

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУРБУЛЕНТНЫХ И ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ

Том 3



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

Фундаментальные проблемы моделирования
турбулентных
и двухфазных течений

Том 3

Под редакцией
академика РАН *А. А. Саркисова*,
академика РАН *Г. А. Филитова*

Москва 2012

УДК 621.039
ББК 31.4
Ф94

Рецензенты:

доктор физико-математических наук *М. С. Вещунов*,
доктор физико-математических наук *О. И. Мелихов*

Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений : Т. 3 / под ред. акад. РАН А. А. Саркисова и Г. А. Филиппова ; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН. — М. : Комтехпринт, 2012. — 487 с. : ил. — ISBN 978-5-903511-32-7 (в пер.).

В сборнике представлены работы научных сотрудников Института проблем безопасного развития атомной энергетики РАН и Института теплофизики СО РАН, выполненные в рамках Программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения, механики и проблем управления РАН «Фундаментальные процессы в многофазных и турбулентных потоках». Эти работы посвящены развитию теоретических, экспериментальных и численных методов моделирования различных турбулентных и двухфазных течений. Сборник охватывает широкий диапазон физических явлений: дозвуковые и трансзвуковые потоки с аэрозольными частицами, каплями и пузырьками; однородную, струйную и пристеночную турбулентность; тепломассообмен при фазовых переходах; образование когерентных структур и кластеризацию частиц в турбулентной среде; аномальную дисперсию примеси в сильно неоднородных средах.

Для научных работников, а также аспирантов и студентов, специализирующихся в области моделирования турбулентных течений, многофазных сред и механики аэрозолей.

Fundamental problems in modeling of turbulent and two-phase flows : Vol. 3 / Ed. by A. A. Sarkisov and G. A. Filippov. — Moscow : ComTechPrint, 2012. — 487 p. : ill. — ISBN 978-5-903511-32-7 (bound).

The book presents the results of investigations obtained at the Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences and the Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. These works were performed under the Program of Basis Research of the Energy, Engineering Industry, Mechanics and Management Problems Branch of the Russian Academy of Sciences. The investigations are aimed at development of theoretical, experimental, and numerical methods of modelling of various turbulent and two-phase flows. The book covers a wide range of physical phenomena: under-sonic and transonic flows laden with aerosol particles, droplets and bubbles; homogeneous, jet, and wall-bounded turbulence; heat-and-mass transfer at phase transitions; formation of coherent structures and clustering of particles in turbulent flows; anomalous transport of admixture in strongly inhomogeneous media.

The book is assigned for students and specialists in the field of modeling of turbulent flows, multiphase media and aerosol mechanics.

ISBN 978-5-903511-32-7



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту № 12-08-07129.

© Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2012
© Коллектив авторов, 2012
© Издательство «Комтехпринт», 2012

Содержание

Предисловие.....	5
Статистическая модель движения и теплообмена частиц произвольной плотности в турбулентных потоках <i>Л. И. Зайчик, В. М. Алипченков</i>	7
Нелинейная модель турбулентной вязкости для двухфазных потоков с мелкодисперсными частицами <i>В. М. Алипченков, Л. И. Зайчик, Р. В. Мукин, Л. С. Мукина, В. Ф. Стрижов</i>	81
Моделирование турбулентных течений по схеме «Кабаре» в двумерной и трехмерной несжимаемой жидкости <i>В. М. Головизнин, В. Ю. Готов, А. В. Данилин, И. А. Короткин, С. А. Карабасов</i>	113
Новый беспараметрический вычислительный метод прямого моделирования термоконвективных течений в замкнутых двумерных и трехмерных областях <i>В. М. Головизнин, С. А. Карабасов, И. А. Короткин, С. А. Финогенов</i>	186
Аномальные режимы переноса примеси в регулярно-неоднородных резкоконтрастных средах <i>Л. А. Большов, О. А. Дворецкая, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев</i>	242
Аномальные режимы переноса примеси, обусловленные процессами сорбции в геологических средах <i>Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев</i>	293

Разработка численных методов моделирования двухфазных течений с явным выделением межфазной границы <i>А. А. Леонов, В. В. Чуданов, А. Е. Аксенова</i>	351
Асимптотический анализ осаждения инерционных частиц из турбулентного потока с помощью модели переноса вторых моментов <i>Д. Ф. Сиковский</i>	432
Экспериментальное исследование кавитационного обтекания двумерных гидропрофилей <i>С. В. Алексеенко, А. Ю. Кравцова, Д. М. Маркович, К. С. Первунин, М. В. Тимошевский</i>	465

Предисловие

Несмотря на постоянно возрастающие возможности вычислительной техники вообще и быстродействия многопроцессорных вычислительных комплексов в частности, наиболее важные области знаний, на которые опирается современная энергетика, в том числе и атомная, достаточно слабо вовлечены в процесс глобального математического моделирования. Причина кроется в специфике многофазных турбулентных течений. Существующие математические модели этих процессов настолько грубы, что для их реализации вполне достаточно возможностей персональных компьютеров. Переход к массивным параллельным вычислениям просто не может привести к каким-либо качественно новым результатам.

Действительно, если окинуть взглядом историю развития математических моделей даже однофазных турбулентных течений, легко заметить, что подавляющая их часть базируется на осредненных по времени уравнениях Рейнольдса с различными способами их замыкания, ориентированными на достаточно узкие классы течений и существенно опирающимися на экспериментальные данные. Численное решение этих уравнений дает удовлетворительное согласие с экспериментом относительно средних параметров уже на относительно грубых расчетных сетках. При переходе к более подробным расчетным сеткам эти модели в лучшем случае только воспроизводят это решение, а в худшем случае результаты становятся только хуже. Вследствие этого смена многих поколений вычислительной техники слабо отражалась на точности прикладных расчетов, пока количество не перешло в качество.

При появлении компьютеров с быстродействием порядка одного терафлопса осреднение по времени оказалось возможно заменить осреднением по пространственному масштабу порядка размеров ячейки расчетной сетки. Это позволило рассчитывать нестационарные вихревые структуры, размеры которых сопоставимы с размерами расчетных ячеек. Появился стимул к измельчению сеток для выявления более тонких деталей изучаемых течений и сформировался запрос на массивные параллельные вычисления.

Таким образом, в моделировании однофазных турбулентных течений в последние годы наметился серьезный прорыв, в который и устремились десятки и сотни научных коллективов, углубляя и расширяя достигнутые успехи. Следует отметить, однако, что до расчетов развитых турбулентных течений при больших числах Рейнольдса из первых принципов, т. е. без привлечения эмпирических данных, пока еще далеко.

Что касается многофазных течений, то здесь все еще господствует «грубый эмпиризм». В наибольшей степени это касается парожидкостных потоков. В отличие от однофазной гидродинамики, где общепризнано, что для описа-

ния всего многообразия течений достаточно системы уравнений Навье — Стокса, для парожидкостных потоков такой общепризнанной математической модели пока не существует. Прямое численное моделирование из первых принципов требует вычислительных мощностей петафлопсного и эксафлопсного диапазонов даже для максимально упрощенных постановок. Однако именно это направление можно считать в настоящее время наиболее перспективным.

Значительно лучше обстоят дела в области математического моделирования двухфазных течений, когда одна из фаз представляет собой твердые частицы или аэрозоли, не оказывающие обратного влияния на динамику основного потока. Это направление можно считать полностью сформировавшимся в теоретическом плане, и дальнейшее его развитие связано главным образом с решением значимых прикладных задач.

Целью настоящей книги, третьей по счету в серии, является дальнейшее развитие новых теоретических, экспериментальных и численных подходов к моделированию различных турбулентных и двухфазных течений. В ней представлены работы научных групп двух институтов: Института проблем безопасного развития атомной энергетики РАН и Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН. Эти исследования выполнены в рамках программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения, механики и проблем управления РАН «Фундаментальные процессы в многофазных и турбулентных потоках» и грантов Российского фонда фундаментальных исследований.

Конечной целью упомянутой программы является разработка методов компьютерного моделирования нового поколения, ориентированного на массивные параллельные вычисления и создание научных основ гидродинамики и теплопереноса в многофазных, турбулентных и метастабильных потоках с когерентными структурами и аномальными процессами переноса.

Мы надеемся, что это издание будет способствовать повышению интереса к фундаментальным исследованиям гидродинамики и теплопереноса турбулентных и многофазных течений. Полагаем, что изложенные в книге теоретические, экспериментальные и численные методы найдут применение в различных прикладных задачах и в первую очередь в атомной энергетике и энергомашиностроении.

Следует отметить, что сама идея выпуска таких сборников принадлежала профессору Леониду Исааковичу Зайчику, недавно безвременно ушедшему от нас. Два первых тома были выпущены во многом благодаря его большому вкладу и неумной энергии. Мы посвящаем этот том светлой памяти замечательного человека и выдающегося ученого Леонида Исааковича Зайчика.

*Академик РАН А. А. Саркисов,
академик РАН Г. А. Филиппов*

Статистическая модель движения и теплообмена частиц произвольной плотности в турбулентных потоках

Л. И. Зайчик, В. М. Алипченков

1. Введение

В литературе известны два подхода к построению континуальных моделей движения и теплообмена частиц в турбулентных потоках — феноменологический и статистический. Феноменологический подход, используемый большинством авторов, основан на аналогии с однофазной турбулентностью и привлекает традиционные для однофазной турбулентности полуэмпирические замыкающие соотношения. Такой подход, как правило, содержит большое количество подгоночных коэффициентов, определяемых путем сравнения с экспериментальными данными. Более плодотворным и содержащим существенно меньшее количество эмпирических допущений является статистический подход, базирующийся на кинетических уравнениях для функции плотности вероятности (ФПВ) распределения скорости и температуры. Кинетический метод — мощный инструмент, широко применяемый в механике сплошных сред для построения гидродинамических моделей. Главное достоинство этого подхода для рассматриваемой проблемы состоит в том, что замыкание на кинетическом уровне позволяет получить согласующиеся соотношения для турбулентных напряжений и тепловых потоков дисперсной фазы вместо отдельных замыкающих аппроксимаций этих членов непосредственно в уравнениях для моментов, тем самым обеспечивая реализуемость получаемой системы уравнений для моментов.

Статистические модели на основе кинетических уравнений для описания гидродинамики двухфазных дисперсных турбулентных потоков были развиты целым рядом авторов (например, [1—17]). Однако все эти работы относятся к газодисперсным потокам с тяжелыми частицами. Теория турбулентных потоков с легкой дисперсной фазой (в частности, пузырьковых течений) развита в существенно меньшей степени. Это связано в первую очередь с необходимостью учитывать влияние нестационарных межфазных сил на взаимодействие частиц (пузырьков) с турбулентными вихрями (эффекты вытесненной и присоединенной масс), а также подъемной силы, обусловленной градиентом скорости несущего потока. Эти силы приводят к дополнительным гидродинамическим возмущениям, давая тем больший

дополнительный вклад в дисперсию частиц, чем меньше отношение плотностей дисперсной и сплошной фаз. В этом случае необходимо моделировать не только корреляции плотности вероятности распределения частиц со скоростью, но и с ускорением жидкости. Кроме того, размеры пузырьков могут значительно превосходить колмогоровский пространственный масштаб. Поэтому приближение точечных сил, обычно применяемое для описания взаимодействия «частица — турбулентность», становится слишком грубым, и необходимо учитывать пространственную протяженность пузырьков при моделировании взаимодействия с турбулентными вихрями.

В [18] представлена статистическая ФПВ модель для описания движения частиц произвольной плотности. Эта модель учитывает флуктуации сил вытесненной и присоединенной масс, однако не принимает во внимание известные кинематические соотношения между корреляциями пульсаций скорости и ускорения турбулентной жидкости, а также флуктуации подъемной силы. Важная роль, которую играют флуктуации силы присоединенной массы в моделировании дисперсии пузырьков, отмечается также в [19]. Недавно в [20] предложена статистическая ФПВ-модель, учитывающая эффекты пульсаций сил вытесненной и присоединенной масс путем включения в кинетическое уравнение корреляций скоростей и ускорения, определяемых из экспериментов.

Несмотря на большую практическую важность статистической теории теплообмена в неизотермических дисперсных турбулентных потоках, ей уделялось существенно меньше внимания [4; 1; 21—23]. Все эти работы относятся к газодисперсным турбулентным течениям с небольшими тяжелыми частицами, а статистические ФПВ-модели теплообмена для частиц произвольной плотности отсутствуют.

В настоящей статье развита статистическая модель для движения и теплообмена сферических частиц произвольной плотности в анизотропных турбулентных потоках. Представленная модель охватывает весь диапазон изменения отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз от твердых частиц в газе до пузырьков в жидкости. На данном этапе развития модели используется приближение точечных сил и не учитываются эффекты, обусловленные пространственной протяженностью частиц. Поэтому представленная модель справедлива главным образом для небольших частиц и микропузырьков, размеры которых не превышают колмогоровский пространственный масштаб турбулентности. Кроме того, рассматривается движение и теплообмен частиц в заданном несжимаемом турбулентном потоке, так что обратным влиянием частиц на характеристики сплошной фазы можно пренебречь. С целью валидации модели выполнено сравнение с данными прямых численных расчетов (DNS) различных турбулентных течений — от простого течения к более сложному.

2. Уравнения движения и теплообмена для одиночной частицы

Движение небольшой сферической частицы (капли или пузырька) описывается уравнениями [24]:

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{v}_p, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = & \frac{3C_D\rho_f}{4d_p\rho_p} |\mathbf{u} - \mathbf{v}_p| (\mathbf{u} - \mathbf{v}_p) + \mathbf{g} + \frac{\rho_f}{\rho_p} \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \mathbf{g} \right) + C_A \frac{\rho_f}{\rho_p} \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} \right) + \\ & + C_L \frac{\rho_f}{\rho_p} (\mathbf{u} - \mathbf{v}_p) \times \nabla \times \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u},$$

где \mathbf{v}_p и \mathbf{x}_p — координата и скорость частицы; \mathbf{u} и $D\mathbf{u}/Dt$ — скорость и ускорение сплошной фазы (жидкости) на траектории частицы $\mathbf{x} = \mathbf{x}_p(t)$; \mathbf{g} — ускорение силы тяжести; ρ_f и ρ_d — плотности жидкости и материала частицы; d_p — диаметр частицы.

Члены в правой части уравнения (2) описывают соответственно силы гидродинамического сопротивления и тяжести, эффекты вытесненной массы (силу Архимеда) и присоединенной массы, а также так называемую подъемную силу (силу Сэффмена), обусловленную сдвигом скорости несущего потока. Сила Бассе не учитывается, поскольку ее вклад, не будучи очень существенным ни в качественном, ни в количественном отношении, приводит к значительному усложнению проводимого анализа. Коэффициенты гидродинамического сопротивления C_D и подъемной силы C_L могут зависеть от числа Рейнольдса обтекания частицы, параметра сдвига скорости и других параметров. Для сферических частиц коэффициент присоединенной массы C_A принимается равным 0,5. Коэффициент сопротивления сферической частицы или пузырька в загрязненной жидкости может быть описан известной аппроксимацией Шиллера—Неймана

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_p} \left(1 + 0,15 \text{Re}_p^{0,687} \right), \quad (3)$$

где $Re_p \equiv |\mathbf{u} - \mathbf{v}_p| d_p / \nu_f$ — число Рейнольдса обтекания частицы; ν_f — коэффициент кинематической вязкости жидкости.

Для удобства дальнейшего анализа уравнение (2) представляется в виде

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{f}_d + \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_a + \mathbf{f}_l, \quad (4)$$

$$\mathbf{f}_d = \frac{3C_D \rho_f}{4d_p (\rho_p + C_A \rho_f)} |\mathbf{u} - \mathbf{v}_p| (\mathbf{u} - \mathbf{v}_p), \quad \mathbf{f}_g = \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p + C_A \rho_f} \mathbf{g}, \quad \mathbf{f}_a = A \mathbf{a},$$

$$\mathbf{f}_l = L (\mathbf{u} - \mathbf{v}_p) \times \text{rot } \mathbf{u}, \quad A = \frac{(1 + C_A) \rho_f}{\rho_p + C_A \rho_f}, \quad \mathbf{a} = \frac{D\mathbf{u}}{Dt}, \quad L = \frac{C_L \rho_f / \rho_p}{1 + C_A \rho_f / \rho_p},$$

где члены в правой части (4) символизируют соответственно силы, обусловленные гидродинамическим сопротивлением вследствие разности скоростей между частицей и жидкостью, гравитацией, ускорением жидкости и градиентом скорости жидкости при наличии скоростного скольжения между фазами. Параметр A характеризует эффект вытесненной и присоединенной масс, а L выражает эффект подъемной силы.

Уравнение для температуры частицы имеет вид [24]

$$\frac{d\theta_p}{dt} = q_c + q_b, \quad (5)$$

$$q_c = \frac{6\lambda_f Nu_p}{C_{pp} \rho_p d_p^2} (\vartheta - \theta_p), \quad Nu_p = 2 + 0,6 Re_p^{1/2} Pr_f^{1/3},$$

$$q_b = Bb, \quad B = \frac{C_{pf} \rho_f}{C_{pp} \rho_p}, \quad b = \frac{D\vartheta}{Dt} = \frac{\partial \vartheta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \vartheta,$$

где θ_p — температура частицы; ϑ и $D\vartheta/Dt$ — температура жидкости и ее субстанциональная производная на траектории частицы; C_{pf} и C_{pp} — удельные теплоемкости жидкости и материала частицы; λ_f — коэффициент теплопроводности жидкости; Nu_p — число Нуссельта обтекания частицы; Pr_f — число Прандтля жидкости, а параметр B выражает отношение теплоемкостей жидкости и частицы. Первый член в правой части уравнения (5) представляет межфазный тепловой поток, обусловленный теплопроводностью и конвекцией, а второй член аналогичен вытесненной

силе в уравнении движения частицы и характеризует эффект вытесненной теплоемкости эквивалентной массы жидкости вследствие изменения температуры невозмущенной жидкости. В то же время член, соответствующий добавленной массе, в уравнении для теплообмена отсутствует, что определяет различие между изменениями скорости и температуры частицы в нестационарном неоднородном потоке.

3. Кинетическое уравнение для скорости и температуры частиц

Уравнения (1), (4) и (5) являются стохастическими, поскольку скорость \mathbf{u} , ускорение \mathbf{a} , температура ϑ и субстанциональная производная температуры b жидкости рассматриваются как случайные процессы. С целью перехода от стохастического описания отдельных частиц к статистическому моделированию дисперсной фазы вводится ФПВ распределения скорости и температуры частиц в фазовом пространстве $(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \theta)$:

$$P = \langle p \rangle = \left\langle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_p(t)) \delta(\theta - \theta_p(t)) \right\rangle, \quad (6)$$

где $\delta(\mathbf{x})$ — дельта-функция Дирака, а символ $\langle \rangle$ характеризует процедуру осреднения по ансамблю реализаций скорости, ускорения, температуры и производной температуры турбулентной жидкости. Таким образом, $p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \theta, t)$ обозначает плотность вероятности нахождения частицы в точке \mathbf{x} со скоростью \mathbf{v} и температурой θ в момент времени t , а $P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \theta, t)$ определяет статистически осредненную плотность вероятности скорости и температуры частиц.

Дифференцируя (6) с учетом уравнений (1), (4) и (5), получаем

$$\frac{\partial P}{\partial t} + v_i \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial v_i} (\langle f_{di} p \rangle + \langle f_{si} p \rangle + \langle f_{ai} p \rangle) + \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\langle q_c p \rangle + \langle q_b p \rangle) = 0. \quad (7)$$

Для замыкания уравнения (6) необходимо определить корреляции сил, действующих на частицу, и межфазных тепловых потоков с плотностью вероятности скорости и температуры частицы. Вначале рассмотрим корреляцию силы гидродинамического сопротивления с плотностью вероятности $\langle f_{di} p \rangle$. Для удобства дальнейшего анализа эта величина представляется следующим образом:

$$\langle f_{di}P \rangle = \frac{\langle (u_i - v_{pi})P \rangle}{\tau_p} = \frac{(U_i - v_i)P + \langle u'_i P \rangle}{\tau_p}, \quad (8)$$

$$\frac{1}{\tau_p} = \left\langle \frac{3C_D \rho_f |\mathbf{u} - \mathbf{v}_p|}{4d_p (\rho_p + C_A \rho_f)} \right\rangle_p. \quad (9)$$

Корреляция (8) записывается с учетом соотношения $\langle v_{pi}P \rangle = v_i P$, а также разложения скорости жидкости на осредненную и пульсационную составляющие ($u_i = U_i + u'_i$). В (9) символ $\langle \rangle_p$ обозначает осреднение по ансамблям реализаций случайных полей жидкости и распределений частиц. Согласно (8) нужно определить как корреляцию пульсаций скорости жидкости с плотностью вероятности частиц $\langle u'_i P \rangle$, так и время динамической релаксации τ_p , характеризующее инерционное поведение частиц в турбулентном потоке. Сначала найдем $\langle u'_i P \rangle$, а τ_p определим в следующем разделе.

Аналогично (8) и (9) корреляция межфазного теплового потока и плотности вероятности частиц записывается так:

$$\langle q_c P \rangle = \frac{\langle (\vartheta - \theta_p) P \rangle}{\tau_t} = \frac{(T - \theta)P + \langle \vartheta' P \rangle}{\tau_t}, \quad (10)$$

$$\frac{1}{\tau_t} = \left\langle \frac{6\lambda_f Nu_p}{C_{pp} \rho_p d_p^2} \right\rangle_p, \quad (11)$$

где T и ϑ' обозначают осредненную и пульсационную составляющие температуры жидкости, а τ_t — время термической релаксации частиц.

В дальнейшем распределения скорости, ускорения, температуры и производной температуры будем считать гауссовыми распределениями, а для получения необходимых корреляций применим функциональный формализм. Тогда корреляция между пульсациями скорости жидкости и плотностью вероятности согласно приложению А может быть представлена в виде

$$\langle u'_i P \rangle = -\tau_p \left(\Lambda_{ij}^u(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_j} + M_{ij}^u(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_j} + H_i^u(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (12)$$

$$\Lambda_{ij}^u = \Lambda_{ij}^{uu} + \Lambda_{ij}^{ua} = \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{f_{kj}^u}{\tau_p} + l_{kn}^u \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right),$$

$$\mathbf{M}_{ij}^u = \mathbf{M}_{ij}^{uu} + \mathbf{M}_{ij}^{ua} = \langle u'_i u'_k \rangle g_{kj}^u, \quad (13)$$

$$\mathbf{H}_i^u = \mathbf{H}_i^{uu} + \mathbf{H}_i^{ua} + \mathbf{H}_i^{u\delta} + \mathbf{H}_i^{ub} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle f_{ij}^{u*}}{\tau_p} + \langle u'_i u'_j \rangle q_{jk}^u \frac{\partial T}{\partial x_k},$$

где $\langle u'_i u'_j \rangle$ и $\langle u'_i \vartheta' \rangle$ — турбулентные кинетические напряжения и тепловые потоки в дисперсной фазе. В соответствии с (A18), (A28), (A33) и (A38) коэффициенты вовлечения частиц в турбулентное движение жидкости, входящие в (13), равны:

$$\begin{aligned} f_{ij}^u &= f_{u ij} + f_{u ij}^a = A \delta_{ij} + (1-A) f f_{u ij}, \quad g_{ij}^u = g_{u ij} + g_{u ij}^a = \frac{T_{Lp ij}}{\tau_p} - (1-A) f_{u ij}, \\ l_{ij}^u &= l_{u ij} + l_{u ij}^a = \frac{T_{Lp ij}}{\tau_p} - f_{u ij} + (A-1) f_{u ij}, \\ f_{ij}^{u*} &= f_{ij}^u + f_{ij}^{ub} = B \delta_{ij} + (1-B) f_{ij}^u, \\ q_{ij}^u &= q_{u ij} + q_{u ij}^a = \frac{T_{Lp ij}}{\tau_p} + \frac{(A-1) f_{u ij} + \Upsilon(\Upsilon-A) f_{u ij}}{1-\Upsilon}, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\Upsilon \equiv \tau_i / \tau_p$ — отношение термической и динамической времен релаксации частиц.

Предположение о гауссовой турбулентности жидкости является ключевым и позволяет выразить $\langle u'_i p \rangle$ явно в виде оператора диффузионного типа. Следует отметить, что результаты экспериментов и прямых численных расчетов свидетельствуют, что даже изотропная турбулентность не является гауссовой и «хвосты» ФПВ скорости заметно отличаются от нормального распределения. Однако статистические аргументы, основанные на центральной предельной теореме, позволяют заключить, что «ядро» ФПВ, где сосредоточена большая часть энергии турбулентности, при больших числах Рейнольдса должно быть близким к нормальному распределению. В частности, экспериментальные данные [25; 26] показывают, что по крайней мере в однородном сдвиговом потоке ядра распределений пульсаций скорости и температуры близки к эллиптическим гауссовым. Предположение о гауссовом распределении ускорения выполняется значительно хуже по сравнению со статистикой скорости. Известно, что нормальный закон применим для аппроксимации распределения ускорения только при малых значениях, а при больших ускорениях эти распределения имеют длинные хвосты, отражающие явление перемежаемости. По-

сколькx вклад хвостов в статистические моменты увеличивается с ростом порядка момента, то развиваемая в данной статье модель ограничена применением к моментам порядка не выше второго.

В предположении, что плотности жидкости и частиц являются постоянными, пульсации силы гравитации отсутствуют, и, следовательно,

$$\langle f_{gi} p \rangle = F_{gi} P, \quad \langle f_{gi} \rangle = f_{gi} = F_{gi}. \quad (15)$$

Корреляция ускорения жидкости и плотности вероятности скорости частиц представляется так:

$$\langle f_{ai} p \rangle = \langle f_{ai} \rangle P + \langle f'_{ai} p \rangle, \quad \langle f_{ai} \rangle = A \langle a_i \rangle, \quad \langle f'_{ai} p \rangle = A \langle a'_i p \rangle, \quad (16)$$

$$\langle a_i \rangle = \left(\frac{DU_i}{Dt} + \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_j} \right), \quad \frac{DU_i}{Dt} = \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j}.$$

Согласно (14) осредненный эффект вытесненной и присоединенной масс $\langle f_{ai} \rangle$ проявляется как через ускорение осредненной скорости жидкости DU_i/Dt , так и благодаря градиенту рейнольдсовых напряжений сплошной среды $\partial \langle u'_i u'_j \rangle / \partial x_j$. Для нахождения $\langle f'_{ai} p \rangle$ необходимо определить корреляцию пульсаций ускорения жидкости и плотности вероятности скорости частиц $\langle a'_i p \rangle$. Аналогично (12) и (13) из приложения В следует:

$$\langle a'_i p \rangle = - \left(\Lambda_{ij}^a(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_j} + M_{ij}^a(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_j} + H_i^a(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (17)$$

$$\Lambda_{ij}^a = \Lambda_{ij}^{au} + \Lambda_{ij}^{aa} = \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{f_{kj}^a}{\tau_p} + I_{kn}^a \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right),$$

$$M_{ij}^a = M_{ij}^{au} + M_{ij}^{aa} = \langle u'_i u'_k \rangle g_{kj}^a, \quad (18)$$

$$H_i^a = H_i^{au} + H_i^{aa} + H_i^{a\vartheta} + H_i^{ab} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle f_{ji}^{a*}}{\tau_r} + \langle u'_i u'_j \rangle q_{jk}^a \frac{\partial \Gamma}{\partial x_k},$$

где в соответствии с (Б16) имеем

$$f_{ij}^a = f_{aij}^u + f_{aij} = (A-1)(\delta_{ij} - f_{u ij}), \quad g_{ij}^a = g_{aij}^u + g_{aij} = (A-1)f_{u ij} - A\delta_{ij},$$

$$l_{ij}^a = l_{a ij}^u + l_{a ij} = -A f_{u ij} + (A-1) f_{u1 ij}, \quad f_{t ij}^{a*} = f_{t ij}^a + f_{t ij}^{ab} = (B-1)(\delta_{ij} - f_{t ij}^u), \quad (19)$$

$$q_{ij}^a = q_{a ij}^u + q_{a ij} = \frac{(A-1) f_{u ij} + (\Upsilon - A) f_{u1 ij}}{1 - \Upsilon}.$$

Корреляция подъемной силы и плотности вероятности скорости частиц представляется в виде

$$\langle f_{li} p \rangle = \langle f_{li} \rangle P + \langle f'_{li} p \rangle, \quad (20)$$

$$\langle f_{li} \rangle = L \left[(U_j - v_j) \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\partial k}{\partial x_i} - \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_j} \right) \right],$$

$$\begin{aligned} \langle f'_{li} p \rangle = & L \langle u'_j p \rangle \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) + L (U_j - v_j) \left\langle \left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) p \right\rangle + \\ & + L \left\langle \left[\frac{1}{2} \frac{\partial (u'_i u'_j - \langle u'_i u'_j \rangle)}{\partial x_i} - \frac{\partial (u'_i u'_j - \langle u'_i u'_j \rangle)}{\partial x_j} \right] p \right\rangle, \end{aligned}$$

где $k \equiv \langle u'_i u'_i \rangle / 2$ — турбулентная энергия жидкости. Согласно (20) не учитывались флуктуации коэффициента L , а также принималось во внимание уравнение неразрывности для несжимаемой жидкости $\partial u_i / \partial x_i = 0$. При определении корреляции флуктуаций подъемной силы и плотности вероятности скорости частиц $\langle f'_{li} p \rangle$ будем учитывать только первый член, пренебрегая вкладом корреляций флуктуаций завихренности и квадрата пульсаций скорости жидкости с плотностью вероятности скорости частиц. Далее корреляция между пульсациями температуры жидкости и плотностью вероятности частиц согласно приложению В имеет вид

$$\langle \vartheta' p \rangle = -\tau_i \left(\Lambda_i^\vartheta(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_i} + M_i^\vartheta(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_i} + H^\vartheta(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (21)$$

$$\Lambda_i^\vartheta = \Lambda_i^{\vartheta u} + \Lambda_i^{\vartheta a} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle}{\Upsilon} \left(\frac{f_{t ji}^\vartheta}{\tau_p} + l_{jk}^\vartheta \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right),$$

$$M_i^\vartheta = M_i^{\vartheta u} + M_i^{\vartheta a} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle g_{ji}^\vartheta}{\Upsilon}, \quad (22)$$

$$\mathbf{H}^\vartheta = \mathbf{H}^{\vartheta u} + \mathbf{H}^{\vartheta a} + \mathbf{H}^{\vartheta \vartheta} + \mathbf{H}^{\vartheta b} = \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle f_t^\vartheta}{\tau_t} + \frac{\langle u'_i \vartheta' \rangle q_{ij}^\vartheta}{\Upsilon} \frac{\partial T}{\partial x_j},$$

где $\langle \vartheta'^2 \rangle$ — интенсивность пульсаций (вариация) температуры турбулентной жидкости. Коэффициенты вовлечения в (22) с учетом (B16) равны

$$f_{ij}^\vartheta = f_{u ij}^t + f_{u ij}^{ta} = A \delta_{ij} + (1-A) f_{u ij}^t, \quad g_{ij}^\vartheta = g_{u ij}^t + g_{u ij}^{ta} = \frac{T^{\vartheta u}}{\tau_p} + (A-1) f_{u ij}^t,$$

$$l_{ij}^\vartheta = l_{u ij}^t + l_{u ij}^{ta} = \frac{T^{\vartheta u}}{\tau_p} - f_{u ij}^t + (A-1) f_{u ij}^t, \quad f_t^\vartheta = f_t + f_t^b = B + (1-B) f_t, \quad (23)$$

$$q_{ij}^\vartheta = q_{u ij}^t + q_{u ij}^{ta} = \frac{T^{\vartheta u}}{\tau_p} + \frac{(A-1) f_{u ij}^t + \Upsilon(\Upsilon-A) f_{t ij}^t}{1-\Upsilon}.$$

Наконец, рассмотрим корреляцию между тепловым потоком, обусловленным вытесненной теплоемкостью жидкости, и плотностью вероятности частиц. Эту корреляцию представим так:

$$\langle q_b p \rangle = \langle q_b \rangle P + \langle q'_b p \rangle, \quad \langle q_b \rangle = B \langle b \rangle, \quad \langle q'_b p \rangle = B \langle b' p \rangle, \quad (24)$$

$$\langle b \rangle = \left(\frac{DT}{Dt} + \frac{\partial \langle u'_i \vartheta' \rangle}{\partial x_i} \right), \quad \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + U_j \frac{\partial T}{\partial x_j}.$$

Из (24) видно, что осредненный эффект вытесненной теплоемкости $\langle q_b \rangle$ проявляет себя как через субстанциональную производную осредненной температуры жидкости DT/Dt , так и через градиент турбулентного теплового потока $\partial \langle u'_i \vartheta' \rangle / \partial x_j$. Чтобы найти $\langle q'_b p \rangle$, нужно определить корреляцию флуктуаций производной температуры с плотностью вероятности жидкости $\langle b' p \rangle$. Аналогично (21) и (22) приложение Г дает

$$\langle b' p \rangle = - \left(\Lambda_i^b(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_i} + \mathbf{M}_i^b(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_i} + \mathbf{H}^b(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (25)$$

$$\Lambda_i^b = \Lambda_i^{bu} + \Lambda_i^{ba} = \langle u'_j \vartheta' \rangle \left(\frac{f_{t ji}^b}{\tau_p} + l_{jk}^b \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right), \quad \mathbf{M}_i^b = \mathbf{M}_i^{bu} + \mathbf{M}_i^{ba} = \langle u'_j \vartheta' \rangle g_{ji}^b, \quad (26)$$

$$\mathbf{H}^b = \mathbf{H}^{bu} + \mathbf{H}^{ba} + \mathbf{H}^{b\emptyset} + \mathbf{H}^{bb} = \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle f_t^b}{\tau_t} + \langle u'_i \vartheta' \rangle q_{ij}^b \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j},$$

где согласно (Г16)

$$\begin{aligned} f_{t\,ij}^b &= f_{ub\,ij}^t + f_{ub\,ij}^{ta} = (A-1)(\delta_{ij} - f_{u\,ij}^t), \quad g_{ij}^b = g_{ub\,ij}^t + g_{ub\,ij}^{ta} = (A-1)f_{u\,ij}^t - A\delta_{ij}, \\ l_{ij}^b &= l_{ub\,ij}^t + l_{ub\,ij}^{ta} = -Af_{u\,ij}^t + (A-1)f_{u1\,ij}^t, \quad f_t^b = f_{tb} + f_{tb}^b = (B-1)(1-f_t), \quad (27) \\ q_{ij}^b &= q_{ub\,ij}^t + q_{ub\,ij}^{ta} = \frac{(A-1)f_{u\,ij}^t + (\Upsilon-A)f_{t\,ij}^t}{1-\Upsilon}. \end{aligned}$$

Подставляя (8), (10), (12), (15), (16), (17), (20), (21), (24) и (25) в (7), получаем замкнутое кинетическое уравнение для ФПВ распределения скорости и температуры частиц в турбулентном потоке

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} + v_i \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left(\frac{U_i - v_i}{\tau_p} + \langle f_{g\,i} \rangle + \langle f_{a\,i} \rangle + \langle f_{l\,i} \rangle \right) P \right] + \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\left(\frac{T - \theta}{\tau_t} + \langle q_b \rangle \right) P \right] = \\ = \Lambda_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial v_j} + \mathbf{M}_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial x_j} + (\mathbf{H}_i + \Lambda_i) \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial \theta} + \mathbf{M}_i \frac{\partial^2 P}{\partial x_i \partial \theta} + \mathbf{H} \frac{\partial^2 P}{\partial \theta^2} + \\ + \Lambda_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial v_j} + \mathbf{M}_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial x_j} + L\tau_p \left(\Lambda_{jk}^u \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial v_k} + \mathbf{M}_{jk}^u \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial x_k} + \mathbf{H}_j^u(\mathbf{x}, t) \frac{\partial^2 P}{\partial v_i \partial \theta} \right) \times \\ \times \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

где согласно (13), (14), (18), (19), (22), (23), (26) и (27)

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij} &= \Lambda_{ij}^u + A\Lambda_{ij}^a = \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{\hat{f}_{kj}}{\tau_p} + \hat{l}_{kn} \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right), \quad \mathbf{M}_{ij} = \mathbf{M}_{ij}^u + A\mathbf{M}_{ij}^a = \langle u'_i u'_k \rangle \hat{g}_{kj}, \\ \mathbf{H}_i &= \mathbf{H}_i^u + A\mathbf{H}_i^a = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle \hat{f}_{i\,ji}^u}{\tau_t} + \langle u'_i u'_j \rangle \hat{q}_{jk} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_k}, \\ \Lambda_i &= \Lambda_i^\emptyset + B\Lambda_i^b = \langle u'_j \vartheta' \rangle \left(\frac{\hat{f}_{u\,ji}^t}{\tau_p} + \hat{l}_{t\,jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_i &= M_i^\vartheta + BM_i^b = \langle u'_j \vartheta' \rangle \hat{g}_{i,j}, \quad N = N^\vartheta + BN^b = \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle \hat{f}_t}{\tau_t} + \langle u'_i \vartheta' \rangle \hat{q}_{t,ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}, \\
 \hat{f}_{ij} &= f_{ij}^u + Af_{ij}^a = A^2 \delta_{ij} + (1 - A^2) f_{u,ij}, \quad \hat{g}_{ij} = g_{ij}^u + Ag_{ij}^a = \frac{T_{Lp,ij}}{\tau_p} - \hat{f}_{ij}, \\
 \hat{l}_{ij} &= l_{ij}^u + Al_{ij}^a = \frac{T_{Lp,ij}}{\tau_p} - (1 + A^2) f_{u,ij} - (1 - A^2) f_{u1,ij}, \\
 \hat{f}_{t,ij}^u &= \Upsilon f_{t,ij}^{u*} + Af_{t,ij}^{a*} = (AB + B\Upsilon - A) \delta_{ij} + (1 - B)(\Upsilon + A) f_{t,ij}^u, \quad (29) \\
 \hat{q}_{ij} &= q_{u,ij} + Aq_{u,ij}^a = \frac{T_{Lp,ij}}{\tau_p} + \frac{(A^2 - 1) f_{u,ij} + (\Upsilon^2 - A^2) f_{u,ij}}{1 - \Upsilon}, \\
 \hat{f}_{u,ij}^t &= \frac{f_{t,ij}^\vartheta}{\Upsilon} + Bf_{t,ij}^b = \frac{(A + AB\Upsilon - B\Upsilon) \delta_{ij} + (1 - A)(1 + B\Upsilon) f_{u,ij}^t}{\Upsilon}, \\
 \hat{l}_{t,ij} &= \frac{l_{ij}^\vartheta}{\Upsilon} + Bl_{t,ij}^b = \frac{T_{Lp,ij}^{\vartheta u}}{\tau_t} - \frac{(1 + AB\Upsilon) f_{u,ij}^t + (1 - A)(1 + B\Upsilon) f_{u1,ij}^t}{\Upsilon}, \\
 \hat{g}_{t,ij} &= \frac{g_{ij}^\vartheta}{\Upsilon} + Bg_{t,ij}^b = \frac{T_{Lp,ij}^{\vartheta u}}{\tau_t} + \frac{(A - 1)(1 + B\Upsilon) f_{u,ij}^t - AB\Upsilon \delta_{ij}}{\Upsilon}, \\
 \hat{f}_t &= f_t^\vartheta + Bf_t^b = B^2 + (1 - B^2) f_t, \\
 \hat{q}_{t,ij} &= \frac{q_{ij}^\vartheta}{\Upsilon} + Bq_{t,ij}^b = \frac{T_{Lp,ij}^{\vartheta u}}{\tau_t} + \frac{(A - 1)(1 + B\Upsilon) f_{u,ij}^t + \Upsilon(\Upsilon - A)(1 + B) f_{t,ij}^t}{\Upsilon(1 - \Upsilon)}.
 \end{aligned}$$

Левая часть уравнения (28) описывает конвекцию ФПВ частиц в фазовом пространстве $(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \theta)$, в то время как правая часть характеризует диффузионный перенос благодаря динамическому и тепловому взаимодействию частиц с турбулентными вихрями. Моделирование полей скорости и температуры, а также их производных гауссовыми случайными процессами позволило выразить взаимодействие частиц с турбулентными вихрями в виде дифференциального оператора второго порядка типа Фоккера—Планка. Этот оператор учитывает анизотропию лагранжевых корреляций пульсаций скорости и температуры жидкости, видимых частицами, через коэффициенты вовлечения \hat{f}_{ij} , \hat{g}_{ij} и т. д. Если пренебречь анизотропией

корреляционных функций, то тензорные коэффициенты вовлечения становятся скалярами. В предельном случае бесконечного отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз ($\rho_p/\rho_f \rightarrow \infty$), когда эффекты вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости не играют роли, уравнение (28) с учетом (29) переходит в кинетическое уравнение для тяжелых частиц в легкой жидкости. Если пренебречь также эффектами анизотропии корреляций скорости и температуры жидкости, видимой частицами, (28) трансформируется в кинетическое уравнение, предложенное в [22]. После интегрирования по температуре частиц (28) становится кинетическим уравнением для ФПВ распределения скоростей частиц.

