{fs} + a_{fs}kT}{kT^3} (\delta T)^2 - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\beta_{\alpha s}}{n_\alpha^2} (\delta n_\alpha)^2, \qquad (22)$$

$$\delta^2(A_s / \boldsymbol{k}T) = \frac{\Delta v_s \boldsymbol{k}T - Q_s - Q_s^0}{\boldsymbol{k}T^3} (\delta T)^2 + \sum_{\alpha=1}^N \frac{v_{\alpha s}}{n_\alpha^2} (\delta n_\alpha)^2, \qquad (23)$$

$$\delta^2(\ln\omega_{rs}) = \delta^2(\ln\omega_{fs}) - \delta^2(A_s / kT).$$
(24)

В результат окончательно получим

$$\frac{1}{2}\delta^{2}\xi_{s} = \mathcal{B}_{s0}(\delta T)^{2} + \sum_{\alpha=1}^{N}\mathcal{B}_{s\alpha}(\delta T \,\delta n_{\alpha}) + \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{\beta=1}^{N}\mathcal{B}_{s\alpha\beta}(\delta n_{\alpha}\delta n_{\beta}), \qquad (25)$$

где

$$\mathcal{B}_{s\alpha} \equiv \omega_{fs} \frac{E_{fs}^*}{kT^2 n_{\alpha}} \left\{ \beta_{\alpha s} - \left(1 - \frac{Q_s^*}{E_{fs}^*} \right) \frac{\eta_{\alpha s}}{\mathcal{K}_s} \prod_{\beta=1}^N n_{\beta}^{\nu_{\beta s}} \right\},$$
(26)

$$\mathcal{B}_{s\alpha\beta} \equiv \frac{\omega_{fs}}{2n_{\alpha}n_{\beta}} \left\{ \beta_{\alpha s} (\beta_{\alpha s} - \delta_{\alpha\beta}) - \frac{\eta_{\alpha s}}{\mathcal{K}_{s}} (\eta_{\alpha s} - \delta_{\alpha\beta}) \prod_{\gamma=1}^{N} n_{\gamma}^{\nu_{\gamma s}} \right\}, \qquad (27)$$
$$\mathcal{B}_{s0} \equiv \omega_{fs} \left\{ \left(1 - \frac{1}{\mathcal{K}_{s}} \prod_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha}^{\nu_{\alpha s}} \right) \frac{E_{fs}^{*2} - kT(2E_{fs}^{*} - a_{fs}kT)}{2k^{2}T^{4}} + \frac{Q_{s}^{*}(Q_{s}^{*} - 2E_{fs}^{*} + kT) + kTQ_{s}^{*}}{2k^{2}T^{4}} \prod_{\beta=1}^{N} n_{\beta}^{\nu_{\beta s}} \right\}. \qquad (28)$$

Здесь введены обозначения: $E_{fs}^* = E_{fs} + a_{fs} k$, $Q_s^* = Q_s(T,p) - \Delta v_s kT$. Напомним ещё раз, что в формулах (19), (26)-(28) все фигурирующие в них термодинамические параметры p, T, n_{α} являются осреднёнными (соответствующим образом), но для упрощения записи символ осреднения опущен.

Осредняя теперь по ансамблю возможных реализаций приближенное равенство (13) и используя соотношения (19) и (25), для эффективного значения скорости химической реакции (7) в турбулентном потоке будем иметь

$$\overline{\xi_{s}(T,n_{\alpha})} = \xi_{s}(\langle T \rangle, \langle n_{\alpha} \rangle) + \mathcal{B}_{s0}\langle (\delta T)^{2} \rangle + \sum_{\alpha=1}^{N} \mathcal{B}_{s\alpha} \langle \delta T \delta n_{\alpha} \rangle + \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{N} \mathcal{B}_{s\alpha\beta} \langle \delta n_{\alpha} \delta n_{\beta} \rangle, \quad (29)$$

где

$$\overline{(\delta T)^2} \equiv \overline{\rho^2 T''^2} / \overline{\rho}^2 \cong \overline{\rho T''^2} / \overline{\rho} = \langle T''^2 \rangle, \qquad (30)$$

$$\overline{\delta T \delta n_{\alpha}} \equiv \overline{\rho T'' n_{\alpha}'} / \overline{\rho} = \overline{\rho^2 T'' z_{\alpha}} / \overline{\rho} \cong \overline{\rho T'' z_{\alpha}''} = \overline{\rho} \langle T'' z_{\alpha}'' \rangle, \qquad (31)$$

$$\overline{\delta n_{\alpha} \delta n_{\beta}} \equiv \overline{n_{\alpha}' n_{\beta}'} \cong \overline{\rho}^2 \Big(\langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle - \langle z_{\alpha} \rangle \overline{z_{\beta}''} - \langle z_{\beta} \rangle \overline{z_{\alpha}''} \Big), \tag{32}$$

причём последнее соотношение следует из очевидного преобразования

$$n'_{\alpha} = n_{\alpha} - \bar{n}_{\alpha} = \rho z_{\alpha} - \bar{\rho} \langle z_{\alpha} \rangle = \rho z''_{\alpha} + \rho' \langle z_{\alpha} \rangle.$$
(33)

Из выражения (29) следует, что в случае учёта взаимовлияния осреднённой гидродинамики и химической кинетики на характер протекания химических реакций и процессы тепло- и массопереноса в турбулентном течении, необходимо в общем случае многокомпонентной смеси привлекать к рассмотрению достаточно большое количество дополнительных уравнения переноса для парных корреляционных функций от пульсаций температуры и состава.

По поводу используемой далее формулы (29) сделаем следующее замечание. В силу экспоненциальной формы выражения (8) и медленной сходимости соответствующих степенных рядов разложения (13), в общем случае необходимы более детальные сведения о структуре турбулентного поля течения многокомпонентной реагирующей смеси. Другими словами, знание одних только вторых корреляционных моментов для пульсирующих температуры и состава может оказаться совсем недостаточным для удовлетворительной аппроксимации осреднённой величины «источникового» члена $\overline{\sigma}_{\alpha}$. Естественно, что наиболее полную информацию о химической турбулентности можно было бы получить, вводя в рассмотрение функцию распределения совместных вероятностей для гидродинамической скорости и основных термодинамических параметров течения химически активной смеси во всех точках координатного пространства. Однако такой подход всё-таки слишком сложен для практического употребления и потому может играть лишь ограниченную роль в исследованиях реагирующей турбулентности.

В последнее время достаточно широкое распространение (в частности, в связи с исследованиями турбулентного горения) получили методы, основанные на использовании одноточечной плотности распределения вероятностей скорости u_j , температуры T, концентраций $z_{\alpha}(\alpha = 1, 2, ..., N)$ и некоторых других величин в турбулентных потоках, $\mathcal{P}(\rho, u_j, T, z_{\alpha}, \mathbf{r}, t)$. Этот подход является относительно новым и интенсивно развивающимся в настоящее время (см., например, [3,4,39]). Однако оценить в полной мере перспективность подобного (существенно упрощенного) подхода также не представляется пока что возможным, как из-за отсутствия завершённой полной теории, позволяющей непосредственно находить функцию \mathcal{P} с помощью определяющего её интегродифференциального уравнения, так и вследствие немногочисленного на сегодня количества численно решённых тестовых задач турбулентного горения.

Вместе с тем, предложенная нами аппроксимация осреднённых скоростей химических реакций $\overline{\xi_s}$ на уровне моментов второго порядка позволяет, до известной степени, учитывать влияние химической кинетики на процессы возникновения и эволюции реагирующей турбулентности. Безусловным является то, что даже этот ограниченный подход к решению сложной проблемы взаимодействия турбулентности и химической кинетики всё-таки гораздо лучше, чем её полное игнорирование.

Формула для моментов, включающих пульсации источника вещества. Для дальнейших целей нам понадобится выражение, позволяющее записать величины $\overline{\mathcal{A}''\sigma_{\alpha}}$, содержащие пульсации σ'_{α} источника вещества сорта α за счёт химических реакций, через корреляционные моменты $\langle h''z''_{\alpha} \rangle$ и $\langle z''_{\alpha}z''_{\beta} \rangle$. Исполь-

зуя соотношение $\sigma_{\alpha} = \sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s} \xi_{s}$ для источника, величину $\overline{\mathcal{A}''} \sigma_{\alpha}$ представим сначала в виде

$$\overline{\mathcal{A}''\sigma_{\alpha}} = \overline{\sigma}_{\alpha}\overline{\mathcal{A}''} + \overline{\sigma_{\alpha}'\mathcal{A}''} = \overline{\mathcal{A}''}\left(\sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s}\xi_{s}(\langle T \rangle, \overline{n}_{\alpha})\right) + \sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s}\overline{\xi_{s}'\mathcal{A}''}, \quad (34)$$

где пульсация скорости ξ'_s , согласно формуле (19), определяется выражением

$$\xi_s' = \mathcal{L}_0^s(\rho T''/\overline{\rho}) + \sum_{\beta=1}^N \mathcal{L}_\beta^s n_\beta'.$$
(35)

Пульсацию температуры T'' в соотношении (35) удобно выразить через пульсацию энтальпии $\langle c_p \rangle T'' = h'' - \sum_{\alpha=1}^N \langle h_\alpha \rangle z''_\alpha$. Это связано с тем, что в случае

многокомпонентной смеси эволюционные уравнения переноса для корреляций, содержащих пульсации температуры, значительно сложнее аналогичных уравнений с пульсациями полной энтальпии смеси. Так, например, уравнение для среднего квадрата пульсаций энтальпии $\langle h''^2 \rangle$ не содержит корреляций вида $\langle h''z'_{\alpha} \rangle$ [см. (41)], в то время как в уравнение для дисперсии $\langle T''^2 \rangle$ входят корреляции, содержащие пульсации температуры и состава, что связано, в конечном счёте, с наличием члена с химическим источником тепловой энергии в мгновенном уравнении для температуры [18,19]. В результате будем иметь

$$\overline{\xi_{s}'\mathcal{A}''} \cong \mathcal{L}_{0}^{s} \langle h''\mathcal{A}'' \rangle / \langle c_{p} \rangle + \sum_{\beta=1}^{N} \left(\overline{\rho} \mathcal{L}_{\beta}^{s} - \langle h_{\beta} \rangle \mathcal{L}_{0}^{s} / \langle c_{p} \rangle \langle z_{\beta}''\mathcal{A}'' \rangle - \overline{\mathcal{A}''} \sum_{\beta=1}^{N} \mathcal{L}_{\beta}^{s} \overline{n}_{\beta} \,. \tag{36}$$

Отсюда, с учётом известной формулы $\overline{\mathcal{A}''} = -\overline{\rho' \mathcal{A}''} / \overline{\rho}$, записанной в виде [19]

$$\overline{\mathcal{A}''} \cong \langle h'' \mathcal{A}'' \rangle / \langle T \rangle \langle c_p \rangle + \langle c_p \rangle^{-1} \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\overline{\rho} \langle c_p \rangle / \overline{n} - c_{p\alpha} \right) \langle z_{\alpha}'' \mathcal{A}'' \rangle, \qquad (37)$$

для искомого выражения $\overline{\mathscr{A}''}\sigma_{\alpha}$ окончательно находим

$$\overline{\mathcal{A}''\sigma_{\alpha}} = \overline{\mathcal{A}''}\left(\sum_{s=1}^{r} \mathsf{v}_{\alpha s} \xi_{s}(\langle T \rangle, \overline{n}_{\alpha})\right) + \sum_{s=1}^{r} \mathsf{v}_{\alpha s} \overline{\xi_{s}'\mathcal{A}''} = \overline{\rho} \mathfrak{V}_{0\alpha}^{\mathrm{Ch}} \langle h''\mathcal{A}'' \rangle + \overline{\rho} \sum_{\beta=1}^{N} \mathfrak{T}_{\alpha\beta}^{\mathrm{Ch}} \langle z_{\alpha}''\mathcal{A}'' \rangle.$$
(38)

Здесь введены следующие обозначения

$$\bar{\rho}\mathfrak{T}_{0\alpha}^{\mathrm{Ch}} \equiv \frac{1}{\langle T \rangle \langle c_p \rangle} \sum_{s=1}^{r} \mathbf{v}_{\alpha s} \bigg(\xi_s(\langle T \rangle, \bar{n}_\alpha) + \mathcal{L}_0^s \langle T \rangle - \sum_{\beta=1}^{N} \mathcal{L}_\beta^s \bar{n}_\beta \bigg), \tag{39}$$

$$\bar{\rho}\mathfrak{T}_{\alpha\beta}^{Ch} \equiv \bar{\rho}\sum_{s=1}^{r} \mathsf{v}_{\alpha s} \left(\mathscr{L}_{\beta}^{s} - \frac{\langle T \rangle}{\bar{n}} \mathscr{L}_{0}^{s} \right) + \langle T \rangle \left(\frac{\bar{\rho} \langle c_{p} \rangle}{\bar{n}} - c_{p\beta} \right) \mathfrak{T}_{0\alpha}^{Ch}.$$
(40)

Далее будут рассмотрены случаи различных физических величин *А*, пульсирующих в турбулентном потоке.