В заключение этого раздела отметим, что развиваемый в данной работе подход в существенной степени опирается на кинематические соотношения, которые выражают корреляции, содержащие ускорение и субстанциональную производную температуры, соответственно через корреляции скорости и температуры. Следует подчеркнуть, что эти кинематические соотношения, как будет показано в разделе 5, обеспечивают выполнение известных выражений Чена—Хинце для вариации скорости частиц и ковариации скоростей жидкости и частиц в однородной бесдвиговой турбулентности [29]. Так, в работе [20], где кинематические соотношения не используются, а корреляции скорости, ускорения и скорости с ускорением жидкости определяются независимо из экспериментальных данных, согласие с теорией Чена—Хинце отсутствует.

4. Уравнения для статистических моментов ФПВ

Кинетическое уравнение полностью описывает статистику полей скорости и температуры дисперсной фазы. Однако кинетический уровень моделирования не только очень дорог в вычислительном отношении, но и является избыточным, поскольку в практических приложениях, как правило, нужны только макроскопические свойства течения. Другим, существенно менее дорогим способом моделирования гидродинамики и теплообмена дисперсной фазы является решение уравнений сохранения для нескольких первых моментов скорости и температуры ФПВ, хотя при этом и происходит некоторая потеря статистической информации о поведении частиц в турбулентном потоке. Уравнение (28) производит систему континуальных уравнений для концентрации, осредненных скорости и температуры, кинетических напряжений и тепловых потоков и других статистических моментов ФПВ. Уравнения сохранения массы, количества движения и тепловой энергии имеют вид

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi V_i}{\partial x_i} = 0, \quad (30)$$

$$\frac{\partial V_i}{\partial t} + V_j \frac{\partial V_i}{\partial x_j} = F_{di} + F_{gi} + F_{ai} + F_{fi} + F_{li} - \frac{D_{p ij}^*}{\tau_p} \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_j}, \quad (31)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + V_i \frac{\partial \Theta}{\partial x_i} = Q_c + Q_b + Q_t - \frac{D_{pi}^*}{\tau_t} \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_i}, \quad (32)$$

$$\Phi = \iint P d v d \theta, \quad V_i = \frac{1}{\Phi} \iint v_i P d v d \theta, \quad \langle v'_i v'_j \rangle = \frac{1}{\Phi} \iint (v_i - V_i)(v_j - V_j) P d v d \theta,$$

$$\Theta = \frac{1}{\Phi} \iint \theta P d v d \theta, \quad \langle v'_i \theta' \rangle = \frac{1}{\Phi} \iint (v_i - V_i)(\theta - \Theta) P d v d \theta,$$

$$F_{di} = \frac{U_{pi} - V_i}{\tau_p}, \quad F_{ai} = A \frac{D U_i}{D t}, \quad F_{fi} = \frac{\partial (A \langle u'_i u'_j \rangle - \langle v'_i v'_j \rangle)}{\partial x_j},$$

$$F_{li} = L \left[(U_{pj} - V_j) \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\partial k}{\partial x_i} - \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_j} \right) \right],$$

$$D_{p ij}^* = \tau_p (\langle v'_i v'_j \rangle + A M_{ij}^a),$$

$$Q_c = \frac{T_p - \Theta}{\tau_t}, \quad Q_b = B \frac{D T}{D t}, \quad Q_t = \frac{\partial (B \langle u'_i \theta' \rangle - \langle v'_i \theta' \rangle)}{\partial x_i},$$

$$D_{pi}^* = \tau_t (\langle v'_i \theta' \rangle + B M_i^b).$$

Здесь Φ , V_i , Θ — осредненные объемная концентрация, скорость и температура дисперсной фазы; $\langle v'_i v'_j \rangle$, $\langle v'_i \theta' \rangle$ — турбулентные напряжения и тепловые потоки в дисперсной фазе, обусловленные вовлечением частиц в пульсационное движение сплошной среды. Сила F_{fi} в (31) определяет турбулентную миграцию частиц (силу турбофореза), характеризуемую градиентами турбулентных напряжений дисперсной и сплошной фаз. Направление действия этой силы зависит от параметра A , т. е. от отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз ρ_p / ρ_f . Очевидно, что турбофорез приводит к движению тяжелых частиц ($\rho_p / \rho_f \rightarrow \infty$, $A \rightarrow 0$) из

области с высоким уровнем турбулентности в низкотурбулентную область [28; 29]. Однако F_{ti} меняет знак при нулевой плавучести частиц ($\rho_p = \rho_f$, $A = 1$), и, следовательно, изменяется направление действия силы турбофореза. Поэтому более легкие, чем жидкость, частицы и пузырьки под действием турбофореза движутся из области с низким уровнем турбулентности в высокотурбулентную область. Таким образом, в турбулентном потоке тяжелые и легкие частицы могут мигрировать в противоположных направлениях. Действие подъемной силы F_{ti} в турбулентной среде обусловлено как градиентом осредненной скорости, так и разностью градиентов турбулентной энергии и кинетических напряжений жидкости. Последний член в (31) характеризует турбулентную диффузию частиц с эффективным тензором диффузии $D_{p\,ij}^*$. Отметим, что в силу сопротивления F_{di} и подъемную силу F_{ti} входит скорость жидкости, видимая частицей U_{pi} . Эта величина определяется согласно (12) так:

$$U_{pi} = \frac{1}{\Phi} \iint \langle u_i p \rangle d\mathbf{v} d\theta = U_i + \langle u'_i \rangle_p,$$

$$\langle u'_i \rangle_p = \frac{1}{\Phi} \iint \langle u'_i p \rangle d\mathbf{v} d\theta = -\tau_p \mu_{ij}^u \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_j}. \quad (33)$$

Согласно (33) скорость жидкости на траектории частицы U_{pi} отличается от собственной скорости жидкости U_i на величину так называемой скорости дрейфа $\langle u'_i \rangle_p$ [30], обусловленной неоднородным распределением частиц в пространстве. Аналогично величина T_p , входящая в Q_c , обозначает температуру жидкости, видимую частицами, и в соответствии с (21) определяется так:

$$T_p = \frac{1}{\Phi} \iint \langle \vartheta p \rangle d\mathbf{v} d\theta = T + \langle \vartheta' \rangle_p,$$

$$\langle \vartheta' \rangle_p = \frac{1}{\Phi} \iint \langle \vartheta' p \rangle d\mathbf{v} d\theta = -\tau_p \mu_i^\vartheta \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_i}. \quad (34)$$

В (32) Q_i характеризует источник (сток) тепла, возникающий благодаря градиентам тепловых потоков сплошной и дисперсной фаз. Эта величина напоминает силу термофореза F_{ti} в уравнении количества движения, и знак Q_i зависит от отношения теплоемкостей сплошной и дисперсной фаз B .

Последний член в правой части (32) описывает турбулентный диффузионный перенос тела с эффективным вектором термической диффузии D_{pi}^{*} .

Уравнения баланса для кинетических напряжений, тепловых потоков и интенсивности пульсаций температуры дисперсной фазы имеют вид

$$\frac{\partial \langle v'_i v'_j \rangle}{\partial t} + V_k \frac{\partial \langle v'_i v'_j \rangle}{\partial x_k} + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi \langle v'_i v'_j v'_k \rangle}{\partial x_k} = -(\langle v'_i v'_k \rangle + M_{ik}) \frac{\partial V_j}{\partial x_k} - (\langle v'_j v'_k \rangle + M_{jk}) \frac{\partial V_i}{\partial x_k} + \Lambda_{ij} + \Lambda_{ji} - \frac{2 \langle v'_i v'_j \rangle}{\tau_p} + \quad (35)$$

$$+ L \left[(\langle v'_i v'_k \rangle - \langle u'_k u'_n \rangle f_{ni}^u) (U_{j,k} - U_{k,j}) + (\langle v'_j v'_k \rangle - \langle u'_k u'_n \rangle f_{nj}^u) (U_{i,k} - U_{k,i}) \right],$$

$$\frac{\partial \langle v'_i \theta' \rangle}{\partial t} + V_j \frac{\partial \langle v'_i \theta' \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi \langle v'_i v'_j \theta' \rangle}{\partial x_j} = -(\langle v'_i v'_j \rangle + M_{ij}) \frac{\partial \Theta}{\partial x_j} - (\langle v'_j \theta' \rangle + M_j) \frac{\partial V_i}{\partial x_j} + H_i + \Lambda_i - \left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_i} \right) \langle v'_i \theta' \rangle + \quad (36)$$

$$+ L (\langle v'_j \theta' \rangle - \langle u'_k \theta' \rangle f_{ikj}^{u*}) (U_{i,j} - U_{j,i}),$$

$$\frac{\partial \langle \theta'^2 \rangle}{\partial t} + V_i \frac{\partial \langle \theta'^2 \rangle}{\partial x_i} + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi \langle v'_i \theta'^2 \rangle}{\partial x_i} = -2(\langle v'_i \theta' \rangle + M_i) \frac{\partial \Theta}{\partial x_i} + 2H - \frac{2 \langle \theta'^2 \rangle}{\tau_i}. \quad (37)$$

Уравнения (35)—(37) описывают эволюцию во времени, конвекцию, диффузию, производство вторых моментов пульсаций скорости и температуры частиц благодаря их градиентам осредненных скорости и температуры, а также генерации вследствие взаимодействия с турбулентными вихрями и диссипацию, обусловленную силой гидродинамического сопротивления и межфазным тепловым потоком. Последние члены в уравнениях (35) и (36) возникают благодаря подъемной силе и записаны с точностью до градиентов осредненных скорости и температуры жидкости не выше первого порядка.

С целью замыкания системы уравнений, вытекающей из (28), на уровне моментов второго порядка привлекаются алгебраические градиентные аппроксимации для третьих моментов. Эти аппроксимации следуют из соответствующих дифференциальных уравнений для третьих моментов путем пренебрежения членами, описывающими эволюцию во времени, конвекцию и генерацию благодаря градиентам осредненных скорости и температуры, а также привлечения квазигауссовой аппроксимации для четвертых моментов:

$$\langle v'_i v'_j v'_k \rangle = -\frac{1}{3} \left(D_{p\,in} \frac{\partial \langle v'_j v'_k \rangle}{\partial x_n} + D_{p\,jn} \frac{\partial \langle v'_i v'_k \rangle}{\partial x_n} + D_{p\,kn} \frac{\partial \langle v'_i v'_j \rangle}{\partial x_n} \right), \quad (38)$$

$$\langle v'_i v'_j \theta' \rangle = -\frac{1}{1+2\Upsilon} \left(\Upsilon D_{p\,ik} \frac{\partial \langle v'_j \theta' \rangle}{\partial x_k} + \Upsilon D_{p\,jk} \frac{\partial \langle v'_i \theta' \rangle}{\partial x_k} + D'_{p\,k} \frac{\partial \langle v'_i v'_j \rangle}{\partial x_k} \right), \quad (39)$$

$$\langle v'_i \theta'^2 \rangle = -\frac{1}{2+\Upsilon} \left(\Upsilon D_{p\,ij} \frac{\partial \langle \theta'^2 \rangle}{\partial x_j} + 2D'_{p\,j} \frac{\partial \langle v'_i \theta' \rangle}{\partial x_j} \right), \quad (40)$$

где $D_{p\,ij}$ и $D'_{p\,i}$ являются соответственно тензором диффузии и вектором термической диффузии дисперсной фазы:

$$D_{p\,ij} = \tau_p \left(\langle v'_i v'_j \rangle + M_{ij} \right), \quad D'_{p\,i} = \tau_t \left(\langle v'_i \theta' \rangle + M_i \right). \quad (41)$$

Отметим особенную важность валидации представленных аппроксимаций для третьих моментов пульсаций скорости и температуры, поскольку соотношения (38)—(40) непосредственно не следуют из кинетического уравнения и для их получения требуется привлечение дополнительных допущений. Такая валидация алгебраических градиентных соотношений для третьих моментов пульсаций скорости частиц выполнена в [31] с использованием метода крупных вихрей (LES) для расчета турбулентного течения газа в плоском канале с тяжелыми частицами. Получено, что градиентная аппроксимация третьих моментов удовлетворительно, но не идеально согласуется с данными численного моделирования, что неудивительно, поскольку вклад отклонения от нормального распределения увеличивается с ростом порядка момента.

С учетом соотношений (3), (9) и (11) времена динамической и термической релаксации частиц аппроксимируются так:

$$\tau_p = \frac{\tau_{p0} (1+0,5\rho_f/\rho_p)}{(1+0,15\text{Re}_p^{0,687})}, \quad \tau_t = \frac{3C_{pp} Pr_f \tau_{p0}}{C_{pf} Nu_p}, \quad \tau_{p0} = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho_f \nu_f},$$

$$\text{Re}_p = \frac{d_p}{\nu_f} \left[(U_{pi} - V_i)(U_{pi} - V_i) + \langle u'_i u'_i \rangle + \langle v'_i v'_i \rangle - 2\langle u'_i v'_i \rangle \right]^{1/2},$$

где τ_{p0} — стоксово время релаксации частицы, а число Рейнольдса обтекания частицы Re_p учитывает вклад как осредненного, так и пульсационного скоростного скольжения между дисперсной и сплошной фазами.

Уравнения (30)—(41) позволяют моделировать движение и теплообмен дисперсной фазы на уровне вторых моментов. Смешанные корреляционные вторые моменты (ковариации) пульсаций скорости и температуры сплошной и дисперсной фаз в соответствии с (12) и (21) составляют:

$$\begin{aligned}\langle u'_i v'_j \rangle &= \frac{1}{\Phi} \left(\iint \langle u'_i p \rangle v_j d\mathbf{v} d\theta - V_j \iint \langle u'_i p \rangle d\mathbf{v} d\theta \right) = \tau_p \left(\Lambda_{ij}^u - \mathbf{M}_{ik}^u \frac{\partial V_j}{\partial x_k} \right), \\ \langle u'_i \theta' \rangle &= \frac{1}{\Phi} \left(\iint \langle u'_i p \rangle \theta d\mathbf{v} d\theta - \Theta \iint \langle u'_i p \rangle d\mathbf{v} d\theta \right) = \tau_p \left(\mathbf{H}_i^u - \mathbf{M}_{ij}^u \frac{\partial \Theta}{\partial x_j} \right), \quad (42) \\ \langle v'_i \vartheta' \rangle &= \frac{1}{\Phi} \left(\iint \langle \vartheta' p \rangle v_i d\mathbf{v} d\theta - V_i \iint \langle \vartheta' p \rangle d\mathbf{v} d\theta \right) = \tau_i \left(\Lambda_i^\vartheta - \mathbf{M}_j^\vartheta \frac{\partial V_i}{\partial x_j} \right), \\ \langle \vartheta' \theta' \rangle &= \frac{1}{\Phi} \left(\iint \langle \vartheta' p \rangle \theta d\mathbf{v} d\theta - \Theta \iint \langle \vartheta' p \rangle d\mathbf{v} d\theta \right) = \tau_i \left(\mathbf{H}^\vartheta - \mathbf{M}_i^\vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial x_i} \right).\end{aligned}$$

Рассмотрим асимптотическое поведение представленной модели в предельном случае безынерционных частиц ($\tau_p, \tau_i \rightarrow 0$). Прежде всего, очевидно, что только первый и последний члены в правой части уравнения (30), характеризующие соответственно силу гидродинамического сопротивления и диффузионную силу, являются существенными при $\tau_p \rightarrow 0$. Таким образом, с учетом (33) и (41) можно получить, что скорость безынерционных частиц совпадает со скоростью жидкости, видимой такими частицами:

$$\lim_{\tau_p \rightarrow 0} V_i = \lim_{\tau_p \rightarrow 0} U_{pi} = U_i - D_{ij} \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_j}, \quad (43)$$

а тензор диффузии частиц трансформируется в соответствующую величину для безынерционной примеси (пассивного скаляра):

$$\lim_{\tau_p \rightarrow 0} D_{p\ ij} = D_{ij} = \langle u'_i u'_k \rangle T_{L\ kj},$$

где $T_{L\ ij}$ — тензор лагранжевых временных интегральных масштабов турбулентности. Из (43) следует, что осредненная скорость дисперсной фазы, состоящей из безынерционных частиц, складывается из конвективной и диффузионной составляющих. В этом случае конвективный перенос, естественно, производится со средней скоростью несущей жидкости U_i , а

диффузионный перенос характеризуется тензором диффузии безынерционной примеси D_{ij} .

Аналогично (43) из (32) и (34) следует, что температура безынерционных частиц

$$\lim_{\tau_p, \tau_i \rightarrow 0} \Theta = \lim_{\tau_p, \tau_i \rightarrow 0} T_p = T - D'_i \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_i}, \quad D'_i = \langle u'_j \vartheta \rangle T_{Lji}^{\vartheta u},$$

где D'_i — вектор термической диффузии безынерционной примеси; $T_{Lji}^{\vartheta u}$ — тензор лагранжевых временных интегральных масштабов корреляции температуры и скорости в турбулентной жидкости.

Далее из уравнений (35)—(37) легко получить, что кинетические напряжения, тепловые потоки и вариация температуры безынерционных частиц совпадают с соответствующими величинами для турбулентной жидкости

$$\lim_{\tau_p \rightarrow 0} \langle v'_i v'_j \rangle = \langle u'_i u'_j \rangle, \quad \lim_{\tau_p, \tau_i \rightarrow 0} \langle v'_i \vartheta \rangle = \langle u'_i \vartheta \rangle, \quad \lim_{\tau_p, \tau_i \rightarrow 0} \langle \vartheta'^2 \rangle = \langle \vartheta'^2 \rangle.$$

В безынерционном пределе третьи моменты пульсаций скорости (35) переходят в соотношения для соответствующих корреляций сплошной среды [32]:

$$\begin{aligned} \lim_{\tau_p \rightarrow 0} \langle v'_i v'_j v'_k \rangle &= \langle u'_i u'_j u'_k \rangle = \\ &= -\frac{1}{3} \left(\langle u'_i u'_l \rangle T_{Lln} \frac{\partial \langle u'_j u'_k \rangle}{\partial x_n} + \langle u'_j u'_l \rangle T_{Lin} \frac{\partial \langle u'_i u'_k \rangle}{\partial x_n} + \langle u'_k u'_l \rangle T_{Lin} \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_n} \right). \end{aligned} \quad (44)$$

Если для тензора лагранжевых интегральных временных масштабов принять изотропное представление

$$T_{Lij} = T_L \delta_{ij}, \quad (45)$$

то (44) переходит в хорошо известное в теории однофазной турбулентности соотношение для третьих моментов [33]

$$\langle u'_i u'_j u'_k \rangle = -\beta \frac{k}{\varepsilon} \left(\langle u'_i u'_n \rangle \frac{\partial \langle u'_j u'_k \rangle}{\partial x_n} + \langle u'_j u'_n \rangle \frac{\partial \langle u'_i u'_k \rangle}{\partial x_n} + \langle u'_k u'_n \rangle \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_n} \right), \quad \beta = \frac{\alpha}{3},$$

где лагранжев временной масштаб турбулентности выражается через турбулентную энергию k и скорость ее диссипации ε :

$$T_L = \alpha \frac{k}{\varepsilon}, \quad \alpha = \text{const}. \quad (46)$$

Подобно (45) и (46) тензор лагранжевых временных интегральных масштабов корреляции температуры и скорости аппроксимируется в виде изотропного представления

$$T_{Lij}^{\vartheta u} = \alpha_{\vartheta u} \frac{k}{\varepsilon} \delta_{ij}. \quad (47)$$

Тогда из (39) и (40) с учетом (47) в безынерционном пределе следует:

$$\lim_{\tau_p, \tau_t \rightarrow 0} \langle v_i' v_j' \theta' \rangle = -\frac{k}{\varepsilon} \left[C_{u1} \left(\langle u_i' u_k' \rangle \frac{\partial \langle u_j' \vartheta' \rangle}{\partial x_k} + \langle u_j' u_k' \rangle \frac{\partial \langle u_i' \vartheta' \rangle}{\partial x_k} \right) + C_{u1}' \langle u_k' \vartheta' \rangle \frac{\partial \langle u_i' u_j' \rangle}{\partial x_k} \right], \quad (48)$$

$$\lim_{\tau_p, \tau_t \rightarrow 0} \langle v_i' \theta'^2 \rangle = -\frac{k}{\varepsilon} \left(C_{u2} \langle u_i' u_j' \rangle \frac{\partial \langle \vartheta'^2 \rangle}{\partial x_j} + 2C_{u2}' \langle u_j' \vartheta' \rangle \frac{\partial \langle u_i' \vartheta' \rangle}{\partial x_j} \right), \quad (49)$$

$$C_{u1} = \frac{\Upsilon_0 \alpha}{1 + 2\Upsilon_0}, \quad C_{u1}' = \frac{\alpha_{\vartheta u}}{1 + 2\Upsilon_0}, \quad C_{u2} = \frac{\Upsilon_0 \alpha}{2 + \Upsilon_0}, \quad C_{u2}' = \frac{\alpha_{\vartheta u}}{2 + \Upsilon_0},$$

$$\Upsilon_0 = \lim_{\tau_p, \tau_t \rightarrow 0} \frac{\tau_t}{\tau_p}.$$

Выражения (48) и (49) согласуются с известными градиентными аппроксимациями третьих моментов пульсаций скорости и температуры турбулентной жидкости [34; 35].

Итак, представленная модель второго порядка для гидродинамики и теплообмена дисперсной фазы обеспечивает правильный предельный переход к случаю безынерционных частиц и воспроизводит известные в теории однофазной турбулентности соотношения.

5. Локально-равновесное приближение

Далее рассмотрим поведение вторых моментов пульсаций скорости и температуры в так называемом локально-равновесном приближении, когда пренебрегают всеми дифференциальными членами, описывающими транспорт и производство пульсаций. В неоднородной сдвиговой турбулентности это приближение может быть использовано для предсказания турбулентных характеристик малоинерционных частиц, когда динамическое и термическое время релаксаций мало по сравнению с макромасшта-

бами турбулентности. В этой ситуации из уравнений (35)—(37) можно получить следующие локально-равновесные соотношения между вторыми моментами дисперсной и сплошной фаз:

$$\langle v_i' v_j' \rangle = \frac{\langle u_i' u_k' \rangle \hat{f}_{kj}^u + \langle u_j' u_k' \rangle \hat{f}_{ki}^u}{2}, \quad \langle v_i' \vartheta' \rangle = \frac{\langle u_j' \vartheta' \rangle (\tau_p \hat{f}_{tji}^u + \tau_t \hat{f}_{tji}^t)}{\tau_p + \tau_t},$$

$$\langle \theta'^2 \rangle = \langle \vartheta'^2 \rangle \hat{f}_t. \quad (50)$$

Аналогично корреляции пульсаций скорости и температуры сплошной и дисперсной фаз выражаются так:

$$\langle u_i' v_j' \rangle = \langle u_i' u_k' \rangle f_{kj}^u, \quad \langle u_i' \theta' \rangle = \langle u_j' \vartheta' \rangle f_{tji}^{u*}, \quad \langle v_i' \vartheta' \rangle = \langle u_j' \vartheta' \rangle f_{tji}^{\vartheta},$$

$$\langle \vartheta' \theta' \rangle = \langle \vartheta'^2 \rangle f_t^{\vartheta}. \quad (51)$$

Для определения коэффициентов вовлечения частиц, появившихся в (50) и (51), корреляционные функции аппроксимируются экспоненциальными зависимостями

$$\Psi_{Lp} = \exp\left(-\frac{\tau}{T_{Lp}}\right), \quad \Psi_{Lp}^{u\vartheta} = \exp\left(-\frac{\tau}{T_{Lp}^{u\vartheta}}\right), \quad \Psi_{Lp}^{\vartheta u} = \exp\left(-\frac{\tau}{T_{Lp}^{\vartheta u}}\right),$$

$$\Psi_{Lp} = \exp\left(-\frac{\tau}{T_{Lp}}\right), \quad (52)$$

которые являются корректными при больших числах Рейнольдса за исключением узкой области вблизи начала координат $\tau = 0$.

Далее лагранжевы временные интегральные масштабы корреляций скорости и температуры на траектории частиц предполагаются совпадающими с соответствующими величинами на траекториях жидких элементов. Очевидно, что это допущение строго справедливо только в безынерционном пределе и нарушается для высокоинерционных частиц, когда существенными становятся так называемые инерционный эффект и эффект пересечения траекторий [36—38]. Кроме того, в этом разделе все тензоры лагранжевых временных масштабов предполагаются изотропными. В результате имеем:

$$T_{Lp\ ij} = T_L \delta_{ij}, \quad T_{Lp\ ij}^{u\vartheta} = T_L^{u\vartheta} \delta_{ij}, \quad T_{Lp\ ij}^{\vartheta u} = T_L^{\vartheta u} \delta_{ij}, \quad T_{Lp} = T_L, \quad (53)$$

где T_L , $T_L^{u\vartheta}$, $T_L^{\vartheta u}$, T_L — лагранжевы временные масштабы корреляций скорости, скорости с температурой, температуры со скоростью и температуры турбулентной жидкости.

Соотношения (52) и (53) позволяют представить (50) в виде

$$\langle v'_i v'_j \rangle = \frac{T_L + A^2 \tau_p}{T_L + \tau_p} \langle u'_i u'_j \rangle, \quad (54)$$

$$\langle v'_i \vartheta' \rangle = \left[AB + \frac{(1-A)(\tau_p + B\tau_t) T_L^{\vartheta u}}{(\tau_p + \tau_t)(T_L^{\vartheta u} + \tau_p)} + \frac{(1-B)(\tau_t + A\tau_p) T_L^{u\vartheta}}{(\tau_p + \tau_t)(T_L^{u\vartheta} + \tau_t)} \right] \langle u'_i \vartheta' \rangle, \quad (55)$$

$$\langle \vartheta'^2 \rangle = \frac{T_L + B^2 \tau_t}{T_L + \tau_t} \langle \vartheta'^2 \rangle, \quad (56)$$

Аналогично соотношения (51) примут вид

$$\langle u'_i v'_j \rangle = \frac{T_L + A\tau_p}{T_L + \tau_p} \langle u'_i u'_j \rangle, \quad (57)$$

$$\langle u'_i \vartheta' \rangle = \frac{T_L^{u\vartheta} + B\tau_t}{T_L^{u\vartheta} + \tau_t} \langle u'_i \vartheta' \rangle, \quad \langle v'_i \vartheta' \rangle = \frac{T_L^{\vartheta u} + A\tau_p}{T_L^{\vartheta u} + \tau_p} \langle u'_i \vartheta' \rangle, \quad (58)$$

$$\langle \vartheta' \vartheta' \rangle = \frac{T_L + B\tau_t}{T_L + \tau_t} \langle \vartheta'^2 \rangle. \quad (59)$$

В рассматриваемой ситуации тензор диффузии и вектор термической диффузии частиц совпадают с соответствующими величинами для безынерционной примеси:

$$D_{p\,ij} = D_{ij} = T_L \langle u'_i u'_j \rangle, \quad (60)$$

$$D'_{p\,i} = D'_i = T_L^{\vartheta u} \langle u'_i \vartheta' \rangle. \quad (61)$$

Поскольку безынерционные частицы полностью следуют турбулентным пульсациям скорости и температуры несущей сплошной среды, то соотношения (54)—(59) предсказывают, что в безынерционном пределе вторые моменты дисперсной фазы, а также ковариации сплошной и дисперсной фаз переходят в соответствующие вторые моменты турбулентной жидкости. Также очевидно, что соотношения (54), (57) и (60) согласуются с теорией Чена—Хинце [27] для дисперсии частиц в однородной бессдвиговой турбулентности. Соотношения (55), (56), (58), (59) и (61) расширяют эту теорию на неизотермические течения.

6. Изотропная турбулентность с постоянным средним градиентом температуры

Далее исследуем справедливость модели для предсказания характеристик дисперсной фазы в изотропном однородном стационарном поле турбулентной жидкости с наложенным средним градиентом температуры в направлении x_2 . Вследствие однородности рассматриваемого течения трети моменты пульсаций скорости и температуры обращаются в нуль и цепочка уравнений обрывается на уровне вторых моментов. Поэтому однородные потоки имеют фундаментальное значение для валидации моделей турбулентного переноса импульса и тепла.

В предположении, что действующие на частицы внешние силы отсутствуют, кинетические напряжения дисперсной фазы изотропны и с учетом (52) и (53) выражаются так:

$$\langle v'_i v'_j \rangle = \frac{2(T_L + A^2 \tau_p)}{3(T_L + \tau_p)} k \delta_{ij}. \quad (62)$$

Градиенты осредненных температур сплошной и дисперсной фаз равны

$$\frac{\partial T}{\partial x_2} = \frac{\partial \Theta}{\partial x_2} = \Sigma, \quad (63)$$

где Σ — постоянная величина.

В соответствии с (62) и (63) турбулентный тепловой поток $\langle v'_i \theta' \rangle$ имеет только одну ненулевую компоненту в направлении градиента осредненной температуры. Как следует из (36) с учетом (52), (53), (62) и (63), эта ненулевая компонента определяется из соотношения

$$\langle v'_2 \theta' \rangle = \left[AB + \frac{(1-A)(\tau_p + B\tau_i) T_L^{\partial u}}{(\tau_p + \tau_i)(T_L^{\partial u} + \tau_p)} + \frac{(1-B)(\tau_i + A\tau_p) T_L^{u\partial}}{(\tau_p + \tau_i)(T_L^{u\partial} + \tau_i)} \right] \langle u'_2 \vartheta' \rangle c - \frac{2\tau_i T_L k \Sigma [T_L(\tau_p + \tau_i) + \tau_p \tau_i + A^2 \tau_p^2]}{3(\tau_p + \tau_i)(T_L + \tau_p)(T_L + \tau_i)}. \quad (64)$$

В рассматриваемых условиях интенсивность пульсаций температуры согласно (37) имеет вид

$$\langle \theta'^2 \rangle = \frac{T_L + B^2 \tau_i}{T_L + \tau_i} \langle \vartheta'^2 \rangle - \tau_i \Sigma \langle v'_2 \theta' \rangle - \left\{ \frac{T_L^{\vartheta u}}{\tau_p - \tau_i} \left[\frac{(1-A)(\tau_p + B\tau_i)}{T_L^{\vartheta u} + \tau_p} + \frac{(1+B)(A\tau_p - \tau_i)}{T_L^{\vartheta u} + \tau_i} \right] - AB \right\} \tau_i \Sigma \langle u'_2 \vartheta' \rangle. \quad (65)$$

Из (42) с учетом (62) и (63) получаются ненулевые компоненты ковариаций скорости и температуры сплошной и дисперсной фаз:

$$\langle u'_2 \theta' \rangle = \frac{T_L^{\vartheta u} + B\tau_i}{T_L^{\vartheta u} + \tau_i} \langle u'_2 \vartheta' \rangle - \frac{2\tau_i T_L k \Sigma (T_L + A\tau_p)}{3(T_L + \tau_p)(T_L + \tau_i)}, \quad (66)$$

$$\langle v'_2 \vartheta' \rangle = \frac{T_L^{\vartheta u} + A\tau_p}{T_L^{\vartheta u} + \tau_p} \langle u'_2 \vartheta' \rangle. \quad (67)$$

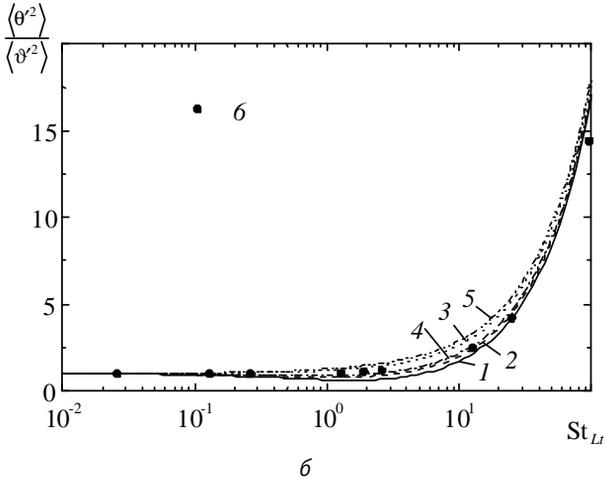
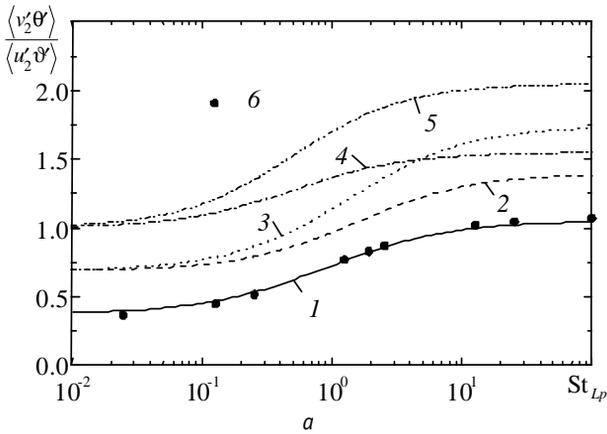
Турбулентный тепловой поток, вариация температуры и ковариации скорости и температуры, предсказываемые выражениями (64)—(67) и нормализованные на соответствующие величины в турбулентной жидкости, представлены на рис. 1.

В предельном случае тяжелых частиц ($A = B = 0$) выполнено сравнение с данными прямых численных расчетов (DNS) [39], полученными при $\rho_p / \rho_f = 3462$. Динамическое число Стокса $St_{L0} \equiv \tau_{p0} / T_L$ фиксировалось и равнялось 3,29, а термическое число Стокса $St_{L1} \equiv \tau_i / T_L$ варьировалось. С учетом данных DNS [39; 40] отношение между лагранжевыми временными масштабами корреляций пульсаций скорости и температуры в изотропной турбулентности было принято равным 2, а масштабы корреляций скорость — температура и температура — скорость определялись как $T_L^{\vartheta u} = T_L$ и $T_L^{\vartheta u} = T_L$.

Из рис. 1а видно монотонное увеличение отношения тепловых потоков дисперсной и сплошной фаз по мере возрастания термической инерционности частиц. Этот эффект обусловлен влиянием среднего градиента температуры. Также видно увеличение теплового потока дисперсной фазы с ростом параметров A и B , характеризующих эффекты вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости жидкости. В предельных случаях малых и больших значений термического числа Стокса справедливы следующие асимптотические соотношения:

$$\lim_{St_{L1} \rightarrow 0} \frac{\langle v'_2 \theta' \rangle}{\langle u'_2 \vartheta' \rangle} = \frac{T_L^{\vartheta u} + A\tau_p}{T_L^{\vartheta u} + \tau_p}, \quad \lim_{St_{L1} \rightarrow \infty} \frac{\langle v'_2 \theta' \rangle}{\langle u'_2 \vartheta' \rangle} = \frac{B(T_L^{\vartheta u} + A\tau_p)}{T_L^{\vartheta u} + \tau_p} + \frac{2T_L k \Sigma}{3|\langle u'_2 \vartheta' \rangle|}.$$

Следовательно, при малых St_{Lr} отношение тепловых потоков $\langle v'_2 \theta' \rangle / \langle u'_2 \theta' \rangle$ не зависит ни от среднего градиента температуры Σ , ни от отношения теплоемкостей сплошной и дисперсной фаз B . Напротив, при больших St_{Lr} отношение тепловых потоков $\langle v'_2 \theta' \rangle / \langle u'_2 \theta' \rangle$ линейно возрастает с Σ и B . При относительно больших значениях параметров A и B благодаря эффектам вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости жидкости турбулентный тепловой поток для легких частиц может существенно превышать тепловой поток в жидкости.



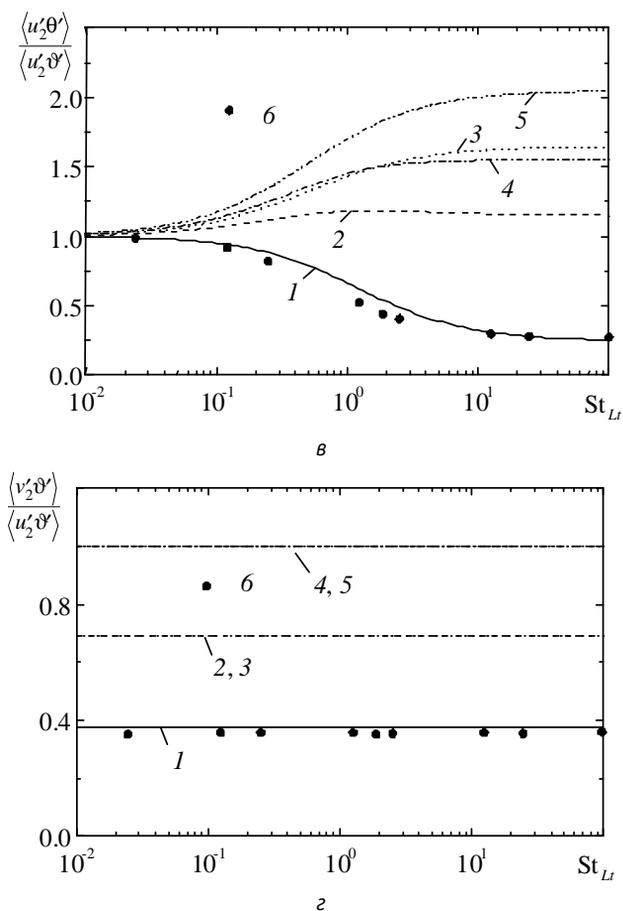


Рис. 1. Нормализованные тепловой поток (а) и вариация температуры (б) дисперсной фазы и ковариации скорость — температура сплошной и дисперсной фаз (в, з):
 1—5 — модель, 6 — DNS [39]; 1, 6 — $A = B = 0$, 2 — $A = B = 0,5$,
 3 — $A = 0,5$, $B = 1$, 4 — $A = 1$, $B = 0,5$, 5 — $A = B = 1$

На рис. 1б представляет отношение интенсивностей пульсаций температуры дисперсной и сплошной фаз в зависимости от теплового числа Стокса. Очевидно, что пульсации температуры безынерционных частиц совпадают с пульсациями температуры сплошной среды. С ростом St_{Lr} интенсивность пульсаций температуры частиц $\langle \theta'^2 \rangle$ увеличивается и существенно превышает интенсивность пульсаций температуры сплошной среды $\langle \vartheta'^2 \rangle$.

Этот эффект может иметь большое значение в физико-химических процессах, скорость которых сильно и нелинейно зависит от температуры, например, при воспламенении мелких частиц твердого топлива. Превышение интенсивности пульсаций температуры частиц над пульсациями температуры жидкости вызвано генерацией $\langle \theta'^2 \rangle$ благодаря среднему градиенту температуры и объясняется отсутствием механизмов диссипации турбулентных мелкомасштабных пульсаций скорости и температуры в дисперсной фазе, обусловленных в сплошной среде вязкостью и теплопроводностью. Как можно видеть, соотношение $\langle \theta'^2 \rangle / \langle \vartheta'^2 \rangle$ слабо чувствительно к значениям параметров A и B и, кроме того, вообще не зависит от этих параметров при малых и больших значениях St_L . Это означает, что влияние вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости жидкости на пульсации температуры частиц незначительно и слегка проявляется только при средних значениях термического числа Стокса.

На рис. 1в и 1г показаны ковариации скоростей и температур сплошной и дисперсной фаз, отнесенные к турбулентному тепловому потоку в жидкости. Из рис. 1в видно, что вследствие так называемого эффекта инерционной фильтрации мелкомасштабных возмущений отклик тяжелых частиц на турбулентные пульсации жидкости уменьшается и в результате $\langle u'_2 \theta' \rangle / \langle u'_2 \vartheta' \rangle$ с ростом St_L падает. Напротив, в случае легких частиц эффекты вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости могут вызывать увеличение $\langle u'_2 \theta' \rangle / \langle u'_2 \vartheta' \rangle$ с ростом термической инерции частиц. Согласно (67) $\langle v'_2 \vartheta' \rangle / \langle u'_2 \vartheta' \rangle$ не зависит от St_L , что подтверждается данными DNS. Кроме того, выражение (67) предсказывает, что $\langle v'_2 \vartheta' \rangle / \langle u'_2 \vartheta' \rangle$ не зависит от отношения теплоемкостей сплошной и дисперсной фаз B .

Таким образом, рис. 1 свидетельствует, что формулы (64)—(67) хорошо воспроизводят основные закономерности численных расчетов [39], найденные для температурных корреляций тяжелых частиц в изотропной однородной турбулентности с наложенным средним градиентом температуры. В то же время желательны провести валидацию модели для легких частиц, однако необходимые данные DNS в литературе отсутствуют.

7. Квазиоднородное пристеночное течение

В данном разделе проведем анализ эффектов вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости жидкости на вторые моменты пульсаций скорости и температуры частиц в стационарном пристеночном турбулентном течении при наличии средних градиентов скорости и температуры. Хорошо известно, что в турбулентном потоке на определенном рас-

стоянии от стенки (вне области вязкого подслоя) реализуется равновесное состояние, характеризующее приближенным равенством скоростей порождения и диссипации турбулентной энергии жидкости. В равновесном состоянии конвективный и диффузионный механизмы переноса пульсаций скорости и температуры становятся незначительными, тройные одноточечные корреляции пульсаций исчезают, а вторые моменты пульсаций принимают постоянные значения. Однако в целом пристеночное течение даже в равновесной области не является однородным, поскольку пространственные и временные масштабы турбулентности зависят от нормальной к стенке координаты $y = x_2$. Отметим, что достаточно протяженная равновесная пристеночная область может наблюдаться только при больших числах Рейнольдса, например, она реализована в логарифмическом слое при течении в канале ($v_f/u_* \ll y \ll h$, где u_* — скорость трения; h — полуширина канала). В пристеночной области определяющими параметрами являются скорость трения u_* и нормальная координата y . Тогда в соответствии с теорией подобия градиент осредненной продольной скорости жидкости имеет вид

$$S = \frac{dU_1}{dx_2} = \frac{u_*}{\kappa y}, \quad (68)$$

где $\kappa = 0,4$ — постоянная Прандтля—Кармана.

Из (68) очевидно, что пристеночное течение не представляет собой область с постоянной скоростью сдвига, поскольку S возрастает по мере приближения к стенке. Тем не менее мы будем использовать уравнения баланса вторых моментов пульсаций скорости и температуры как для однородного течения, пренебрегая в них всеми транспортными членами. Такой приближенный анализ может рассматриваться как локально-однородный (или квазиоднородный) подход. Кроме того, как упоминалось во введении, концентрация частиц предполагается достаточно малой, чтобы модификацией турбулентности можно было пренебречь. Вследствие однородности течения из (30) и (31) следует, что при отсутствии действующих на частицы внешних сил их концентрация не изменяется в пространстве, а средние градиенты скоростей сплошной и дисперсной фаз совпадают. В соответствии с (68)

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_j} = \frac{\partial V_i}{\partial x_j} = S \delta_{i1} \delta_{j2}. \quad (69)$$

Подстановка (69) в (35) с учетом (29) приводит к следующей системе уравнений для ненулевых кинетических напряжений частиц:

$$\langle v_1'^2 \rangle = \langle u_1'^2 \rangle \hat{f}_{11} + \langle u_1' u_2' \rangle \hat{f}_{21} - \tau_p S \left[\langle v_1' v_2' \rangle + \langle u_1'^2 \rangle (\hat{g}_{12} - \hat{l}_{12}) + \langle u_1' u_2' \rangle (\hat{g}_{22} - \hat{l}_{22}) \right],$$

$$\langle v_2'^2 \rangle = \langle u_1' u_2' \rangle \hat{f}_{12} + \langle u_2'^2 \rangle \hat{f}_{22}, \quad \langle v_3'^2 \rangle = \langle u_3'^2 \rangle \hat{f}_{33}, \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \langle v_1' v_2' \rangle &= \frac{1}{2} \left[\langle u_1'^2 \rangle \hat{f}_{12} + \langle u_1' u_2' \rangle (\hat{f}_{11} + \hat{f}_{22}) + \langle u_2'^2 \rangle \hat{f}_{21} \right] - \\ &- \frac{\tau_p S}{2} \left[\langle v_2'^2 \rangle + \langle u_1' u_2' \rangle (\hat{g}_{12} - \hat{l}_{12}) + \langle u_2'^2 \rangle (\hat{g}_{22} - \hat{l}_{22}) \right]. \end{aligned}$$

Аналогично, подставляя (63) и (69) в (36) и (37), получаем систему уравнений для тепловых потоков и вариации температуры:

$$\begin{aligned} \langle v_1' \theta' \rangle &= \frac{1}{\tau_p + \tau_t} \left[\langle u_1' \vartheta' \rangle (\tau_p \hat{f}_{t11}^u + \tau_t \hat{f}_{u11}^t) + \langle u_2' \vartheta' \rangle (\tau_p \hat{f}_{t21}^u + \tau_t \hat{f}_{u21}^t) \right] - \\ &- \frac{\tau_p \tau_t \Sigma}{\tau_p + \tau_t} \left[\langle v_1' v_2' \rangle + \langle u_1'^2 \rangle (\hat{g}_{12} - \hat{q}_{12}) + \langle u_1' u_2' \rangle (\hat{g}_{22} - \hat{q}_{22}) \right] - \\ &- \frac{\tau_p \tau_t S}{\tau_p + \tau_t} \left[\langle v_2' \theta' \rangle + \langle u_1' \vartheta' \rangle (\hat{g}_{t12} - \hat{l}_{t12}) + \langle u_2' \vartheta' \rangle (\hat{g}_{t22} - \hat{l}_{t22}) \right], \end{aligned} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \langle v_2' \theta' \rangle &= \frac{1}{\tau_p + \tau_t} \left[\langle u_1' \vartheta' \rangle (\tau_p \hat{f}_{t12}^u + \tau_t \hat{f}_{u12}^t) + \langle u_2' \vartheta' \rangle (\tau_p \hat{f}_{t22}^u + \tau_t \hat{f}_{u22}^t) \right] - \\ &- \frac{\tau_p \tau_t \Sigma}{\tau_p + \tau_t} \left[\langle v_2'^2 \rangle + \langle u_1' u_2' \rangle (\hat{g}_{12} - \hat{q}_{12}) + \langle u_2'^2 \rangle (\hat{g}_{22} - \hat{q}_{22}) \right], \end{aligned}$$

$$\langle \theta'^2 \rangle = \hat{f}_t \langle \vartheta'^2 \rangle - \tau_t \Sigma \left[\langle v_2' \theta' \rangle + \langle u_1' \vartheta' \rangle (\hat{g}_{t12} - \hat{q}_{t12}) + \langle u_2' \vartheta' \rangle (\hat{g}_{t22} - \hat{q}_{t22}) \right]. \quad (72)$$

Для определения коэффициентов вовлечения, входящих в уравнения (70)–(72), используются экспоненциальные аппроксимации корреляционных функций (52). Отметим, что нахождение лагранжевых временных масштабов корреляций жидкости на траекториях частиц представляет собой сложную задачу, выходящую за рамки настоящей статьи. Поэтому в данном разделе лагранжевы временные масштабы, видимые частицами, принимаются такими же, как и на траекториях жидких элементов. Как уже отмечалось, данное допущение справедливо только для безынерционных частиц и нарушается для высокоинерционных частиц [37; 38]. Однако можно надеяться, что при отсутствии эффекта пересечения траекторий, обусловленного осредненным скоростным скольжением между частицами и жидкостью, это допущение не будет приводить к большим погрешностям. Так, в [41; 42] показано, что использование характеристик турбулентной жидкости вместо этих же характеристик, видимыми частицами, не приводит к существенным отклонениям для предсказанных моделью кинетических напряжений тяжелых частиц в однородном сдвиговом и каналь-

ном течениях при отсутствии силы тяжести. Следует отметить, что отождествление лагранжевых временных масштабов на траекториях частиц с соответствующими обычными масштабами турбулентности не является принципиальным недостатком развиваемого подхода, поскольку возможно инкорпорировать некоторую модель, учитывающую как инерционный эффект, так и эффект пересечения траекторий.

Таким образом, коэффициенты вовлечения в матричных обозначениях представляются в виде

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{f}} &= \frac{\mathbf{T}_L + A^2 \tau_p \mathbf{I}}{\mathbf{T}_L + \tau_p \mathbf{I}}, \quad \hat{\mathbf{g}} = \frac{\mathbf{T}_L}{\tau_p} - \frac{\mathbf{T}_L + A^2 \tau_p \mathbf{I}}{\mathbf{T}_L + \tau_p \mathbf{I}}, \quad \hat{\mathbf{i}} = \frac{\mathbf{T}_L}{\tau_p} - \frac{2\mathbf{T}_L^2 + (1 + A^2) \tau_p \mathbf{T}_L}{(\mathbf{T}_L + \tau_p \mathbf{I})^2}, \\ \hat{\mathbf{f}}_u &= \frac{\mathbf{T}_L^{\partial u} + (A + AB\Upsilon - B\Upsilon) \tau_p \mathbf{I}}{\Upsilon(\mathbf{T}_L^{\partial u} + \tau_p \mathbf{I})}, \quad \hat{\mathbf{f}}_t = \frac{\Upsilon \mathbf{T}_L^{u\partial} + (AB + B\Upsilon - A) \tau_t \mathbf{I}}{\mathbf{T}_L^{u\partial} + \tau_t \mathbf{I}}, \\ \hat{\mathbf{f}}_t &= \frac{T_{Lt} + B^2 \tau_t}{T_{Lt} + \tau_t}, \\ \hat{\mathbf{q}} &= \frac{\mathbf{T}_L}{\tau_p} - \frac{(1 + \Upsilon) \mathbf{T}_L^2 + (A^2 + \Upsilon) \tau_p \mathbf{T}_L}{(\mathbf{T}_L + \tau_p \mathbf{I})(\mathbf{T}_L + \tau_t \mathbf{I})}, \\ \hat{\mathbf{g}}_t &= \frac{\mathbf{T}_L^{\partial u}}{\tau_t} - \frac{(1 + B\Upsilon - A) \mathbf{T}_L^{\partial u} + AB\Upsilon \tau_p \mathbf{I}}{\Upsilon(\mathbf{T}_L^{\partial u} + \tau_p \mathbf{I})}, \\ \hat{\mathbf{i}}_t &= \frac{\mathbf{T}_L^{\partial u}}{\tau_t} - \frac{(2 + B\Upsilon - A) \mathbf{T}_L^{\partial u 2} + (1 + AB\Upsilon) \tau_p \mathbf{T}_L^{\partial u}}{\Upsilon(\mathbf{T}_L^{\partial u} + \tau_p \mathbf{I})^2}, \\ \hat{\mathbf{q}}_t &= \frac{\mathbf{T}_L^{\partial u}}{\tau_t} - \frac{(1 + \Upsilon + B\Upsilon - A) \mathbf{T}_L^{\partial u 2} + (1 + AB) \tau_t \mathbf{T}_L^{\partial u}}{\Upsilon(\mathbf{T}_L^{\partial u} + \tau_p \mathbf{I})(\mathbf{T}_L^{\partial u} + \tau_t \mathbf{I})},\end{aligned}$$

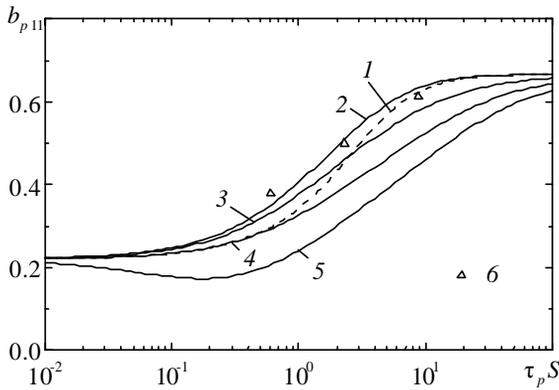
где \mathbf{I} — единичная матрица.

Тензор лагранжевых временных масштабов турбулентной жидкости задается таким же, как полученный в [43] из DNS данных для однородного сдвигового потока с постоянным средним градиентом скорости:

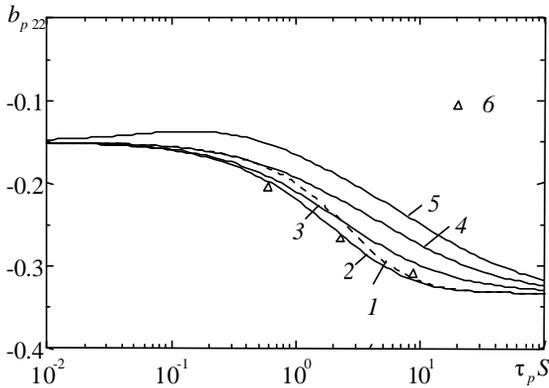
$$\mathbf{T}_L = \frac{k}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 0,44 & -0,11 & 0 \\ -0,06 & 0,22 & 0 \\ 0 & 0 & 0,24 \end{pmatrix}. \quad (73)$$

В соответствии с принятым в разделе 6 лагранжевы временные масштабы, характеризующие температурные корреляции, определяются следующими соотношениями: $\mathbf{T}_L^{uv} = \mathbf{T}_L$, $\mathbf{T}_L^{\partial u} = 2\mathbf{T}_L$ и $T_{Lz} = 2T_L$, где согласно (73) $T_L = T_{Lii}/3 = 0,3k/\varepsilon$.

На рис. 2 и 3 демонстрируется соответственно поведение тензора анизотропии $b_{p\ ij}$ и нормализованных кинетических напряжений $\langle v'_i v'_j \rangle / \langle u'_i u'_i \rangle$, предсказываемое выражениями (70), в зависимости от произведения времени релаксации частицы τ_p и скорости сдвига скорости S .



a



б

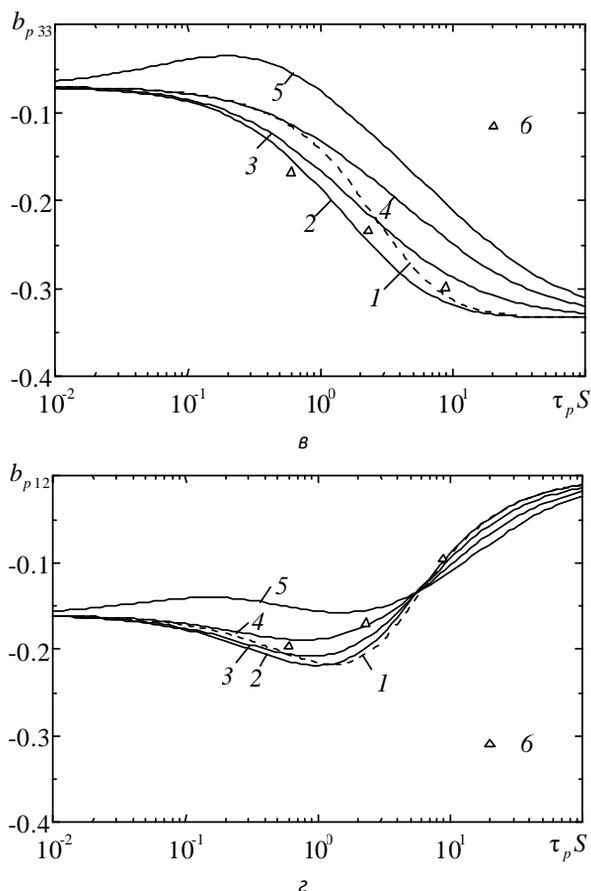


Рис. 2. Продольная (а), нормальная (б), трансверсальная (в) и касательная (г) компоненты тензора анизотропии частиц: 1—5 — модель, 6 — LES [44]; 1 — изотропные временные масштабы, 2—5 — анизотропные временные масштабы; 1, 2, 6 — $A=0$, 3 — $A=0,5$, 4 — $A=1$, 5 — $A=3$

Здесь тензоры анизотропии кинетических напряжений жидкости и частиц определяются так:

$$b_{ij} = \frac{\langle u'_i u'_j \rangle}{2k} - \frac{\delta_{ij}}{3}, \quad b_{p\,ij} = \frac{\langle v'_i v'_j \rangle}{2k_p} - \frac{\delta_{ij}}{3},$$

где $k_p \equiv \langle v'_i v'_i \rangle / 2$ обозначает кинетическую турбулентную энергию частиц. Принимаются следующие турбулентные характеристики турбулентной

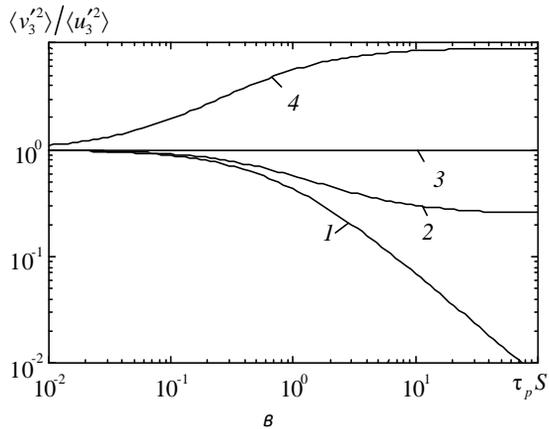
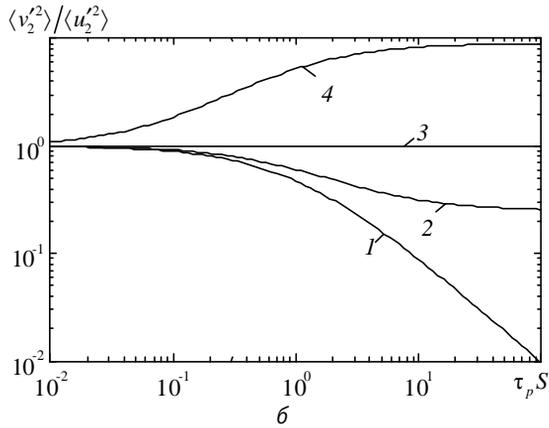
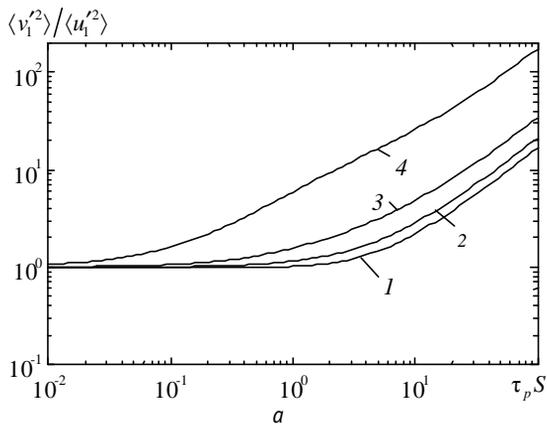
жидкости: $b_{11} = 0,22$, $b_{22} = -0,15$, $b_{33} = -0,07$, $b_{12} = -0,16$, $Sk/\varepsilon = 3,1$, где цифры 1, 2, 3 обозначают продольное, поперечное и трансверсальное направления.

Вначале рассмотрим поведение кинетических напряжений в пределе тяжелых частиц ($A = 0$), когда эффекты вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости жидкости не играют роли. В этом случае для анализа влияния анизотропии лагранжевых масштабов турбулентности результаты, полученные с использованием (73), сравниваются с соответствующими результатами для изотропных временных масштабов $T_{L,ij} = T_L \delta_{ij}$. Как видно из рис. 2, анизотропия пульсаций тяжелых частиц увеличивается с ростом их инерционности, и интенсивность пульсаций скорости в продольном направлении может значительно превышать соответствующие значения в нормальном и трансверсальном направлениях. Значения $b_{p,ij}$ при $\tau_p S = 0$ соответствуют тензору анизотропии жидкости b_{ij} . Рост анизотропии с увеличением инерционности частиц обусловлен вкладом производства продольных пульсаций скорости благодаря среднему градиенту скорости.

На рис. 2г показано немонокотное изменение касательной компоненты тензора анизотропии с увеличением инерционности тяжелых частиц: $b_{p,12}$ вначале падает с увеличением $\tau_p S$, достигает минимума при $\tau_p S \approx 1$, а далее возрастает, стремясь к нулю при $\tau_p S \rightarrow \infty$. На рис. 2 также представлены результаты численного моделирования, полученные в [44] при помощи LES для турбулентного течения тяжелых частиц в плоском канале при $y_+ \equiv y u_* / \nu_f \approx 100$. Очевидно, что результаты, предсказываемые моделью в случае учета анизотропии временных масштабов, лучше согласуются с данными численного моделирования по сравнению с результатами, полученными для изотропного представления этих масштабов.

Поэтому все другие результаты на рис. 2 и 3 представлены с использованием (73).

Продольное напряжение тяжелых частиц возрастает с увеличением $\tau_p S$ и может существенно превышать соответствующее напряжение в жидкости при больших $\tau_p S$.



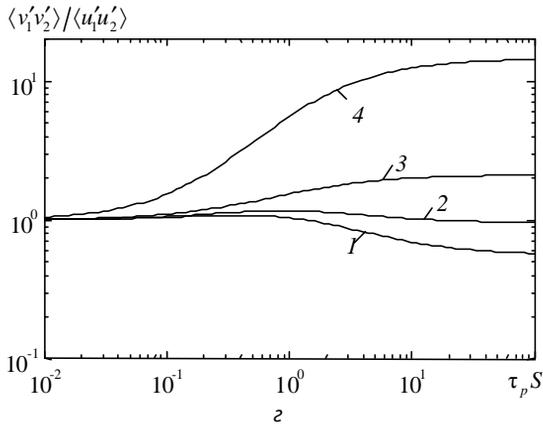


Рис. 3. Продольное (а), нормальное (б), трансверсальное (в) и касательное (г) напряжения частиц, отнесенные к соответствующим напряжениям в жидкости: 1 — $A = 0$, 2 — $A = 0,5$, 3 — $A = 1$, 4 — $A = 3$

Нужно подчеркнуть, что, как следует из (70), существует два механизма генерации продольного и касательного напряжений: производство пульсаций скорости частиц из осредненного движения благодаря среднему градиенту скорости и их производство в результате прямого взаимодействия частиц с турбулентными вихрями жидкости (этот механизм описывается первыми членами в правых частях уравнений). Рост $\langle v_1'^2 \rangle / \langle u_1'^2 \rangle$ с увеличением $\tau_p S$ объясняется градиентным механизмом производства пульсаций. Нормальное и трансверсальное напряжения уменьшаются по мере увеличения $\tau_p S$ (рис. 3б, 3в). Одной из причин уменьшения этих напряжений является отсутствие градиентного механизма порождения, вторая причина состоит в уменьшающемся вовлечении тяжелых частиц с ростом их инерционности в турбулентное движение жидкости (эффект инерционной фильтрации). Из рис. 3г видно, что амплитуда касательного напряжения тяжелых частиц вначале слегка увеличивается с ростом $\tau_p S$ благодаря градиентному механизму порождения, затем падает вследствие уменьшающегося вовлечения частиц в турбулентное движение жидкости и наконец достигает конечного предельного значения при $\tau_p S \rightarrow \infty$.

Как следует из рис. 2, анизотропия диагональных касательных напряжений уменьшается с возрастанием параметра A . Следовательно, эффект вытесненной/добавленной массы приводит к более изотропному поведению флуктуаций скорости за исключением касательного напряжения, поскольку амплитуда касательной компоненты тензора анизотропии b_{p12} увеличива-

ется с ростом A при больших значениях $\tau_p S$. На рис. 3а показан более крутой рост продольного напряжения с $\tau_p S$ по мере увеличения A . Следовательно чувствительность продольного напряжения к среднему градиенту скорости повышается с уменьшением отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз. Поскольку градиентный механизм порождения не действует в нормальном и трансверсальном направлениях, то поведение этих напряжений в пристеночном потоке аналогично случаю изотропной однородной турбулентности. Поэтому, как видно из рис. 3б и 3в, $\langle v_2'^2 \rangle / \langle u_2'^2 \rangle$ и $\langle v_3'^2 \rangle / \langle u_3'^2 \rangle$ равняются единице для частиц нейтральной плавучести ($A=1$) и превышают единицу, когда частицы легче жидкости ($A>1$). Наконец, рис. 3г указывает, что амплитуда касательного напряжения дисперсной фазы также может значительно превышать касательное напряжение в жидкости для более легких, чем сплошная фаза частиц.

На рис. 4 представлены продольный и нормальный к стенке тепловые потоки, а также интенсивность пульсаций температуры частиц, предсказываемые соответственно формулами (71) и (72) при $\tau_i = \tau_p$, $k^{1/2} \Sigma = \langle \vartheta'^2 \rangle^{1/2} S$, $\langle u_1' \vartheta' \rangle / (\langle u_1'^2 \rangle \langle \vartheta'^2 \rangle)^{1/2} = 0,5$ и $\langle u_2' \vartheta' \rangle / (\langle u_2'^2 \rangle \langle \vartheta'^2 \rangle)^{1/2} = -0,5$.

Из рис. 4а видно, что отношение продольных тепловых потоков в дисперсной и сплошной фазах монотонно возрастает с увеличением $\tau_p S$. Это отношение увеличивается также с возрастанием значений параметров A и B , что соответствует увеличению роли эффектов вытесненной/добавленной массы и вытесненной теплоемкости. Однако следует отметить, что роль параметра A существенна во всем диапазоне изменения $\tau_p S$, тогда как параметр B играет роль только при средних значениях $\tau_p S$. На рис. 4б показано, что отношение тепловых потоков дисперсной и сплошной фаз возрастает с увеличением параметров A и B во всем диапазоне изменения $\tau_p S$, но в отличие от $\langle v_1' \vartheta' \rangle / \langle u_1' \vartheta' \rangle$ отношение $\langle v_2' \vartheta' \rangle / \langle u_2' \vartheta' \rangle$ стремится к конечному пределу при $\tau_p S \rightarrow \infty$. Из рис. 4в видно, что отношение интенсивностей пульсаций температуры дисперсной и сплошной фаз монотонно возрастает с увеличением $\tau_p S$, а влияние параметров A и B на $\langle \theta'^2 \rangle / \langle \vartheta'^2 \rangle$ напоминает соответствующие эффекты на $\langle v_1' \vartheta' \rangle / \langle u_1' \vartheta' \rangle$.