3. Соотношения для корреляционных членов с пульсирующей массовой плотностью

В отличие от однородного турбулентного газового континуума, в котором эффекты сжимаемости часто пренебрежимо малы [32], в многокомпонентной реагирующей газовой смеси полная массовая плотность ρ заметно изменяется от точки к точке, в частности, из-за локального тепловыделения в химических реакциях. В итоге, в уравнение для осреднённой внутренней энергии смеси (5), а также в другие эволюционные уравнения переноса (например, для турбулентной кинетической энергии, для турбулентных потоков тепла, вещества и количества движения [18,19]) входят корреляционные члены вида $\overline{\rho' \mathcal{A}''}/\overline{\rho} = -\overline{\rho} \langle v'' \mathcal{A}'' \rangle$, где $v'' = -\rho' / \overline{\rho} \rho$, $\mathcal{A} = u_j, h, z_{\alpha}$. Поэтому в общем случае необходимо привлекать к рассмотрению дополнительные балансовые уравнения для подобных корреляционных функций $(J_{(v)j}^T \equiv \overline{\rho} \langle v'' u_{\alpha}'' \rangle$, ($\overline{\rho v'' z_{\alpha}''}$, $\overline{\rho v'' h''}$), включающих, в свою очередь, целый ряд новых корреляционных членов, плохо поддающихся моделированию.

Вместе с тем для значительного числа турбулентных режимов движения многокомпонентной газовой смеси, когда относительные пульсации массовой плотности, вызванные пульсациями давления, пренебрежимо малы по сравнению с её изменениями, вызванными пульсациями температуры и концентраций компонентов, возможен более простой путь отыскания корреляций вида $\langle v'' \mathcal{A}'' \rangle$ (связанный в этом случае с турбулентными потоками диффузии и тепла), основанный на использовании простого алгебраического соотношения, выводимого с использованием уравнения состояния для давления смеси.

Для вывода этого важного соотношения получим сначала точное выражение для турбулентных пульсаций плотности ρ' в газовой смеси, в качестве уравнения состояния которой возьмем, как и ранее, уравнение состояния совершенного газа

$$p = \mathbf{k}Tn = \mathbf{k}\rho T \sum_{\alpha=1}^{N} z_{\alpha} = \mathbf{R}^{*}\rho T, \quad \mathbf{R}^{*} = \mathbf{k}n / \rho = \mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^{N} n_{\alpha} / \rho = \mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^{N} z_{\alpha}.$$
(41)

Подставляя в соотношение (30) истинные (мгновенные) значения величин R^* и T, записанные в виде суммы осреднённых и пульсационных слагаемых, перепишем его следующим образом

$$p / \rho = \langle \mathbf{R}^* \rangle \langle T \rangle + (\mathbf{R}^*)'' \langle T \rangle + \langle \mathbf{R}^* \rangle T'' + (\mathbf{R}^*)'' T'' =$$

$$= \langle \mathbf{R}^* \rangle \langle T \rangle + \mathbf{k} \langle T \rangle \sum_{\alpha=1}^N z_{\alpha}'' + \langle \mathbf{R}^* \rangle T'' + \mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^N (z''T'').$$
(42)

Здесь введены обозначения $\langle \mathbf{R}^* \rangle = \mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^N \langle z_\alpha \rangle = \mathbf{k} \overline{n} / \overline{\rho}$, $(\mathbf{R}^*)'' = \mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^N z''_\alpha$. Применяя оператор осреднения (1) к соотношению (42), получим осреднённое уравнение состояния для давления смеси (6), записанное в виде $\overline{p} = \langle \mathbf{R}^* \rangle \overline{\rho} \langle T \rangle + \mathbf{k} \overline{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \langle z_\alpha T'' \rangle$. Используем это выражение для исключения произведения $\langle \mathbf{R}^* \rangle \langle T \rangle$ из формулы (31); в результате получим

$$\frac{\rho'}{\overline{\rho}} = \left\{ p' - \langle \boldsymbol{R}^* \rangle \overline{\rho} \rho T'' - \boldsymbol{k} \langle T \rangle \rho \sum_{\alpha=1}^N \boldsymbol{z}_{\alpha}'' - \boldsymbol{k} \rho \sum_{\alpha=1}^N (\boldsymbol{z}_{\alpha}'' T'')'' \right\} / \overline{p} \,. \tag{43}$$

Заметим, что в соотношении (43) осреднённое давление \overline{p} определятся точным уравнением состояния (6).

Важно подчеркнуть, что часто, например, для течений с малыми числами Маха Ma в формуле (43) можно пренебречь относительными турбулентными пульсациями давления по сравнению с относительными пульсациями плотности и/или температуры. Это условие известно как *гипотеза Морковина* [33], справедливость которой (для течений без химических реакций) была подтверждена вплоть до Ma = 5. Так, для земной атмосферы вынужденная конвекция существенно проявляется только в тех струйных течениях, в которых градиенты скорости ветра достигают достаточно больших значений. В этом случае отношения пульсаций ρ' , p' и T'' к соответствующим средним значениям $\bar{\rho}, \bar{p}$ и $\langle T \rangle$ имеют порядки величин $|\rho'|/\bar{\rho} \approx |T''|/\langle T \rangle \approx 10^{-4}$, $|p'|/\bar{p} \approx 10^{-5}$ [6].

Пульсацию температуры *T*" в соотношении (43) в рассматриваемом здесь случае химически активной смеси удобно выразить через пульсацию энтальпии

$$\langle c_p \rangle T'' = h'' - \sum_{\alpha=1}^N \langle h_\alpha \rangle z''_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N c_{p\alpha} (z''_\alpha T'')''.$$
(44)

Это связано с тем, что в случае многокомпонентной смеси эволюционные уравнения переноса для корреляций, содержащих пульсации температуры, значительно сложнее аналогичных уравнений с пульсациями полной энтальпии смеси. Так, например, уравнение для среднего квадрата пульсаций энтальпии $\langle h''^2 \rangle$ не содержит корреляций вида $\langle h'' z''_{\alpha} \rangle$ [см. (41)], в то время как в уравнение для дисперсии $\langle T''^2 \rangle$ входят корреляции, содержащие пульсации температуры и состава, что связано, в конечном счёте, с наличием члена с химическим источником тепловой энергии в мгновенном уравнении для температуры [18,19]. В результате, при подстановке соотношения (44) в (43) будем иметь

$$\frac{\rho'}{\overline{\rho}} = \frac{p'}{\overline{p}} - \frac{\rho \langle \boldsymbol{R}^* \rangle}{\overline{p} \langle \boldsymbol{c}_p \rangle} \left(h'' - \sum_{\alpha=1}^N \langle \boldsymbol{h}_\alpha \rangle \boldsymbol{z}_\alpha'' \right) - \frac{\rho \boldsymbol{k} \langle T \rangle}{\overline{p}} \sum_{\alpha=1}^N \boldsymbol{z}_\alpha''$$
(45)

Получим теперь формулу для искомой корреляции $\rho v'' \mathcal{A}''$. При умножении (45) на \mathcal{A}'' и теоретико-вероятностном осреднении полученного результата по ансамблю возможных реализаций, получим следующее ключевое соотношение

$$\overline{\rho v'' \mathcal{A}''} = -\frac{\overline{p' \mathcal{A}''}}{\overline{p}} + \frac{\langle \mathbf{R}^* \rangle}{\overline{p} \langle c_p \rangle} \bigg[\overline{\rho} \langle h'' \mathcal{A}'' \rangle - \overline{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \langle h_\alpha \rangle \langle z_\alpha'' \mathcal{A}'' \rangle \bigg] + \frac{k \overline{\rho} \langle T \rangle}{\overline{p}} \sum_{\alpha=1}^N \langle z_\alpha'' \mathcal{A}'' \rangle.$$
(46)

Если отождествить в (46) параметр \mathcal{A} с гидродинамической скоростью течения u_j , то в результате получим выражение для турбулентного потока удельного объёма смеси $J_{(v)j}^T$

$$J_{(v)j}^{T} = -\frac{\overline{p'u_{j}''}}{\overline{p}} + \frac{\langle \mathbf{R}^{*} \rangle}{\overline{p} \langle c_{p} \rangle} \left(q_{j}^{T} - \sum_{\alpha=1}^{N} \langle h_{\alpha} \rangle J_{\alpha j}^{T} \right) + \frac{\mathbf{k} \langle T \rangle}{\overline{p}} \sum_{\alpha=1}^{N} J_{\alpha j}^{T} \approx \frac{\langle \mathbf{R}^{*} \rangle}{\overline{p} \langle c_{p} \rangle} J_{q j}^{T} + \frac{\mathbf{k} \langle T \rangle}{\overline{p}} \sum_{\alpha=1}^{N} J_{\alpha j}^{T}, \quad (47)$$

где $J_{qj}^T \equiv q_j^T - \sum_{\alpha=1}^N \langle h_{\alpha} \rangle J_{\alpha j}^T$ – приведённый турбулентный поток тепла [19]. Заметим, что турбулентный поток $J_{(v)j}^T$ фигурирует как в осреднённом энергетическом уравнении смеси (6), так и в ряде других дифференциальных уравнениях переноса для вторых корреляций (в частности, в уравнении переноса турбулентной энергии).

Аналогичным образом, полагая последовательно $\mathcal{A} \equiv h, z_{\alpha}$ в (46), можно получить соотношения для корреляций $\overline{\rho v'' h''}$ и $\overline{\rho v'' z_{\beta}''}$, позволяющие исключить их из всех уравнений переноса для вторых моментов пульсирующих термогидродинамических параметров.

4. Модельные уравнения переноса вторых моментов

Применение теоретико-вероятностного осреднения (1) к мгновенным гидродинамическим уравнениям смеси приводит к потере части информации о турбулентном течении. Недостающую информацию содержат уравнения для пульсационных составляющих плотности, скорости, температуры (энтальпии), состава и др. Статистический подход к описанию процессов турбулентного переноса в однородной сжимаемой жидкости, предложенный *Келлером и Фридманом*, основан на анализе цепочки зацепляющихся дифференциальных уравнений для корреляционных моментов связи возрастающего порядка [14]. Дополнительные трудности возникают при обобщении этого подхода на многокомпонентные химически реагирующие сжимаемые среды. Как уже было отмечено, подобные уравнения для однородной жидкости с «постоянной» плотностью (*приближение Буссинеска* [5]) лежат в основе *метода инвариантного моделирования* во многих современных теориях турбулентности различной степени сложности [36].