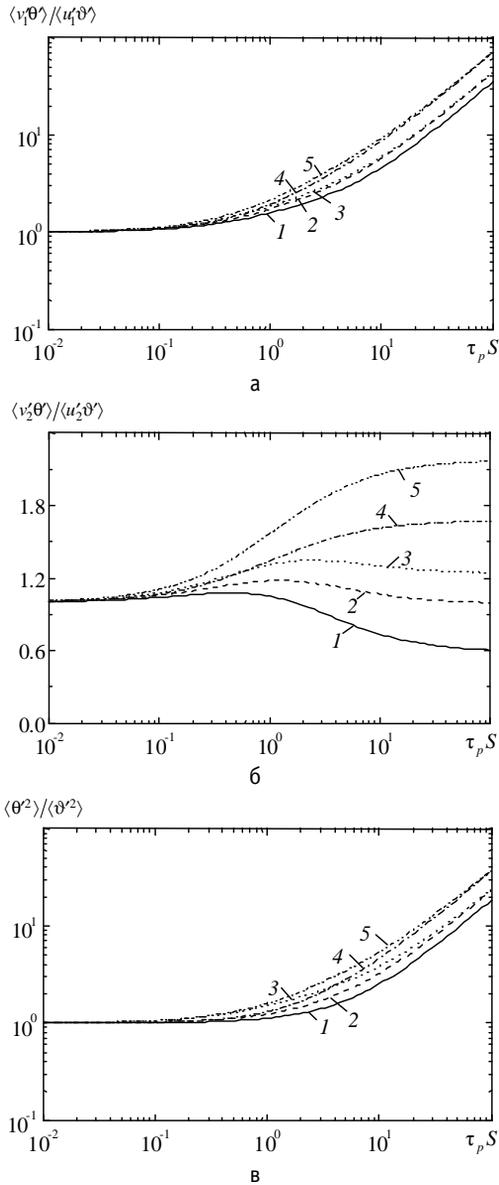


Рис. 4. Нормализованные продольный (а) и нормальный (б) тепловые потоки и вариация температуры (в) частиц: 1 — $A = B = 0$; 2 — $A = B = 0,5$; 3 — $A = 0,5, B = 1$; 4 — $A = 1, B = 0,5$; 5 — $A = B = 1$

7. Движение частиц и пузырьков в плоском канале

В заключение представим результаты валидации модели в случае движения частиц и пузырьков в плоском канале. Выбор этого течения мотивирован наличием большого количества данных прямого численного моделирования. Течение рассматривается вдали от входного сечения и предполагается гидродинамически развитым. Это значит, что все характеристики сплошной и дисперсной фаз предполагаются независимыми (автомодельными) относительно продольной координаты x_1 и считаются зависимыми только от нормальной к стенке координаты $x_2 = y$. Для анализа влияния отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз на гидродинамические характеристики частиц привлекаются данные DNS [45—47], охватывающие весь диапазон изменения ρ_p/ρ_f — от тяжелых частиц в газе до пузырьков в жидкости. Для тестирования результатов по теплопереносу используются данные DNS для тяжелых частиц [48], полученные при разных постоянных значениях температур стенок канала. Все эти данные получены для плоского канала с непроницаемыми стенками, т. е. осаждение частиц не рассматривается. Следовательно, нормальные компоненты осредненных скоростей обеих фаз считаются равными нулю ($U_2 = V_2 = 0$). Обратное влияние частиц на турбулентные характеристики не учитывается, влиянием силы тяжести пренебрегается. Число Рейнольдса $Re_* \equiv hu_* / \nu_f$, определенное по полуширине канала h и скорости трения u_* , во всех расчетах равнялось 150. Система обыкновенных дифференциальных уравнений, получающаяся из (30)—(41) для рассматриваемого течения, решалась методом трехдиагональной матричной прогонки с итерациями. Взаимодействие частиц со стенками предполагается упругим без трения и потерь тепла. Поэтому градиенты диагональных напряжений и вариации температуры, а также касательное напряжение и нормальный тепловой поток на стенке равняются нулю [41]. Таким образом, граничные условия имеют вид

$$\frac{d\Phi}{dy} = \frac{d\langle v_1'^2 \rangle}{dy} = \frac{d\langle v_2'^2 \rangle}{dy} = \frac{d\langle v_3'^2 \rangle}{dy} = \frac{d\langle \theta'^2 \rangle}{dy} = \langle v_1'v_2' \rangle = \langle v_2'\theta' \rangle = 0 \text{ для } y=0, 2h.$$

Поскольку течение вблизи стенки характеризуется небольшими числами Рейнольдса, то для вычисления коэффициентов вовлечения частиц в турбулентное движение жидкости используется двухмасштабная биэкспоненциальная автокорреляционная функция [49]. С целью упрощения лагранжев временной макромасштаб T_{Lij} предполагается изотропным (45), од-

нако будет учитываться различие во временах взаимодействия частиц с турбулентными вихрями в разных направлениях, обусловленное так называемым эффектом пересечения траекторий вследствие осредненного скоростного скольжения между частицей и турбулентной жидкостью [36]. В результате появляется различие между продольной (в вертикальном направлении x_1) T_{Lp}^l и поперечной (в горизонтальных направлениях x_2 и x_3) T_{Lp}^n компонентами $T_{Lp\,ij}$. Интегральные временные масштабы взаимодействия частиц с турбулентными вихрями определяются на основе модели [50]. Лагранжев интегральный временной масштаб турбулентности задается соотношением [41]

$$T_L = \left[\left(\frac{10v_f}{u_*^2} \right)^2 + \left(\frac{\alpha k}{\varepsilon} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad \alpha = 0,3,$$

а тейлоров дифференциальный временной масштаб турбулентности τ_T определяется так [41]:

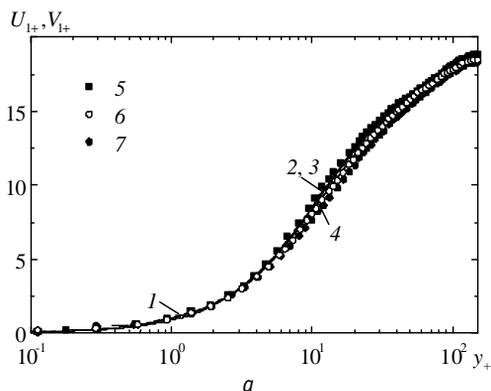
$$\tau_T = \left(\frac{2\text{Re}_\lambda}{15^{1/2} a_0} \right)^{1/2} \tau_k, \quad \tau_k = \left(\frac{v_f}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad \text{Re}_\lambda = \left(\frac{20k^2}{3\varepsilon v_f} \right)^{1/2}, \quad a_0 = \frac{a_{01} + a_{0\infty} \text{Re}_\lambda}{a_{02} + \text{Re}_\lambda},$$

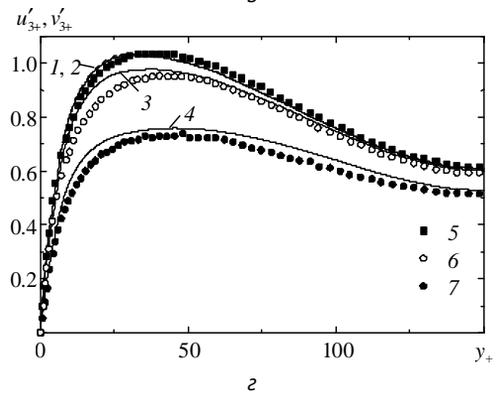
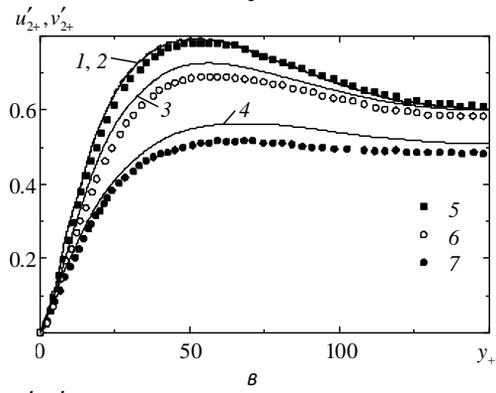
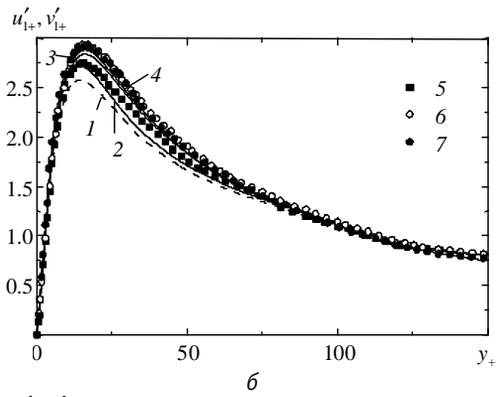
$$a_{01} = 11, \quad a_{02} = 205, \quad a_{0\infty} = 7.$$

Безразмерные переменные, обозначенные нижним индексом «+», определены с помощью кинематической вязкости жидкости ν_f , скорости трения u_* и температуры трения $T_* \equiv q_w / \rho_f C_{pf} u_*$, где q_w — тепловой поток на стенке: $U_{1+} = U_1 / u_*$, $V_{1+} = V_1 / u_*$, $u'_{i+} = \langle u_i'^2 \rangle^{1/2} / u_*$, $v'_{i+} = \langle v_i'^2 \rangle^{1/2} / u_*$, $y_+ = y u_* / \nu_f$, $T_+ = (T - T_w) / T_*$, $\Theta_+ = (\Theta - T_w) / T_*$, $\vartheta'_+ = \langle \vartheta'^2 \rangle^{1/2} / T_*$, $\theta'_+ = \langle \theta'^2 \rangle^{1/2} / T_*$; концентрация частиц отнесена к своему значению на оси канала $\bar{\Phi} = \Phi / \Phi(h)$; инерционность частиц характеризуется безразмерным временем релаксации $\tau_+ = \tau_{p0} u_*^2 / \nu_f$.

На рис. 5 показаны распределения осредненной продольной скорости, ненулевых кинетических напряжений и концентрации тяжелых частиц ($\rho_p / \rho_f = 769$) по сечению канала в случае отсутствия действия подъемной силы. В соответствии с DNS [45] осредненная продольная скорость дисперсной фазы V_{1+} незначительно отличается от скорости жидкости

U_{1+} даже для самых тяжелых частиц с $\tau_+ = 25$ (рис. 5а). В пристеночной области интенсивность продольных пульсаций скорости частиц превышает значение соответствующей величины для жидкости (рис. 5б). Как отмечалось в предыдущем разделе, существуют два механизма генерации продольного и касательного напряжений: градиентный механизм благодаря сдвигу осредненной продольной скорости в нормальном к стенке направлении и механизм, обусловленный непосредственным взаимодействием частиц с турбулентными вихрями жидкости и характеризующийся величиной Λ_{ij} в уравнении баланса кинетических напряжений (35). Увеличение V'_{1+} по сравнению с U'_{1+} объясняется действием градиентного механизма порождения пульсаций. Нормальная и трансверсальная компоненты интенсивности пульсаций скорости уменьшаются по всему сечению канала (рис. 5в и 5г), что связано с отсутствием градиентного механизма порождения и уменьшения вовлечения тяжелых частиц с ростом их инерционности в турбулентное движение жидкости. С ростом τ_+ амплитуда касательного напряжения вначале увеличивается благодаря градиентному механизму порождения, а далее снижается вследствие уменьшения отклика частиц на турбулентные пульсации жидкости (рис. 5д). На рис. 5е продемонстрировано влияние инерционности частиц на профиль их концентрации по сечению канала. Как видно, концентрация инерционных частиц сильно возрастает в пристеночной области (в вязком подслое), где градиент турбулентных пульсаций скорости жидкости достигает максимального значения. Следовательно, формирование области аккумуляции тяжелых частиц вблизи стенки обусловлено силой турбофореза, индуцированной градиентом пульсаций скорости жидкости [28; 29].





2

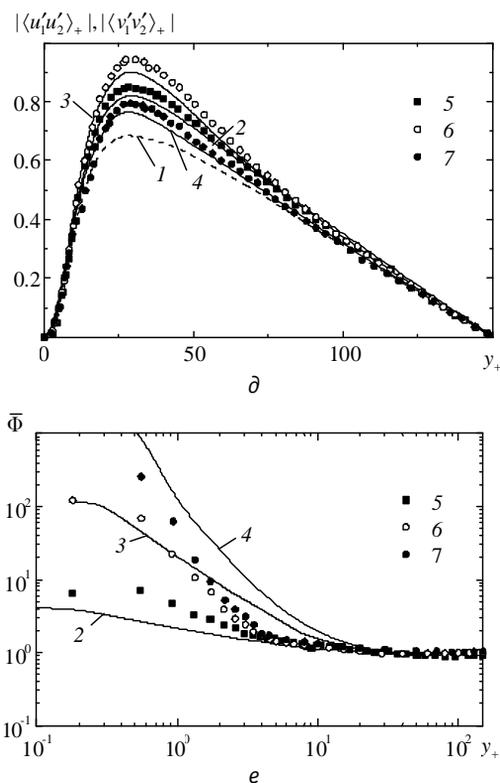
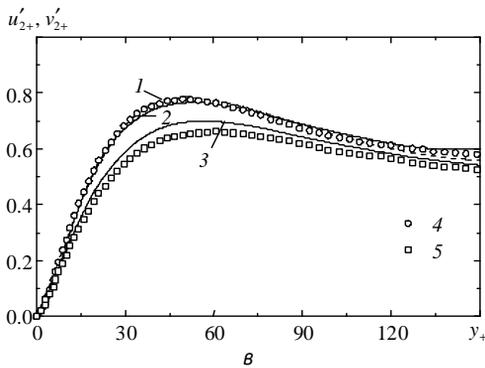
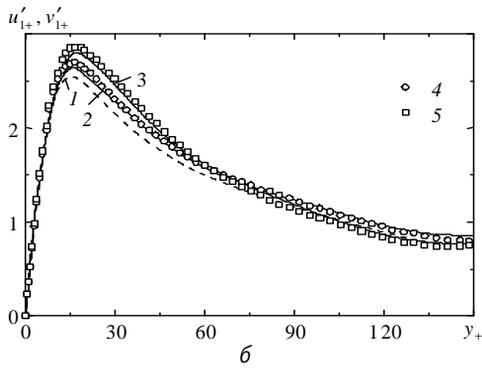
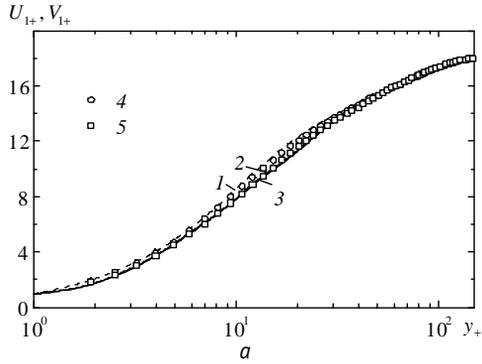


Рис. 5. Распределения динамических характеристик тяжелых частиц по сечению канала: 1 — жидкость, 2—7 — частицы; 2, 3, 4 — модель, 5, 6, 7 — DNS [45];
2, 5 — $\tau_+ = 1$, 3, 6 — $\tau_+ = 5$, 4, 7 — $\tau_+ = 25$

На рис. 6 показано сравнение результатов моделирования динамических и тепловых характеристик тяжелых частиц с данными прямых численных расчетов [48] для $\rho_p/\rho_f = 19,3$ и $Pr_f = 3$. Видно, что полученные распределения осредненной продольной скорости и интенсивностей пульсаций скорости частиц по сечению канала аналогичны профилям, представленным на рис. 5, и согласуются с данными DNS. Влияние инерционности частиц на распределения осредненной температуры Θ_+ и интенсивности пульсаций температуры θ'_+ качественно подобно соответствующему эффекту на осредненную продольную скорость V_{1+} и интенсивность пульсаций продольной скорости v'_{1+} . Некоторое количественное различие между распределениями динамических и тепловых характеристик обусловлено

разницей граничных условий для осредненных продольной скорости и температуры.



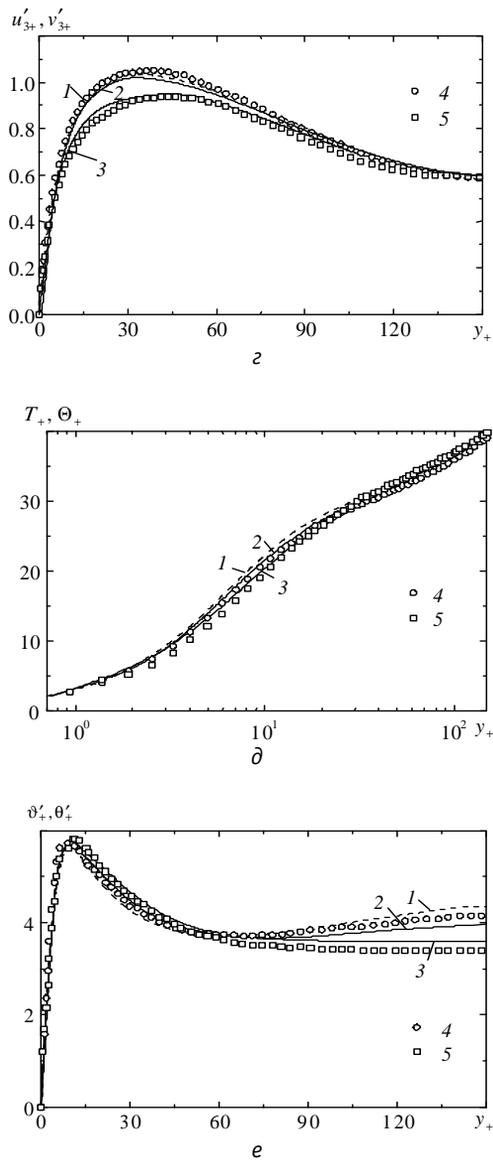


Рис. 6. Распределения динамических и тепловых характеристик тяжелых частиц по сечению канала: 1 — жидкость, 2—5 — частицы; 2, 3 — модель, 4, 5 — DNS [48]; 2, 4 — $d_p = 4 \mu\text{м}$, 3, 5 — $d_p = 8 \mu\text{м}$

На рис. 7 представлены результаты моделирования и прямого численного расчета распределений поперечной компоненты пульсаций скорости и концентрации частиц при варьировании отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз. Как и в DNS [46], подъемная сила определяется формулой [51].

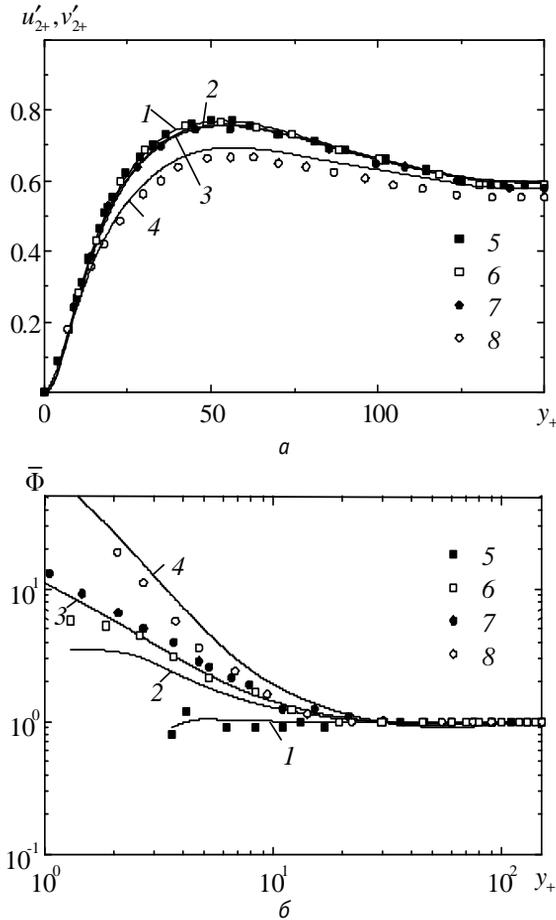


Рис. 7. Распределения поперечной компоненты пульсаций скорости (а) и концентрации (б) частиц разной плотности по сечению канала: 1—4 — модель, 5—8 — DNS [46]; 1, 5 — $\rho_p/\rho_f = 1,05$, $\tau_+ = 3$; 2, 6 — $\rho_p/\rho_f = 8$, $\tau_+ = 3$; 3, 7 — $\rho_p/\rho_f = 713$, $\tau_+ = 3$; 4, 8 — $\rho_p/\rho_f = 713$, $\tau_+ = 7$

Отметим, что в рассматриваемом диапазоне изменения параметра инерционности ($\tau_+ \leq 7$) распределения осредненных продольных скоростей жидкости и частиц практически неразличимы. Пульсационные скорости частиц также не слишком значительно отклоняются от пульсаций скорости жидкости. Из рис. 7а видно, что поперечная компонента пульсаций скорости уменьшается с ростом параметров ρ_p/ρ_f и τ_+ . Поведение нормальной к стенке компоненты пульсаций скорости является определяющим для объяснения тенденции частиц, плотность которых больше плотности несущей жидкости, аккумулироваться в вязком подслое вблизи стенки. Благодаря градиенту интенсивности нормальных пульсаций плотности частицы мигрируют в область низкого уровня турбулентной энергии и концентрируются в вязком подслое. Данные рис. 7б подтверждают тенденцию всех частиц за исключением случая $\rho_p/\rho_f = 1,05$ аккумулироваться вблизи стенки канала. Эта тенденция становится более выраженной при увеличении ρ_p/ρ_f и τ_+ . Итак, эффект аккумулирования частиц в пристеночной области вырождается, когда отношение плотностей дисперсной и сплошной фаз стремится к единице, а параметр инерции стремится к нулю.

В заключение раздела оценим предложенную модель путем сравнения с данными прямых численных расчетов [47] для пузырькового турбулентного течения в вертикальном канале. Расчеты проведены для случая $\tau_+ = 0,0758$ и $\rho_p/\rho_f = 0,0013$ (пузырьки воздуха диаметром 220 мкм в воде). В соответствии с DNS исследуются восходящее и опускающее течения без учета и с учетом подъемной силы, определяемой формулами в [51; 52]. Кроме того, коэффициент сопротивления (3) модифицирован вблизи стенки путем введения корректирующих факторов, использованных ранее в [53].

На рис. 8 показано распределение пузырьков по сечению канала. Ясно, что при отсутствии подъемной силы распределение пузырьков близко к однородному за исключением небольшого подъема или падения концентрации вблизи стенки, соответственно предсказываемого моделью или полученного прямым численным расчетом. Однако следует отметить, что результаты экспериментальных исследований и численных расчетов на основе метода крупных вихрей для пузырькового турбулентного течения в условиях микрогравитации в [54; 55], когда подъемная сила не играет роли, свидетельствуют, что максимум концентрации небольших пузырьков находится в центре, а не на стенке трубы. Таким образом, предсказываемое моделью распределение микропузырьков по сечению в качественном отношении лучше согласуется с результатами [54; 55], чем с данными DNS [46].

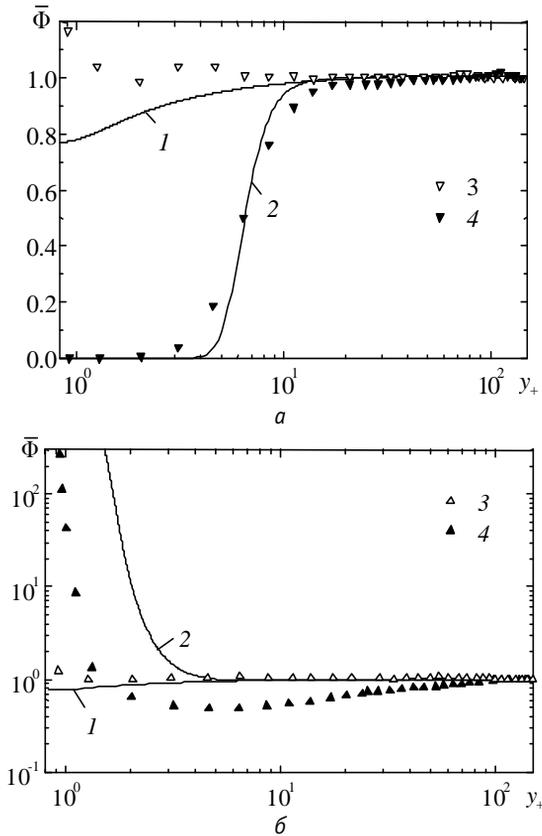


Рис. 8. Профили концентрации пузырьков при опускном (а) и восходящем (б) течениях без учета (1, 3) и с учетом (2, 4) подъемной силы: 1, 2 — модель, 3, 4 — DNS [47]

Сравнение результатов, полученных с учетом и без учета подъемной силы, наглядно демонстрирует ее решающую роль в формировании распределения пузырьков. При опускном движении подъемная сила двигает пузырьки от стенки в ядро потока. Напротив, при восходящем течении эта сила двигает пузырьки по направлению к стенке, и, подобно распределению тяжелых частиц в газе, пузырьки аккумулируются в пристеночной области. Результаты, полученные с учетом подъемной силы, находятся в качественном соответствии с данными многочисленных экспериментальных исследований как для опускного, так и для восходящего турбулентного течения в трубах (например, [56—59]).

На рис. 9 и 10 представлены распределения осредненных продольных скорости жидкости, видимой пузырьками, U_{p1} и скорости пузырьков V_1 . Пунктирные линии на этих рисунках изображают осредненную продольную скорость жидкости U_1 .

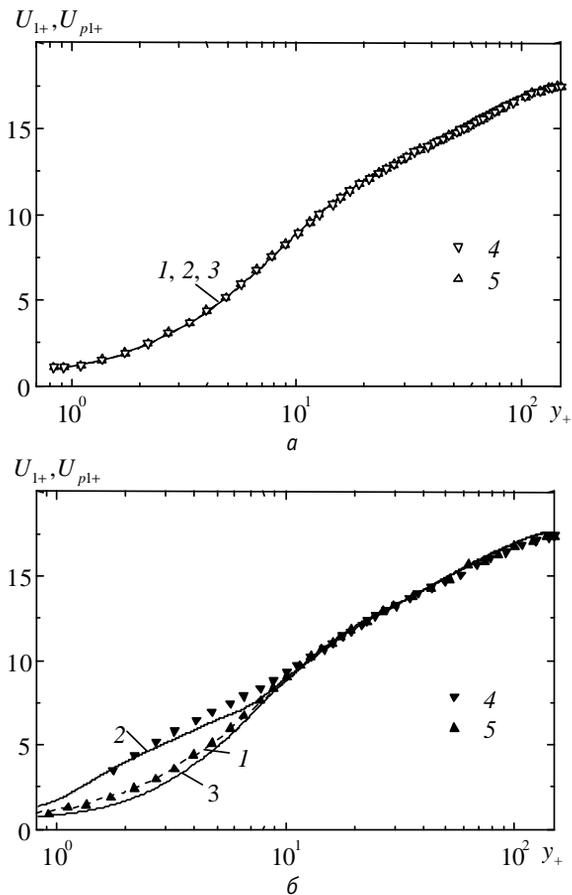


Рис. 9. Профили осредненных продольных скорости жидкости (1) и скорости жидкости, видимой пузырьками, (2—5) при опускном (2, 4) и восходящем (3, 5) течениях без учета (а) и с учетом (б) подъемной силы: 1, 4, 5 — DNS [47], 2, 3 — модель

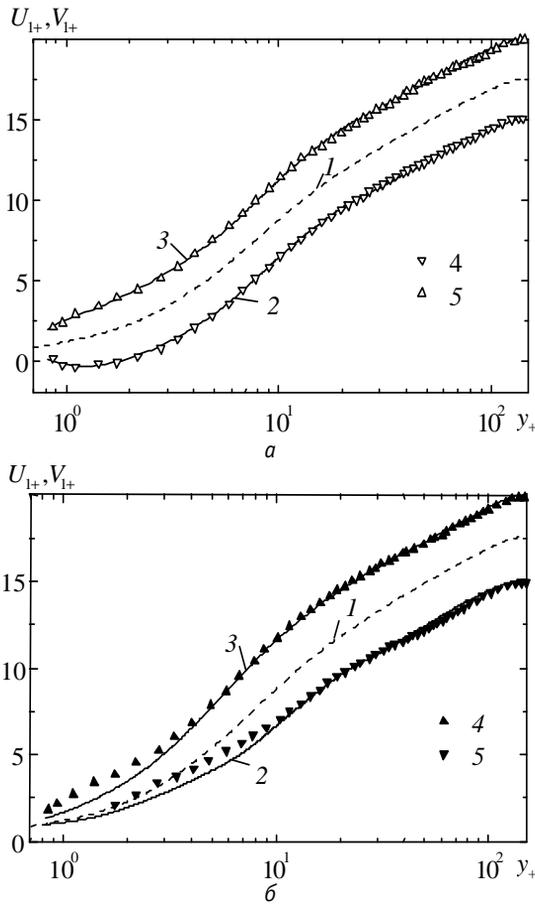


Рис. 10. Профили осредненных продольных скоростей жидкости (1) и пузырьков (2—5) при опускном (2, 4) и восходящем (3, 5) течениях без учета (а) и с учетом (б) подъемной силы: 1, 4, 5 — DNS [47], 2, 3 — модель

На рис. 9 сравниваются скорости U_{p1} , предсказываемые формулой (33), с результатами прямых расчетов скоростей жидкости на позиции пузырьков [47]. Видно, что без учета действий подъемной силы U_{p1} практически совпадает с U_1 . Этот факт не вызывает удивления, поскольку при отсутствии подъемной силы распределение пузырьков по сечению канала близко к однородному и, следовательно, скорость дрейфа $\langle u_1' \rangle_p$ близка к нулю. Учет подъемной силы приводит к сильной неоднородности в распределе-

нии концентрации пузырьков, благодаря чему отклонение U_{p1} от U_1 становится более заметным (особенно при опускном течении). Как видно из рис. 10а, в случае отсутствия подъемной силы пузырьки движутся быстрее при восходящем течении и медленнее при опускном течении по сравнению с жидкостью. Эта разность между скоростями пузырьков и жидкости обусловлена силой плавучести и является почти постоянной по сечению канала за исключением окрестности стенки. В пристеночной области разность скоростей между пузырьками и жидкостью уменьшается благодаря корректирующему фактору, который увеличивает гидродинамическое сопротивление вблизи стенки канала.

На рис. 10б показано, что влияние подъемной силы на V_1 существенно только в случае опускного течения. Это обстоятельство согласуется с влиянием подъемной силы на скорость жидкости на позиции пузырьков, поскольку сила плавучести уравнивается главным образом силой гидродинамического сопротивления, в которую входит U_{p1} .

8. Заключение

Представлена статистическая модель движения и теплообмена частиц произвольной плотности в турбулентном потоке. Модель основана на кинетическом уравнении для ФПВ скорости и температуры частиц и включает корреляции плотности вероятности распределения частиц со скоростью, ускорением, температурой и субстанциональной температурой жидкости, а также учитывает флуктуации подъемной силы.

Модель справедлива во всем диапазоне изменения отношения плотностей дисперсной и сплошной фаз — от тяжелых частиц (капель) в газе до пузырьков в жидкости. Модель предсказывает, что тяжелые и легкие частиц под действием турбофореза мигрируют в противоположных направлениях: тяжелые частицы мигрируют из области с высоким уровнем турбулентности в низкотурбулентную область, а легкие частицы, напротив, мигрируют из области с низким уровнем турбулентности в высокотурбулентную область.

В широком диапазоне изменения отношения плотностей дисперсной и инерционной фаз проведен анализ статистических характеристик движения и теплообмена частиц в изотропной турбулентности с градиентом осредненной скорости, пристеночном течении и вертикальном плоском канале. Результаты сравнения с данными прямых численных расчетов позволяют сделать вывод, что представленная модель адекватно описывает как статистику поля скорости, так и эффект аккумуляирования частиц и пузырьков.

Приложение А. Корреляция между пульсациями скорости жидкости и плотностью вероятности частиц

Используя формулу Фурутсу—Донскера—Новикова для гауссовых случайных функций [60; 61], можно получить

$$\begin{aligned}
 \langle u'_i p \rangle &= \iint \langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iint \langle u'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iint \langle u'_i(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta \vartheta(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iint \langle u'_i(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta b(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 = \\
 &= \langle u'_i p \rangle_u + \langle u'_i p \rangle_a + \langle u'_i p \rangle_\vartheta + \langle u'_i p \rangle_b,
 \end{aligned} \tag{A1}$$

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta x_{pk}(t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle - \\
 &-\frac{\partial}{\partial v_k} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta v_{pk}(t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle - \frac{\partial}{\partial \theta} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta \theta_p(t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle,
 \end{aligned} \tag{A2}$$

$$\begin{aligned}
 \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta x_{pk}(t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle - \\
 &-\frac{\partial}{\partial v_k} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta v_{pk}(t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle - \frac{\partial}{\partial \theta} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta \theta_p(t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle,
 \end{aligned} \tag{A3}$$

$$\left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta \vartheta(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial \theta} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta \theta_p(t)}{\delta \vartheta(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle, \tag{A4}$$

$$\left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta b(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle = - \frac{\partial}{\partial \theta} \left\langle p(\mathbf{x}, t) \frac{\delta \theta_p(t)}{\delta b(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle. \quad (\text{A5})$$

Для нахождения функциональных производных в (A2)—(A5) представим решения уравнений (1), (4) и (5) с учетом (8)—(11) в виде интегралов вдоль траектории частицы, пренебрегая для простоты в (4) вкладом подъемной силы:

$$\mathbf{R}_p(t) = \int_{-\infty}^t \mathbf{v}_p(t_1) dt_1, \quad (\text{A6})$$

$$\mathbf{v}_p(t) = \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \left[\frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}_p(t_1), t_1)}{\tau_p} + \mathbf{f}_g + \mathbf{Aa}(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right] dt_1, \quad (\text{A7})$$

$$\theta_p(t) = \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) \left[\frac{\vartheta(\mathbf{x}_p(t_1), t_1)}{\tau_t} + Bb(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right] dt_1, \quad (\text{A8})$$

Применяя оператор функционального дифференцирования к (A6)—(A8), получаем систему интегральных уравнений для функциональных производных позиции, скорости и температуры частицы по скорости жидкости:

$$\begin{aligned} \frac{\delta x_{p_i}(t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}_p(t_1) - \mathbf{x}_1) \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] H(t-t_1) + \\ &+ \int_{t_1}^t \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_2}{\tau_p}\right) \right] \frac{\partial u_i(\mathbf{x}_p(t_2), t_2)}{\partial x_n} \frac{\delta x_{p_n}(t_2)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} dt_2, \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta v_{p_i}(t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} &= \frac{\delta_{ij}}{\tau_p} \delta(\mathbf{x}_p(t_1) - \mathbf{x}_1) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) H(t-t_1) + \\ &+ \frac{1}{\tau_p} \int_{t_1}^t \exp\left(-\frac{t-t_2}{\tau_p}\right) \frac{\partial u_i(\mathbf{x}_p(t_2), t_2)}{\partial x_n} \frac{\delta x_{p_n}(t_2)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} dt_2, \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

$$\frac{\delta \theta_p(t)}{\delta u_i(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} = \frac{1}{\tau_t} \int_{t_1}^t \exp\left(-\frac{t-t_2}{\tau_t}\right) \frac{\partial \vartheta(\mathbf{x}_p(t_2), t_2)}{\partial x_n} \frac{\delta x_{p_n}(t_2)}{\delta u_i(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} dt_2, \quad (\text{A11})$$

где $H(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда ($H(x < 0) = 0$, $H(x > 0) = 1$), обеспечивающая начало действия жидкости на частицу в момент времени $t = t_1$.

Для решения уравнений (A9)—(A11) используется итерационная процедура [6; 15; 41]. Отметим различие между настоящим подходом и методом, берущим начало с работы [3]. Главное отличие между этими подходами заключается в способе решения системы интегральных уравнений для функциональных производных. В рамках настоящего подхода уравнения (A6) и (A7) решаются методом итераций, тогда как в [8; 10; 20] эта задача решается при помощи функции. Можно показать, что оба подхода являются эквивалентными для квазиоднородного гауссова поля скорости турбулентной жидкости при больших временах по сравнению с интегральным масштабом турбулентности, когда влияние начальных условий не играет роли. Принимая первый член в правой части (A9) в качестве нулевого члена итерационного разложения, учитывая (A1) и (A2) и ограничиваясь членами первого порядка итерационного разложения, получим:

$$\langle u'_i p \rangle_u = -\tau_p \left(\Lambda_{ij}^{uu}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_j} + M_{ij}^{uu}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_j} + H_i^{uu}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (A12)$$

$$\Lambda_{ij}^{uu}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_p^2} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 + \frac{1}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_k(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_j}{\partial x_k}, \quad (A13)$$

$$M_{ij}^{uu}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1, \quad (A14)$$

$$H_i^{uu}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}. \quad (A15)$$

Следует отметить, что в [6; 15; 41] также учитываются члены второго порядка при получении итерационного разложения для Λ_{ij}^{uu} , M_{ij}^{uu} , H_i^{uu} для предельного случая тяжелых частиц ($A = 0$). Однако, как показано в [41] для движения тяжелых частиц в однородном сдвиговом слое и канале,

влияние этих членов не очень заметно. Поэтому в настоящей работе мы ограничимся итерационными членами первого порядка при решении всех интегральных уравнений, иначе получаемые уравнения гидродинамики и теплопереноса для дисперсной фазы становятся слишком громоздкими.

Чтобы вычислить интегралы (A13)—(A15), определим лагранжеву корреляцию скорости жидкости вдоль траектории частицы (видимой частицей)

$$\langle u'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle = \langle u'_i u'_k \rangle \Psi_{Lp kj}(\tau), \quad (\text{A16})$$

где $\Psi_{Lp ij}(\tau)$ обозначает автокорреляционную функцию пульсаций скорости жидкости на позиции частицы (видимую частицей). В пределе безынерционных частиц (A16) совпадает с выражением, предложенным в [43]. Важно отметить, что в анизотропном турбулентном течении автокорреляционная функция вдоль траектории даже безынерционной частицы (жидкого элемента) является тензором в отличие от изотропной турбулентности, где она может быть выражена как $\Psi_{Lij}(\tau) = \Psi_L(\tau) \delta_{ij}$ со скалярной функцией $\Psi_L(\tau)$ от инкремента времени τ .

Подставляя (A16) в (A13)—(A15) и интегрируя по времени, получаем

$$\Lambda_{ij}^{uu} = \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{f_{ukj}}{\tau_p} + l_{ukn} \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right), \quad \mathbf{H}_i^{uu} = \langle u'_i u'_j \rangle q_{ujk} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_k}. \quad (\text{A17})$$

Коэффициенты $f_{u ij}$, $g_{u ij}$, $l_{u ij}$, $q_{u jk}$ характеризуют вовлечение частиц в турбулентное движение несущей сплошной среды (отклик на турбулентные пульсации жидкости). В матричных обозначениях эти коэффициенты имеют вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_u &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^\infty \Psi_{Lp}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \\ \mathbf{g}_u &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^\infty \Psi_{Lp}(\tau) \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{\mathbf{T}_{Lp}}{\tau_p} - \mathbf{f}_u, \\ \mathbf{l}_u &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^\infty \Psi_{Lp}(\tau) \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \mathbf{g}_u - \mathbf{f}_{u1}, \\ \mathbf{f}_{u1} &= \frac{1}{\tau_p^2} \int_0^\infty \tau \Psi_{Lp}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \end{aligned} \quad (\text{A18})$$

$$\mathbf{q}_u = \frac{1}{\tau_p} \int_0^\infty \Psi_{L_p}(\tau) \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{\mathbf{T}_{L_p}}{\tau_p} + \frac{(\Upsilon^2 \mathbf{f}_u - \mathbf{f}_u)}{1-\Upsilon},$$

$$\mathbf{f}_u = \frac{1}{\tau_t} \int_0^\infty \Psi_{L_p}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau, \quad \mathbf{T}_{L_p} = \int_0^\infty \Psi_{L_p}(\tau) d\tau,$$

где \mathbf{T}_{L_p} — матрица лагранжевых интегральных временных масштабов пульсаций скорости жидкости, видимой частицами (так называемых временных масштабов взаимодействия частиц с турбулентными вихрями).