Общий вид уравнения переноса одноточечных вторых моментов. Пусть \mathcal{A} – удельное значение какой-либо скалярной величины (в частности, это могут быть компоненты тензора), субстанциональный баланс которой имеет вид $\rho d\mathcal{A} / dt = -\partial_i J_{(\mathcal{A}) i} + \sigma_{(\mathcal{A})}$. Тогда

$$\rho \frac{d\mathcal{A}''}{dt} = -\partial_j \Big(J_{(\mathcal{A})j} \Big) + \sigma_{(\mathcal{A})} - \rho \frac{D\langle \mathcal{A} \rangle}{Dt} - \rho u''_j \partial_j \langle \mathcal{A} \rangle .$$
(48)

Умножая (48) на пульсацию \mathcal{B}'' параметра \mathcal{B} (для которого также существует балансовое уравнение) и турбулентно осредняя результат, получим в итоге

$$\rho \mathcal{B}'' \frac{d\mathcal{A}''}{dt} = -J_{(\mathcal{B})j}^T \partial_j \langle \mathcal{A} \rangle + \overline{\mathcal{B}'' \left\{ \sigma_{(\mathcal{A})} - \partial_j J_{(\mathcal{A})j} \right\}}.$$
(49)

Аналогично можно написать

$$\overline{\rho \mathcal{A}'' \frac{d\mathcal{B}''}{dt}} = -J_{(\mathcal{A})j}^T \partial_j \langle \mathcal{B} \rangle + \overline{\mathcal{A}'' \left\{ \sigma_{(\mathcal{B})} - \partial_j J_{(\mathcal{B})j} \right\}}.$$
(50)

Складывая теперь (49) и (50), получим, при учёте тождества $\rho d\mathcal{A}/dt = \overline{\rho} D\langle \mathcal{A} \rangle / Dt + \partial_j J^T_{(\mathcal{A})j}$ [19], следующее уравнение баланса в субстанциональной форме для одноточечного второго момента $\langle \mathcal{A}'' \mathcal{B}'' \rangle$

$$\rho \frac{d(\mathcal{A}''\mathcal{B}'')}{dt} \equiv \overline{\rho} \frac{D}{Dt} \langle \mathcal{A}''\mathcal{B}'' \rangle + \partial_j \left(\overline{\rho \mathcal{A}''\mathcal{B}'' u_j''} \right) = -J_{(\mathcal{A})j}^T \partial_j \langle \mathcal{B} \rangle - J_{(\mathcal{B})j}^T \partial_j \langle \mathcal{A} \rangle + \frac{\overline{\mathcal{A}''} \left\{ \sigma_{(\mathcal{B})} - \partial_j J_{(\mathcal{B})j} \right\}}{+ \overline{\mathcal{A}''} \left\{ \sigma_{(\mathcal{B})} - \partial_j J_{(\mathcal{B})j} \right\}} + \overline{\mathcal{B}''} \left\{ \sigma_{(\mathcal{A})} - \partial_j J_{(\mathcal{A})j} \right\},$$
(51)

которое, при использовании обозначений

$$J_{(\mathcal{AB})j}^{\Sigma} \equiv J_{(\mathcal{AB})j}^{T} + \left(\overline{J_{(\mathcal{B})j}\mathcal{A}''} + \overline{J_{(\mathcal{A})j}\mathcal{B}''}\right),$$
(52)

$$J_{(\mathcal{AB})j}^{T} \equiv \overline{\rho(\mathcal{A}''\mathcal{B}'')u_{j}''} , \qquad (53)$$

$$\overline{\rho}\langle \varepsilon_{(\mathcal{AB})} \rangle \equiv -\left(\overline{\mathbf{J}_{(\mathcal{A})j} \partial_j \mathcal{B}''} + \overline{\mathbf{J}_{(\mathcal{B})j} \partial_j \mathcal{A}''} \right), \tag{54}$$

принимает следующий окончательный вид:

$$\overline{\rho} \frac{\partial \langle \mathcal{A}'' \mathcal{B}'' \rangle}{\partial t} + (\overline{\rho} \langle u_j \rangle \partial_j \langle \mathcal{A}'' \mathcal{B}'' \rangle) = -\overline{\partial_j J_{(\mathcal{A}\mathcal{B})j}^{\Sigma}} - \overline{J_{(\mathcal{A})j}^{T} \partial_j \langle \mathcal{B} \rangle} - \overline{J_{(\mathcal{B})j}^{T} \partial_j \langle \mathcal{A} \rangle} + \frac{\overline{\rho} \langle \mathcal{B} \rangle}{\overline{\rho} \langle \mathcal{B} \rangle} + \overline{\mathcal{A}'' \sigma_{(\mathcal{B})}} + \overline{\mathcal{B}'' \sigma_{(\mathcal{A})}} - \overline{\rho} \langle \overline{\rho} \langle \overline{\mathcal{E}}_{(\mathcal{A}\mathcal{B})} \rangle.$$
(55)

Здесь $J_{(\mathcal{AB})}^{T}$, $J_{(\mathcal{AB})}^{\Sigma}$ – соответственно турбулентный поток и суммарный турбулентный поток смешанной корреляции $\langle \mathcal{A}'' \mathcal{B}'' \rangle$; $\langle \varepsilon_{(\mathcal{AB})} \rangle$ – скорость диссипации корреляции $\langle \mathcal{A}'' \mathcal{B}'' \rangle$ под действием молекулярных процессов переноса. Уравнение (55) иллюстрирует общую форму уравнений переноса корреляционных моментов второго порядка – скорость изменения корреляции связывается с её диффузией, генерацией и диссипацией.

В частном случае, когда $\mathcal{A} \equiv \mathcal{B}$, уравнение (55) превращается в уравнение переноса среднеквадратичной пульсации («дисперсии») $\langle \mathcal{A}''^2 \rangle$ термогидродинамического параметра \mathcal{A} :

$$\overline{\rho}\frac{D}{Dt}\langle\mathcal{A}''^{2}/2\rangle \equiv \overline{\rho}\frac{\partial\langle\mathcal{A}''^{2}/2\rangle}{\partial t} + \overline{\rho}\langle u_{j}\rangle\partial_{j}\langle\mathcal{A}''^{2}/2\rangle =$$
$$= -\partial_{j}\left(\overline{\rho(\mathcal{A}''^{2}u_{j}'')/2} + \overline{\mathcal{A}''}\overline{J}_{(\mathcal{A})j}\right) - J_{(\mathcal{A})j}^{T}\partial_{j}\langle\mathcal{A}\rangle + \overline{\mathcal{A}''}\overline{\sigma}_{(\mathcal{A})} - \overline{\rho}\langle\varepsilon_{(\mathcal{A})}\rangle,$$
(56)

где $\overline{\rho}\langle \varepsilon_{\mathcal{A}}\rangle \equiv \overline{\rho}\langle \varepsilon_{(\mathcal{A}\mathcal{A})}\rangle / 2 = -\overline{J_{(\mathcal{A})j}\partial_j\mathcal{A}''}$ – скорость скалярной диссипации дисперсии $\langle \mathcal{A}''^2 \rangle$.

Таким образом, балансовое уравнение для смешанных парных корреляций (55), так же как и уравнение для дисперсий (56), иллюстрирует общую форму уравнений переноса корреляционных моментов второго порядка. Оно содержит члены, отражающие влияние на пространственно-временное распределение данной статистической характеристики турбулентного течения следующих динамических процессов: конвективного переноса, диффузии, образования за счёт обмена энергии между осреднённым и пульсационным движением, перераспределения турбулентной энергии между пульсационными движениями в различных направлениях и диссипации пульсирующей характеристики потока вследствие молекулярных процессов переноса. Рассмотрим теперь последовательно случаи различных величин \mathcal{A} и \mathcal{B} .

Уравнение для тензора напряжений Рейнольдса. Уравнение переноса для $R_{ki} \equiv -\bar{\rho} \langle u_k'' u_i'' \rangle$ получается из (55), если принять $\mathcal{A} \equiv u_k$, $\mathcal{B} \equiv u_i$ и использовать выражения: $J_{(u_i)j} \equiv -\pi_{ij}$, $J_{(u_k)j} \equiv -\pi_{kj}$, $\sigma_{(u_i)} \equiv -\partial_i p + \rho \sum_{\alpha=1}^N z_\alpha F_{\alpha i}, \sigma_{(u_k)} \equiv -\partial_k p + \rho \sum_{\alpha=1}^N z_\alpha F_{\alpha i}$. В результате получим точное уравнение переноса

$$-\overline{\rho}\frac{D}{Dt}\left(\frac{R_{ki}}{\overline{\rho}}\right) + \partial_{j}J_{(u_{k}u_{i})j}^{\Sigma} \equiv -\frac{\partial R_{ki}}{\partial t} + \partial_{j}\left(-\langle u_{j}\rangle R_{ki} + J_{(u_{k}u_{i})j}^{\Sigma}\right) = R_{kj}\partial_{j}\langle u_{i}\rangle + R_{ij}\partial_{j}\langle u_{k}\rangle + \overline{u_{k}''\sigma_{(u_{i})} + u_{i}''\sigma_{(u_{k})}} - \overline{\rho}\langle\varepsilon_{(u_{k}u_{i})}\rangle.$$
(57)

Здесь
$$\overline{u_k''\sigma_{(u_i)}} \equiv -\overline{u_k''(\partial p / \partial x_i)} + \sum_{\alpha=1}^N J_{\alpha k}^T F_{\alpha i}$$
, $\overline{u_i''\sigma_{(u_k)}} \equiv -\overline{u_i''(\partial p / \partial x_k)} + \sum_{\alpha=1}^N J_{\alpha i}^T F_{\alpha k}$;

 $J_{(u_{k}u_{i})j}^{\Sigma} \equiv \overline{\rho(u_{k}''u_{i}'')u_{j}''} - \overline{\pi_{ij}u_{k}''} - \overline{\pi_{kj}u_{i}''} - \mu\phi\phiy$ зионный поток (тензор 3-го ранга) тензора турбулентных напряжений; $\overline{\rho}\langle \varepsilon_{(u_{k}u_{i})}\rangle \equiv \overline{\pi_{ij}(\partial/\partial x_{j})u_{k}''} + \overline{\pi_{kj}(\partial/\partial x_{j})u_{i}''} -$ скорость (тензор второго ранга) диссипации тензора R_{ki} вследствие молекулярной вязкости;

Используем теперь следующее преобразование $\overline{\mathcal{A}''\partial_i p} = \overline{\mathcal{A}''} \partial_i \overline{p} + \overline{\mathcal{A}''\partial_i p'} = \overline{\rho v'' \mathcal{A}''} \partial_i \overline{p} - \overline{p'\partial_i \mathcal{A}''} + \partial_j \left(\delta_{ij} \overline{p' \mathcal{A}''} \right)$, справедливое для любого пульсирующего в потоке признака \mathcal{A} . Тогда, полагая в нём $\mathcal{A} \equiv u_k$ и $\mathcal{A} \equiv u_i$ будем соответственно иметь

$$\overline{u_k''\partial_i p} = J_{(v)k}^T \partial_i \overline{p} - \overline{p'\partial_i u_k''} + \partial_j \left(\delta_{ij} \overline{p'u_k''} \right),$$
$$\overline{u_i''\partial_k p} = J_{(v)i}^T \partial_k \overline{p} - \overline{p'\partial_k u''} + \partial_j \left(\delta_{kj} \overline{p'u_k''} \right),$$

(здесь δ_{ij} – символ Кронекера). В результате уравнение (57) может быть переписано в следующем компактном виде:

$$-\frac{\partial R_{ki}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(R_{ki} \langle u_{j} \rangle \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} (J_{kij}^{\Sigma}) = P_{ki}^{*} + \Phi_{ki} + \overline{\rho} G_{ki} - \overline{\rho} \varepsilon_{ki} , \qquad (58)$$

где

$$J_{kij}^{\Sigma} \equiv J_{(u_k u_i)j}^{\Sigma} + \overline{p'(\delta_{ij} u_k'' + \delta_{kj} u_i'')} = \overline{\rho(u_k'' u_i'') u_j''} + \overline{(\delta_{ij} p' - \pi_{ij}) u_k''} + \overline{(\delta_{kj} p' - \pi_{kj}) u_i''}, \quad (59)$$

$$P_{ki}^* \equiv R_{kj} \partial_j \langle u_i \rangle + R_{ij} \partial_j \langle u_k \rangle, \quad \Phi_{ki} \equiv \overline{p'(\partial_k u_i'' + \partial_i u_k'')}, \tag{60}$$

$$\overline{\rho}\varepsilon_{ki} \equiv \overline{\rho} \langle \varepsilon_{(u_k u_i)} \rangle \equiv \overline{\pi_{ij} \partial_j u_k''} + \overline{\pi_{kj} \partial_j u_i''}, \qquad (61)$$

$$\overline{\rho}G_{ki} \equiv -J_{(v)k}^T \partial_i \overline{p} - J_{(v)i}^T \partial_k \overline{p} + \sum_{\alpha=1}^N \left(J_{\alpha k}^T F_{\alpha i} + J_{\alpha i}^T F_{\alpha k} \right).$$
(62)

Поясним смысл отдельных слагаемых уравнения (4.2.18):

• J_{ki}^{Σ} – полный «диффузионный поток» тензора R_{ki} , включающий различные механизмы переноса турбулентности в пространстве, а именно, тензор турбулентной диффузии (слагаемое $\rho u_k^{"} u_i^{"} u_j^{"}$), тензорный перенос под влиянием молекулярной вязкости, когда пульсирующей гидродинамической скоростью вовлекаются в движение соседние, до этого не пульсировавшие, слои газа (слагаемые $-\overline{\pi_{ij}}u_k^{"} - \overline{\pi_{kj}}u_i^{"}$); тензорный перенос, вызванный взаимодействием полей пульсационных скоростей и пульсационных давлений (слагаемые $\overline{\delta_{ij}p'u_k^{"}} + (\overline{\delta_{ki}p'u_i^{"}})$;

• P_{ki}^* – тензорная величина, связанная с процессами генерации тензора R_{ki} из-за взаимодействия турбулентных пульсаций скорости с неоднородным полем осреднённых скоростей;

• Φ_{ki} – тензор корреляций турбулентных пульсаций скорости и давления, описывающий перераспределение турбулентной энергии между различными составляющими тензора Рейнольдса;

• $\overline{\rho}G_{ki}$ – тензор, связанный с возникновением (или исчезновением) турбулентности при движении среды в поле неравномерного гидродинамического давления, либо под воздействием массовых сил;

• $\overline{\rho} \varepsilon_{ki}$ – тензорная величина, связанная со скоростью диссипации тензора R_{ki} вследствие молекулярной вязкости.

С учётом формулы (47) для потока $J_{(v)j}^T$ выражение (62) принимает вид

$$\overline{\rho}G_{ki} = \left(\overline{p'u_k''}\partial_i \ln \overline{p} + \overline{p'u_i''}\partial_k \ln \overline{p}\right) - \frac{1}{\overline{\rho}\langle c_p \rangle \langle T \rangle} \left(J_{qk}^T \partial_i \overline{p} + J_{qi}^T \partial_k \overline{p}\right) - \frac{1}{\overline{n}} \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \left(\partial_i \overline{p} - \overline{n}F_{\alpha i}\right) J_{\alpha k}^T + \left(\partial_k \overline{p} - \overline{n}F_{\alpha k}\right) J_{\alpha i}^T \right\}.$$
(63)

Следует иметь в виду, что во многих практически важных случаях, например, для течений с малыми числами Маха, можно пренебречь относительными пульсациями давления по сравнению с пульсациями плотности и температуры; тогда первое слагаемое в (63) может быть опущено. В этом случае выражение (63), записанное для стратифицированного в поле силы тяжести течения, принимает вид $\overline{\rho}G_{ki} \cong \frac{g}{\langle c_p \rangle \langle T \rangle} \Big(\delta_{k3} J_{qi}^T + \delta_{i3} J_{qk}^T \Big) + \frac{\overline{\rho}}{\overline{n}} g \sum_{\alpha=1}^N \Big(\delta_{i3} J_{\alpha k}^T + \delta_{k3} J_{\alpha i}^T \Big).$

Уравнения для тензора турбулентных напряжений Рейнольдса, записанные в виде (58) (шесть уравнений для составляющих симметрического тензора R_{ki}), не могут быть непосредственно использованы для замыкания осреднённых гидродинамических уравнений смеси, поскольку содержат большое число новых неопределённых величин, представляющих собой статистические корреляции с пульсациями давления, диссипативные члены, моменты третьего порядка. Аппроксимацию этих неопределённых величин для турбулизованной среды с переменной плотностью можно провести по аналогии с более или менее удовлетворительными и хорошо апробированными гипотезами замыкания, используемыми в «классической» теории турбулентности с постоянной плотностью².

Ограничим далее наше рассмотрение следующими упрощёнными схемами замыкания второго порядка, которые используют минимальное количество произвольных эмпирических констант.

$$\overline{\rho}\varepsilon_{ki} = \frac{2}{3}K_{b1}\delta_{ki}\frac{\overline{\rho}\langle b\rangle^{\frac{3}{2}}}{L} - K_{b2}\frac{\nu R_{ki}}{L^2},$$
(64)

$$\Phi_{ki} = K_{p1} \frac{\langle b \rangle^{\frac{1}{2}}}{L} \left(R_{ki} + \frac{2}{3} \delta_{ki} \overline{\rho} \langle b \rangle \right) - K_{p2} \left(P_{ki} - \frac{2}{3} \delta_{ki} P \right), \tag{65}$$

$$J_{kij}^{\Sigma} = \left(c_1 L \langle b \rangle^{\frac{1}{2}} + c_2 \nu\right) \partial_j R_{ki}, \qquad (66)$$

где K_e, K_p, c -свободные константы, определяемые на основе экспериментальных данных, причём эмпирические коэффициенты K_{b2} и c_2 существенны только при небольших турбулентных числах Рейнольдса $Re^T \equiv L\langle b \rangle^{1/2} / v$, т.е. когда $K_{b1}Re^T/K_{b2} \leq 0(1)$ и $c_1Re^T/c_2 \leq 0(1)$; v – молекулярный кинематический коэффициент вязкости смеси; L- внешний масштаб турбулентного поля скоростей в точке. В формуле (65) использованы следующие обозначения: $P_{ki} = P_{ki}^* + \bar{\rho}G_{ki}$ – суммарная скорость возникновения (исчезновения) турбулентных напряжений Рейнольдса R_{ki} ; $P = \frac{1}{2}\delta_{kj}P_{kj} = R_{kj}\partial_j\langle u_k \rangle + \bar{\rho}G$ – полная скорость генерации турбулентной энергии $\langle b \rangle$ под воздействием среднего сдвига (первое слагаемое) и эффектов плавучести и взаимных превращений турбулентной и потенциальной энергий в стратифицированной многокомпонентной смеси (второе слагаемое).

²⁾ Заметим, что моделирующие соотношения должны характеризоваться теми же свойствами тензорной симметрии, что и у моделируемых членов, и иметь ту же размерность.

Выражение для величины $\bar{\rho}G$, в силу (63), может быть преобразовано к виду

$$\overline{\rho}G \equiv \frac{1}{2}\overline{\rho}\delta_{kj}G_{kj} = \frac{\overline{p'u_j''}}{\overline{p}}\partial_j\overline{p} - \frac{J_{qj}^T}{\overline{\rho}\langle c_p\rangle\langle T\rangle}\partial_j\overline{p} - \sum_{\alpha=1}^N J_{\alpha j}^T \left(\frac{1}{\overline{n}}\partial_j\overline{p} - F_{\alpha j}\right).$$
(67)

Очевидно, что замыкающие соотношения (64)-(66) обеспечивают выполнение минимальных требований, которым должны удовлетворять любые схемы замыкания второго порядка. Выражение (64) для тензорной величины ε_{ki} описывает влияние вязкой диссипации на структуру тензора Рейнольдса. Основной причиной диссипации турбулентной энергии является наличие мелкомасштабных вихрей. Для течений с большим числом Рейнольдса Re^{T} эта мелкомасштабная турбулентность является изотропной.

Поток J_{ki}^{Σ} , задаваемый выражением (66), определяет диффузионный перенос напряжений Рейнольдса R_{kj} из одной области течения в другую, без их генерации или затухания. Этот перенос препятствует образованию больших градиентов в пространственном распределении величины R_{kj} . Успех применения уравнений переноса вторых корреляционных моментов во многом зависит от того, насколько удачно выбраны значения эмпирических констант. В соотношениях (64)-(66) можно принять следующие численные значения этих констант

$$K_{b1} = 0.125$$
; $K_{b2} = 6$; $K_{p1} = 0.275$; $K_{p2} = 0.55$; $c_1 = 0.3 \pm 0.05$, (68)

приведённые, например, в широко цитируемой нами монографии [36].

Все модели Рейнольдсовых напряжений (*Reynolds stress model, RSM*), решающие уравнения переноса для компонент тензора рейнольдсовых напряжений, более физически обоснованы по сравнению с моделями для модифицированной турбулентной вязкости (модель *Spalart-Allmaras*), так как: учитывают анизотропию турбулентности; обладают эффектом предыстории потока; напрямую учитывают перенос напряжений Рейнольдса.

Уравнение баланса турбулентной энергии. Свертка уравнения (58) по индексам k и i) приводит к точному уравнению для осреднённой кинетической энергии $\bar{\rho}\langle b \rangle = -\frac{1}{2}R_{ki}\delta_{ki}$ турбулентных пульсаций сжимаемой смеси

$$\overline{\rho}\left\{\frac{\partial\langle b\rangle}{\partial t} + \langle u_{j}\rangle\partial_{j}\langle b\rangle\right\} = -\partial_{j}J_{\langle b\rangle j}^{T} + R_{ij}\partial_{j}\langle u_{i}\rangle + \overline{p'\partial_{j}u''} + \overline{\rho}G - \overline{\rho}\langle\varepsilon_{b}\rangle.$$
(69)

Заметим, что уравнение (69), в отличие от уравнения для тензора Рейнольдса, содержит только два неизвестных корреляционных члена. Первый, диффузионный член $J_{\langle b \rangle j}^T \equiv \overline{\rho b u_j''} + \overline{(p' \delta_{ij} - \tau'_{ij}) u_i''} - J_{(v)i}^T \overline{\tau}_{ij}$ описывает полный субстанциональ-

ный поток энергии турбулентности, связанный с различными механизмами переноса в координатном пространстве. В частности, величина $J_{(b)j}^T \equiv \overline{\rho b u_j''}$ интерпретируется как поток кинетической энергии пульсационного движения, в свою очередь, величина $-\partial_i(\overline{\tau'_{ij}\mu''_i})$ характеризует среднюю скорость увеличения вихревой кинетической энергии за счёт работы, совершаемой пульсациями тензора вязких напряжений τ_{ii} на границе элементарного объёма. Второй, корреляционный, член $\overline{\rho}\langle \varepsilon_b \rangle \equiv \overline{\tau_{ij}} \partial_j u_i'' = \overline{\rho} \varepsilon_b + \overline{\tau}_{ij} \partial_i J_{(v)j}^T$ описывает диссипацию турбулентной кинетической энергии в тепло под действием молекулярной вязкости. Величина $\overline{\rho}\varepsilon_b \equiv \overline{\tau'_{ij}\partial_j u'_i} > 0$ имеет смысл среднего значения работы, отнесённой к единице времени и единице объёма, совершаемой пульсациями тензора вязких напряжений над турбулентными вихрями со сдвигом скорости. Для самоподдерживающегося турбулентного поля скорость диссипации ε_b имеет тот же порядок величины, что и скорость генерации турбулентности сдвиговым потоком $R_{ij}\partial_j\langle u_i\rangle$. Предпоследний член в правой части уравнения (69), описывает генерацию турбулентной энергии в поле силы тяжести, обусловленную неоднородностью температуры и/или состава стратифицированной смеси, и взаимные превращения турбулентной и потенциальной энергий среды под действием массовых сил негравитационного происхождения.