Перейдем к определению функциональных производных позиции, скорости и температуры частицы по ускорению жидкости. Из (A6)—(A8) следует

$$\frac{\delta x_{p_i}(t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} = A \tau_p \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}_p(t_1) - \mathbf{x}_1) \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] H(t-t_1), \quad (\text{A19})$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta v_{p_i}(t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} &= A \delta(\mathbf{x}_p(t_1) - \mathbf{x}_1) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) H(t-t_1) + \\ &+ \frac{1}{\tau_p} \int_{t_1}^t \exp\left(-\frac{t-t_2}{\tau_p}\right) \frac{\partial u_i(\mathbf{x}_p(t_2), t_2)}{\partial x_n} \frac{\delta x_{p_n}(t_2)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} dt_2, \end{aligned} \quad (\text{A20})$$

$$\frac{\delta \theta_p(t)}{\delta a_i(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} = \frac{1}{\tau_t} \int_{t_1}^t \exp\left(-\frac{t-t_2}{\tau_t}\right) \frac{\partial \vartheta(\mathbf{x}_p(t_2), t_2)}{\partial x_n} \frac{\delta x_{p_n}(t_2)}{\delta a_i(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} dt_2. \quad (\text{A21})$$

Подстановка (A19)—(A21) в (A1) и (A3) дает

$$\langle u'_i p \rangle_a = -\tau_p \left(\Lambda_{ij}^{ua}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_j} + M_{ij}^{ua}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_j} + H_i^{ua}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (\text{A22})$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij}^{ua}(\mathbf{x}, t) &= \frac{A}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 + \\ &+ A \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_j}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (\text{A23})$$

$$\mathbf{M}_{ij}^{ua}(\mathbf{x}, t) = A \int_{-\infty}^t \left\langle u'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1. \quad (\text{A24})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_i^{ua}(\mathbf{x}, t) &= A \int_{-\infty}^t \left\langle u'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \times \\ &\times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (\text{A25})$$

Как видно из (A23)—(A25), чтобы вычислить величины Λ_{ij}^{ua} , \mathbf{M}_{ij}^{ua} , \mathbf{H}_i^{ua} , необходимо определить лагранжеву корреляцию между скоростью и ускорением жидкости вдоль траектории частицы. Принимая во внимание (A16), эту корреляцию можно выразить так [62]:

$$\left\langle u'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) \mid \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \right\rangle = -\langle u'_i u'_k \rangle \frac{d\Psi_{Lp kj}}{d\tau}. \quad (\text{A26})$$

Тогда подстановка (A26) в (A23)—(A25) дает

$$\Lambda_{ij}^{ua} = \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{f_{u kj}^a}{\tau_p} + l_{u kn}^a \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right), \quad \mathbf{M}_{ij}^{ua} = \langle u'_i u'_k \rangle g_{u kj}^a, \quad \mathbf{H}_i^{ua} = \langle u'_i u'_j \rangle q_{u jk}^a \frac{\partial \Gamma}{\partial x_k}, \quad (\text{A27})$$

где коэффициенты вовлечения равны:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_u^a &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau = A(\mathbf{I} - \mathbf{f}_u), \\ \mathbf{g}_u^a &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = A\mathbf{f}_u, \\ \mathbf{l}_u^a &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = A\mathbf{f}_{u1}, \end{aligned} \quad (\text{A28})$$

$$\mathbf{q}_u^a = -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{A(\mathbf{f}_u - \Upsilon\mathbf{f}_{u1})}{1-\Upsilon}.$$

Далее из (A4) и (A8) получаем

$$\langle u'_i p \rangle_{\vartheta} = -\tau_p \mathbf{H}_i^{u\vartheta}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (\text{A29})$$

$$\mathbf{H}_i^{u\vartheta}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_p \tau_t} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) dt_1, \quad (\text{A30})$$

где лагранжева корреляция пульсаций скорости и температуры жидкости на позиции частицы задается соотношением

$$\langle u'_i(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle = \langle u'_j \vartheta' \rangle \Psi_{Lp\ ji}^{u\vartheta}(\tau), \quad (\text{A31})$$

где $\Psi_{Lp\ ij}^{u\vartheta}(\tau)$ обозначает корреляционную функцию пульсаций скорости и температуры жидкости, видимой частицами.

Подстановка (A31) в (A30) дает

$$\mathbf{H}_i^{u\vartheta} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle f_{t\ ji}^u}{\tau_p}, \quad (\text{A32})$$

где

$$\mathbf{f}_t^u = \frac{1}{\tau_t} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{u\vartheta}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau. \quad (\text{A33})$$

Наконец, согласно (A5) и (A8) получаем

$$\langle u'_i p \rangle_b = -\tau_p \mathbf{H}_i^{ub}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (\text{A34})$$

$$\mathbf{H}_i^{ub}(\mathbf{x}, t) = \frac{B}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \langle u'_i(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) dt_1. \quad (\text{A35})$$

В соответствии с (A31) лагранжева корреляция между пульсациями скорости и субстанциональной производной температуры на позиции частицы определяется по формуле

$$\langle u'_i(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle = -\langle u'_j \vartheta' \rangle \frac{d\Psi_{Lp\ ji}^{u\vartheta}(\tau)}{d\tau}. \quad (\text{A36})$$

Подстановка (A36) в (A35) дает

$$\mathbf{H}_i^{ub} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle f_{ji}^{ub}}{\tau_p}, \quad (\text{A37})$$

$$\mathbf{f}_i^{ub} = -B \int_0^\infty \frac{d\Psi^{uv}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_i}\right) d\tau = B(\mathbf{I} - \mathbf{f}_i^u). \quad (\text{A38})$$

Полученные соотношения (A1), (A12), (A17), (A22), (A27), (A29), (A32), (A34), (A37) приводят к (12) и (13).

Приложение Б.

Корреляция между пульсациями ускорения жидкости и плотностью вероятности частиц

Аналогично (A1), применяя формулу Фурутсу—Донскера—Новикова для гауссовых случайных функций, получаем

$$\begin{aligned} \langle a'_i p \rangle &= \iint \langle a'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\ &+ \iint \langle a'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\ &+ \iint \langle a'_i(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta \vartheta(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\ &+ \iint \langle a'_i(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta b(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 = \\ &= \langle a'_i p \rangle_u + \langle a'_i p \rangle_a + \langle a'_i p \rangle_\vartheta + \langle a'_i p \rangle_b. \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

Преобразуя (B1) с учетом аналогичных допущений, принятых в приложении А, получаем:

$$\langle a'_i p \rangle_u = - \left(\Lambda_{ij}^{au}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_j} + \mathbf{M}_{ij}^{au}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_j} + \mathbf{H}_i^{au}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (\text{B2})$$

$$\Lambda_{ij}^{au}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 +$$

$$+ \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) u'_k(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_j}{\partial x_k}, \quad (53)$$

$$\mathbf{M}_{ij}^{au}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1, \quad (54)$$

$$\mathbf{H}_i^{au}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \times$$

$$\times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}. \quad (55)$$

$$\langle a'_i p \rangle_a = - \left(\Lambda_{ij}^{aa}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_j} + \mathbf{M}_{ij}^{aa}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_j} + \mathbf{H}_i^{aa}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (56)$$

$$\Lambda_{ij}^{aa}(\mathbf{x}, t) = A \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 +$$

$$+ A \tau_p \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_j}{\partial x_k}, \quad (57)$$

$$\mathbf{M}_{ij}^{aa}(\mathbf{x}, t) = A \tau_p \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1, \quad (58)$$

$$\mathbf{H}_i^{aa}(\mathbf{x}, t) = A \tau_p \int_{-\infty}^t \left\langle a'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \right\rangle \times$$

$$\times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \quad (59)$$

$$\langle a'_i p \rangle_\theta = -\mathbf{H}_i^{a\theta}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (510)$$

$$\mathbf{H}_i^{a\delta}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_i} \int_{-\infty}^t \langle a'_i(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) dt_1. \quad (\text{Б11})$$

$$\langle a'_i p \rangle_b = -\mathbf{H}_i^{ab}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (\text{Б12})$$

$$\mathbf{H}_i^{ab}(\mathbf{x}, t) = B \int_{-\infty}^t \langle a'_i(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) dt_1. \quad (\text{Б13})$$

Для вычисления интегралов, входящих в (Б3)—(Б5), (Б7)—(Б9), (Б11) и (Б13), нужно определить лагранжевы корреляции с ускорением жидкости. Эти корреляции связаны с корреляциями скорости жидкости (А16) и (А31) кинематическими соотношениями [62]:

$$\begin{aligned} \langle a'_i(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= \langle u'_i u'_k \rangle \frac{d\Psi_{Lp kj}}{d\tau}, \\ \langle a'_i(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= -\langle u'_i u'_k \rangle \frac{d^2\Psi_{Lp kj}}{d\tau^2}, \\ \langle a'_i(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= \langle u'_j \vartheta' \rangle \frac{d\Psi_{Lp ji}^{u\delta}}{d\tau}, \\ \langle a'_i(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= -\langle u'_j \vartheta' \rangle \frac{d^2\Psi_{Lp ji}^{u\delta}}{d\tau^2}. \end{aligned} \quad (\text{Б14})$$

С учетом (Б14) находим:

$$\begin{aligned} \Lambda_{ij}^{au} &= \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{f_{a kj}^u}{\tau_p} + l_{a kn}^u \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right), \quad \mathbf{M}_{ij}^{au} = \langle u'_i u'_k \rangle g_{a kj}^u, \quad \mathbf{H}_i^{au} = \langle u'_i u'_j \rangle q_{a jk}^u \frac{\partial \Gamma}{\partial x_k}, \\ \Lambda_{ij}^{aa} &= \langle u'_i u'_k \rangle \left(\frac{f_{a kj}}{\tau_p} + l_{a kn} \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right), \quad \mathbf{M}_{ij}^{aa} = \langle u'_i u'_k \rangle g_{a kj}, \\ \mathbf{H}_i^{aa} &= \langle u'_i u'_j \rangle q_{a jk} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_k}, \\ \mathbf{H}_i^{a\delta} &= \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle f_{i ji}^a}{\tau_i}, \quad \mathbf{H}_i^{ab} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle f_{i ji}^{ab}}{\tau_i}, \end{aligned} \quad (\text{Б15})$$

где

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}_a^u &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau = \mathbf{f}_u - \mathbf{I}, \quad \mathbf{g}_a^u = \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = -\mathbf{f}_u, \\
 \mathbf{l}_a^u &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = -\mathbf{f}_{u1}, \\
 \mathbf{q}_a^u &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = \frac{\Upsilon \mathbf{f}_u - \mathbf{f}_u}{1-\Upsilon}, \\
 \mathbf{f}_a &= -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}}{d\tau^2} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau = A(\mathbf{I} - \mathbf{f}_u), \quad (Б16) \\
 \mathbf{g}_a &= -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}}{d\tau^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = A(\mathbf{f}_u - \mathbf{I}), \\
 \mathbf{l}_a &= -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}}{d\tau^2} \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = A(\mathbf{f}_{u1} - \mathbf{f}_u), \\
 \mathbf{q}_a &= -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}}{d\tau^2} \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = \frac{A(\mathbf{f}_u - \mathbf{f}_{u1})}{1-\Upsilon}, \\
 \mathbf{f}_t^a &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}^{u\delta}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau = \mathbf{f}_t^u - \mathbf{I}, \\
 \mathbf{f}_t^{ab} &= -B\tau_t \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}^{u\delta}}{d\tau^2} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau = B(\mathbf{I} - \mathbf{f}_t^u).
 \end{aligned}$$

В результате формулы (Б1), (Б2), (Б6), (Б10), (Б12), (Б15) приводят к (17) и (18).

Приложение В. Корреляция между пульсациями температуры жидкости и плотностью вероятности частиц

Аналогично (А1) запишем

$$\begin{aligned}
 \langle \vartheta' p \rangle &= \iiint \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) u'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iiint \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iiint \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta \vartheta(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 \} \quad (B1) \\
 &+ \iiint \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta b(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 = \\
 &= \langle \vartheta' p \rangle_u + \langle \vartheta' p \rangle_a + \langle \vartheta' p \rangle_\vartheta + \langle \vartheta' p \rangle_b.
 \end{aligned}$$

Используя те же допущения, что и в приложениях А и Б, получаем:

$$\langle \vartheta' p \rangle_u = -\tau_i \left(\Lambda_i^{\vartheta u}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_i} + M_i^{\vartheta u}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_i} + H^{\vartheta u}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (B2)$$

$$\begin{aligned}
 \Lambda_i^{\vartheta u}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\tau_i \tau_p} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 + \\
 &+ \frac{1}{\tau_i} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_i}{\partial x_j}, \quad (B3)
 \end{aligned}$$

$$M_i^{\vartheta u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_i} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1. \quad (B4)$$

$$\begin{aligned} H^{\partial a}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\tau_t} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) u_i'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \times \\ &\times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (B5)$$

$$\langle \vartheta' p \rangle_a = -\tau_t \left(\Lambda_i^{\partial a}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_i} + M_i^{\partial a}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_i} + H^{\partial a}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (B6)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_i^{\partial a}(\mathbf{x}, t) &= \frac{A}{\tau_t} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) a_i'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 + \\ &+ \frac{A}{\Upsilon} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) a_i'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_i}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (B7)$$

$$M_i^{\partial a}(\mathbf{x}, t) = \frac{A}{\Upsilon} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) a_i'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1. \quad (B8)$$

$$\begin{aligned} H_i^{\partial a}(\mathbf{x}, t) &= \frac{A}{\Upsilon} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) a_j'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \times \\ &\times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (B9)$$

$$\langle \vartheta' p \rangle_{\partial} = -\tau_t H^{\partial \partial}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (B10)$$

$$H^{\partial \partial}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_t^2} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) dt_1, \quad (B11)$$

$$\langle \vartheta' p \rangle_b = -\tau_t H^{\partial b}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (B12)$$

$$H^{\partial b}(\mathbf{x}, t) = \frac{B}{\tau_t} \int_{-\infty}^t \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_t}\right) dt_1. \quad (B13)$$

Далее нужно определить лагранжевы корреляции, появляющиеся в (B3)—
(B5), (B7)—(B9), (B11), (B13). Эти корреляции представляются так:

$$\begin{aligned} \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= \langle u'_j \vartheta' \rangle \Psi_{Lp\ ji}^{\vartheta u}(\tau), \\ \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) a'_i(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= -\langle u'_j \vartheta' \rangle \frac{d\Psi_{Lp\ ji}^{\vartheta u}}{d\tau}, \quad (B14) \\ \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= \langle \vartheta'^2 \rangle \Psi_{Lp}(\tau), \\ \langle \vartheta'(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= -\langle \vartheta'^2 \rangle \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau}. \end{aligned}$$

С учетом (B14) получаем

$$\begin{aligned} \Lambda_i^{\vartheta u} &= \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle}{\Upsilon} \left(\frac{f_{u\ ji}^t}{\tau_p} + l_{u\ jk}^t \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right), \quad \mathbf{M}_i^{\vartheta u} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle g_{u\ ji}^t}{\Upsilon}, \quad \mathbf{H}^{\vartheta u} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle q_{u\ ij}^t}{\Upsilon} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \\ \Lambda_i^{\vartheta a} &= \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle}{\Upsilon} \left(\frac{f_{u\ ji}^{ta}}{\tau_p} + l_{u\ jk}^{ta} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right), \quad \mathbf{M}_i^{\vartheta a} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle g_{u\ ji}^{ta}}{\Upsilon}, \quad \mathbf{H}^{\vartheta a} = \frac{\langle u'_j \vartheta' \rangle q_{u\ ij}^{ta}}{\Upsilon} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \quad (B15) \\ \mathbf{H}^{\vartheta \vartheta} &= \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle f_t}{\tau_i}, \quad \eta^{\vartheta b} = \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle f_t^b}{\tau_i}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_u^t &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{\vartheta u}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \\ \mathbf{g}_u^t &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{\vartheta u}(\tau) \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{\mathbf{T}_{Lp}^{\vartheta u}}{\tau_p} - \mathbf{f}_u^t, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{l}'_u &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{\partial u}(\tau) \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \mathbf{g}'_u - \mathbf{f}'_{u1}, \\ \mathbf{f}'_{u1} &= \frac{1}{\tau_p^2} \int_0^{\infty} \tau \Psi_{Lp}^{\partial u}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \\ \mathbf{q}'_u &= \frac{1}{\tau_p} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{\partial u}(\tau) \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{\mathbf{T}_{Lp}^{\partial u}}{\tau_p} + \frac{(\Upsilon^2 \mathbf{f}'_t - \mathbf{f}'_u)}{1-\Upsilon}, \\ \mathbf{f}'_t &= \frac{1}{\tau_t} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{\partial u}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau, \quad \mathbf{T}_{Lp}^{\partial u} = \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}^{\partial u}(\tau) d\tau, \quad (\text{B16}) \\ \mathbf{f}'_{u1} &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau = A(\mathbf{I} - \mathbf{f}'_u), \\ \mathbf{g}'_u &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = A\mathbf{f}'_u, \\ \mathbf{l}'_{u1} &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau} \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = A\mathbf{f}'_{u1}, \\ \mathbf{q}'_{u1} &= -A \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau} \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{A(\mathbf{f}'_t - \Upsilon \mathbf{f}'_u)}{1-\Upsilon}, \\ f_t &= \frac{1}{\tau_t} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau, \quad f_t^b = -B \int_0^{\infty} \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau = B(1 - f_t), \end{aligned}$$

где $\mathbf{T}_{Lp}^{\partial u}$ обозначает тензор лагранжевых интегральных временных масштабов корреляции пульсаций температуры и скорости жидкости, видимой частицами.

Соотношения (B1), (B2), (B6), (B10), (B12) и (B15) приводят к (21) и (22).

Приложение Г. Корреляция между пульсациями субстанциональной производной температуры жидкости и плотностью вероятности частиц

В полной аналогии с (С1) имеем

$$\begin{aligned}
 \langle b'p \rangle &= \iint \langle b'u'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta u_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iint \langle b'(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta a_j(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iint \langle b'(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta \vartheta(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 + \\
 &+ \iint \langle b'(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_1, t_1) \rangle \left\langle \frac{\delta p(\mathbf{x}, t)}{\delta b(\mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_1 dt_1} \right\rangle d\mathbf{x}_1 dt_1 = \\
 &= \langle b'p \rangle_u + \langle b'p \rangle_a + \langle b'p \rangle_\vartheta + \langle b'p \rangle_b,
 \end{aligned} \tag{Г1}$$

Используя те же допущения, что и раньше, получаем:

$$\langle b'p \rangle_u = - \left(\Lambda_i^{bu}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_i} + M_i^{bu}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_i} + H^{bu}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \tag{Г2}$$

$$\begin{aligned}
 \Lambda_i^{bu}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\tau_p} \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 + \\
 &+ \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_i}{\partial x_j},
 \end{aligned} \tag{Г3}$$

$$M_i^{bu}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1, \tag{Г4}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{bu}(\mathbf{x}, t) = & \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \times \\ & \times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (\Gamma 5)$$

$$\langle b'p \rangle_a = - \left(\Lambda_i^{ba}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial v_i} + \mathbf{M}_i^{ba}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial x_i} + \mathbf{H}^{ba}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta} \right), \quad (\Gamma 6)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_i^{ba}(\mathbf{x}, t) = & A \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) a'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) dt_1 + \\ & + A \tau_p \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) a'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial U_i}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (\Gamma 7)$$

$$\mathbf{M}_i^{ba}(\mathbf{x}, t) = A \tau_p \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) a'_i(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1. \quad (\Gamma 8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_i^{ba}(\mathbf{x}, t) = & A \tau_p \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) a'_j(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \times \\ & \times \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) \right] dt_1 \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (\Gamma 9)$$

$$\langle b'p \rangle_{\vartheta} = -\mathbf{H}^{b\vartheta}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (\Gamma 10)$$

$$\mathbf{H}^{b\vartheta}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_i} \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) dt_1, \quad (\Gamma 11)$$

$$\langle b'p \rangle_b = -\mathbf{H}^{bb}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \theta}, \quad (\Gamma 12)$$

$$\mathbf{H}^{bb}(\mathbf{x}, t) = B \int_{-\infty}^t \langle b'(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t_1), t_1) \rangle \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_i}\right) dt_1. \quad (\Gamma 13)$$

Лагранжевы корреляции, появляющиеся в (Г3)—(Г5), (Г7)—(Г9), (Г11) и (Г13), представляются так:

$$\begin{aligned}
 \langle b'(\mathbf{x}, t) u'_i(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= \langle u'_j \vartheta' \rangle \frac{d\Psi_{Lp}^{\delta u}}{d\tau}, \\
 \langle b'(\mathbf{x}, t) a'_i(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= -\langle u'_j \vartheta' \rangle \frac{d^2\Psi_{Lp}^{\delta u}}{d\tau^2}, \\
 \langle b'(\mathbf{x}, t) \vartheta'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= \langle \vartheta'^2 \rangle \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau}, \\
 \langle b'(\mathbf{x}, t) b'(\mathbf{x}_p(t-\tau), t-\tau) | \mathbf{x}_p(t) = \mathbf{x} \rangle &= -\langle \vartheta'^2 \rangle \frac{d^2\Psi_{Lp}}{d\tau^2}.
 \end{aligned} \tag{Г14}$$

С учетом (Г14) получаем

$$\begin{aligned}
 \Lambda_i^{bu} &= \langle u'_j \vartheta' \rangle \left(\frac{f_{ub}^{ji}}{\tau_p} + l_{ub}^{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right), \quad \mathbf{M}_i^{bu} = \langle u'_j \vartheta' \rangle g_{ub}^{ji}, \quad \mathbf{H}^{bu} = \langle u'_i \vartheta' \rangle q_{ub}^{ij} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \\
 \Lambda_i^{ba} &= \langle u'_j \vartheta' \rangle \left(\frac{f_{ub}^{ja}}{\tau_p} + l_{ub}^{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right), \quad \mathbf{M}_i^{ba} = \langle u'_j \vartheta' \rangle g_{ub}^{ja}, \\
 \mathbf{H}^{ba} &= \langle u'_i \vartheta' \rangle q_{ub}^{ia} \frac{\partial \Gamma}{\partial x_j}, \\
 \mathbf{H}^{b\vartheta} &= \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle f_{tb}}{\tau_t}, \quad \mathbf{H}^{bb} = \frac{\langle \vartheta'^2 \rangle f_{tb}^b}{\tau_t},
 \end{aligned} \tag{Г15}$$

где

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}_{ub}^i &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}^{\delta u}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau = \mathbf{f}_u^i - \mathbf{I}, \quad \mathbf{g}_{ub}^i = \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}^{\delta u}}{d\tau} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = -\mathbf{f}_u^i, \\
 l_{ub}^i &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}^{\delta u}}{d\tau} \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p} \right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = -\mathbf{f}_{u1}^i, \\
 \mathbf{q}_{ub}^i &= \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}^{\delta u}}{d\tau} \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) \right] d\tau = \frac{\Upsilon \mathbf{f}_u^i - \mathbf{f}_u^i}{1-\Upsilon},
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{f}_{ub}^{ia} = -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau^2} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau = A(\mathbf{I} - \mathbf{f}_u^t), \quad (\Gamma 16)$$

$$\mathbf{g}_{ub}^{ia} = -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = A(\mathbf{f}_u^t - \mathbf{I}),$$

$$\mathbf{I}_{ub}^{ia} = -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau^2} \left[1 - \left(1 + \frac{\tau}{\tau_p}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = A(\mathbf{f}_{u1}^t - \mathbf{f}_u^t),$$

$$\mathbf{q}_{ub}^{ia} = -A\tau_p \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}^{\partial u}}{d\tau^2} \left[1 + \frac{\Upsilon}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) - \frac{1}{1-\Upsilon} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right)\right] d\tau = \frac{A(\mathbf{f}_u^t - \mathbf{f}_t^t)}{1-\Upsilon},$$

$$f_{ib} = \int_0^\infty \frac{d\Psi_{Lp}}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau = f_t - 1,$$

$$f_{ib}^b = -Bf_t \int_0^\infty \frac{d^2\Psi_{Lp}}{d\tau^2} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_t}\right) d\tau = B(1 - f_t).$$

Формулы (Г1), (Г2), (Г6), (Г10), (Г12) и (Г15) производят (25) и (26).

Литература

1. Деревич И. В., Зайчик Л. И. Осаждение частиц из турбулентного потока // Изв. АН СССР. МЖГ. — 1988. — № 5. — С. 96—104.
2. Reeks M. W. On a kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows // Phys. Fluids A. — 1991. — Vol. 3. — P. 446—456.
3. Reeks M. W. On the continuum equation for dispersed particles in non-uniform flows // Phys. Fluids A. — 1992. — Vol. 4. — P. 1290—1303.
4. Simonin O. Combustion and turbulence in two-phase flows: Continuum modelling of dispersed two-phase flows / Von Karman Inst. for Fluid Dynamics, Belgium. — [S.l.], 1996. — Lecture Series 1996-02.
5. Swailes D. C., Darbyshire K. F. F. A generalized Fokker—Planck equation for particle transport in random media // Physica A. — 1997. — Vol. 242. — P. 38—48.

6. *Zaichik L. I.* Modelling of the motion of particles in non-uniform turbulent flow using the equation for the probability density function // *J. Appl. Math. Mech.* — 1997. — Vol. 61. — P. 127—133.
7. *Swales D. C., Sergeev Y. A., Parker A.* Chapman–Enskog closure approximation in the kinetic theory of dilute turbulent gas-particulate suspensions // *Physica A.* — 1998. — Vol. 254. — P. 517—547.
8. *Hyland K. E., McKee S., Reeks M. W.* Derivation of a PDF kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 1999. — Vol. 32. — P. 6169—6190.
9. *Pozorski J., Minier J.-P.* Probability density function modeling of dispersed two-phase turbulent flows // *Phys. Rev. E.* — 1999. — Vol. 59. — P. 855—863.
10. *Swales D. C., Darbyshire K. F. F.* A Probabilistic models for particle and scalar transport in fluctuating flows: an evaluation of simple closure approximations // *Physica A.* — 1999. — Vol. 262. — P. 307—327.
11. *Derevich I. V.* Statistical modelling of mass transfer in turbulent two-phase dispersed flows. — 1: Model development // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2000. — Vol. 43. — P. 3709—3723.
12. *Simonin O.* Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate flows. — Pt. 1: Theoretical derivation of dispersed phase Eulerian modelling from probability function kinetic equation / Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Belgium. — [S.l.], 2000. — Lecture Series 2000-06.
13. *Pandya R. V. R., Mashayek F.* Turbulent thermal and barodiffusion of passive scalar and dispersed phase of particles in turbulent flows // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88, Paper № 044501.
14. *Peirano E., Minier J.-P.* Probabilistic formalism and hierarchy of models for polydispersed two-phase flows // *Phys. Rev. E.* — 2002. — Vol. 65, Paper № 046301.
15. *Zaichik L. I., Oesterlé B., Alipchenkov V. M.* On the probability density function model for the transport of particles in anisotropic turbulent flow // *Phys. Fluids.* — 2004. — Vol. 16. — P. 1956—1964.
16. *Reeks M. W.* On probability density function equations for particle dispersion in a uniform shear flow // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 522. — P. 263—302.
17. *Skartlien R.* Kinetic modeling of particles in stratified flow — Evaluation of dispersion tensors in inhomogeneous turbulence // *Int. J. Multiphase Flow.* — 2007. — Vol. 33. — P. 1006—1022.

18. *Alipchenkov V. M., Zaichik L. I.* Modeling of the motion of particles of arbitrary density in a turbulent flow on the basis of a kinetic equation for the probability density function // *Fluid Dynamics*. — 2000. — Vol. 35. — P. 883—900.
19. *Chahed J., Colin C., Masbernat L.* Turbulence and phase distribution in bubbly pipe flow under microgravity condition // *J. Fluids Eng.* — 2002. — Vol. 124. — P. 951—956.
20. *Skartlien R., Drazen D., Swailes D. C., Jensen A.* Suspensions in turbulent liquid pipe flow: Kinetic modeling and added mass effects // *Int. J. Multiphase Flow*. — 2009. — Vol. 35. — P. 1017—1035.
21. *Деревич И. В., Зайчик Л. И.* Осаждение частиц из турбулентного потока // *Изв. АН СССР. МЖГ*. — 1988. — № 5. — С. 96—104.
22. *Zaichik L. I.* A statistical model of particle transport and heat transfer in turbulent shear flows // *Phys. Fluids*. — 1999. — Vol. 11. — P. 1521—1534.
23. *Pandya R. V. R., Mashayek F.* Non-isothermal dispersed phase of particles in turbulent flow // *J. Fluid Mech.* — 2003. — Vol. 475. — P. 205—245.
24. *Michaelides E. E.* Hydrodynamic force and heat/mass transfer from particles, bubbles, and drops — The Freeman Scholar Lecture. *Trans ASME // J. Fluids Eng.* — 2003. — Vol. 125. — P. 209—238.
25. *Tavoularis S., Corrsin S.* Experiments in nearly homogeneous turbulent shear flow with a uniform mean temperature gradient // *J. Fluid Mech.* — 1981. — Vol. 104. — P. 311—347.
26. *Ferchichi M., Tavoularis S.* Scalar probability density function and fine structure in uniformly sheared turbulence // *J. Fluid Mech.* — 2002. — Vol. 461. — P. 155—182.
27. *Hinze J. O.* *Turbulence*. — New York: McGraw-Hill, 1975.
28. *Caporaloni M., Tampieri F., Trombetti F., Vittori O.* Transfer of particles in nonisotropic air turbulence // *J. Atmos. Sci.* 1975. — Vol. 32. — P. 565—568.
29. *Reeks M. W.* The transport of discrete particles in inhomogeneous turbulence // *J. Aerosol Sci.* — 1983. — Vol. 14. — P. 729—739.
30. *Simonin O.* Second-moment prediction of dispersed-phase turbulence in particle-laden flows // *Proc. of the Eighth Symposium on Turbulent Shear Flows*. Munich, Germany. 1991. — P. 7-4-1—7-4-6.
31. *Wang Q., Squires K. D., Simonin O.* Large eddy simulation of turbulent gas–solid flows in a vertical channel and evaluation of second-order moments // *Int. J. Heat Fluid Flow*. — 1998. — Vol. 19. — P. 505—511.

32. *Cho W. C., Chung M. K., Kim K., Sung H. J.* Tensorial time scale in turbulent gradient transport of Reynolds stresses // *Phys. Fluids.* — 2005. — Vol. 17, Paper №071701.
33. *Hanjalić K., Launder B. E.* A Reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear flows // *J. Fluid Mech.* — 1972. — Vol. 52. — P. 609—638.
34. *Launder B. E.* Heat and Mass Transport in Turbulence — Topics in Applied Physics. — Berlin: Springer, 1976. — P. 232—287.
35. *Dekeyser I., Launder B. E.* A comparison of triple-moment temperature–velocity correlations in the asymmetric heated jet with alternative closure models *Turbulent Shear Flow 4.* — Berlin: Springer, 1985. — P. 102—117.
36. *Csanady G. T.* Turbulent diffusion of heavy-particles in the atmosphere // *J. Atmos. Sci.* — 1963. — Vol. 20. — P. 201—208.
37. *Reeks M. W.* On the dispersion of small particles suspended in an isotropic turbulent fluid // *J. Fluid Mech.* — 1977. — Vol. 83. — P. 529—546.
38. *Wang L.-P., Stock D. E.* Dispersion of heavy particles in turbulent motion // *J. Atmos. Sci.* — 1993. — Vol. 50. — P. 1897—1913.
39. *Couzinet A., Bédard B., Simonin O.* DNS/DPS of particle temperature correlations in gas-solid turbulent flows // *Proceedings of the Sixth International Conference on Multiphase Flow.* Leipzig, Germany. 2007.
40. *Yeung P. K.* Lagrangian characteristics of turbulence and scalar transport in direct numerical simulations // *J. Fluid Mech.* — 2001. — Vol. 427. — P. 241—274.
41. *Зайчик Л. И., Алитченков В. М.* Статистические модели движения частиц в турбулентной жидкости. — М.: Физматлит. 2007. — 312 с.
42. *Arcen B., Tanière A., Zaichik L. I.* Assessment of a statistical model for the transport of discrete particles in a turbulent channel flow // *Int. J. Multiphase Flow.* — 2008. — Vol. 34. — P. 419—426.
43. *Pope S. B.* Stochastic Lagrangian models of velocity in homogeneous turbulent shear flow // *Phys. Fluids.* — 2002. — Vol. 14. — P. 1696—1702.
44. *Wang Q., Squires K. D.* Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow // *Phys. Fluids.* — 1996. — Vol. 8. — P. 1207—1223.
45. *Marchioli C., Soldati A., Kuerten J. G. M.* et al. Statistics of particle dispersion in direct numerical simulations of wall-bounded turbu-

- lence: Results of an international collaborative benchmark test // *Int. J. Multiphase Flow*. — 2008. — Vol. 34. — P. 879—893.
46. Mizuya T., Kasagi N. Numerical analysis of particle motion in turbulent channel flow // *Proc. of the International Conference on Multiphase Flow*. Lyon, France. 1998.
47. Giusti A., Lucci F., Soldati A. Influence of lift force in direct numerical simulation of upward/downward turbulent channel flow laden with surfactant contaminated microbubbles // *Chem. Eng. Sci.* — 2005. — Vol. 60. — P. 6176—6187.
48. Zonta F., Marchioli C., Soldati A. Direct numerical simulation of turbulent heat transfer modulation in micro-dispersed channel flow // *Acta Mech.* — 2008. — Vol. 195. — P. 305—326.
49. Sawford B. L. Reynolds number effects in Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion // *Phys. Fluids A*. — 1991. — Vol. 3. — P. 1577—1586.
50. Oesterlé B., Zaichik L. I. Time scales for predicting dispersion of arbitrary-density particles in isotropic turbulence // *Int. J. Multiphase Flow*. — 2006. — Vol. 32. — P. 838—849.
51. McLaughlin J. B. Inertial migration of a small sphere in linear shear flows // *J. Fluid Mech.* — 1991. — Vol. 224. — P. 261—274.
52. Kurose R., Komori S. Drag and lift forces on a rotating sphere in a linear shear flow // *J. Fluid Mech.* — 1999. — Vol. 384. — P. 183—206.
53. Fukagata K., Zahrai S., Bark F. H., Kondo S. Influences of the near-wall drag correction in a Lagrangian Simulation of particulate turbulent channel flow // *Proc. of the First International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*. Begell House, New York. 1999. — P. 259—264.
54. Kamp A., Colin C., Fabre J. The local structure of a turbulent bubble pipe flow under different gravity conditions // *Proc. of the Second Int. Conference on Multiphase Flow*. Kyoto. 1995. — Vol. 3. — P. P6-13—P6-20.
55. Colin C., Legendre D. Bubble distribution in turbulent shear flows: experiments and numerical simulations on single bubbles // *Proc. of the Forth Int. Conference on Multiphase Flow*. New Orleans. 2001. — Paper № 449.
56. Wang S. K., Lee S. J., Jones O. C., Lahey R. T. Jr. 3-D turbulence structure and phase distribution measurements in bubbly two-phase flows // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1987. — Vol. 13, № 3. — P. 327—343.

57. *Liu T. J., Bankoff S. G.* Structure of air-water bubbly flow in a vertical pipe. I: Liquid mean velocity and turbulence measurements. II: Void fraction, bubble velocity and bubble size distribution // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 1993. — Vol. 36, №4. — P. 1049—072.
58. *Kashinsky O. N., Randin V. V.* Downward bubbly gas—liquid flow in a vertical pipe // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1999. — Vol. 25. — P. 109—138.
59. *Hibiki T., Goda H., Kim S.* et al. Structure of vertical downward bubbly flow // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2004. — Vol. 47. — P. 1847—1862.
60. *Кляцкин В. И.* Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах. — М.: Наука, 1980. — 336 с.
61. *Frisch U.* Turbulence. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995.
62. *Pope S. B.* A stochastic Lagrangian model for acceleration in turbulent flows // *Phys. Fluids.* — 2002. — Vol. 14. — P. 2360—2375.

Нелинейная модель турбулентной вязкости для двухфазных потоков с мелкодисперсными частицами

В. М. Алипченков, Л. И. Зайчик, Р. В. Мукин, Л. С. Мукина, В. Ф. Стрижов

1. Введение

Моделирование рейнольдсовых напряжений несущего потока (жидкости) с учетом обратного влияния частиц является одной из главных задач в теории двухфазных дисперсных турбулентных течений. Характер влияния частиц на структуру турбулентного течения не однозначен, и в зависимости от инерционности и размера частицы могут оказывать как ламинаризирующее, так и турбулизирующее влияние на поток. Так, присутствие относительно мелких частиц в результате тормозящего (демпфирующего) воздействия, связанного с неполнотой их вовлечения в пульсационное движение жидкости, вызывает дополнительную диссипацию и уменьшение интенсивности турбулентных пульсаций. С ростом инерционности частиц дополнительная диссипация, обусловленная межфазным пульсационным скольжением, снижается и для крупных частиц становится несущественной. Основным механизмом генерации турбулентности из-за обратного воздействия дисперсной фазы, по-видимому, следует считать образование нестационарной вихревой структуры (следа) вследствие отрыва потока за обтекаемой крупной частицей. Кроме того, заметное влияние на турбулентные характеристики сплошной фазы может оказывать диффузионный турбулентный перенос частиц, обусловленный неравномерностью распределения дисперсной фазы в пространстве (своеобразный аналог влияния термогравитационных сил на турбулентность в однофазном неизотермическом стратифицированном потоке). В целом с ростом инерционности частиц наблюдается тенденция смены ламинаризирующего влияния дисперсной фазы на турбулизирующее [1; 2]. Вместе с тем в [3] обнаружено, что микрочастицы, время релаксации которых τ_p много меньше колмогоровского масштаба τ_k , вызывают замедление скорости вырождения турбулентности, т. е. повышают интенсивность турбулентных пульсаций. Этот эффект был объяснен вкладом микрочастиц в транспорт турбулентной энергии за счет увеличения эффективной плотности двухфазной среды, что эквивалентно уменьшению кинематической вязкости [4]. С ростом τ_p

влияние мелких частиц на затухающую изотропную турбулентность качественно изменяется и турбулизирующий эффект сменяется подавлением пульсаций скорости несущей сплошной среды [4; 5]. Результаты прямых численных расчетов (DNS) [6—8] показывают, что влияние небольших тяжелых частиц на турбулентную энергию жидкости в однородном сдвиговом потоке подобно влиянию в изотропной турбулентности: с ростом τ_p происходит качественный переход от интенсификации к подавлению турбулентности. В этом случае турбулизирующий эффект связан с вкладом микрочастиц в порождение турбулентности, обусловленное градиентом осредненной скорости.