В случае развитой турбулентности, когда $Re \equiv LU/v \gg 1$, справедливо неравенство $\langle b \rangle^{\frac{1}{2}} \geq LU/L_{hydro}$ (см.[36]). Здесь $L_{hydro} = |\partial \ln \theta / \partial \mathbf{x}|^{-1}$ – расстояние, на котором происходят существенные изменения каких-либо осреднённых термогидродинамических параметров θ ; число Рейнольдса Re определяется по интегральному масштабу турбулентности L, соответствующему характерным размерам крупных вихрей, и характерной скорости течения U. Можно показать, что при больших числах Рейнольдса, когда $\varepsilon_b \propto \langle b \rangle^{\frac{3}{2}} / L$, $\overline{\tau_{ij}} \propto \overline{\rho} v U / L_{hydro}$,

 $\partial_j J^T_{(v)j} \propto \langle b \rangle^{\frac{1}{2}} / L_{hydro}$, справедливы оценки

$$\frac{\tau_{ij}\partial_{j}J_{(v)j}^{I}}{\overline{\rho}\varepsilon_{b}} \propto \frac{\overline{\rho}\nu U}{L_{hydro}} \cdot \frac{\langle b \rangle^{\frac{1}{2}}}{L_{hydro}} \cdot \frac{L}{\overline{\rho}\langle b \rangle^{\frac{3}{2}}} = \frac{\nu UL}{\langle b \rangle L_{hydro}^{2}} = \frac{\nu}{LU} \cdot \frac{U^{2}L^{2}}{\langle b \rangle L_{\eta\psi\delta\rho\sigma}^{2}} \leq \frac{1}{Re},$$
$$\frac{\left|\overline{\tau}_{ij}J_{(v)j}^{T}\right|}{\left|\overline{\tau}_{ij}'''\right|} \propto \frac{\overline{\rho}\nu U}{L_{hydro}} \cdot \langle b \rangle^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{L}{\overline{\rho}\langle b \rangle^{\frac{3}{2}}L_{hydro}} = \frac{\nu UL}{\langle b \rangle L_{hydro}^{2}} \leq \frac{1}{Re}.$$

Таким образом, в предельно развитом турбулентном потоке многокомпонентной смеси уравнение переноса для турбулентной энергии приобретает вид

$$\overline{\rho}\frac{D\langle b\rangle}{Dt} + \partial_j \Big(\overline{\rho b u_j''} + \overline{(p'\delta_{ij} - \tau_{ij}')u_i''}\Big) = \overline{p'\partial_j u_j''} + P - \overline{\rho}\langle \varepsilon_b \rangle.$$
(70)

Свертка аппроксимирующих соотношений (64)-(66) приводит к следующим замыкающим соотношениям для неизвестных корреляционных членов уравнения баланса турбулентной энергии

$$\overline{\rho}\langle\varepsilon_b\rangle = \frac{1}{2}\langle\varepsilon_{ki}\rangle\delta_{ki} = K_{b1}\frac{\overline{\rho}\langle b\rangle^{\frac{3}{2}}}{L} + K_{b2}\frac{\overline{\rho}\nu\langle b\rangle}{L^2},$$
(71)

$$\overline{p'\partial_j u''} = 0, \qquad (72)$$

$$J_{\langle b \rangle j} = - \Big(c_1 L \langle b \rangle^{\frac{1}{2}} + c_2 v \Big) \partial_j \Big(\overline{\rho} \langle b \rangle \Big).$$
(73)

Эти соотношения вытекают, по существу, из соображений теории размерности и являются обобщением известной гипотезы Колмогорова, состоящей в том, что скорость диссипации энергии ε_b в данной точке развитого турбулентного потока определяется только локальными значениями средней турбулентной энергии единицы массы $\langle b \rangle$ и масштабом турбулентности L, а турбулентный перенос импульса и пульсационной энергии осуществляется посредством диффузионных членов градиентного типа. Фундаментальное уравнение переноса турбулентной энергии (70) лежит в основе многих современных полуэмпирических моделей турбулентности, например, используется в конкретных расчётах турбулентных движений по модели ($k - \varepsilon$) Колмогорова-Лаундера и её многочисленным разновидностям.

Аналогичным способом могут быть получены дифференциальные уравнения переноса и для следующих корреляционных моментов: $q_j^T \equiv \overline{\rho} \langle h'' u'' \rangle$, $J_{\alpha j}^T \equiv \overline{\rho} \langle z_{\alpha}'' u_j'' \rangle$, $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$ и $\langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle$. По этой причине приведём их ниже без подробного вывода.

Уравнение переноса турбулентного потока тепла $q_j^T \equiv \overline{\rho h'' u_j''}$ имеет следующий вид:

$$\overline{\rho}\frac{D}{Dt}\left(q_{j}^{T}/\overline{\rho}\right) + \partial_{k}J_{(h,u_{j})k}^{\Sigma} = -q_{k}^{T}\partial_{k}\langle u_{j}\rangle + R_{jk}\left(\partial_{k}\langle h\rangle - \partial_{k}\overline{p}/\overline{\rho}\right) + \overline{\rho}G_{hj} + \overline{p'\partial_{j}h''} + \overline{u_{j}''}\left(dp'/dt + \tau_{ik}\partial_{k}u''\right) - \overline{\rho}\varepsilon_{hj}$$

$$(74)$$

и описывает пространственно-временные распределения корреляций $\langle hu''_j \rangle$ для турбулентного сдвигового течения. Здесь $J_{(hu_j)k}^{\Sigma} \equiv \overline{(\rho u''_j u''_k + p' \delta_{jk} - \tau_{jk})h''} + \overline{u''_j q_k}$ –

диффузионный поток корреляции $\langle hu''_j \rangle$; $\overline{\rho} \varepsilon_{hj} \equiv \overline{\rho} \varepsilon_{(hu_j)} \equiv \overline{\tau_{jk} \partial_k h''} - \overline{q_k \partial_k u''} - ско$ $рость разрушения корреляции <math>\langle hu''_j \rangle$ под воздействием молекулярных процессов вязкости и температуропроводности; $\overline{\rho} G_{hj} = -\{\langle h''^2 \rangle / \langle c_p \rangle \langle T \rangle\} \partial_j \overline{p}$ – скорость образования (исчезновения) турбулентного потока тепла q_j^T под воздействием осреднённого градиента давления.

По аналогии с уравнением переноса тензора Рейнольдса можно сказать, что в левой части уравнения (74) стоят конвективный и «диффузионный» члены, а в правой части – величина, описывающая генерацию турбулентного потока q_j^T под воздействием силы плавучести, градиентов скорости течения, энтальпии и давления смеси; величина, связанная с перераспределением корреляции $\langle hu''_j \rangle$ смешанным моментом пульсаций давления и градиента энтальпии, а также величина, характеризующая диссипацию потока q_j^T . В монографии [12] была проведена оценка предпоследнего члена уравнения (74), из которой следует, что он мал по сравнению с диссипативным членом ε_{hj} во всех тех случаях, когда существенен турбулентный перенос тепла.

В уравнение переноса (74) входит целый ряд неопредёленных корреляционных моментов, порождающих проблему замыкания. Моделирование этих дополнительных корреляций проведём с использованием следующих простых аппроксимаций:

$$J_{(hu_j)k}^{\Sigma} = -\left(c_3 L\langle b \rangle^{\frac{1}{2}} + c_4(\nu + \chi)\right)\partial_k q_j^T,$$
(75)

$$\overline{p'\partial_{j}h''} = -K_{s1}\frac{\langle b \rangle^{\frac{1}{2}}}{L}q_{j}^{T} - K_{s2}P_{hj}, \qquad (76)$$

$$\overline{\rho}\varepsilon_{hj} = K_{b2} \frac{\nu + \chi}{2L^2} q_j^T, \qquad (77)$$

в которых K_{s1} , K_{s2} , c_3 и c_4 – универсальные эмпирические константы. По поводу этих соотношений можно сказать следующее: для локально изотропной турбулентности при больших числах Рейнольдса корреляционные моменты $\tau_{jk} \overline{\partial_k h_k''}$ и $\overline{q_k \partial_k u_i''}$, а тем самым и член с вязкой диссипацией ε_{hj} , равны нулю. Диссипативная корреляция ε_{hj} будет также пренебрежимо мала в неизотропной турбулентности при условии, что турбулентное число Рейнольдса Re^T велико. Следовательно, для практических приложений необходимы модельные аппроксимации величины ε_{hj} только при малых числах Re^T , например, в приповерхностном слое. Корреляция давления с градиентом энтальпии $\overline{p'\partial_j h''}$ является эквивалентом корреляции давления с деформацией (65) в уравнении для тензора Рейнольдса. Когда прямая диссипация пренебрежимо мала, этот член обеспечивает механизм, который ограничивает рост потоков. Наиболее часто используемой аппроксимацией для корреляции давления с градиентом энтальпии $\overline{p'\partial_j h''}$ служит выражение, предложенное в Мониным [32] – первое слагаемое в (76). Второй аппроксимирующий член, связанный с величиной $P_{hj} \equiv -q_k^T \partial_k \langle u_j \rangle + \overline{\rho} G_{hj}$ определяет скорость генерации турбулентного теплового потока q_j^T под влиянием средней деформации, а также благодаря действию осреднённого градиента давления. И, хотя корреляция $\overline{p'\partial_j h''}$ силами плавучести, всё же силы плавучести приводят к росту вертикального потока турбулентного тепла при нестабильной стратификации среды и к его уменьшению – при стабильной.

Для свободных констант в соотношениях (75)-(77) на основе имеющихся в литературе сведений по моделированию плоских слоев смешения можно принять следующие значения:

$$K_{b2} = 6; K_{s1} = 0.4; K_{s2} = 0.5; c_3 = 0.8$$
 (78)

Для других типов течений эти константы подлежат дальнейшему уточнению.

Уравнения переноса турбулентных потоков диффузии. Уравнения переноса турбулентных потоков диффузии $J_{\alpha j}^T \equiv \overline{\rho} \langle z_{\alpha}'' u_j'' \rangle$ имеют вид:

$$\overline{\rho} \frac{D}{Dt} \left(J_{\alpha j}^{T} / \overline{\rho} \right) = -\partial_{k} J_{(z_{\alpha} u_{j})k}^{\Sigma} + R_{jk} \partial_{k} \langle z_{\alpha} \rangle - J_{\alpha k}^{T} \partial_{k} \langle u_{j} \rangle + \overline{p' \partial_{j} z''} + \overline{\rho} G_{\alpha j} + \sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s} \overline{\xi_{s} u_{j}''} - \overline{\rho} \varepsilon_{\alpha j}, \quad (\alpha = 1, 2, ...N).$$

$$(79)$$

Здесь $J_{(z_{\alpha}u_{j})k}^{\Sigma} \equiv \overline{(\rho u_{j}'' u_{k}'' + p' \delta_{jk} - \tau_{jk}) z_{\alpha}''} + \overline{J_{\alpha k} u_{j}''} - диффузионный поток корреляции <math>\langle z_{\alpha}'' u_{j}'' \rangle$; $\overline{\rho} \varepsilon_{\alpha j} \equiv \overline{\rho} \langle \varepsilon_{(z_{\alpha}u)j} \rangle \equiv \overline{\tau_{jk} \partial_{k} z_{\alpha}'' - J_{\alpha k} \partial_{k} u''} -$ скорость (векторная величина) разрушения корреляции $\langle z_{\alpha}'' u_{j}'' \rangle$ вследствие молекулярных процессов вязкости и диффузии; $\rho G_{\alpha j} = -\frac{\langle h z_{\alpha}'' \rangle}{\langle c_{p} \rangle \langle T \rangle} \partial_{j} \overline{p}$ – скорость генерации потока турбулентной диффузии $J_{\alpha j}^{T}$, обусловленная градиентом осредненного давления. Члены урав-

нения (79), включающие корреляции с пульсациями гидродинамической скорости и химических источников вещества сорта α, согласно формулам (34), приобретают следующий вид:

$$\overline{\sigma_{\alpha}u_{j}''} = \sum_{s=1}^{r} \nu_{\alpha s} \overline{\xi_{s}u_{j}''} = \overline{u_{j}''} \left(\sum_{s=1}^{r} \nu_{\alpha s} \xi_{s} (\langle T \rangle, \overline{n}_{\alpha}) \right) + \sum_{s=1}^{r} \nu_{\alpha s} \overline{\xi_{s}'u_{j}''} =$$
$$= \overline{\rho} \mathfrak{I}_{0\alpha}^{\text{Ch}} \langle hu_{j}'' \rangle + \overline{\rho} \sum_{\beta=1}^{N} \mathfrak{I}_{\alpha\beta}^{\text{Ch}} \langle z_{\alpha}''u_{j}'' \rangle.$$
(80)

Для аппроксимации диссипативных и диффузионных членов уравнений переноса потоков диффузии $J_{\alpha j}^{T}$ будем использовать следующие простые выражения

$$J_{(z_{\alpha}u_{j})k}^{\Sigma} = -\left(c_{\alpha 1}L\langle b \rangle^{\frac{1}{2}} + c_{\alpha 2}(\chi + \nu)\right)\partial_{k}J_{\alpha j}^{T}, \qquad (81)$$

$$\overline{p'\partial_j z''_{\alpha}} = -K_{\alpha 1} \frac{\langle b \rangle^{\frac{1}{2}}}{L} J^{turb}_{\alpha j} - K_{\alpha 2} P_{\alpha j}, \qquad (82)$$

$$\overline{\rho} \ \varepsilon_{\alpha j} = K_{b2} \frac{\nu + \chi}{2L^2} \mathbf{J}_{\alpha j}^{turb} \ . \tag{83}$$

Здесь коэффициенты $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $c_{\alpha 1}$, $c_{\alpha 2}$ ($\alpha = 1, 2, ..., N$) – эмпирические постоянные, величина $P_{\alpha j} \equiv -J_{\alpha k}^T \partial_k \langle u_j \rangle + \bar{\rho} G_{\alpha j}$ характеризует скорость генерации турбулентного потока диффузии $J_{\alpha j}^T$ вследствие средней деформации среды и эффектов плавучести. Для численных значений универсальных констант модели, ввиду полного отсутствия в литературе необходимых сведений, полученных *ad hoc*, воспользуемся значениями, аналогичными (78):

$$K_{b2} = 6; \ K_{\alpha 1} = 0.4; \ K_{\alpha 2} = 0.5; \ c_{\alpha 1} = 0.8,$$
 (84)

что, по-видимому, возможно для пассивной (нереагирующей) смеси. В случае же химически активной смеси для точного определения этих констант необходимы дополнительные специальные эксперименты, позволяющие моделировать частные случаи реагирующей турбулентности.

Уравнение переноса среднеквадратичных пульсаций энтальпии смеси. Для развитой турбулентности уравнение переноса дисперсии энтальпии имеет вид

$$\overline{\rho}\frac{D}{Dt}\langle \frac{1}{2}h''^2\rangle + \partial_j J_{hj}^{\Sigma} = -q_j^T \left(\partial_j \langle h \rangle - \frac{1}{\overline{\rho}}\partial_j \overline{p}\right) - \overline{\rho}\varepsilon_h, \qquad (85)$$

где $J_h^{\Sigma} \equiv \frac{1}{2}q_j^{turb} + \overline{h''q_j} - диффузионный поток дисперсии <math>\langle h''^2 \rangle$; $\overline{\rho} \varepsilon_H \equiv -\overline{q_j \partial_j h''} -$ скорость скалярной диссипации среднего квадрата пульсаций энтальпии под воздействием процессов молекулярной температуропроводности.

В большинстве известных моделей, аппроксимирующих диффузионные слагаемые уравнения (85), принимаются следующие соотношения для потока J_{hi}^{Σ} и скорости диссипации $\bar{\rho}\varepsilon_h$ величины $\langle h''^2 \rangle$,

$$J_{hj}^{\Sigma} = -\left(c_5 L\langle b \rangle^{\frac{1}{2}} + c_6 \chi\right) \partial_j \left(\overline{\rho} \langle h''^2 \rangle / 2\right).$$
(86)

$$\overline{\rho}\varepsilon_{h} = K_{h1} \frac{\overline{\rho}\langle b \rangle^{\frac{1}{2}} \langle h''^{2} \rangle}{L} + K_{h2} \frac{\chi \rho h''^{2}}{L^{2}}.$$
(87)

Здесь K_{H1}, K_{H2}, c_5, c_6 – универсальные константы, причем константы K_{H2} и c_6 существенны только при малых значениях турбулентного числа Рейнольдса Re^T , т.е. когда $K_{h1}PrRe^T/K_{h2} \leq 0(1)$ и $c_5PrRe^T/c_6 \leq 0(1)$; здесь $Pr = v/\chi$ – молекулярное число Прандтля. На основе сведений, приведенных в [36], имеем:

$$K_{h1} = 0.45; \quad K_{h2} = 3; \quad c_5 = 0.3 \pm 0.05.$$
 (88)

Уравнение переноса корреляций, связанных с пульсациями энтальпии и состава смеси. Уравнения переноса корреляций $\langle h'' z''_{\alpha} \rangle$ имеет следующий вид:

$$\overline{\rho} \frac{D}{Dt} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle + \partial_{j} J_{(hz_{\alpha})j}^{\Sigma} = -q_{j}^{turb} \partial_{j} \langle z_{\alpha} \rangle - J_{\alpha j}^{turb} \left(\partial_{j} \langle h \rangle - \partial_{j} \overline{p} / \overline{\rho} \right) + \sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s} \overline{\xi_{s}} \overline{h''} + \overline{z_{\alpha}''} \left(\frac{dp'}{dt} + \tau_{ij} \partial_{j} u_{i}'' \right) - \overline{\rho} \varepsilon_{h\alpha}, \quad (\alpha = 1, 2, ..., N)$$

$$(89)$$

где $J_{(hz_{\alpha})j}^{\Sigma} \equiv \overline{\rho h'' z_{\alpha}'' u_{j}'' + h'' J_{\alpha j}} + z_{\alpha}'' q_{j}$ – диффузионный поток корреляции $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$; $\overline{\rho} \varepsilon_{h\alpha} = -\overline{q_{j} \partial_{j} z_{\alpha}''} - \overline{J_{\alpha j} \partial_{j} h''}$ – скорость диссипации корреляции $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$ под воздействием молекулярных процессов и температуропроводности. Предпоследнее слагаемое в правой части уравнения (89), малое по сравнению с диссипативным членом [12], будем далее опускать.

Слагаемые, включающие пульсации энтальпии и химических источников вещества сорта α, согласно формулам (34), приобретают вид

$$\sum_{s=1}^{r} \mathbf{v}_{\alpha s} \overline{\xi_{s} h''} = \overline{h''} \left(\sum_{s=1}^{r} \mathbf{v}_{\alpha s} \xi_{s} (\langle T \rangle, \overline{n}_{\alpha}) \right) + \sum_{s=1}^{r} \mathbf{v}_{\alpha s} \overline{\xi_{s}' h''} = \overline{\rho} \mathcal{L}_{0\alpha}^{\mathrm{Ch}} \langle H''^{2} \rangle + \overline{\rho} \sum_{\beta=1}^{N} \mathcal{L}_{\alpha\beta}^{\mathrm{Ch}} \langle z_{\alpha}'' h'' \rangle$$

Диссипативные и диффузионные члены уравнения переноса (89) можно

аппроксимировать с помощью соотношений:

$$\overline{\rho}\varepsilon_{h\alpha} = K_{h\alpha1} \frac{\overline{\rho}\langle b \rangle^{\frac{1}{2}}}{L} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle + K_{h\alpha2} \frac{\overline{\rho}\chi}{L^2} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle, \qquad (90)$$

$$J_{(hz_{\alpha})j}^{\Sigma} = -\left(c_{h\alpha 1}L\langle b \rangle^{\frac{1}{2}} + c_{h\alpha 2}\chi\right)\partial_{j}\left(\overline{\rho}\langle h''z_{\alpha}''\rangle\right),\tag{91}$$

где

$$K_{H\alpha 1} = 0.45; K_{H\alpha 2} = 3; c_{H\alpha 1} = 0.3 \pm 0.05.$$

Уравнения переноса (89) также линейно зависимы. По этой причине одно из них может быть опущено. В этом случае дополнительным соотношением для

определения корреляций $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$ является равенство $\sum_{\alpha=1}^{N} m_{\alpha} \langle h z_{\alpha}'' \rangle = 0$.

Уравнения переноса корреляций, связанных с пульсациями состава. Симметричные по индексам α и β уравнения переноса для парных корреляций $\langle z''_{\alpha} z''_{\beta} \rangle$ имеют вид:

$$\overline{\rho} \frac{D}{Dt} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle + \partial_{j} J_{(\alpha\beta)j}^{\Sigma} = -J_{(\alpha)j}^{turb} \partial_{j} \langle z_{\beta} \rangle - J_{(\beta)j}^{turb} \partial_{j} \langle z_{\alpha} \rangle +$$

$$= \sum_{s=1}^{r} \left(\nu_{\alpha s} \overline{\xi_{s}} \overline{z_{\beta}''} + \nu_{\beta s} \overline{\xi_{s}} \overline{z_{\alpha}''} \right) - \overline{\rho} \varepsilon_{(\alpha\beta)}, \quad (\alpha, \beta = 1, 2, ...N), \qquad (92)$$

где $J_{\alpha\betaj}^{\Sigma} \equiv \overline{\rho z_{\alpha}'' z_{\beta}'' u_{j}''} + \overline{z_{\alpha}'' J_{\beta j} + z_{\beta}'' J_{\alpha j}} - диффузионный поток корреляции \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle;$ $\overline{\rho} \varepsilon_{\alpha\beta} \equiv -\overline{J_{\beta j} \partial_{j} z_{\alpha}'' + J_{\alpha j} \partial_{j} z_{\beta}''} - скалярная скорость разрушения корреляции \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle$ под воздействием процессов молекулярной диффузии. Слагаемые, содержащие парные корреляционные моменты пульсаций состава и скоростей химических реакций $\sum_{s=1}^{r} v_{\beta s} \overline{\xi_s z_{\alpha}''}$ и $\sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s} \overline{\xi_s z_{\beta}''}$, согласно формулам (34) принимают вид $\sum_{s=1}^{r} v_{\beta s} \overline{\xi_s z_{\alpha}''} = \overline{\rho} \mathfrak{I}_{0\beta}^{(Ch)} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle + \overline{\rho} \sum_{\gamma=1}^{N} \mathfrak{I}_{\gamma\beta}^{(Ch)} \langle z_{\gamma}'' z_{\alpha}'' \rangle,$ (93) $\sum_{s=1}^{r} v_{\alpha s} \overline{\xi_s z_{\beta}''} = \overline{\rho} \mathfrak{I}_{0\alpha}^{(Ch)} \langle h'' z_{\beta}'' \rangle + \overline{\rho} \sum_{\gamma=1}^{N} \mathfrak{I}_{\gamma\alpha}^{(Ch)} \langle z_{\gamma}'' z_{\beta}'' \rangle.$ (94)

Для аппроксимации диффузионных и диссипативных членов уравнения переноса корреляции $\langle z''_{\alpha} z''_{\beta} \rangle$ также можно использовать простые выражения

$$\overline{\rho}\varepsilon_{\alpha\beta} = K_{\alpha\beta1} \frac{\overline{\rho}\langle b \rangle^{\frac{1}{2}}}{L} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle + K_{\alpha\beta2} \frac{\overline{\rho}\chi}{L^2} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle$$
(95)

$$J_{(\alpha\beta)j}^{\Sigma} = -\left(c_{\alpha\beta1}L\langle b\rangle^{\frac{1}{2}} + c_{\alpha\beta2}\chi\right)\partial_{j}\left(\overline{\rho}\langle z_{\alpha}''z_{\beta}''\rangle\right).$$
(96)

Заметим, что уравнения (92) также линейно зависимы. Дополнительными соотношениями для определения корреляций $\langle z''_{\alpha} z''_{\beta} \rangle$ являются равенства

$$\sum_{\alpha=1}^{N} m_{\alpha} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle = 0, \quad \sum_{\beta=1}^{N} m_{\beta} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle = 0 \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N).$$
(97)

Итак, полученные в этом разделе разнообразные уравнения переноса для корреляционных моментов второго порядка замыкают, при том или ином способе моделирования макромасштаба турбулентности L, систему турбулентно осреднённых уравнений гидродинамики сжимаемой многокомпонентной смеси. В совокупности с осреднёнными гидродинамическими уравнениями они образуют достаточно сложную полуэмпирическую модель многокомпонентной турбулентности второго приближения, в рамках которой рассчитываются разнообразные, в том числе анизотропные, режимы турбулентного течения реагирующей газовой смеси. Приведённый вывод этих уравнений при систематическом использовании средневзвешенного осреднения Фавра даёт возможность не только проследить за всеми упрощающими допущениями, которые обычно делаются при их выводе, но и позволяет достаточно легко получить их модификации в случае турбулизованных течений гетерогенных или электропроводящих сред.