В литературе известно большое количество моделей для описания турбулентных характеристик жидкости в присутствии частиц. Наиболее распространенной является линейная изотропная модель турбулентной вязкости в сочетании с уравнениями для кинетической турбулентной энергии и скорости ее диссипации. Эта модель вследствие своей простоты широко применяется для расчета различных типов двухфазных течений (например, [9—18]). Однако, несмотря на большую практическую полезность, хорошо известны недостатки этой модели. Так, она не описывает анизотропию турбулентных напряжений, а также вторичные течения в некруглых каналах и, кроме того, приводит к большим ошибкам при моделировании сильнонеравновесных течений с большими градиентами скоростей, при резком расширении или сжатии потока, сильно искривленных течений и т. д. Строго говоря, линейная модель турбулентной вязкости применима только для расчета квазиравновесных течений, характеризуемых приближенным равенством генерации и диссипации энергии турбулентности. Более точное и детальное моделирование характеристик турбулентной жидкости может быть основано на решении полной системы транспортных уравнений для компонент вторых моментов пульсаций скоростей. Такой подход реализован в [19]; при этом эмпирические константы, входящие в уравнения для вторых моментов, определяются в результате калибровки с данными DNS для однородного сдвигового потока. Транспортные уравнения для компонент рейнольдсовых напряжений сплошной фазы использовались также в [20—22] для моделирования осесимметричных струйных и канальных газодисперсных турбулентных течений. Однако моделирование сложных трехмерных течений на основе системы дифференциальных уравнений для всех компонент турбулентных напряжений приводит к существенному увеличению расчетного времени по сравнению с использованием двухпараметрической модели турбулентности типа $k-\varepsilon$. Поэтому для расчета однофазных течений широкое распространение получили так называемые нелинейные явные алгебраические модели рейнольдсовых напряжений (модели нелинейной турбулентной вязкости). Эти модели, обладая практически такой же точностью, как и дифференциальные модели для вторых моментов пульсаций скорости, позволяют кардинально

уменьшить время вычислений, одновременно повышая устойчивость численных схем.

В [23] выполнены расчеты турбулентного течения и теплообмена в трубах с использованием простейшей нелинейной модели турбулентной вязкости с постоянными коэффициентами без учета присутствия частиц [24]. Авторы [25] представили оригинальную нелинейную модель, основанную на теории инвариантов и непосредственно учитывающую влияние частиц. Однако эта модель не является полностью явной и требует применения итерационной процедуры для определения отношения производства к диссипации турбулентной энергии. Как отмечается в [26], эта итерационная процедура в существенной степени уменьшает вычислительную эффективность алгебраической модели, так как может приводить к неединственности решений и, как следствие, к сходимости к нефизическому решению. В [26; 27] предложена полностью явная самосогласованная алгебраическая модель рейнольдсовых напряжений в однофазной турбулентности, не требующая применения итерационной процедуры. Несмотря на то что эта модель строго справедлива только для двумерных однородных осредненных течений, такой подход находит широкое применение для моделирования неоднородных и трехмерных однофазных течений (например, [28; 29]). В настоящей статье представлена полностью явная алгебраическая модель для описания рейнольдсовых напряжений жидкости в присутствии небольших тяжелых частиц дисперсной фазы. Модель получена путем обобщения подхода [26; 27], развитого для однофазных турбулентных течений, на двухфазные течения с мелкодисперсными частицами.

Для моделирования влияния дисперсной фазы на турбулентные характеристики сплошной фазы предложено несколько подходов. Наиболее распространенными среди них являются процедура получения обусловленных частицами источниковых членов путем осреднения по Рейнольдсу, учитывающая подавление турбулентной энергии за счет дополнительной диссипации, и подход на основе энергетического баланса [30], позволяющий учитывать турбулизацию потока за счет образования следа за крупной частицей. В [21; 23] выполнен сравнительный анализ этих двух подходов и показано, что первый из них, по-видимому, предпочтительнее для моделирования двухфазных турбулентных течений с мелкими частицами, а второй — напротив, течений с крупными частицами. В настоящей статье для описания воздействия небольших частиц на турбулентность используется метод, основанный на одноточечной функции плотности вероятности (ФПВ) скорости частицы. Этот метод наряду с подавлением турбулентности в результате дополнительной диссипации позволяет учитывать вклад микрочастиц в конвективный перенос и порождение турбулентной энергии, однако не описывает механизм турбулизации потока за счет образования нестационарного вихревого следа.

2. Уравнения для турбулентной жидкости

Рассматривается движение двухфазной дисперсной среды, состоящей из несжимаемой вязкой жидкости и небольших тяжелых частиц. Объемная концентрация дисперсной фазы Φ предполагается малой, чтобы можно было пренебречь столкновениями частиц; однако массовая концентрация $M \equiv \rho_p \Phi / \rho_f$ может быть достаточно большой. Плотность частиц ρ_p считается много большей плотности жидкости ρ_f , а размер не превышает колмогоровский пространственный микромасштаб. В этом случае уравнения для сплошной и дисперсной фаз могут быть представлены в приближении точечных сил, приложенных к центрам масс отдельных частиц. Кроме того, поведение частиц в турбулентной среде и их обратное воздействие на поток определяется главным образом силой гидродинамического сопротивления, а силы, обусловленные присоединенной и вытесненной массами и эффектом памяти (сила Бассе), могут не приниматься во внимание.

Таким образом, движение жидкости описывается уравнением Навье—Стокса

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\rho_p}{\rho_f \tau_p} \int (v_i - u_i) p d\mathbf{v}, \quad (1)$$

где u_i , v_i — скорости сплошной и дисперсной фаз; τ_p — время релаксации частиц; p — давление; ν_f — кинематическая вязкость жидкости. Влияние частиц учитывается последним членом в (1), а величина p обозначает динамическую плотность вероятности скорости частиц.

Осредним уравнение (1) по ансамблю случайных реализаций турбулентных полей, представляя скорость жидкости и давление в виде сумм осредненных и пульсационных составляющих. В результате получим уравнение Рейнольдса для турбулентной жидкости с частицами

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_f \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \langle u'_i u'_j \rangle \right) + A_i, \quad (2)$$

$$A_i = \frac{\rho_p}{\rho_f \tau_p} \int \langle (v_i - u_i) p \rangle d\mathbf{v} = \frac{M}{\tau_p} (v_i - U_{pi}), \quad U_{pi} = U_i + \langle u'_i \rangle_p,$$

$$\langle u'_i \rangle_p = \frac{1}{\Phi} \int \langle u'_i p \rangle d\mathbf{v},$$

$$\Phi = \int P d\mathbf{v}, \quad V_i = \frac{1}{\Phi} \int v_i P d\mathbf{v}, \quad P = \langle p \rangle.$$

Здесь U_{pi} — осредненная скорость жидкости, определяемая на траектории частицы (так называемая скорость жидкости, видимая частицей); $\langle u'_i \rangle_p$ — скорость дрейфа между жидкостью и частицами, обусловленная неоднородностью распределения дисперсной фазы [11]; V_i — осредненная скорость дисперсной фазы; P — статистическая одноточечная ФПВ распределения скорости частиц.

Уравнение для рейнольдсовых напряжений жидкости, следующее из (1), имеет вид

$$\mathcal{K}_{ij} - \mathcal{D}_{ij} - \mathcal{P}_{ij} - \pi_{ij} + \varepsilon_{ij} - A_{ij} = 0, \quad (3)$$

$$\mathcal{K}_{ij} = \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial t} + U_k \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_k},$$

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_f \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_k} - \langle u'_i u'_j u'_k \rangle - \frac{\langle u'_i p \rangle \delta_{jk} + \langle u'_j p \rangle \delta_{ik}}{\rho_f} \right),$$

$$\mathcal{P}_{ij} = -\langle u'_i u'_k \rangle \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \langle u'_j u'_k \rangle \frac{\partial U_i}{\partial x_k}, \quad \pi_{ij} = \left\langle p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle,$$

$$\varepsilon_{ij} = 2v_f \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right\rangle,$$

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{\rho_p}{\rho_f \tau_p} \int \left[\langle (v_i - u_i) u'_j p \rangle + \langle (v_j - u_j) u'_i p \rangle \right] d\mathbf{v} = \\ &= \frac{\rho_p}{\rho_f \tau_p} \int (v_i \langle u'_j p \rangle + v_j \langle u'_i p \rangle - U_i \langle u'_j p \rangle - U_j \langle u'_i p \rangle - 2 \langle u'_i u'_j p \rangle) d\mathbf{v}. \end{aligned}$$

Для нахождения членов, характеризующих воздействие частиц на импульс и турбулентные напряжения несущего потока в уравнениях (2) и (3), т. е. A_i и A_{ij} , необходимо определить корреляции пульсаций скорости жидкости и плотности вероятности скорости частиц $\langle u'_i p \rangle$ и $\langle u'_i u'_j p \rangle$. Моделируя поле скорости жидкости гауссовым случайным процессом и ограничиваясь членами с производными первого порядка, можно получить [31; 32]

$$\langle u'_i p \rangle = -\tau_p \left(\lambda_{ij} \frac{\partial P}{\partial v_j} + \mu_{ij} \frac{\partial P}{\partial x_j} \right), \quad (4)$$

$$\lambda_{ij} = \left(\frac{f_u}{\tau_p} + l_u \frac{\partial U_j}{\partial x_n} \right) \langle u'_i u'_j \rangle - \frac{f_{u1}}{2} \frac{D_p \langle u'_i u'_j \rangle}{Dt}, \quad \mu_{ij} = g_u \langle u'_i u'_j \rangle,$$

$$f_u = \frac{1}{\tau_p} \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \quad f_{u1} = \frac{1}{\tau_p^2} \int_0^{\infty} \tau \Psi_{Lp}(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau,$$

$$g_u = \frac{T_{Lp}}{\tau_p} - f_u, \quad l_u = g_u - f_{u1}, \quad T_{Lp} = \int_0^{\infty} \Psi_{Lp}(\tau) d\tau,$$

$$\frac{D_p \langle u'_i u'_j \rangle}{Dt} = \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial t} + U_{pk} \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_k} + \frac{\partial \langle u'_i u'_j u'_k \rangle_p}{\partial x_k},$$

$$\langle u'_i \rangle_p = -\tau_p g_u \langle u'_i u'_j \rangle \frac{\partial \ln \Phi}{\partial x_j},$$

$$\langle u'_i u'_j u'_k \rangle_p = -\frac{\tau_p}{3} \left(\mu_{in} \frac{\partial \langle u'_j u'_k \rangle}{\partial x_n} + \mu_{jn} \frac{\partial \langle u'_i u'_k \rangle}{\partial x_n} + \mu_{kn} \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_n} \right).$$

Величины f_u , f_{u1} , g_u , l_u представляют собой коэффициенты, характеризующие вовлечение частиц в турбулентное движение жидкости. С целью упрощения эти коэффициенты предполагаются скалярами и описываются соотношениями, соответствующими биекспоненциальной автокорреляционной функции:

$$f_u = \frac{2St_{Lp} + z^2}{2St_{Lp} + 2St_{Lp}^2 + z^2}, \quad f_{u1} = \frac{(2St_{Lp} + z^2)^2 - 2St_{Lp}^2 z^2}{(2St_{Lp} + 2St_{Lp}^2 + z^2)^2},$$

$$g_u = \frac{1}{St_{Lp}} - f_u, \quad l_u = g_u - f_{u1}, \quad (5)$$

$$St_{Lp} = \frac{\tau_p}{T_{Lp}}, \quad z = \frac{\tau_{Tp}}{T_{Lp}},$$

где T_{Lp} , τ_{Tp} — интегральный и дифференциальный временные масштабы, характеризующие взаимодействие частиц с турбулентными вихрями. Отме-

тим, что вследствие анизотропии турбулентного движения жидкости и так называемого эффекта пересечения траекторий при наличии осредненной скорости скольжения (осредненного дрейфа) частиц относительно жидкости эти интегральный и дифференциальный временные масштабы, а, следовательно, коэффициенты вовлечения (5), могут быть тензорными, а не скалярными величинами. Если предположение об изотропии тейлорова временного микромасштаба τ_T , как показывают результаты DNS [33], достаточно хорошо выполняется даже для неоднородного течения в канале, то лагранжев временной макромасштаб турбулентности T_L является существенно анизотропным не только при течении в каналах, но и в однородном сдвиговом потоке [34]. Кроме того, лагранжев интегральный временной масштаб пульсаций скорости жидкости вдоль траектории частицы T_{Lp} является анизотропным даже в изотропной турбулентности из-за наличия осредненной скорости скольжения (эффект пересечения траекторий [35]). Однако в дальнейшем с целью упрощения будем считать T_L изотропным, а T_{Lp} (эффективное время взаимодействия частиц с турбулентными вихрями) будем определять в виде квазиизотропного представления:

$$T_{Lp} = \frac{T_{Lp}^l + 2T_{Lp}^n}{3}, \quad (6)$$

где T_{Lp}^l и T_{Lp}^n — интегральные временные масштабы взаимодействия частиц с турбулентными вихрями в параллельном и поперечном направлениях к вектору относительной осредненной скорости между частицами и жидкостью (скорости скольжения) $\mathbf{V}_r = \mathbf{V} - \mathbf{U}_p$. Дифференциальный интегральный временной масштаб пульсаций скорости жидкости вдоль траектории частицы τ_{Tp} принимается изотропным, кроме того, отношение дифференциальных и интегральных масштабов предполагается одинаковым $\tau_{Tp}/\tau_T = T_{Tp}/T_L$, где τ_T — тейлоров временной масштаб турбулентности. Благодаря принятым допущениям коэффициенты вовлечения могут рассматриваться как скалярные величины.

Для определения корреляции $\langle u'_i u'_j p \rangle$ примем аппроксимацию

$$\langle u'_i u'_j p \rangle = \langle u'_i u'_j \rangle P + \frac{\langle u'_i \rangle_p \langle u'_j p \rangle + \langle u'_j \rangle_p \langle u'_i p \rangle}{2},$$

в соответствии с которой член, описывающий влияние частиц в уравнении (3), представляется в виде

$$A_{ij} = \frac{\rho_p}{\rho_f \tau_p} \int \left[(v_i - U_{pi}) \langle u'_j p \rangle + (v_j - U_{pj}) \langle u'_i p \rangle - 2 \langle u'_i u'_j \rangle P \right] d\mathbf{v} = \quad (7)$$

$$= -\mathcal{K}_{p\,ij} + \mathcal{D}_{p\,ij} + \mathcal{P}_{p\,ij} - \varepsilon_{p\,ij} - G_{p\,ij},$$

$$\mathcal{K}_{p\,ij} = M f_{ul} \left(\frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial t} + U_{pk} \frac{\partial \langle u'_i u'_j \rangle}{\partial x_k} \right), \quad \mathcal{D}_{p\,ij} = -M f_{ul} \frac{\partial \langle u'_i u'_j u'_k \rangle_p}{\partial x_k},$$

$$\mathcal{P}_{p\,ij} = -M \left[\langle u'_i u'_k \rangle \left(g_u \frac{\partial V_j}{\partial x_k} - l_u \frac{\partial U_j}{\partial x_k} \right) + \langle u'_j u'_k \rangle \left(g_u \frac{\partial V_i}{\partial x_k} - l_u \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right) \right],$$

$$\varepsilon_{p\,ij} = \frac{2M}{\tau_p} (1 - f_u) \langle u'_i u'_j \rangle,$$

$$G_{p\,ij} = \frac{\rho_p}{\rho_f} \left[(V_i - U_{pi}) \langle u'_j u'_k \rangle g_u \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} + (V_j - U_{pj}) \langle u'_i u'_k \rangle g_u \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \right].$$

Слагаемые в правой части (7) могут быть интерпретированы как обусловленные присутствием частиц в потоке дополнительные конвекция, диффузия, порождение, диссипация и эффект неоднородности распределения частиц в пространстве.

Уравнение (3) с учетом (7) примет вид

$$\mathcal{K}_{m\,ij} - \mathcal{D}_{m\,ij} - \mathcal{P}_{m\,ij} - \pi_{ij} + \varepsilon_{m\,ij} + \mathcal{G}_{p\,ij} = 0, \quad (8)$$

$$\mathcal{K}_{m\,ij} = \mathcal{K}_{ij} + \mathcal{K}_{p\,ij}, \quad \mathcal{D}_{m\,ij} = \mathcal{D}_{ij} + \mathcal{D}_{p\,ij}, \quad \mathcal{P}_{m\,ij} = \mathcal{P}_{ij} + \mathcal{P}_{p\,ij}, \quad \varepsilon_{m\,ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{p\,ij},$$

где $\mathcal{K}_{m\,ij}$, $\mathcal{D}_{m\,ij}$, $\mathcal{P}_{m\,ij}$, $\varepsilon_{m\,ij}$ обозначают соответственно конвекцию, диффузию, порождение и диссипацию турбулентных напряжений в двухфазном потоке.

Из (3) с учетом (7) получается уравнение баланса турбулентной энергии жидкости $k \equiv \langle u'_i u'_i \rangle / 2$

$$\mathcal{K} - \mathcal{D} - \mathcal{P} + \varepsilon - A_k = 0, \quad (9)$$

$$\mathcal{K} = \frac{\partial k}{\partial t} + U_i \frac{\partial k}{\partial x_i}, \quad \mathcal{D} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(v_f \frac{\partial k}{\partial x_i} - \frac{\langle u'_i u'_j u'_j \rangle}{2} - \frac{\langle u'_i p \rangle}{\rho_f} \right), \quad \mathcal{P} = -\langle u'_i u'_j \rangle \frac{\partial U_i}{\partial x_j},$$

$$\varepsilon = \nu_f \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right\rangle, \quad A_k = -\mathcal{K}_p + \mathcal{D}_p + \mathcal{P}_p - \varepsilon_p - \mathcal{G}_p,$$

$$\mathcal{K}_p = Mf_{u1} \left(\frac{\partial k}{\partial t} + U_{pi} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right),$$

$$\mathcal{D}_p = -\frac{Mf_{u1}}{2} \frac{\partial \langle u'_i u'_j u'_j \rangle_p}{\partial x_i}, \quad \mathcal{P}_p = -M \langle u'_i u'_j \rangle \left(g_u \frac{\partial V_i}{\partial x_j} - l_u \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right),$$

$$\varepsilon_p = \frac{2M}{\tau_p} (1 - f_u) k,$$

$$\mathcal{G}_p = \frac{\rho_p}{\rho_f} g_u (V_i - U_{pi}) \langle u'_i u'_j \rangle \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}.$$

Уравнение (9) аналогично (8) может быть представлено в виде

$$\mathcal{K}_m - \mathcal{D}_m - \mathcal{P}_m + \varepsilon_m + \mathcal{G}_p = 0, \quad (10)$$

$$\mathcal{K}_m = \mathcal{K} + \mathcal{K}_p, \quad \mathcal{D}_m = \mathcal{D} + \mathcal{D}_p, \quad \mathcal{P}_m = \mathcal{P} + \mathcal{P}_p, \quad \varepsilon_m = \varepsilon + \varepsilon_p.$$

Далее в выражении для дополнительного порождения $\mathcal{P}_{p\,ij}$ заменим градиент скорости дисперсной фазы $V_{i,j}$ градиентом осредненной скорости жидкости $U_{i,j}$. Эта замена не приводит к существенной погрешности ни для малоинерционных ($St_{Lp} \ll 1$), ни для высокоинерционных ($St_{Lp} \gg 1$) частиц, поскольку скорость малоинерционных частиц совпадает со скоростью жидкости, а вклад порождения высокоинерционных частиц $\mathcal{P}_{p\,ij}$ в полное порождение $\mathcal{P}_{m\,ij}$ несущественен по сравнению с порождением турбулентных напряжений в сплошной среде. Поэтому указанная замена может приводить к некоторой погрешности только при $St_{Lp} \sim 1$. Итак, получим

$$\mathcal{P}_{p\,ij} = Mf_{u1} \mathcal{P}_{ij}, \quad \mathcal{P}_{m\,ij} = (1 + Mf_{u1}) \mathcal{P}_{ij}, \quad \mathcal{P}_p = Mf_{u1} \mathcal{P}, \quad \mathcal{P}_m = (1 + Mf_{u1}) \mathcal{P}. \quad (11)$$

Кроме того, в диффузионном члене пренебрежем вкладом молекулярного переноса и пульсациями давления, т. е. положим

$$\mathcal{D} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \langle u'_i u'_j u'_k \rangle}{\partial x_i}.$$

Тогда в пределе безынерционных частиц (микрочастиц) имеют место асимптотические соотношения

$$\lim_{\tau_p \rightarrow 0} \mathcal{K}_p = M\mathcal{K}, \quad \lim_{\tau_p \rightarrow 0} \mathcal{D}_p = M\mathcal{D}, \quad \lim_{\tau_p \rightarrow 0} \mathcal{P}_p = M\mathcal{P}, \quad \lim_{\tau_p \rightarrow 0} \varepsilon_p = \lim_{\tau_p \rightarrow 0} \mathcal{G}_p = 0$$

и, следовательно,

$$\lim_{\tau_p \rightarrow 0} A_k = -M(\mathcal{K} - \mathcal{D} - \mathcal{P}). \quad (12)$$

Подстановка (12) в (9) показывает, что при наличии в потоке микрочастиц уравнение баланса турбулентной энергии переходит в

$$\mathcal{K} - \mathcal{D} - \mathcal{P} + \frac{\varepsilon}{1+M} = 0. \quad (13)$$

Физический смысл уравнения (13) заключается в том, что микрочастицы дают вклад в конвекцию, диффузию и порождение турбулентной энергии за счет увеличения эффективной плотности потока в $(1+M)$ раз, однако не влияют на диссипацию, обусловленную вязкостью. Полученный результат согласуется с выводами работ [3—5; 7].

3. Алгебраическая модель рейнольдсовых напряжений жидкости

Моделирование сложных трехмерных течений на основе системы дифференциальных уравнений для всех компонент турбулентных напряжений приводит к большим затратам времени даже при использовании самых быстродействующих компьютеров. Поэтому для расчета однофазных турбулентных течений широкое распространение получил подход на основе алгебраических моделей рейнольдсовых напряжений, когда вместо полной системы для компонент напряжений решается только дифференциальное уравнение для турбулентной энергии. Аналогичный подход целесообразно применить и при моделировании двухфазных турбулентных течений. Нужно получить алгебраическое соотношение для $\langle u'_i u'_j \rangle$, учитывающее присутствие частиц. С этой целью, следуя известной в теории однофазных турбулентных течений равновесной аппроксимации Роди [36], выразим члены в уравнении (8), описывающие конвекцию, диффузию и

эффект неоднородности распределения частиц в пространстве, через соответствующие члены в уравнении баланса турбулентной энергии (10):

$$\mathcal{K}_{mij} - \mathcal{D}_{mij} + \mathcal{G}_{p\ ij} = \frac{\langle u'_i u'_j \rangle}{k} (\mathcal{K}_m - \mathcal{D}_m + \mathcal{G}_p). \quad (14)$$

С учетом (10), (11) и (14) дифференциальное уравнение (8) преобразуется в алгебраическое выражение

$$(1 + Mf_{u1}) \mathcal{P}_{ij} + \pi_{ij} - \varepsilon_{ij} = \frac{\langle u'_i u'_j \rangle}{k} [(1 + Mf_{u1}) \mathcal{P} - \varepsilon]. \quad (15)$$

В соответствии с (15) корреляцию пульсаций давления и скорости деформации аппроксимируем выражением

$$\begin{aligned} \pi_{ij} = & - \left(C_1^0 + C_1^1 \frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} \right) \varepsilon b_{ij} + C_2 k S_{ij}^* + \\ & + C_3 k \left(b_{ik} S_{jk}^* + b_{jk} S_{ik}^* - \frac{2}{3} b_{kn} S_{kn}^* \delta_{ij} \right) + C_4 k (b_{ik} W_{jk}^* + b_{jk} W_{ik}^*), \end{aligned} \quad (16)$$

$$b_{ij} = \frac{\langle u'_i u'_j \rangle}{2k} - \frac{\delta_{ij}}{3}, \quad S_{ij}^* = (1 + Mf_{u1}) S_{ij}, \quad W_{ij}^* = (1 + Mf_{u1}) W_{ij},$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right), \quad W_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right),$$

представляющим собой обобщение квазилинейной модели [37] в результате замены тензоров скоростей деформации и вращения жидкости S_{ij} и W_{ij} на соответствующие величины для двухфазного потока S_{ij}^* и W_{ij}^* . Согласно модели [37] константы в (16) имеют следующие значения: $C_1^0 = 3,4$, $C_1^1 = 1,8$, $C_2 = 0,36$, $C_3 = 1,25$, $C_4 = 0,4$.

С учетом изотропного представления обусловленной мелкомасштабными пульсациями скорости вязкой диссипации турбулентной энергии $\varepsilon_{ij} = 2\varepsilon\delta_{ij}/3$ подстановка (16) в (15) дает

$$A_1 b_{ij} = -A_2 \bar{S}_{ij}^* - A_3 \left(b_{ik} \bar{S}_{jk}^* + b_{jk} \bar{S}_{ik}^* - \frac{2}{3} b_{kn} \bar{S}_{kn}^* \delta_{ij} \right) - A_4 (b_{ik} \bar{W}_{jk}^* + b_{jk} \bar{W}_{ik}^*), \quad (17)$$

$$\bar{S}_{ij}^* = \frac{k}{\varepsilon} S_{ij}^*, \quad \bar{W}_{ij}^* = \frac{k}{\varepsilon} W_{ij}^*, \quad A_1 = C_1^0 - 2 + (2 + C_1^1) \frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon}, \quad A_2 = \frac{4}{3} - C_2,$$

$$A_3 = 2 - C_3, \quad A_4 = 2 - C_4.$$

Выражение (17) представляет собой неявную алгебраическую модель для определения турбулентных напряжений, поскольку тензор анизотропии b_{ij} входит как в левую, так и в правую часть уравнения. С вычислительной точки зрения существенным преимуществом по отношению к неявным обладают явные алгебраические модели, непосредственно связывающие турбулентные напряжения с градиентами осредненной скорости. Для построения полностью явной алгебраической модели рейнольдсовых напряжений с учетом влияния частиц воспользуемся самосогласованным подходом [26; 27]. Разложение на трехчленном тензорном базисе представляет решение уравнения (17) в виде

$$b_{ij} = \beta_1 \bar{S}_{ij}^* + \beta_2 \left(\bar{S}_{ik}^* \bar{S}_{jk}^* - \frac{1}{3} \bar{S}_{kn}^* \bar{S}_{kn}^* \delta_{ij} \right) + \beta_3 \left(\bar{S}_{ik}^* \bar{W}_{jk}^* + \bar{S}_{jk}^* \bar{W}_{ik}^* \right), \quad (18)$$

$$\beta_1 = -\frac{3A_1 A_2}{3A_1^2 - 2A_3^2 \bar{S}_{II}^* - 6A_4^2 \bar{W}_{II}^*}, \quad \beta_2 = -\frac{2A_3}{A_1} \beta_1, \quad \beta_3 = -\frac{A_4}{A_1} \beta_1,$$

$$\bar{S}_{II}^* = \bar{S}_{ij}^* \bar{S}_{ji}^*, \quad \bar{W}_{II}^* = \bar{W}_{ij}^* \bar{W}_{ji}^*.$$

Отношение полного порождения турбулентности с учетом присутствия частиц \mathcal{P}_m к вязкой диссипации ε определяется выражением

$$\frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} = -2b_{ij} \bar{S}_{ij}^* = -2\beta_1 \bar{S}_{II}^* = \frac{6A_1 A_2 \bar{S}_{II}^*}{3A_1^2 - 2A_3^2 \bar{S}_{II}^* - 6A_4^2 \bar{W}_{II}^*}. \quad (19)$$

С учетом соотношения

$$\frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} = \frac{A_1 + 2 - C_1^0}{2 + C_1^1}$$

из (19) получается кубическое уравнение для определения A_1

$$A_1^3 - (C_1^0 - 2)A_1^2 - \left\{ \left[2A_2 (C_1^1 + 2) + \frac{2A_3^2}{3} \right] \bar{S}_{II}^* + 2A_4^2 \bar{W}_{II}^* \right\} A_1 + 2(C_1^0 - 2) \left(\frac{A_3^2 \bar{S}_{II}^*}{3} + A_4^2 \bar{W}_{II}^* \right) = 0. \quad (20)$$

Уравнение (20) по сравнению с оригинальной моделью [26; 27] содержит инварианты скоростей деформации и вращения для двухфазного потока

\bar{S}_{II}^* и \bar{W}_{II}^* вместо соответствующих инвариантов для однофазного течения. Корни уравнения (20) имеют вид

$$A_{1(1)} = M + N - \frac{a}{3}, \quad A_{1(2,3)} = -\frac{M + N}{2} - \frac{a}{3} \pm i \frac{\sqrt{3}(M - N)}{2}, \quad (21)$$

$$M = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}}, \quad N = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}}, \quad Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2, \quad p = -\frac{a^2}{3} + b,$$

$$q = 2\left(\frac{a}{3}\right)^3 - \frac{ab}{3} + c, \quad a = -(C_1^0 - 2),$$

$$b = -\left\{ \left[2A_2(C_1^1 + 2) + \frac{2A_3^2}{3} \right] \bar{S}_{II}^* + 2A_4^2 \bar{W}_{II}^* \right\},$$

$$c = 2(C_1^0 - 2) \left(\frac{A_3^2 \bar{S}_{II}^*}{3} + A_4^2 \bar{W}_{II}^* \right).$$

Если все три корня (21) действительные, нужно выбрать наибольший [38].

В соответствии с (18) реинольдсовы напряжения равны

$$\langle u'_i u'_j \rangle = \frac{2k}{3} \delta_{ij} - 2C_\mu^* \frac{k^2}{\varepsilon} \left\{ S_{ij}^* - \frac{k}{\varepsilon} \left[B_1 \left(S_{ik}^* S_{jk}^* - \frac{1}{3} S_{kn}^* S_{kn}^* \delta_{ij} \right) + B_2 \left(S_{ik}^* W_{jk}^* + S_{jk}^* W_{ik}^* \right) \right] \right\}, \quad (22)$$

$$C_\mu^* = \frac{3A_1 A_2}{3A_1^2 - 2A_3^2 \bar{S}_{II}^* - 6A_4^2 \bar{W}_{II}^*}, \quad B_1 = \frac{2A_3}{A_1}, \quad B_2 = \frac{A_4}{A_1}.$$

Входящие в (22) турбулентная энергия жидкости и скорость ее вязкой диссипации могут быть рассчитаны на основе двухпараметрической k - ε модели турбулентности для двухфазного потока с мелкодисперсной примесью. В соответствии с (10) уравнение баланса турбулентной энергии представляется в виде

$$(1 + Mf_{ul}) \left(\frac{\partial k}{\partial t} + U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left[v_f + (1 + Mf_{ul}) \frac{C_\mu k^2}{\sigma_k \varepsilon} \right] \frac{\partial k}{\partial x_i} \right\} - \\ - (1 + Mf_{ul}) \langle u'_i u'_j \rangle \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - (\varepsilon + \varepsilon_p + \mathcal{G}_p). \quad (23)$$

Уравнение баланса диссипации турбулентной энергии аналогично (23) представляется в виде

$$(1 + Mf_{u1}) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left[v_f + (1 + Mf_{u1}) \frac{C_\mu k^2}{\sigma_\varepsilon \varepsilon} \right] \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right\} - \frac{\varepsilon}{k} \left[C_{\varepsilon 1} (1 + Mf_{u1}) \langle u'_i u'_j \rangle \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + C_{\varepsilon 2} (\varepsilon + \varepsilon_p + \mathcal{G}_p) \right]. \quad (24)$$

Уравнения (23) и (24) учитывают вклад частиц в конвекцию, диффузию, порождение и диссипацию турбулентных характеристик несущего потока, а также эффект неоднородности распределения частиц в пространстве. Значения постоянных C_μ , σ_k , σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ в уравнениях (23) и (24) могут быть заданы такими же, как и при моделировании однофазных течений.

4. Диффузионно-инерционная модель для малоинерционных частиц

Для описания транспорта и дисперсии аэрозольных частиц в [39—41] развита диффузионно-инерционная модель (ДИМ), сопряженная с моделированием несущего турбулентного потока в рамках рейнольдсова осреднения уравнений Навье—Стокса (Reynolds Averaged Navier–Stokes, RANS). Модель основана на кинетическом уравнении для ФПВ скорости частиц и справедлива для дисперсных потоков с частицами, время динамической релаксации которых не превышает временной интегральный масштаб турбулентности. Отличительной особенностью ДИМ является выражение скорости частиц в виде разложения через характеристики несущего потока и тем самым сведение проблемы моделирования транспорта и дисперсии частиц к решению одного дифференциального уравнения для их концентрации:

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \frac{\partial U_i M}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_p \left(F_i - \frac{DU_i}{Dt} \right) M \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(D_B \delta_{ij} + D_{Tp ij}) \frac{\partial M}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(M \frac{\partial q_u D_{Tp ij}}{\partial x_j} \right), \quad (25)$$

$$D_{Tij} = \langle u'_i u'_j \rangle T_{Lp}, \quad q_u = \frac{\tau_p f_u}{T_{Lp}}, \quad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + U_j \frac{\partial}{\partial x_j},$$

где F_i — ускорение действующей на частицу массовой силы (например, силы тяжести); D_B — коэффициент броуновской диффузии; $D_{Tp\ ij}$ — тензор турбулентной диффузии частиц; q_u — коэффициент турбулентной миграции частиц.

В рамках ДИМ осредненная скорость дисперсной фазы представляется в виде

$$V_i = U_i - (D_B \delta_{ij} + D_{Tp\ ij}) \frac{\partial \ln M}{\partial x_j} + \tau_p \left(F_i - \frac{DU_i}{Dt} - \frac{\partial (q_u D_{Tp\ ij})}{\partial x_j} \right). \quad (26)$$

Отметим, что применение анизотропной нелинейной модели турбулентной вязкости по сравнению со стандартной изотропной линейной позволяет улучшить расчет движения и дисперсии частиц на основе ДИМ в двух аспектах: во-первых, в результате уточнения моделирования поля осредненной скорости несущего потока U_i , определяющего конвективный транспорт частиц, во-вторых, вследствие непосредственного уточнения описания рейнольдсовых напряжений газа $\langle u'_i u'_j \rangle$, что существенно для моделирования переноса частиц, обусловленного турбулентной миграцией (турбофорезом) и турбулентной диффузией.

Для определения интегральных временных масштабов взаимодействия частиц с турбулентными вихрями в параллельном и поперечном направлениях к вектору скорости дрейфа используется модель [42], учитывающая так называемые эффекты инерционности и пересечения траекторий в изотропной турбулентности:

$$T_{Lp}^l = \left\{ \frac{3\mathfrak{S} + m(2 + 3\gamma^2)}{3\mathfrak{S}(1 + m\mathfrak{S})^2} [1 - F(\text{St}_E)] + \frac{F(\text{St}_E)}{1 + m\gamma} \right\} T_E,$$

$$T_{Lp}^n = \left\{ \frac{6\mathfrak{S} + m(4 + 3\gamma^2)}{6\mathfrak{S}(1 + m\mathfrak{S})^2} [1 - F(\text{St}_E)] + \frac{2 + m\gamma}{2(1 + m\gamma)^2} F(\text{St}_E) \right\} T_E,$$

$$\mathfrak{S} = (1 + \gamma^2)^{1/2}, \quad \text{St}_E = \frac{\tau_p}{T_E}, \quad \gamma = \frac{|\mathbf{V}_r|}{(2k/3)^{1/2}}, \quad T_E = \frac{3(1 + m)^2}{3 + 2m} T_L,$$

$$F(\text{St}_E) = \frac{\text{St}_E}{1 + \text{St}_E} - \frac{0,9m\text{St}_E^2}{(1 + \text{St}_E)^2 (2 + \text{St}_E)},$$

где T_E — эйлеров временной интегральный масштаб турбулентности, а структурный параметр турбулентности m принимается равным 0,5. Лагранжев интегральный масштаб турбулентности определяется так:

$$T_L = \alpha \frac{k}{\varepsilon}, \quad \alpha = C_\mu^{1/2} = 0,3,$$

а тейлоров временной микромасштаб

$$\tau_T = \left(\frac{2 \operatorname{Re}_\lambda v_f}{15^{1/2} a_0 \varepsilon} \right)^{1/2}, \quad a_0 = \frac{a_{01} + a_{0\infty} \operatorname{Re}_\lambda}{a_{02} + \operatorname{Re}_\lambda}, \quad \operatorname{Re}_\lambda = \left(\frac{20k^2}{3\varepsilon v_f} \right)^{1/2},$$

$$a_{01} = 11, \quad a_{02} = 205, \quad a_{0\infty} = 7.$$

Время динамической релаксации частицы определяется соотношением

$$\tau_p = \tau_{p0} \left(1 + 0,15 \operatorname{Re}_p^{0,687} \right)^{-1}, \quad \tau_{p0} = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho v_f},$$

где τ_{p0} — стоксово время релаксации частицы; d_p — диаметр частицы, а число Рейнольдса обтекания частицы оценивается с учетом как осредненного, так и пульсационного скольжения между частицами и жидкостью:

$$\operatorname{Re}_p = \frac{d_p \left[|\mathbf{V}_r|^2 + 2(1 - 2f_u)k \right]^{1/2}}{v_f}.$$

Относительная осредненная скорость между частицами и скоростью газа, видимой частицами, согласно (26) равна

$$V_{ri} = V_i - U_{pi} = \tau_p \left(F_i - \frac{DU_i}{Dt} \right) - \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(D_B + q_u D_{Tpij}) M \right].$$

5. Валидация модели

Валидация модели нелинейной турбулентной вязкости выполнена путем сравнения с результатами решения системы дифференциальных уравнений для всех компонент рейнольдсовых напряжений и данными прямых численных расчетов в однородном сдвиговом потоке, а также с экспериментальными данными по влиянию мелкодисперсной примеси на турбулентное течение воздуха в трубе.