5. Локально равновесное приближение в моделях химической турбулентности

Полученные модельные уравнения переноса довольно сложны с вычислительной точки зрения и потому на современной стадии развития теории турбулентности смеси часто не очень удобны для практических приложений. Вместе с тем, они могут быть использованы для совершенствования более простых градиентных моделей. В частности, дифференциальные уравнения переноса для вторых корреляционных моментов можно упростить до алгебраических соотношений для этих же величин и использовать в дальнейшем при моделировании турбулентных коэффициентов переноса, фигурирующих в замыкающих градиентных соотношениях.

Итак, если предположить, что в структуре турбулентного поля имеется некоторое внутреннее равновесие с полем осреднённых термогидродинамических параметров, при котором конвективные и диффузионные члены в уравнениях переноса уравновешивают друг друга, то корреляционные моменты второго порядка R_{ij} , q_j^T , $\langle h''^2 \rangle$, $J_{\alpha j}^T$, $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$, $\langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle$ будут находиться в локальном равновесии друг с другом. Другими словами, они не будут изменяться как во времени так и в координатном пространстве. Это приближение (для случая одножидкостной среды) было названо Дональдсоном (1972) «сверхравновесным» приближением. В этом случае соотношения между корреляционными моментами второго порядка и градиентами характеристик основного течения, определяемые уравнениями (58), (74), (79), (85), (9) и (92), образуют схему замыкания второго порядка, или так называемую *K*-*meoрию турбулентности*. Она справедлива в случае, если: 1) любые изменения осреднённого течения являются очень медленными по сравнению с характерным для турбулентного движения временем $t_{turb} \sim L/\langle b \rangle$ и 2) пространственное изменение характеристик турбулентности мало на расстояниях порядка масштаба турбулентности L^{3} . Специфической областью, где оба условия удовлетворяются, является область пограничного слоя с постоянным потоком импульса, в которой отношение $L/\langle b \rangle$ близко к нулю.

Таким образом, в случае локально равновесного приближения приведенные выше дифференциальные уравнения переноса вырождаются, и мы получаем следующие алгебраические соотношения для определения следующих корреляционных моментов:

 $1. \underline{ypashehus \, \partial ns \, onpedenehus} \langle u_k'' u_j'' \rangle$ $(1-K_{p2}) \Big\{ -\langle u_k'' u_i'' \rangle \partial_i \langle u_j \rangle - \langle u_j'' u_i'' \rangle \partial_i \langle u_k \rangle + G_{kj} \Big\} + K_{p1} \frac{\sqrt{\langle b \rangle}}{L} \Big\{ -\langle u_k'' u_j'' \rangle + \frac{2}{3} \delta_{kj} \langle b \rangle \Big\}$ $+ \frac{2}{3} K_{p2} \delta_{kj} \Big\{ -\langle u_l'' u_m'' \rangle \partial_m \langle u_l \rangle + G \Big\} - \frac{2}{3} K_{b1} \delta_{kj} \frac{\langle b \rangle^{3/2}}{L} - K_{b2} \frac{\nu \langle u_k'' u_j'' \rangle}{L^2} = 0, \quad (98)$

2. <u>уравнения для определения (h"u"</u>)

$$\begin{cases} K_{s1} \frac{\sqrt{\langle b \rangle}}{L} + K_{b2} \frac{\nu + \chi}{2L^2} \\ \langle h'' u_j'' \rangle + \langle u_j'' u_k'' \rangle \\ \left\{ \partial_k \langle h \rangle - \frac{1}{\overline{\rho}} \partial_k \overline{p} \right\} + \\ + (1 - K_{s2}) \left\{ \partial_k \langle u_j \rangle \langle h'' u_k'' \rangle - G_{Hj} \right\} = 0, \quad (j = 1, 2, 3); \tag{99}$$

³) Заметим, что в общем случае эти два условия удовлетворяются одновременно очень редко, поскольку масштаб турбулентности *L* обычно определяется пространственными изменениями течения.

3. <u>уравнение для определения</u> $\langle h''^2 \rangle$

$$\left\{K_{h1}\frac{\sqrt{\langle b\rangle}}{L} + K_{h2}\frac{\chi}{L^2}\right\}\langle h''^2\rangle + \langle h''u_j''\rangle\left\{\partial_j\langle h\rangle - \frac{1}{\overline{\rho}}\partial_j\overline{p}\right\} = 0; \quad (100)$$

4. <u>уравнения для определения</u> $\langle z''_{\alpha} u''_{j} \rangle$

$$\left\{ K_{\alpha 1} \frac{\sqrt{\langle b \rangle}}{L} + K_{b 2} \frac{\nu + \chi}{2L^2} \right\} \langle z_{\alpha}'' u_{j}'' \rangle + (1 - K_{\alpha 2}) \left\{ \partial_k \langle u_j \rangle \langle z_{\alpha}'' u_k'' \rangle - G_{\alpha j} \right\} - \langle u_k'' u_j'' \rangle \partial_k \langle z_{\alpha} \rangle - \left\{ -\Im_{0\alpha}^{\text{Ch}} \langle h'' u_j'' \rangle - \sum_{\beta=1}^N \Im_{\alpha\beta}^{\text{Ch}} \langle z_{\alpha}'' u_j'' \rangle = 0, \quad (\alpha = 1, 2, ..., N); \quad (101)$$

5<u>. уравнения для определения</u> $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$

$$\begin{cases} K_{h\alpha 1} \frac{\sqrt{\langle b \rangle}}{L} + K_{h\alpha 2} \frac{\chi}{L^2} \end{cases} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle + \langle h'' u_k'' \rangle \partial_k \langle z_{\alpha} \rangle + \langle z_{\alpha}'' u_k'' \rangle \left\{ \partial_k \langle h \rangle - \frac{1}{\overline{\rho}} \partial_k \overline{p} \right\} - \\ -\Im_{0\alpha}^{\text{Ch}} \langle h''^2 \rangle - \sum_{\beta=1}^N \Im_{\alpha\beta}^{\text{Ch}} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle = 0, \quad (\alpha = 1, 2, ..., N); \quad (102)$$

6.
$$\underline{ypashehus \, dns \, onpedenehus} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle$$

$$\left\{ K_{\alpha\beta1} \frac{\sqrt{\langle b \rangle}}{L} + K_{\alpha\beta2} \frac{\chi}{L^2} \right\} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle + \langle z_{\alpha}'' u_{k}'' \rangle \partial_k \langle z_{\beta} \rangle + \langle z_{\beta}'' u_{k}'' \rangle \partial_k \langle z_{\alpha} \rangle - \mathfrak{I}_{0\beta}^{(Ch)} \langle h'' z_{\alpha}'' \rangle - \mathfrak{I}_{0\alpha}^{(Ch)} \langle h'' z_{\beta}'' \rangle - \mathfrak{I}_{\gamma\beta}^{(Ch)} \langle z_{\gamma}'' z_{\alpha}'' \rangle - \mathfrak{I}_{\gamma\alpha}^{N} \mathfrak{I}_{\gamma\alpha}^{(Ch)} \langle z_{\gamma}'' z_{\beta}'' \rangle = 0, \quad (\alpha, \beta = 1, 2, ..., N).$$

$$(103)$$

Здесь функции G_{ki} , G, G_{hk} и $G_{\alpha k}$, описывающие обусловленную градиентом осреднённого давления скорость генерацию соответствующей корреляции, определены соотношениями

$$\overline{\rho}G_{ki} = -\left\{ \langle h''u_k'' \rangle \partial_i \overline{p} + \langle h''u_i'' \rangle \partial_k \overline{p} \right\} / \langle c_p \rangle \langle T \rangle - -\overline{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \left(\partial_i \overline{p} / \overline{n} - F_{\alpha i} \right) \langle z_\alpha''u_k'' \rangle + \left(\partial_k \overline{p} / \overline{n} - F_{\alpha k} \right) \langle z_\alpha''u_i'' \rangle \right\},$$
(104)

$$\overline{\rho}G = -\frac{\langle h'' u_k'' \rangle}{\langle c_p \rangle \langle T \rangle} \partial_k \overline{p} + \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \sum_{\beta=1}^N \frac{\overline{n}_\beta (c_{p\alpha} - c_{p\beta})}{\overline{n} \langle c_p \rangle} \partial_k \overline{p} + F_{\alpha k} \right\} \langle z_\alpha u_k'' \rangle, \quad (105)$$

$$\overline{\rho}G_{hk} \equiv \left\{ -\frac{\langle h''^2 \rangle}{\langle c_p \rangle \langle T \rangle} + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \frac{\overline{n}_\beta (c_{p\alpha} - c_{p\beta})}{\overline{n} \langle c_p \rangle} \langle z_\alpha'' h'' \rangle \right\},\tag{106}$$

$$\overline{\rho}G_{\alpha k} = -\left\{\frac{\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle}{\langle c_p \rangle \langle T \rangle} - \sum_{\alpha=1}^{N} \sum_{\beta=1}^{N} \frac{\overline{n}_{\beta}(c_{p\alpha} - c_{p\beta})}{\overline{n} \langle c_p \rangle} \langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle\right\} \widehat{o}_k \overline{p} \,. \tag{107}$$

Уравнения (98)-(107) образуют систему алгебраических уравнений, связывающих корреляционные моменты второго порядка $\langle u_k'' u_j'' \rangle$, $\langle h'' u_j'' \rangle$, $\langle z_{\alpha}'' u_j'' \rangle$, $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$, $\langle h'' z_{\alpha}'' \rangle$, $\langle z_{\alpha}'' z_{\beta}'' \rangle$ с параметрами состояния осреднённого течения, а также с масштабом турбулентности L^{4} и с энергией турбулентности $\langle b \rangle$. При этом энергия турбулентности $\langle b \rangle$ определяется уравнением (70).

Если теперь, следуя Монину [32], предположить справедливость следующих градиентных соотношений:

$$J_{\alpha k}^{T} \equiv \overline{\rho} \langle z_{\alpha}'' u_{k}'' \rangle = -\overline{\rho} D_{(\alpha)kj}^{T} \partial_{j} \langle z_{\alpha} \rangle, \qquad (108)$$

$$q_k^T \equiv \overline{\rho} \langle h'' u_k'' \rangle = -\overline{\rho} \chi_{kj}^{turb} \Big(\partial_j \langle h \rangle - \partial_j \overline{p} / \overline{\rho} \Big), \tag{109}$$

$$R_{ij} = -\overline{\rho} \langle u_i'' u_j'' \rangle = -\frac{2}{3} \overline{\rho} \langle b \rangle \delta_{ij} + \frac{1}{2} \overline{\rho} (v_{is}^T \delta_{jl} + v_{js}^T \delta_{il}) (\partial_l \langle u_s \rangle + \partial_s \langle u_l \rangle),$$
(110)

то из алгебраических уравнений (98)-(107) можно найти явный вид тензоров турбулентной вязкости v_{is}^{turb} , температуропроводности χ_{kj}^{turb} и диффузии $D_{(\alpha)kj}^{turb}$. Важно иметь в виду, что при этом мы учитываем влияние химических реакций на интенсивность пульсаций энтальпии и состава и, тем самым, на коэффициенты турбулентного переноса импульса, тепла и массы.

В заключение этого раздела заметим следующее. Если привлечь к анализу полное уравнение переноса энергии турбулентности (70), в котором фигурируют как конвективные, так и диффузионные члены (разумеется, что в этом случае одно из уравнений (98) должно быть опущено), то это позволит учесть до некоторой степени эффекты «неравновесности» турбулентного поля пульсирующих термогидродинамических параметров в реальном потоке, поскольку в этом случае корреляционные характеристики турбулентности в каждой пространственной точке будут связанными с полем определяющих параметров в

⁴) Для определения масштаба турбулентности можно использовать либо простое алгебраическое соотношение [33], либо соответствующее уравнение переноса [18]. Следует, однако, заметить, что в настоящее время подобного рода уравнений так же много, как и авторов, поскольку обычно приходится моделировать каждый член таких уравнений.

различных областях течения. Применение полного уравнения (70) для определения турбулентной энергии может быть оправдано ещё и тем обстоятельством, что время установления «локально равновесной» структуры турбулентного поля много меньше времени, необходимого для достижения полем турбулентных скоростей такого уровня, который соответствует равенству производства и диссипации турбулентной энергии [11,12]. Подобный подход (называемый *квазиравновесным приближением*), предложенный впервые Левелленом [36] для случая однокомпонентной жидкости, по-видимому, точнее «сверхравновесного приближения» (при котором в уравнениях опускаются все указанные члены).

6. Заключение

Подчеркнём ограниченные возможности инвариантного моделирования химической турбулентности. Само существование определённой формы аппроксимирующих соотношений для корреляций высокого порядка в уравнениях переноса для вторых корреляционных моментов и часто делающиеся предположения о постоянстве входящих в них эмпирических констант, возможно всё же только при существовании некоторого *«равновесного»* (для рассматриваемого режима турбулентного течения) спектра турбулентности. Для другого режима турбулентного течения форма аппроксимирующих соотношений и тем более значения констант могут сильно отличаться [12,13]. Тем не менее, схемы замыкания, использующие эволюционные уравнения переноса для вторых моментов, по своим потенциальным возможностям представляются более перспективными, чем схемы первого порядка, рассмотренные, в частности, в более ранних работах автора [17,27].

Важно иметь в виду, что при использовании метода инвариантного моделирования турбулентных движений во втором порядке замыкания нельзя точно рассчитать течения, в которых осуществляется перенос какой-либо величины в направлении, противоположном её градиенту [29,30]. Подобное явление имеет место, в частности, в пограничном слое земной атмосферы (который стратифицирован по температуре нейтрально) в случае развитой конвекции, когда поток тепла направлен вверх против градиента потенциальной температуры. Это приводит к тому, что коэффициент турбулентной теплопроводности в формуле (67), вычисленный в рамках *К-теории*, оказывается отрицательной величиной (эффект отрицательной теплопроводности). Адекватная теория противоградиентного переноса может быть развита, по-видимому, только на основе моделей третьего порядка замыкания.

И, наконец, отметим, что в настоящее время задачи со сложной геометрией (пространственные течения, отрывные течения и др.) практически не рассчитываются с помощью полуэмпирических теорий турбулентности. Это очевидно связано с недостаточной универсальностью существующих на сегодня полуэмпирических теорий реагирующей турбулентности, не учитывающих, в частности, роль крупных вихрей (размер которых соизмерим с поперечными размерами потока и характеристики которых существенно зависят от геометрии задачи и от режима течения) в механизме турбулентного переноса. Подобные задачи решаются обычно в постановке прямого численного моделирования крупномасштабной турбулентности [1,2,13].

Библиографический список

1. Белоцерковский О.М. Прямое численное моделирование свободной развитой турбулентности// Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1985. Т. 25. № 12. С. 1856-1882.

2. *Белоцерковский О.М.* Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Наука. I изд., 1984; II изд. (исправленное и дополненное), 1994. 519 с.

3. *Борги Р*. Модели для численных расчетов турбулентного горения. В кн.: Методы расчета турбулентных течений. М.: Мир. 1984. С. 399-455.

4. *О'Брайен Е.Е.* Метод функций плотности вероятности (*ФПВ*) в теории турбулентных течений с химическими реакциями. В кн.: Турбулентные течения реагирующих газов. М.: Мир. 1983. С. 252-296.

5. Буссинеск (Boussinesq J.). Essai sur la theorie des eaux courantes. Memoires presentees par diverses Savants a l'Acad. d. Sci. Paris, 1977. V. 23. P. 46.

6. Ван Мигем Ж. Энергетика атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат. 1977. 327 с.

7. Вилкокс Д.С.(Wilcox D.C.) Turbulence Modeling for CFD.1994. DCW Industries, Inc. La Canada, California. 460 p.

8. Дональдсон C.P.(Donaldson, C. duP.). Construction of a Dynamic Model of the Production of Atmospheric Turbulence and the Dispersal of Atmospheric Pollutants.1972. ARAP Report No. 175, Aeronautical Research Associates of Princeton, Princeton, NJ.

9. Дональдсон С.Р. Расчет турбулентных течений в атмосфере и изолированном вихре// Ракетная техника и космонавтика. 1972. Т. 10. № 1. С. 4-14.

10. Земан О., Ламли Дж. Л. Эффекты плавучести в турбулентных пограничных слоях с эжекцией: исследование замыкания второго порядка. В кн.: Турбулентные сдвиговые течения, 1. М.: Машиностроение. 1982. С.310-322. (Turbulent Shear Flows I./ Editors F. Durst, B.E. Launder, F.W. Schmidt, J.H. Whitelaw. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1979).

11. *Иевлев* (*Ievlev V.M.*). The methods of calculation of the turbulentboundary layer for a high–temperature gaseous flow. AIAA 9th Aerospace Sci. Meeting, N.–Y. AIAA Paper. 1971. № 71–165. 15р.

12. Иевлев В.М. Турбулентное движение высокотемпературных сплошных сред. М.: Наука. 1975. 256 с.

13. Иевлев В.М. Численное моделирование турбулентных течений. М.: Наука. 1990. 215 с.

14. Келлер, Фридман (Keller L.V., Friedman A.A.). Differentialgleichungen fur die turbulente Bewegung einer kompressiblen Flussigkeit.–In: Proc. I Intern. Congress Appl. Mech., Delft. 1924. S. 395-405.

15. Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Самарская Е.А., Тишкин В.Ф. Методы математического моделирования окружающей среды. М.: Наука. 2000. 254 с.

16. Колесниченко А.В. Методы механики сплошной среды для описания турбулентных многокомпонентных смесей с химическими реакциями и процессами тепло-и массопереноса// Труды V Всесоюзного съезда по теоретической и прикладной механике. Краткие тексты докл. Алма-Ата. 1981. С.123-126.

17. Колесниченко А.В. Соотношения Стефана-Максвелла и поток тепла для турбулентных многокомпонентных сплошных сред. В сб.: Проблемы современной механики (к 90-летию акад. Л.И. Седова)/ Под ред. акад. С.С. Григоряна. М.: Из-во Моск. ун-та. 1998. С.52-75.

18. Колесниченко А.В., Маров М.Я. Турбулентность и самоорганизация. Проблемы моделирования космических и природных сред. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2009. 632 с.

19. Колесниченко А.В., Маров М.Я. Турбулентность многокомпонентных сред. М.: МАИК-Наука. 1999. 336 с.

20. *Колесниченко А.В.* К теории турбулентности в планетных атмосферах. Численное моделирование структурных параметров//Астрон. вестн. 1995. Т. 29. № 2. С. 133-154.

21. Колесниченко А.В., Маров М.Я. К моделированию параметров многокомпонентной турбулентности в свободной атмосфере по оптическим измерениям флуктуаций показателя преломления воздуха// Космические исследования. 1996. Т. 34. № 1. С. 36-57.

22. *Колесниченко А.В., Маров М.Я.* Моделирование коэффициентов турбулентного переноса в средней атмосфере по измерениям флуктуаций показателя преломления воздуха// Космонавтика и ракетостроение. 2000. № 19. С. 131-144.

23. *Колесниченко А.В.* Моделирование коэффициентов турбулентного переноса в газопылевом аккреционном диске// Астроном. вестник. 2000. Т.34. № 6. С. 516-528.

24. *Куо К. К., Ачарья Р. (Кио К. К., Acharya R.).* Fundamentals of turbulent and multiphase combustion. 2012. John Wiley & Sons, Inc. 879 p.

25. *Левеллен В., Теске М, Дональдсон С.* Применение полуэмпирических уравнений пульсационного движения к расчету осесимметричных следов// Ракетная техника и космонавтика. 1974. Т.12. №.5. С.56-63.

26. Либби П.А., Вильямс Ф.А.(Libby P.A., Williams F. A.). Turbulent reacting flows. 1980. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 243 p.

27. Маров М.Я., Колесниченко А.В. Введение в планетную аэрономию. М.: Наука. 1987. 456 с.

28. *Маров М.Я., Колесниченко А.В.* О некоторых проблемах теоретического моделирования верхней атмосферы// Наблюдения искусственных спутников Земли. Будапешт, 1983. № 20. С. 29-54.

29. *Меллор, Ямада (Mellor G.L., YamadaT.*). Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems// Rev. Geoph. and Space Phys. 1982. V. 20. P. 851-875.

30. Меллор, Ямада (Mellor G.L., YamadaT.). A hierarhy of turbulence closure models for planetary boundary layers// J. Atmos. Sci. 1974. V. 31. P. 1791-1806.

31. Миллионщиков М.Д. К теории однородной изотропной турбулентности// ДАН СССР. 1941. Т.32. С. 611-614.

32. *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидродинамика. М.: Наука. Т. 1, 1965. 640 с.; С.–П.: Гидрометеоиздат, 1992. 694 с.

33. *Морковин (Morkovin M.V.)*. Effects of compressibility on turbulent flow// Mechanics of Turbulence, 367 Gordon and Breach. N.Y., 1961.

34. *Пригожин И., Дефей Р.* Химическая термодинамика. Новосибирск: Наука. 1966. 509 с.

35. *Седов Л.И.* О перспективных направлениях и задачах в механике сплошных сред. В кн.: Размышления о науке и об ученых. М.: Наука. 1980. С. 173-197.

36. Левеллен В. Метод инвариантного моделирования. С. 262-310// В кн: Турбулентность, принципы и применения. / Под ред. У.Форста, Т. Моулдена. М.: Мир, 1980.535 с. (Handbook of Turbulence, Fundamentals and Applications, V.1. Edited by W.Frost, T. Moulden. Plenum press, New York, London, 1977).

37. Турбулентные сдвиговые течения–І./ Под ред. Ф. Дурста, Б.Е. Лаундера, Ф.В. Шмидта, Дж.Х. Уайтлоу. М.: Машиностроение. 1982. 432 с.

38. Турбулентные течения реагирующих газов/ Под ред. П. Либби и Ф. Вильямса. М.: Мир. 1983. 325 с.

39. Шринивасан и др.(Srinivasan R., Giddens D.P., Bangret L.H., Wu J.C.). Turbulent Plane Couette Flow Using Probability Distribution Functions// Physics of Fluids. 1977. V. 20. P. 557.

Оглавление

| Вв | Введение3 | |
|----|--|-----|
| 1. | Осреднённые гидродинамические уравнения многокомпонентной газовой смеси | . 5 |
| 2. | Неравновесная аррениусова кинетика в турбулентном потоке | 10 |
| 3. | Соотношения для корреляционных членов с пульсирующей массовой плотностью2 | 20 |
| 4. | Модельные уравнения переноса вторых моментов | 22 |
| 5. | Локально равновесное приближение в моделях химической турбулентности | 36 |
| 6. | Заключение | 10 |
| Би | блиографический список | 11 |