5.1. Однородное сдвиговое течение

Вначале рассмотрим влияние частиц на однородное течение с постоянной скоростью сдвига. Вследствие однородности поля скорости несущего турбулентного потока тройные моменты пульсаций скоростей жидкостей и частиц обращаются в нуль, что приводит к обрыву цепочки уравнений на уровне вторых моментов. Поэтому однородные течения имеют фундаментальное значение для верификации моделей турбулентности для вторых моментов.

Вследствие однородности потока концентрация частиц в пространстве не изменяется, а градиенты сплошной и дисперсной фаз равны. Эти градиенты задаются соотношением

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_j} = \frac{\partial V_i}{\partial x_j} = S \delta_{i1} \delta_{j2}, \quad (27)$$

где S — интенсивность сдвига скорости.

С учетом (16) и (27) из (8) получается следующая система транспортных уравнений для ненулевых компонент тензора анизотропии в однородном сдвиговом потоке:

$$\begin{aligned} (1 + Mf_{u1}) \frac{db_{11}}{dt} &= 2(1 + Mf_{u1}) S b_{12} \left(b_{11} - \frac{2}{3} \right) - \frac{\varepsilon}{2k} \left(C_1^0 + C_1^1 \frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} \right) b_{11} + \\ &+ (1 + Mf_{u1}) \left(\frac{C_3}{6} + \frac{C_4}{2} \right) S b_{12} + \frac{\varepsilon}{k} b_{11}, \\ (1 + Mf_{u1}) \frac{db_{22}}{dt} &= 2(1 + Mf_{u1}) S b_{12} \left(b_{22} + \frac{1}{3} \right) - \frac{\varepsilon}{2k} \left(C_1^0 + C_1^1 \frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} \right) b_{22} + \\ &+ (1 + Mf_{u1}) \left(\frac{C_3}{6} - \frac{C_4}{2} \right) S b_{12} + \frac{\varepsilon}{k} b_{22}, \\ (1 + Mf_{u1}) \frac{db_{33}}{dt} &= 2(1 + Mf_{u1}) S b_{12} \left(b_{33} + \frac{1}{3} \right) - \frac{\varepsilon}{2k} \left(C_1^0 + C_1^1 \frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} \right) b_{33} - \\ &- \frac{(1 + Mf_{u1}) C_3 S}{3} b_{12} + \frac{\varepsilon}{k} b_{33}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$(1 + Mf_{u1}) \frac{db_{12}}{dt} = (1 + Mf_{u1}) S \left(2b_{12}^2 - b_{22} - \frac{1}{3} \right) - \frac{\varepsilon}{2k} \left(C_1^0 + C_1^1 \frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} \right) b_{12} + \\ + \frac{(1 + Mf_{u1}) S}{4} \left[C_2 + C_3 (b_{11} + b_{22}) - C_4 (b_{11} - b_{22}) \right] + \frac{\varepsilon}{k} b_{12} - \frac{C_4 S}{4} (b_{11} - b_{22}) + \frac{\varepsilon}{k} b_{12},$$

где

$$\frac{\mathcal{P}_m}{\varepsilon} = -2(1 + Mf_{u1}) \frac{kS}{\varepsilon} b_{12}.$$

Система алгебраических уравнений для компонент тензора анизотропии согласно (22) имеет вид

$$b_{11} = \frac{C_\mu^*}{2} \left(\frac{B_1}{6} + B_2 \right) \left[(1 + Mf_{u1}) \frac{kS}{\varepsilon} \right]^2, \quad b_{22} = \frac{C_\mu^*}{2} \left(\frac{B_1}{6} - B_2 \right) \left[(1 + Mf_{u1}) \frac{kS}{\varepsilon} \right]^2, \quad (29) \\ b_{33} = -\frac{C_\mu^* B_1}{6} \left[(1 + Mf_{u1}) \frac{kS}{\varepsilon} \right]^2, \quad b_{12} = -\frac{C_\mu^*}{2} (1 + Mf_{u1}) \frac{kS}{\varepsilon}.$$

Уравнения баланса турбулентной энергии (23) и скорости ее диссипации (24) с учетом (27) примут вид

$$(1 + Mf_{u1}) \frac{dk}{dt} = -(1 + Mf_{u1}) S \langle u'_1 u'_2 \rangle - (1 + Mf_\varepsilon) \varepsilon, \quad (30)$$

$$(1 + Mf_{u1}) \frac{d\varepsilon}{dt} = -(1 + Mf_{u1}) C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon S}{k} \langle u'_1 u'_2 \rangle - C_{\varepsilon 2} (1 + Mf_\varepsilon) \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (31)$$

$$f_\varepsilon = \frac{2(1 - f_u)k}{\tau_p \varepsilon},$$

где коэффициент f_ε характеризует вклад частиц в диссипацию турбулентной энергии жидкости. Эта дополнительная диссипация турбулентной энергии обусловлена работой, связанной с вовлечением частиц в турбулентное движение несущей среды. В уравнении (31) выбраны следующие значения постоянных [43]: $C_{\varepsilon 1} = 1,44$, $C_{\varepsilon 2} = 1,83$.

Далее рассмотрим однородное течение при отсутствии силы тяжести, когда скорости сплошной и дисперсной фаз совпадают. В этом случае эффект пересечения траекторий отсутствует, и, следовательно, $T_{Lp}^I = T_{Lp}^n = T_{Lp}$. На рис. 1 показаны зависимости коэффициентов вовлече-

ния f_{u1} и диссипации f_ε от числа Стокса $St_L \equiv \tau_p / T_L$, характеризующего инерционность частиц по отношению к лагранжеву интегральному масштабу турбулентности. Видно, что за исключением области при малых значениях St_L коэффициент диссипации f_ε превышает коэффициент вовлечения f_{u1} , причем эта область сужается с ростом числа Рейнольдса Re_λ . Соотношение между этими коэффициентами позволяет сделать вывод о характере влияния малоинерционных частиц на турбулентность, когда можно не учитывать эффект порождения турбулентности в следе за частицами. Поскольку коэффициент f_ε определяет обусловленную частицами дополнительную диссипацию турбулентной энергии, а коэффициент вовлечения f_{u1} , напротив, характеризует дополнительную конвекцию и порождение, то эффект турбулизации за счет введения в поток малоинерционных частиц может иметь место только при очень малых значениях числа Стокса St_L . Этот вывод согласуется с данными DNS [7]. При $St_L > St_{L*}$, где St_{L*} определяется из условия равенства $f_\varepsilon = f_{u1}$, частицы приводят к снижению уровня турбулентности. Кроме того, очевидно, что максимальный эффект ламинизирующего воздействия частиц на поток достигается при $St_L \approx z / \sqrt{2}$ и далее уменьшается с ростом St_L .

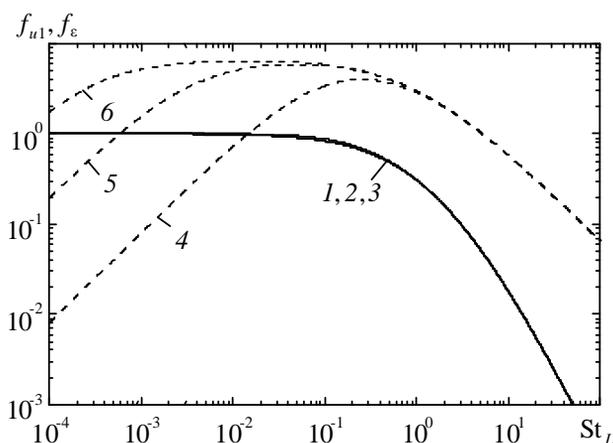


Рис. 1. Зависимость коэффициентов вовлечения f_{u1} (1—3) и диссипации f_ε (4—6) от числа Стокса: 1, 4 — $Re_\lambda = 10^2$; 2, 5 — $Re_\lambda = 10^3$; 3, 6 — $Re_\lambda = 10^4$

Перейдем к сравнению результатов расчета характеристик однородного сдвигового потока с частицами на основе алгебраической модели (29) с соответствующими результатами на основе решения дифференциальной модели (28) и данным прямого численного моделирования [19].

Для определения турбулентной энергии и скорости ее диссипации при расчетах на основе обеих моделей привлекаются уравнения (30) и (31). В соответствии с DNS [19] начальные условия соответствуют изотропному состоянию с числом Рейнольдса $Re_\lambda = 114$, и в момент $t = 0$ накладывается деформация сдвига с параметром $k_0 S / \epsilon_0 = 6,46$. Предполагается, что частицы вводятся в поток в начальный момент времени $t = 0$.

Результаты расчета для частиц с $\tau_p S = 1,0$ представлены на рис. 2—5. Очевидно, что одним из важных критериев качества алгебраической модели является близость ее результатов к данным, полученным на основе транспортной дифференциальной модели. Чем ближе расчеты алгебраической модели к расчетам дифференциальной модели, тем лучше алгебраическая модель. Однако следует отметить, что алгебраические модели не способны предсказывать поведение течения в начальный (переходный) период времени. Поэтому они оцениваются по способности рассчитывать течение в установившемся состоянии.

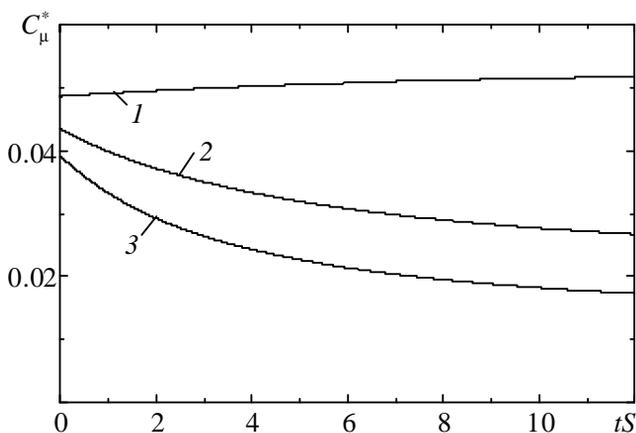


Рис. 2. Изменение во времени коэффициента C_μ^* :
1 — $M = 0$, 2 — $M = 0,25$, 3 — $M = 0,5$

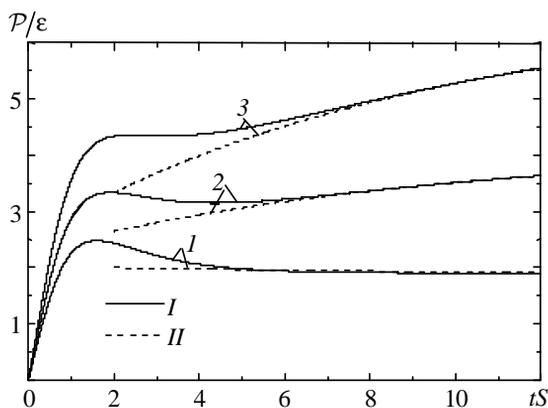


Рис. 3. Изменение во времени отношения порождения и диссипации турбулентной энергии: I — модель (28), II — модель (29);
1, 4 — $M = 0$, 2, 5 — $M = 0,25$, 3, 6 — $M = 0,5$

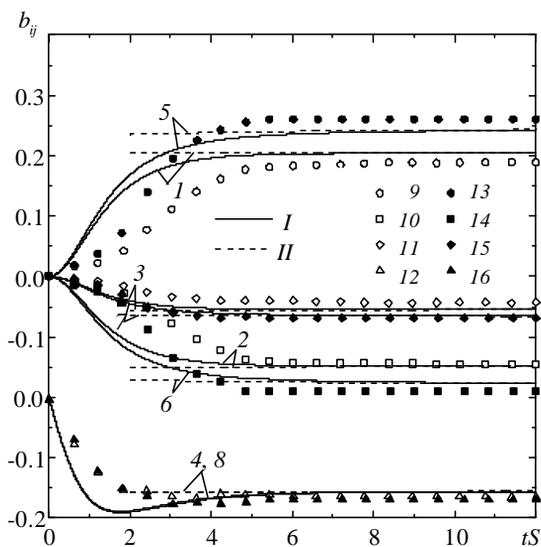


Рис. 4. Изменение во времени компонент тензора анизотропии: I — модель (28), II — модель (29); 1, 5, 9, 13 — b_{11} , 2, 6, 10, 14 — b_{22} , 3, 7, 11, 15 — b_{33} , 4, 8, 12, 16 — b_{12} ; 1—4 и 9—12 — $M = 0$, 5—8 и 13—16 — $M = 0,25$, 9—16 — DNS [19]

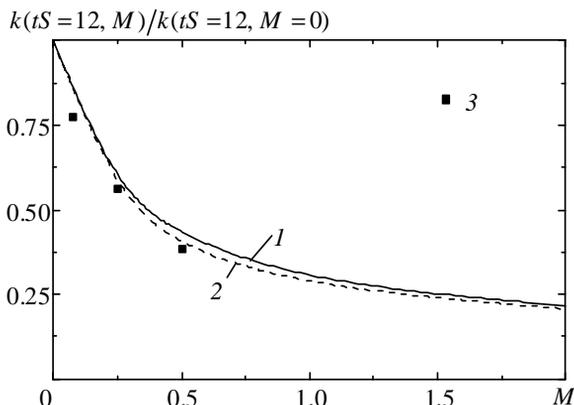


Рис. 5. Влияние массовой концентрации частиц на турбулентную энергию: 1 — модель (28), 2 — модель (29), 3 — DNS [19]

На рис. 2 показана эволюция во времени коэффициента при линейном члене при зависимости реинольдсовых напряжений от градиента скорости (22). Видно существенное влияние частиц, приводящее к снижению C_{μ}^* с ростом концентрации. Отметим, что стандартная линейная k - ϵ -модель турбулентности с постоянным коэффициентом C_{μ} этот эффект не описывает. На рис. 3 показано изменение во времени отношения обусловленного градиентом осредненной скорости порождения турбулентной энергии к ее вязкой диссипации. Возрастание \mathcal{P}/ϵ с увеличением концентрации частиц объясняется главным образом уменьшением вязкой диссипации. При $tS > 6$ значения \mathcal{P}/ϵ , полученные по обеим моделям, оказываются очень близкими.

На рис. 4 представлены компоненты тензора анизотропии, рассчитанные по дифференциальной и алгебраической моделям, в сопоставлении с данными прямого численного моделирования [19]. Видно, что при относительно больших временах ($tS > 6$) значения b_{ij} , предсказываемые обеими моделями, практически неразличимы. В соответствии с DNS модели предсказывают увеличение анизотропии течения в результате присутствия частиц. Поскольку частицы приводят к возрастанию анизотропии течения, актуальность применения нелинейной модели турбулентной вязкости, способной описывать анизотропию турбулентных напряжений, по сравнению с линейной изотропной моделью в двухфазных потоках повышается.

Наконец, на рис. 5 показаны отношения кинетических турбулентных энергий двухфазного и однофазного течений при $tS=12$ в зависимости от

массовой концентрации дисперсной фазы. Видно, что значения $k(tS=12, M)/k(tS=12, M=0)$, даваемые обеими моделями, почти неразличимы и находятся в согласии с DNS [19].

5.2. Течение в круглой трубе

К настоящему времени накоплен достаточно большой экспериментальный материал по характеристикам дисперсных турбулентных внутренних и внешних течений (в каналах, трубах, пограничных слоях, струях и т. д.). Однако выделить из этих работ информацию об отдельных механизмах влияния частиц на турбулентность «в чистом виде», как правило, представляет собой нелегкую задачу вследствие большого количества усложняющих течение факторов. Такое исследование выполнено в [44], где изучалось влияние мелкодисперсной примеси на турбулентное течение воздуха в трубе. В этой работе распределение частиц по сечению трубы было близко к равномерному, деформация профиля осредненной скорости под воздействием частиц практически отсутствовала и образование нестационарной вихревой структуры (следа) вследствие отрыва потока за частицами не имело места. Поэтому основным механизмом влияния частиц на турбулентность является тормозящее (демпфирующее) воздействие, связанное с неполнотой их вовлечения в пульсационное движение жидкости, что и вызывает дополнительную диссипацию и уменьшение интенсивности турбулентных пульсаций. В силу указанного обстоятельства результаты экспериментального исследования [44] представляют большую ценность для тестирования теоретических моделей о влиянии мелкодисперсных частиц на характеристики несущего турбулентного потока. Поэтому с целью валидации представленной нелинейной модели турбулентной вязкости для газодисперсного потока выполнено сравнение с экспериментальными данными [44]. В этой работе методом лазерной анемометрии исследовалось стационарное восходящее гидродинамически развитое газодисперсное течение в вертикальной трубе. Число Рейнольдса, построенное по среднемассовой скорости потока и диаметру канала, равнялось 25 600. В качестве дисперсной фазы использовались частицы стекла SiO_2 размером 50 и 100 мкм и плотностью 2550 кг/м^3 , а также окиси алюминия Al_2O_3 размером 50 мкм и плотностью 3950 кг/м^3 ; массовая концентрация дисперсной фазы M изменялась в диапазоне 0,12—0,39.

Значения постоянных в уравнениях (4) и (5) принимались такими же, как и при моделировании однофазных течений в стандартной высокорейнольдсовой k - ϵ модели турбулентности: $C_\mu = 0,09$, $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_\epsilon = 1,3$, $C_{\epsilon 1} = 1,44$, $C_{\epsilon 2} = 1,92$. В качестве граничных условий на стенке при решении уравнений (23) и (24) применяется метод пристеночных функций [45],

получивший широкое распространение для расчета однофазных течений при больших числах Рейнольдса.

На рис. 6 показано сопоставление результатов расчета осредненной осевой скорости газа вдали от входа в трубу U_x с экспериментальными данными. Результаты представлены в универсальных координатах: $u_+ = U_x/u_*$, $y_+ = yu_*/\nu$, где u_* — динамическая скорость, y — расстояние от стенки трубы. Полученные расчетные и экспериментальные результаты свидетельствуют, что в рассматриваемых диапазонах изменения массовой концентрации и инерционности частицы практически не оказывают влияния на распределение осредненной скорости газа, которое хорошо описывается логарифмическим законом стенки для однофазного течения [46]

$$u_+ = \frac{\ln y_+}{\kappa} + B, \quad \kappa = 0,41, \quad B = 5,2. \quad (32)$$

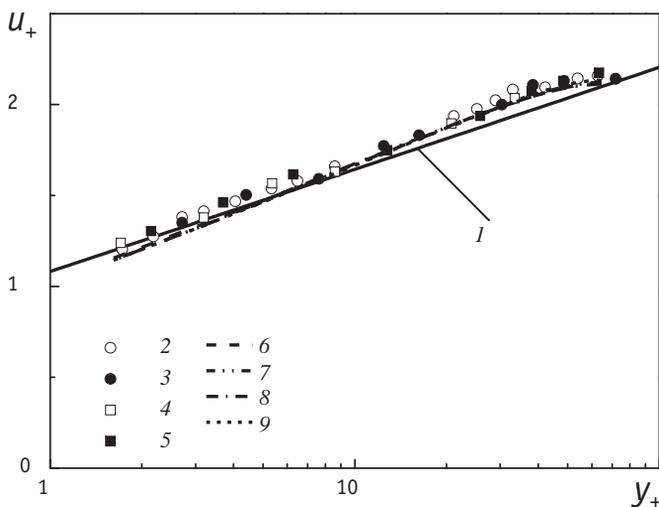
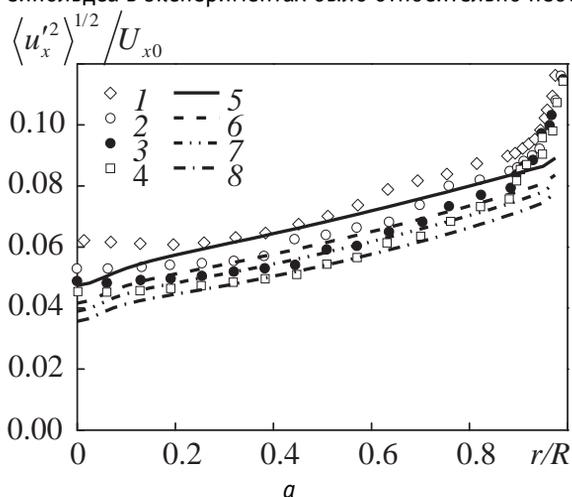
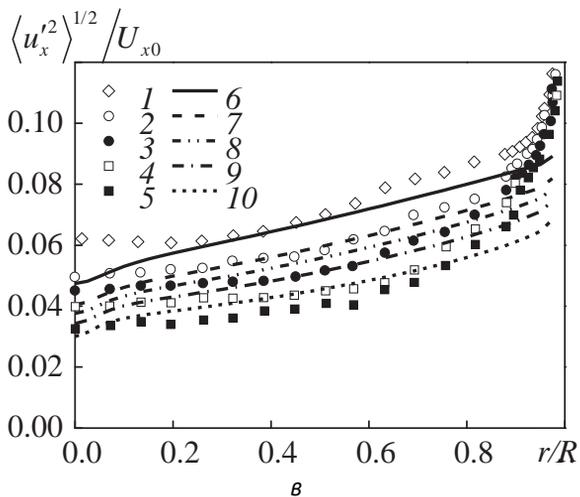
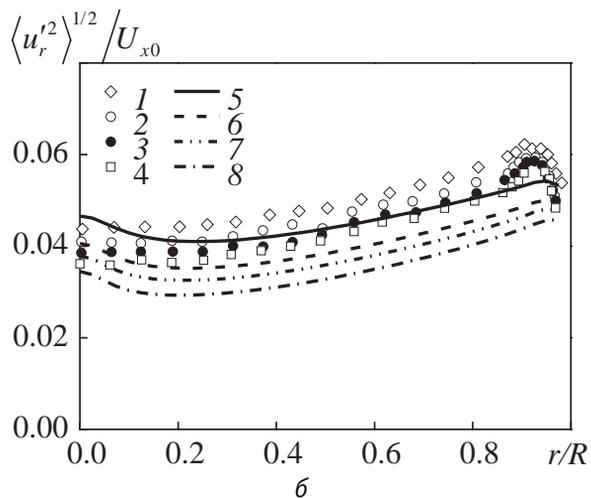
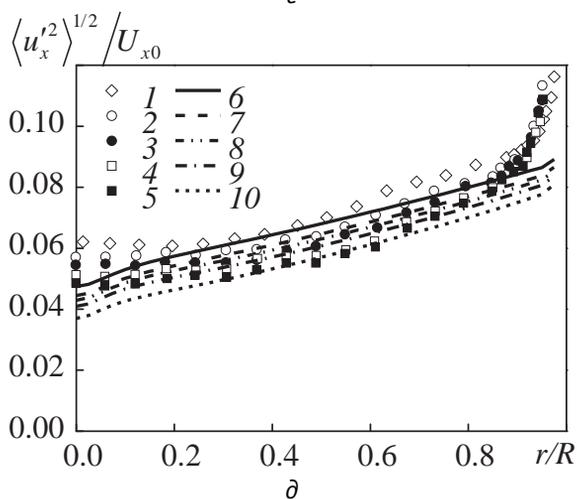
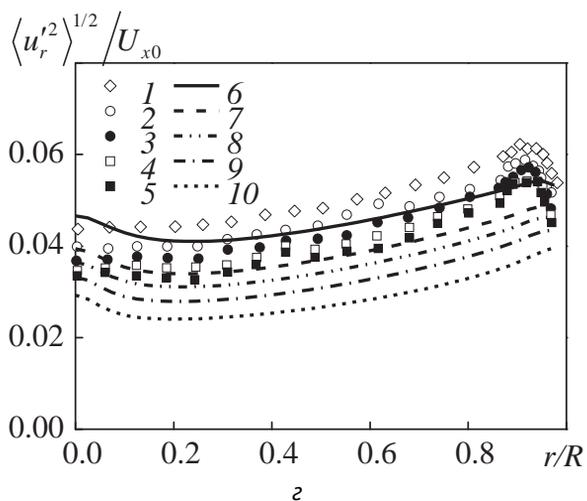


Рис. 6. Распределение осредненной осевой скорости газа по сечению трубы: 1 — (32), 2—5 — эксперименты [44], 6—9 — расчеты;
1, 6 — $M = 0$, 2, 7 — Al_2O_3 , $M = 0,26$; 3, 8 — SiO_2 , $d_p = 50$ мкм, $M = 0,39$,
4, 9 — SiO_2 , $d_p = 100$ мкм, $M = 0,39$

На рис. 7 представлены распределения продольной $\langle u_x'^2 \rangle^{1/2}$ и радиальной $\langle u_r'^2 \rangle^{1/2}$ составляющих интенсивности пульсаций скорости газа, нормированные на осредненную скорость на оси трубы U_{x0} , от расстояния от оси трубы r , отнесенного к ее радиусу R . Видно, что присутствие мелкодисперсных твердых частиц в газовом потоке вызывает подавление турбулентности. При этом ламинаризирующее воздействие частиц возрастает с увеличением их массовой концентрации. Кроме того, с ростом инерционности частиц (в рассматриваемом диапазоне) их влияние на турбулентность снижается, что объясняется уменьшением дополнительной диссипации ϵ_p . Сравнение с экспериментальными данными показывает, что развита модель в качественном отношении адекватно описывает как анизотропию турбулентного течения, так и влияние инерционности и массовой концентрации частиц на интенсивность турбулентности. Вместе с тем представленная модель предсказывает несколько меньшие значения интенсивностей пульсаций скорости газа по сравнению с экспериментальными данными (в особенности это касается радиальной составляющей скорости пульсаций и продольной составляющей вблизи стенки). Для улучшения согласия с экспериментальными данными (особенно для улучшения описания поведения турбулентных напряжений в пристеночной области), по-видимому, необходимо вместо высокорейнольдсово использовать низкорейнольдсову k - ϵ -модель турбулентности, поскольку значение числа Рейнольдса в экспериментах было относительно небольшим.







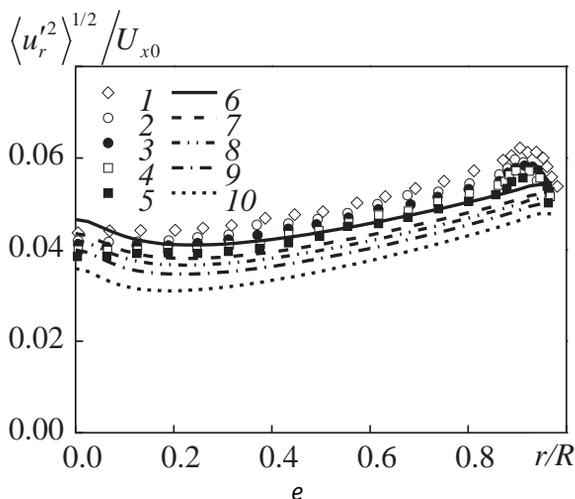


Рис. 7. Распределения продольной (а, в, д) и радиальной (б, г, е) компонент интенсивности пульсаций скорости газа по сечению трубы: а, б — Al_2O_3 , в, г — SiO_2 , д, е — SiO_2 , $d_p = 100$ мкм; 1–5 — эксперименты [44], 6–10 — расчеты; 1, 6 — $M = 0$, 2, 7 — $M = 0,12$, 3, 8 — $M = 0,18$, 4, 9 — $M = 0,26$, 5, 10 — $M = 0,39$

6. Заключение

Получены соотношения для моделирования обратного влияния небольших тяжелых частиц на импульс и реинольдсовы напряжения несущего турбулентного потока. Эти соотношения основаны на одноточечной ФПВ скорости частиц и учитывают вклад частиц в конвекцию, диффузию, порождение и диссипацию турбулентности.

Представлена нелинейная модель нелинейной турбулентной вязкости (полностью явная алгебраическая модель реинольдсовых напряжений) для двухфазного потока с мелкодисперсными частицами. Модель основана на алгебраической модели реинольдсовых напряжений, разработанной ранее Gířtař [26; 27] для однофазного турбулентного течения. Представленная модель нелинейной турбулентной вязкости справедлива для газодисперсных потоков с частицами, время релаксации которых не превышает временной макромасштаб турбулентности. Модель нелинейной турбулентной вязкости объединена с k - ϵ -моделью турбулентности для двухфазного потока, включающей дифференциальные уравнения для турбулентной

энергии газа и скорости ее диссипации с учетом обратного влияния частиц. Выполнено сопряжение нелинейной модели турбулентной вязкости, описывающей турбулентные характеристики несущего газового потока в рамках k - ε модели турбулентности, с разработанной ранее авторами диффузионно-инерционной моделью для расчета транспорта и дисперсии малоинерционных частиц в турбулентном потоке.

Сравнение с результатами решения системы дифференциальных уравнений для всех компонент рейнольдсовых напряжений и данными прямых численных расчетов показывает, что представленная модель адекватно описывает влияние частиц на анизотропию и интенсивность турбулентности в однородном потоке с постоянной скоростью сдвига. В результате сравнения с экспериментальными данными также показано, что представленная модель адекватно описывает анизотропию турбулентных напряжений, а также влияние инерционности и массовой концентрации частиц на интенсивность турбулентности в круглой трубе.

Литература

1. Gore R. A., Crowe C. T. Effect of particle size on modulating turbulent intensity // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1989. — Vol. 15, № 2. — P. 279—285.
2. Hetsroni G. Particle-turbulence interaction // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1989. — Vol. 15, № 5. — P. 735—746.
3. Druzhinin O. A., Eldhobashi S. On the decay rate of isotropic turbulence laden with microparticles // *Phys. Fluids*. — 1999. — Vol. 11, № 3. — P. 602—610.
4. Druzhinin O. A. The influence of particle inertia on the two-way coupling and modification of isotropic turbulence by microparticles // *Phys. Fluids*. — 2001. — Vol. 13, № 12. — P. 3738—3755.
5. Ferrante A., Eldhobashi S. On the physical mechanisms of two-way coupling in particle-laden isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2003. — Vol. 15, № 2. — P. 315—329.
6. Mashayek F. Droplet-turbulence interactions in low-Mach number homogeneous shear two-phase flows // *J. Fluid Mech*. — 1998. — Vol. 367. — P. 163—203.
7. Ahmed A. M., Eldhobashi S. On the mechanisms of modifying the structure of turbulent homogeneous shear flows by dispersed particles // *Phys. Fluids*. — 2000. — Vol. 12, № 11. — P. 2906—2930.
8. Tanaka M., Maeda Y., Hagiwara Y. Turbulence modification in a homogeneous turbulent shear flow laden with small heavy particles // *Int. J. Heat Fluid Flow*. — 2002. — Vol. 23. — P. 615—626.

9. *Eldhobashi S. E., Abou-Arab T. W.* A two-equation turbulence model for two-phase flows // *Phys. Fluids*. — 1983. — Vol. 26, №4. — P. 931—938.
10. *Rizk M. A., Eldhobashi S. E.* A two-equation turbulence model for dispersed confined two-phase flows // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1989. — Vol. 15, № 1. — P. 119—133.
11. *Simonin O.* Second-moment prediction of dispersed-phase turbulence in particle-laden flows // *Proc. 8th Symp. on Turbulent Shear Flows*. Munich, Germany. 1991. — P. 7-4-1—7-4-6.
12. *Винберг А. А., Зайчик Л. И., Периуков В. А.* Расчет переноса импульса и тепла в турбулентных газодисперсных струйных течениях // *Изв. РАН. МЖГ*. — 1992. — №3. — С. 69—80.
13. *Squires K. D., Eaton J. K.* Effect of selective modification of turbulence on two-equation models for particle-laden turbulent flows // *Trans. ASME. J. Fluids Eng.* — 1994. — Vol. 116. — P. 778—784.
14. *Деревич И. В.* Гидродинамика и тепломассоперенос частиц при турбулентном течении газовзвеси в трубе и осесимметричной струе // *ТВТ*. — 2002. — Т. 40, № 1. — С. 86—99.
15. *Terekhov V. I., Pakhomov M. A.* The Numerical Modeling of the Tube Turbulent Gas-Drop Flow with Phase Changes // *Int. J. Thermal Science*. — 2004. — Vol. 43, № 6. — P. 595.
16. *Mando M., Lightstone M. F., Rosendahl L.* et al. Turbulence modulation in dilute particle-laden flows // *Int J. Heat Fluid Flow*. — 2009. — Vol. 30. — P. 331—338.
17. *Benavides A., van Wachem B.* Eulerian-Eulerian prediction of dilute turbulent gas-particle flow in a backward-facing step // *Int J. Heat Fluid Flow*. — 2009. — Vol. 30. — P. 452—461.
18. *Зайчик Л. И., Алинченков В. М., Козлов И. М.* Моделирование влияния мелкодисперсных частиц на турбулентность // *ТВТ*. — 2010. — Т. 48, №2. — С. 224—233.
19. *Taulbee D. B., Mashayek F., Barré C.* Simulation and Reynolds stress modeling of particle-laden turbulent shear flows // *Int. J. Heat Fluid Flow*. — 1999. — Vol. 20. — P. 368—373.
20. *Zhou L. X., Xu Y., Fan L. S., Li Y.* Simulation of swirling gas-particle flows using an improved second-order moment two-phase turbulent model // *Powder Technol.* — 2001. — Vol. 116. — P. 178—189.
21. *Lain S., Sommerfeld M.* Turbulence modulation in dispersed two-phase flow laden with solids from a Lagrangian perspective // *Int. J. Heat Fluid Flow*. — 2003. — Vol. 24. — P. 616—625.
22. *Beishuizen N. A., Naud B., Roekaerts D.* Evaluation of a modified Reynolds stress model for turbulent dispersed two-phase flows in-

- cluding two-way coupling // Flow Turbulence Combust. — 2007. — Vol. 79. — P. 321—341.
23. Boulet P., Moissette S. Influence of the particle-turbulence modulation modeling in the simulation of a non-isothermal gas-solid flow // Int J. Heat Mass Transfer. — 2002. — Vol. 45. — P. 4201—4216.
 24. Speziale C. G. On non-linear $K-l$ and $K-\epsilon$ models of turbulence // J. Fluid Mech. — 1987. — Vol. 178. — P. 459—475.
 25. Mashayek F., Taulbee D. B. Turbulent gas-solid flows. Pt. II: Explicit algebraic models // Numer. Heat Transfer. Pt. B. — 2002. — Vol. 41. — P. 31—52.
 26. Girimaji S. S. Fully explicit and self-consistent algebraic Reynolds stress model // Theoret. Comput. Fluid Dynamics. — 1996. — Vol. 8. — P. 387—402.
 27. Girimaji S. S. A Galilean invariant explicit algebraic Reynolds stress model for turbulent curved flows // Phys. Fluids. — 1997. — Vol. 9, №4. — P. 1067—1077.
 28. Wallin S., Johansson A. V. An explicit algebraic Reynolds stress model for incompressible and compressible turbulent flows // J. Fluid Mech. — 2000. — Vol. 403. — P. 89—132.
 29. Gatski T. B., Rumsey C. L. Linear and nonlinear eddy viscosity models // Closure Strategies for Turbulent and Transitional Flows. — [S.l.]: Cambridge Univ. Press. 2002. — P. 9—46.
 30. Crowe C. T. On models for turbulence modulation in fluid-particle flows // Int. J. Multiphase Flow. — 2000. — Vol. 26, №5. — P. 719—727.
 31. Зайчик Л. И., Алипченков В. М. Статистические модели движения частиц в турбулентной жидкости. — М.: Физматлит, 2007. — 308 с.
 32. Zaichik L. I., Alipchenkov V. M., Avetissian A. R. Transport and deposition of colliding particles in turbulent channel flows // Int. J. Heat Fluid Flow. — 2009. — Vol. 30. — P. 443—451.
 33. Choi J., Yeo K., Lee C. Lagrangian statistics in turbulent channel flow // Phys. Fluids. — 2004. — Vol. 16. — P. 779—793.
 34. Pope S. B. Stochastic Lagrangian models of velocity in homogeneous turbulent shear flow // Phys. Fluids. — 2002. — Vol. 14, №5. — P. 1696—1702.
 35. Csanady G. T. Turbulent diffusion of heavy particles in the atmosphere // J. Atmosph. Sci. — 1963. — Vol. 20, №3. — P. 201—208.
 36. Rodi W. A new algebraic relation for calculating the Reynolds stresses // ZAMM. — 1976. — Vol. 56. — P. T219—T221.

37. *Speziale C. G., Sarkar S., Gatski T. B.* Modeling the pressure–strain correlation of turbulence: an invariant dynamical systems approach // *J. Fluid Mech.* — 1991. — Vol. 227. — P. 245—272.
38. *Jongen T., Gatski T. B.* A unified analysis of planar homogeneous turbulence using single-point closure equations // *J. Fluid Mech.* — 1999. — Vol. 399. — P. 117—150.
39. *Zaichik L. I., Pershukov V. A., Kozelev M. V., Vinberg A. A.* Modeling of dynamics, heat transfer, and combustion in two-phase turbulent flows. — 1: Isothermal flow // *Experim. Thermal and Fluid Science.* — 1997. — Vol. 15, № 1. — P. 291—310.
40. *Дробышевский Н. И., Зайчик Л. И., Мукин Р. В.* и др. Развитие и применение диффузионно-инерционной модели для расчета газодисперсных турбулентных течений // *Теплофизика и аэромеханика.* — 2009. — Т. 16, № 4. — С. 553—572.
41. *Zaichik L. I., Drobyshevsky N. I., Filippov A. S.* et al. A Diffusion-inertia model for predicting dispersion and deposition of low-inertia particles in turbulent flows // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* — 2010. — Vol. 53, № 1. — P. 154—162.
42. *Oesterlé B., Zaichik L. I.* Time scales for predicting dispersion of arbitrary-density particles in isotropic turbulence // *Int. J. Multiphase Flow.* — 2006. — Vol. 32. — P. 838—849.
43. *Gatski T. B., Speziale C. G.* On explicit algebraic stress models for complex turbulent flows // *J. Fluid Mech.* — 1993. — Vol. 254. — P. 59—78.
44. *Вараксин А. Ю., Полежаев Ю. В., Поляков А. Ф.* Экспериментальное исследование влияния твердых частиц на турбулентное течение воздуха в трубе // *ТВТ.* — 1998. — Т. 36, № 5. — С. 767—775.
45. *Launder B. E., Spalding D. B.* The numerical computation of turbulent flows // *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* — 1974. — Vol. 3, № 1. — P. 269—289.
46. *Pope S. B.* *Turbulent Flows.* — [S. l.]: Cambridge Univ. Press, 2000.

Моделирование турбулентных течений по схеме «Кабаре» в двумерной и трехмерной несжимаемой жидкости

*В. М. Головизнин, В. Ю. Глотов, А. В. Данилин, И. А. Короткин,
С. А. Карабасов*

1. Введение

Большинство движений жидкостей, газов и плазмы, встречающихся в природе и технике, являются турбулентными. Однако, несмотря на интенсивное развитие вычислительной техники и достигнутые успехи в построении численных методов и разработке соответствующего математического обеспечения, численное моделирование турбулентности остается одной из наиболее сложных и важных проблем механики жидкостей и газов.

С теоретической точки зрения турбулентные течения представляют собой пример нелинейной механической открытой системы с большим числом степеней свободы. В процессе нелинейного растяжения вихрей происходит передача энергии от крупных вихрей к более мелким, рассеивающим кинетическую энергию в тепло [1]. Ричардсон впервые ввел представление о существовании в турбулентном потоке иерархии вихрей различного масштаба и о каскадном механизме передачи энергии между ними. Колмогоров дополнил это представление, отметив ослабление ориентирующего влияния среднего течения при каждом переходе к более мелким структурам, и сформулировал гипотезу о том, что статистический режим мелко-масштабной турбулентности является универсальным и определяется лишь двумя размерными параметрами — средней скоростью диссипации кинетической энергии и коэффициентом вязкости. В инерциальной области спектра, на которую вязкость влияния не оказывает, Колмогоров получил «закон пяти третей», неоднократно подтвержденный экспериментами и ставший классическим в теории турбулентности.

В работе Рейнольдса была предложена общая методология описания турбулентных течений (RANS) [2; 3—5], согласно которой мгновенные значения искомых функций представляются в виде суммы средней и пульсационной составляющих. Этот подход позволил разрешить поведение средних характеристик турбулентного потока, довольно медленно меняющихся во времени (по сравнению с пульсационной составляющей). Однако в большинстве случаев (например, при высокоскоростном турбулентном течении

сжимаемого газа) этот метод неприемлем. Более того, такой подход не позволяет получить решение той или иной задачи в рамках строгой математической постановки, поскольку уравнения, полученные Рейнольдсом, являются незамкнутыми. Проблема замыкания решается на основе введения полуэмпирических моделей турбулентности.

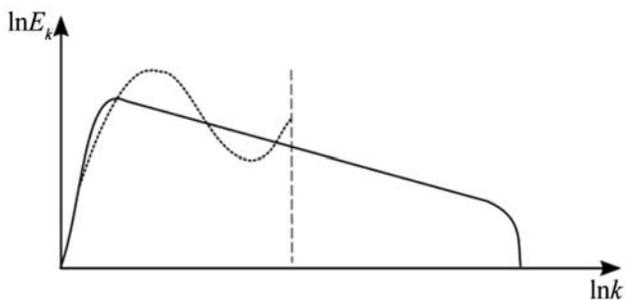
Для описания неустановившихся течений была предложена методика, основанная на пространственном осреднении уравнений Навье—Стокса (LES) [6—10]. В LES-моделях используется так называемое SGS-моделирование (subgrid-scale), т. е. «подсеточное», смысл которого заключается в том, чтобы в уравнениях оставить масштабы, превосходящие размеры расчетной сетки. Это уменьшает количество степеней свободы до разумной величины и позволяет использовать современную вычислительную технику для определения средних полей течения. Пульсации с «подсеточными» частотами при этом отфильтровываются с помощью того или иного фильтра. Под фильтром здесь подразумевается свертка уравнения Навье—Стокса с неким бесконечно гладким финитным ядром, обладающим определенным внутренним пространственным масштабом. Эта операция также приводит к незамкнутым уравнениям. В простейшей SGS-модели роль «подсеточных» масштабов выполняет искусственно введенный параметр — «вихревая» вязкость.

Таким образом, в LES-методах ошибки дискретизации разностной схемой и ошибки SGS-модели связаны друг с другом. Это значит, что усилия по совершенствованию вычислительных моделей турбулентности можно (может быть, даже с большим успехом) сосредоточить на разработке разностных схем для уравнений Навье—Стокса с улучшенными диссипативными и дисперсионными свойствами. Подходы, в которых SGS-модели и разностные схемы объединились в одно целое, получили название ILES-методов (т. е. неявных LES) [11—15]. Одним из способов построения ILES является использование нелинейных разностных схем, например, TVD-схем с «лимитером». Фильтрация «подсеточных» пульсаций осуществляется в них неявно при нелинейной коррекции, без введения полуэмпирических моделей. Дальнейшее развитие TVD-подхода привело к созданию популярных в настоящее время схем ENO, WENO, которые способны обеспечить достаточную монотонность решения при произвольном порядке точности в областях гладкости.

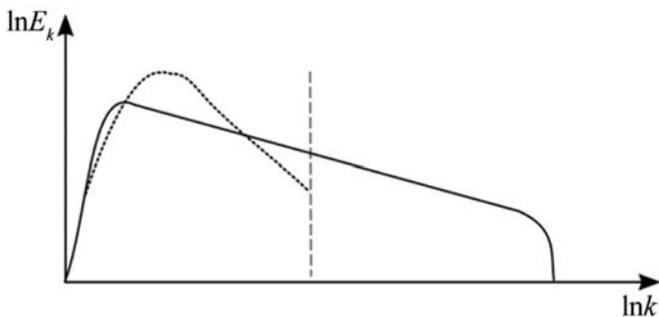
В методах ILES на первый план выходят проблемы оптимизации свойств разностных операторов, позволяющих правильно передавать энергетический каскад и согласовано вводить его на «подсеточный» уровень. Сейчас активно разрабатываются альтернативные идеи управления диссипативными потоками. Одна из таких идей реализована в схеме «Кабаре» [16—19]. В ней, как и в методах ILES, фильтрация «подсеточных» пульсаций происходит неявно, за счет прямого действия принципа максимума, при-

чем коррекции подвергаются только потоковые переменные. Результаты моделирования одномерной «бюргуленции» по схеме «Кабаре» [20] обладали уникальным свойством — на всех расчетных сетках наклоны энергетических спектров совпадали с теоретическими предсказаниями вплоть до самых высоких гармоник, соответствующих размерам ячеек. Это свойство, связанное с особенностями внутренней диссипации схемы «Кабаре», выгодно выделяет данный алгоритм из класса LES-методов и позволяет трактовать его как некое новое направление в SGS-моделировании — Perfect LES (PLES).

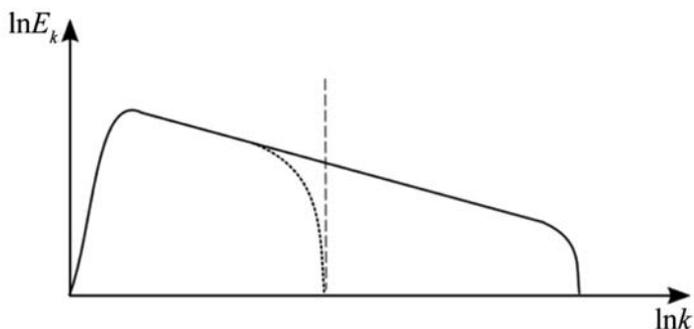
На рис. 1.1 представлена иллюстрация видов энергетических спектров, полученных при использовании различных численных методов типа LES. Пунктирной линией отмечено максимальное волновое число, соответствующее размерам расчетной сетки, которая при больших числах Рейнольдса не простирается до диссипативного предела.



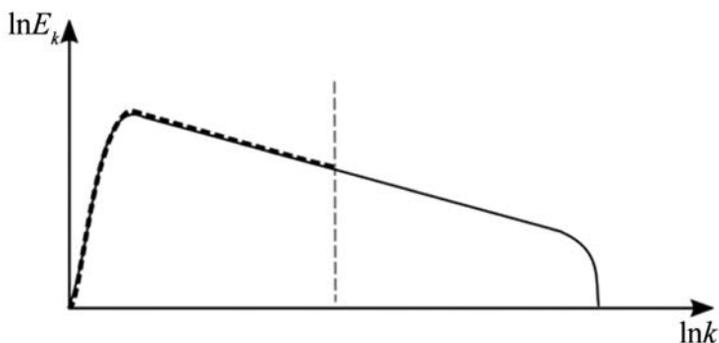
а



б



а



б

Рис. 1.1. Спектральная плотность кинетической энергии в затухающей однородной изотропной турбулентности, рассчитанная при помощи различных численных методов, в сравнении с теоретически предсказанной спектральной плотностью. k — модуль волнового вектора, E_k — спектральная плотность кинетической энергии (на интервале длин волновых векторов)

Энергетический спектр может вообще не иметь какого-либо наклона в инерционном интервале (рис. 1.1а), может иметь наклон, отличный от теоретического (рис. 1.1б), но чаще всего спектр загибается вниз в области больших волновых чисел (рис. 1.1в). От «идеального» LES-алгоритма следовало бы ждать спектральной характеристики, изображенной на рис. 1.1г.

В этом случае при измельчении расчетной сетки такой идеальный алгоритм приводил бы к поэтапному включению последующих пространствен-

ных масштабов турбулентности вплоть до колмогоровского в соответствии с рис. 1.2.

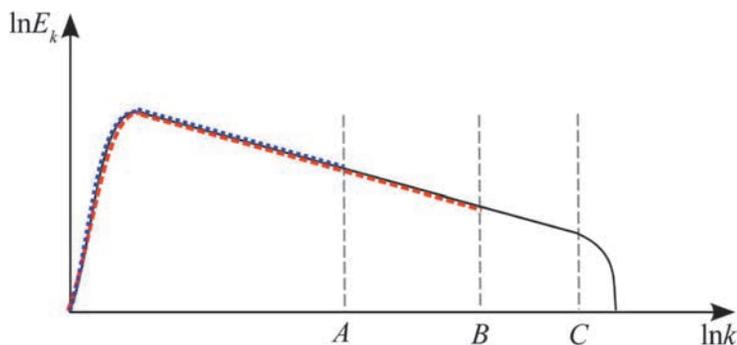


Рис. 1.2. Спектральная плотность кинетической энергии в затухающей однородной изотропной турбулентности, смоделированной при помощи «идеального» LES-алгоритма в сравнении с теоретически предсказанной спектральной плотностью

Данная работа является продолжением работы [20], в которой подробно описан алгоритм «Кабаре» в одномерном случае, и приводятся результаты решения тестовых задач в одномерном и двумерном случаях по данной схеме и классическим схемам «Крест», Аракавы, Годунова, Лакса—Вендроффа.

Результаты моделирования двумерных вихревых структур по схеме «Кабаре» свидетельствовали о высоком качестве получаемых решений на очень грубых расчетных сетках. Однако в задаче о затухании однородной изотропной двумерной турбулентности энергетические спектры имели наклон -4 , что заметно расходилось с общепризнанной теорией Бэтчелора (-3). В настоящей работе удалось преодолеть этот недостаток.

Причем задача ставилась сразу в трех типах переменных («скорость — давление», «завихренность — функция тока», «завихренность — скорость»), и во всех случаях был получен устойчивый результат -3 вне зависимости от мелкости разбиения сетки. Кроме этого, проведено обобщение методики «Кабаре» на трехмерный случай. На примерах тестовых задач были исследованы диссипативные и дисперсионные свойства алгоритма, проведен анализ ряда статистических характеристик развитой турбулентности в пространстве и времени.

2. Моделирование двумерных турбулентных течений по схеме «Кабаре»

Турбулентность — явление существенно трехмерное, и переход к плоской геометрии приводит к качественным изменениям свойств течений. До недавнего времени вопрос о существовании двумерной турбулентности оставался открытым. Первое экспериментальное подтверждение существования обратного каскада энергии (предложенного теоретически Крайчнаном [21]) было получено в работе Соммерия [22]. Идея эксперимента Соммерия получила развитие в серии работ Табелинга [23—25], посвященных исследованиям турбулентности в тонком слое электролита. Некоторые черты двумерной турбулентности имеют и многие крупномасштабные геофизические и астрофизические течения.

Пусть $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t)$ — образы в Фурье пространстве поля скорости $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. Определим *энергетический спектр (спектр кинетической энергии)* $E(k, t)$ так:

$$E(k, t) = \frac{1}{2} \int_{|\mathbf{k}|} \langle |\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t)|^2 \rangle d\mathbf{k}. \quad (2.1)$$

Угловые скобки означают в этом случае осреднение по ансамблю эквивалентных реализаций данного турбулентного течения в фиксированный момент времени t . Таким образом, энергетический спектр характеризует энергию всех гармоник с заданным модулем волнового вектора.

В отличие от классической теории Колмогорова (K41) [26] в двумерной турбулентности имеются две сохраняющиеся квадратичные величины — энергия и энтропия [27], переносимые от одних масштабов к другим, и процессы в турбулентности определяются *скоростью диссипации энергии* ε и *скоростью диссипации энтропии* ε_ω . При этом потоки энергии и энтропии направлены к противоположным концам энергетического спектра (прямой каскад энтропии и обратный энергии), что приводит к образованию крупномасштабных двумерных вихревых структур. Подробнее эффекты плоских турбулентных течений изложены в работах [28—33].

При сохранении в каскаде вихрей скорости диссипации энтропии размерностный анализ [27] приводит к спектральному распределению вида

$$E(k) \sim \varepsilon_\omega^{2/3} k^{-3}. \quad (2.2)$$

Помимо изучения спектральных свойств при статистическом исследовании турбулентности часто рассматривают *структурные функции*, характеризующие степень корреляции пульсаций скоростей в зависимости от масштаба в обычном физическом пространстве [27]:

$$S_q(l) = \left\langle \left| (\mathbf{v}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) - \mathbf{v}(\mathbf{r}), \mathbf{l} / l) \right|^q \right\rangle, \quad (2.3)$$

где усреднение проводится по всем точкам пространства \mathbf{r} и всем векторам с модулем l . Данные функции показывают зависимость величины пульсации скорости в различных точках пространства от расстояния между ними.

В двумерном случае наклоны структурных функций соответствуют закону, следующему их теории размерностей:

$$S_q(l) \sim \varepsilon_\omega^{q/3}, \quad (2.4)$$

где $S_q(l)$ — структурная функция порядка q ; ε_ω — скорость диссипации энтропии с единицы площади в единицу времени; l — расстояние между точками, в которых рассматривается пульсация скорости.

В данном разделе для моделирования двумерных вихревых течений в несжимаемой жидкости предложены три алгоритма на основе методики «Кабаре», использующих для описания движения наборы переменных «скорость — давление», «завихренность — скорость» и «завихренность — функция тока» [34]. Проведено исследование дисперсионных и диссипативных свойств этих алгоритмов на примере задачи об эволюции неподвижного и движущегося изолированного вихря в двумерной прямоугольной области с периодическими граничными условиями. Показано, что приведенные модификации схемы «Кабаре» обладают лучшими по сравнению с классической схемой Аракавы [35; 36] трансляционными свойствами. При помощи всех трех алгоритмов на сетках различной густоты проведено моделирование затухания однородной изотропной турбулентности. Рассмотрен вопрос о формировании в ней энергетического каскада. Исследованы статистические свойства турбулентности (энергетические спектры и структурные функции). Обнаружено хорошее соответствие полученных результатов теории Батчелора.

2.1. Уравнения движения

Переменные «скорость — давление»

Движение идеальной жидкости описывается уравнениями Эйлера и непрерывности:

$$\partial \mathbf{u} / \partial t + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p / \rho, \quad (2.5)$$

$$(\nabla \mathbf{u}) = 0, \quad (2.6)$$

где \mathbf{u} , ρ , p — скорость, плотность и давление жидкости соответственно.

Переменные «завихренность — скорость»

Взяв ротор от обеих частей уравнения Эйлера, получим трехмерное уравнение переноса завихренности ω

$$\partial\omega/\partial t + (\mathbf{u}\nabla)\omega = -(\omega\nabla)\mathbf{u}, \quad (2.7)$$

$$\omega = [\nabla\mathbf{u}]. \quad (2.8)$$

Возьмем ротор от обеих частей уравнения (2.7):

$$[\nabla\omega] = [\nabla[\nabla\mathbf{u}]], \quad (2.9)$$

$$[\nabla\omega] = \nabla(\nabla\mathbf{u}) - \Delta\mathbf{u}. \quad (2.10)$$

С учетом уравнения неразрывности (2.6) получим

$$\Delta\mathbf{u} = -[\nabla\omega]. \quad (2.11)$$

Учитывая, что для плоских течений $\mathbf{u} = (u, v, 0)$ и $\omega = (0, 0, \omega)$, получим систему уравнений движения двумерной несжимаемой жидкости в переменных «завихренность — скорость»:

$$\partial\omega/\partial t + u\partial\omega/\partial x + v\partial\omega/\partial y = 0, \quad (2.12)$$

$$\Delta u = -\partial\omega/\partial y, \quad \Delta v = \partial\omega/\partial x, \quad (2.13)$$

$$\omega = \partial v/\partial x - \partial u/\partial y. \quad (2.14)$$

Переменные «завихренность — функция тока»

Введем скалярную функцию ψ такую, что $u = \partial\psi/\partial y$, $v = -\partial\psi/\partial x$, называемую функцией тока, и, используя ранее описанное понятие завихренности ω , получим новую форму записи уравнений движения несжимаемой жидкости:

$$\partial\omega/\partial t + u\partial\omega/\partial x + v\partial\omega/\partial y = 0, \quad (2.15)$$

$$\Delta\psi = -\omega, \quad (2.16)$$

$$u = \partial\psi/\partial y, \quad v = -\partial\psi/\partial x. \quad (2.17)$$

2.2. Численный алгоритм

Аппроксимация проводится на равномерной ортогональной пространственной сетке с шагами h_x и h_y вдоль соответствующих координатных осей.

Характерной особенностью схемы «Кабаре» является использование так называемых консервативных и потоковых переменных. Под консервативными понимаются переменные, отвечающие за значение того или иного свойства течения в центрах расчетных ячеек. Под потоковыми понимаются переменные, относящиеся к центрам граней расчетных ячеек и отвечающие за перенос тех или иных свойств течения из одной ячейки в другую. Также используются переменные, отнесенные к узлам расчетной сетки.

Для обозначения точки, которой соответствует та или иная переменная, введены следующие обозначения: L, C, R, CR, RR — left, center, right, center right, right right и т. д. Индексы C, CR, CL, CT, CB используются для обозначения консервативных переменных в центральной, правой, левой, верхней и нижней ячейках соответственно. Индексы LL, L, R, RR, BB, B, T, TT используются для обозначения потоковых переменных на соответствующих гранях ячеек. Данная система обозначений наглядно изображена на рис. 2.1.

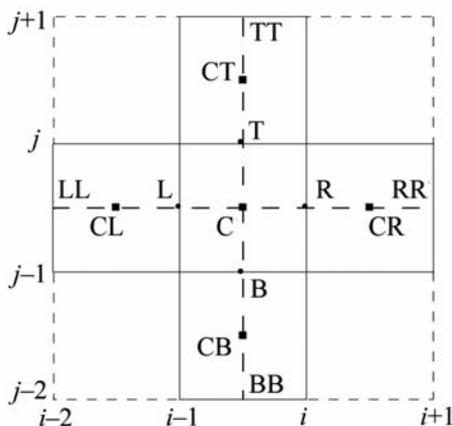


Рис. 2.1. Шаблон для двумерной схемы «Кабаре»

Схема «Кабаре» является двухслойной: n (первоначальный слой), $n+1$ (новый слой). Дополнительно используется вспомогательный $n+1/2$ слой. Каждый тип переменных, относящийся к тому или иному временному слою, обозначается соответствующим верхним индексом.

Начальные условия задаются в узлах расчетной сетки, после чего проводится их линейная интерполяция в центры расчетных ячеек и центры их граней.

Для каждого используемого комплекта переменных алгоритм вычислений разбит на несколько последовательных шагов. У всех алгоритмов есть как общие неотъемлемые элементы (вычисление консервативных переменных на полуцелом временном слое, расчет потоковых переменных на новом временном слое и их коррекция, вычисление консервативных переменных на новом временном слое, расчет шага по времени), так и частные, наличие которых обусловлено особенностями того или иного комплекта переменных. Далее подробно описан каждый исследованный вычислительный алгоритм.

Переменные «скорость — давление»

Шаг первый. Рассчитываем промежуточные (отмеченные тильдой) скорости без учета давления:

$$\begin{cases} \frac{\tilde{u}_C^{n+1/2} - u_C^n}{\tau/2} + \frac{(u_R^n)^2 - (u_L^n)^2}{h_x} + \frac{u_T^n v_T^n - u_B^n v_B^n}{h_y} = 0, \\ \frac{\tilde{v}_C^{n+1/2} - v_C^n}{\tau/2} + \frac{v_R^n u_R^n - v_L^n u_L^n}{h_x} + \frac{(v_T^n)^2 - (v_B^n)^2}{h_y} = 0. \end{cases} \quad (2.18)$$

Шаг второй. Находим давление на промежуточном временном слое и производим коррекцию консервативных скоростей:

$$\begin{cases} \frac{u_C^{n+1/2} - \tilde{u}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = -\nabla_x P^{n+1/2}, \\ \frac{v_C^{n+1/2} - \tilde{v}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = -\nabla_y P^{n+1/2}. \end{cases} \quad (2.19)$$

Систему (2.19) можно записать в векторной форме:

$$\mathbf{u}_C^{n+1/2} = \tilde{\mathbf{u}}_C^{n+1/2} - \frac{2}{\tau} \nabla_h P^{n+1/2}, \quad (2.20)$$

где $\mathbf{u}_C = (u_C, v_C)$, где оператор ∇_h обозначает разностный аналог градиента. Численно возьмем дивергенцию от обеих частей уравнения (2.20):

$$\operatorname{div}_h (\mathbf{u}_C^{n+1/2}) = \operatorname{div}_h (\tilde{\mathbf{u}}_C^{n+1/2}) - \frac{2}{\tau} \Delta_h P^{n+1/2} \quad (2.21)$$

и потребуем, чтобы левая часть полученного равенства была равна нулю, что соответствует соленоидальности поля консервативных скоростей. Получим уравнение Пуассона, решением которого будет значение давления на промежуточном временном слое:

$$\Delta_h P^{n+1/2} = \frac{\tau}{2} \operatorname{div}_h(\tilde{\mathbf{u}}_C^{n+1/2}). \quad (2.22)$$

Оператор Δ_h соответствует 9-точечной аппроксимации лапласиана. Из полученного поля давления, при помощи формул (2.19) найдем скорости на промежуточном временном слое.

Шаг третий. Вычисление и коррекция потоковых скоростей на новом временном слое. Нескорректированные потоковые скорости вычисляются по следующему алгоритму.

$$\tilde{u}_R^{n+1} = \begin{cases} 2u_C^{n+1/2} - u_L^n, & u_C^n > 0, u_{CR}^n > 0, \\ 2u_{CR}^{n+1/2} - u_{RR}^n, & u_C^n < 0, u_{CR}^n < 0, \\ 2u_C^{n+1/2} - u_L^{n+1/2}, & u_C^n < 0, u_{CR}^n > 0, \left| u_C^{n+1/2} - \frac{u_L^n}{2} \right| \geq \left| u_{CR}^{n+1/2} - \frac{u_{RR}^n}{2} \right|, \\ 2u_{CR}^{n+1/2} - u_{RR}^{n+1/2}, & u_C^n < 0, u_{CR}^n > 0, \left| u_C^{n+1/2} - \frac{u_L^n}{2} \right| < \left| u_{CR}^{n+1/2} - \frac{u_{RR}^n}{2} \right|, \\ 0, & u_C^n < 0, u_{CR}^n > 0, \end{cases} \quad (2.23)$$

$$\tilde{v}_R^{n+1} = \begin{cases} 2v_C^{n+1/2} - v_L^n, & u_C^n > 0, u_{CR}^n > 0, \\ 2v_{CR}^{n+1/2} - v_{RR}^n, & u_C^n < 0, u_{CR}^n < 0, \\ 2v_C^{n+1/2} - v_L^{n+1/2}, & u_C^n < 0, u_{CR}^n > 0, \left| u_C^{n+1/2} - \frac{u_L^n}{2} \right| \geq \left| v_{CR}^{n+1/2} - \frac{v_{RR}^n}{2} \right|, \\ 2v_{CR}^{n+1/2} - v_{RR}^{n+1/2}, & u_C^n < 0, u_{CR}^n > 0, \left| u_C^{n+1/2} - \frac{u_L^n}{2} \right| < \left| v_{CR}^{n+1/2} - \frac{v_{RR}^n}{2} \right|, \\ \tilde{v}_R^n, & u_C^n < 0, u_{CR}^n > 0. \end{cases} \quad (2.24)$$

Согласно принципу максимума минимумы и максимумы потоковой скорости в пределах одной вычислительной ячейки можно оценить следующим образом.

Если $u_{CR}^n < 0$, то для правой ячейки

$$\begin{aligned} [\max(u)]_R &= \max(u_R^n, u_{CR}^n, u_{RR}^n) + \tau Q_R, \\ [\min(u)]_R &= \min(u_R^n, u_{CR}^n, u_{RR}^n) + \tau Q_R, \\ Q_R &= \frac{u_{CR}^{n+1/2} - u_{CR}^n}{\tau/2} + \frac{u_{CR}^n (u_{RR}^n - u_R^n)}{h_x}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Аналогично, если $u_C^n > 0$, то для левой ячейки

$$\begin{aligned} [\max(u)]_L &= \max(u_L^n, u_C^n, u_R^n) + \tau Q_L, \\ [\min(u)]_L &= \min(u_L^n, u_C^n, u_R^n) + \tau Q_L, \\ Q_L &= \frac{u_C^{n+1/2} - u_C^n}{\tau/2} + \frac{u_C^n (u_R^n - u_L^n)}{h_x}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Для управления коррекцией потоков в схеме «Кабаре» введем скалярный безразмерный параметр ξ :

$$\begin{aligned} [\max(u)]_{\xi R} &= [\max(u)]_R + \xi ([\max(u)]_R - [\min(u)]_R), \\ [\min(u)]_{\xi R} &= [\min(u)]_R - \xi ([\max(u)]_R - [\min(u)]_R), \\ [\max(u)]_{\xi L} &= [\max(u)]_L + \xi ([\max(u)]_L - [\min(u)]_L), \\ [\min(u)]_{\xi L} &= [\min(u)]_L - \xi ([\max(u)]_L - [\min(u)]_L). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Рекомендуется введение параметра со значениями порядка $\xi \sim 0,1$. Большие по модулю ($\xi \sim 1, \xi > 0$) положительные значения будут уменьшать эффект коррекции за счет расширения границы зоны коррекции, что в некоторых случаях может привести к развитию численной неустойчивости. Большие по модулю отрицательные значения параметра ($\xi \sim 1, \xi < 0$) будут приводить к неоправданной диссипации энтропии за счет сужения зоны коррекции.

Коррекция потоковых скоростей при $u_{CR}^n < 0$ производится так:

$$u_R^{n+1} = \begin{cases} \tilde{u}_R^{n+1}, [\min(u)]_{\xi R} < \tilde{u}_R^{n+1} < [\max(u)]_{\xi R}, \\ [\min(u)]_{\xi R}, \tilde{u}_R^{n+1} < [\min(u)]_{\xi R}, \\ [\max(u)]_{\xi R}, [\max(u)]_{\xi R} < \tilde{u}_R^{n+1}. \end{cases} \quad (2.28)$$

Аналогично при $u_{CR}^n > 0$

$$u_R^{n+1} = \begin{cases} \tilde{u}_R^{n+1}, [\min(u)]_{\xi_L} < \tilde{u}_R^{n+1} < [\max(u)]_{\xi_L}, \\ [\min(u)]_{\xi_L}, \tilde{u}_R^{n+1} < [\min(u)]_{\xi_L}, \\ [\max(u)]_{\xi_L}, [\max(u)]_{\xi_L} < \tilde{u}_R^{n+1}. \end{cases} \quad (2.29)$$

Шаг четвертый. Получение соленоидального (в дискретном смысле) поля скоростей из нескорректированных скоростей, полученных на предыдущем шаге численного алгоритма, т. е. происходит преобразование $\mathbf{u}_h \rightarrow \mathbf{u}_h^*$, где знаком «*» обозначены соленоидальные скорости.

Поскольку любое дивергентное поле определяется с точностью до сеточного ротора, то в качестве дополнительного требования обычно налагают условие минимальности квадратичного отклонения скорректированного поля от исходного. Такая постановка приводит к задаче поиска условного минимума функционала

$$\Phi(\mathbf{u}_h^*, \lambda) = \sum_{k \in \Omega} (\mathbf{u}_h^* - \mathbf{u}_h)_k^2 g_k + \sum_{m \in \Omega^*} \lambda_m \left\{ \text{div}_h(\mathbf{u}_h^*) \right\}_m \Delta S_m, \quad (2.30)$$

где λ_m — множители Лагранжа; Ω^* — множество всех узлов сетки и всех центров расчетных ячеек; $g_k > 0$ и $\Delta S_m > 0$ — так называемые геометрические факторы. Необходимое условие минимума приводит к следующему уравнению:

$$\mathbf{u}_{(k)}^* = \mathbf{u}_{(k)} - \{\nabla \lambda\}_{(k)}. \quad (2.31)$$

Поддействовав оператором div_h на обе части уравнения (2.31) и потребовав, чтобы $\text{div}_h(\mathbf{u}_h^*) = 0$, получим

$$\Delta_h \lambda = \text{div}_h(\mathbf{u}_{(k)}). \quad (2.32)$$

Множители Лагранжа описывают силы реакции системы на нарушение условия несжимаемости. В данном случае оператор Δ_h является 5-точечной аппроксимацией лапласиана. Разрешив уравнение (2.32) относительно множителей Лагранжа, находим дивергентное поле потоковых скоростей по формуле (2.31). Описанная процедура называется соленоидацией поля скоростей.

Шаг пятый. Нахождение поля консервативных скоростей на новом слое по времени:

$$\begin{cases}
 \left[\frac{u_C^{n+1} - u_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \left[\frac{(u_R^{n+1})^2 - (u_L^{n+1})^2}{h_x} + \frac{(u_T^{n+1} v_T^{n+1} - u_B^{n+1} v_B^{n+1})}{h_y} \right] \right] + \\
 + \frac{1}{2} \left[\frac{(u_R^n)^2 - (u_L^n)^2}{h_x} + \frac{(u_T^n v_T^n - u_B^n v_B^n)}{h_y} \right] = -\nabla_x P^{n+1/2}, \\
 \left[\frac{v_C^{n+1} - v_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \left[\frac{(v_R^{n+1} u_R^{n+1} - v_L^{n+1} u_L^{n+1})}{h_x} + \frac{((v_T^{n+1})^2 - (v_B^{n+1})^2)}{h_y} \right] \right] + \\
 + \frac{1}{2} \left[\frac{(v_R^n u_R^n - v_L^n u_L^n)}{h_x} + \frac{((v_T^n)^2 - (v_B^n)^2)}{h_y} \right] = -\nabla_y P^{n+1/2}.
 \end{cases} \quad (2.33)$$

В завершение алгоритма найдем шаг по времени на новом временном слое из условия Куранта — Фридриха — Леви:

$$\tau^{n+1} = \min \left(\frac{\text{CFL} \cdot h_x}{\max_{u_i \in G} (|u^{n+1}|)}, \frac{\text{CFL} \cdot h_y}{\max_{v_i \in G} (|v^{n+1}|)} \right), \quad (2.34)$$

где G — расчетная область.

Переменные «завихренность — скорость»

Данный алгоритм отличается от описанного выше отсутствием процедуры соленидации поля скоростей, вместо которой производится численное решение уравнений Пуассона (2.13), также дающее на выходе соленидальное поле скоростей.

Шаг первый. Расчет консервативных завихренностей на промежуточном временном слое по явной разностной схеме второго порядка аппроксимации по пространству и первого порядка по времени:

$$\frac{\omega_C^{n+1/2} - \omega_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n \omega_R^n - u_L^n \omega_L^n}{h_x} + \frac{v_T^n \omega_T^n - v_B^n \omega_B^n}{h_y} = 0. \quad (2.35)$$

Шаг второй. Нахождение узловых скоростей на слое $n+1/2$, получаемых при численном решении уравнений Пуассона (2.13). Для дискретизации оператора Лапласа применяется девятиточечный шаблон, представленный на рис. 2.2:

$$\partial^2 u / \partial x^2 = \left[\begin{array}{l} (u_3 - 2u_4 + u_5) + 2(u_2 - 2u_0 + u_6) + \\ + (u_1 - 2u_7 + u_8) \end{array} \right]^{n+1/2} / (4h_x^2), \quad (2.36)$$

$$\partial^2 u / \partial y^2 = \left[\begin{array}{l} (u_3 - 2u_2 + u_1) + 2(u_4 - 2u_0 + u_8) + \\ + (u_5 - 2u_6 + u_7) \end{array} \right]^{n+1/2} / (4h_y^2), \quad (2.37)$$

$$\Delta u = \partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2. \quad (2.38)$$

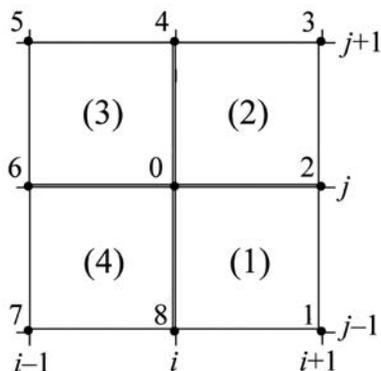


Рис. 2.2. Шаблон для решения двумерного уравнения Пуассона

Для дискретизации правых частей уравнений (2.9) используются консервативные завихренности, полученные на первом шаге алгоритма:

$$\partial \omega / \partial y = (\omega_{(2)}^{n+1/2} - \omega_{(1)}^{n+1/2} + \omega_{(3)}^{n+1/2} - \omega_{(4)}^{n+1/2}) / (2h_y), \quad (2.39)$$

$$\partial \omega / \partial x = (\omega_{(2)}^{n+1/2} - \omega_{(3)}^{n+1/2} + \omega_{(1)}^{n+1/2} - \omega_{(4)}^{n+1/2}) / (2h_x). \quad (2.40)$$

Для решения полученных дискретных аналогов уравнений (2.13) применяется быстрое преобразование Фурье.

Шаг третий. Вычисление и коррекция потоковых завихренностей на новом временном слое в соответствии с принципом максимума. Вычисление завихренностей производим по следующему алгоритму:

$$\tilde{\omega}_R^{n+1} = \begin{cases} 2\omega_C^{n+1/2} - \omega_L^n, & u_L^n + u_R^n > 0, & u_R^n + u_{RR}^n > 0, \\ 2\omega_{CR}^{n+1/2} - \omega_{RR}^n, & u_L^n + u_R^n < 0, & u_R^n + u_{RR}^n < 0, \\ \omega_C^{n+1/2} - \omega_L^n/2 + \omega_{CR}^{n+1/2} - \omega_{RR}^n/2, & u_L^n + u_R^n > 0, & u_R^n + u_{RR}^n < 0, \\ 0, & u_L^n + u_R^n < 0, & u_R^n + u_{RR}^n > 0. \end{cases} \quad (2.41)$$

За вычислением потоковых завихренностей следует их коррекция в соответствии с принципом максимума [3]. Алгоритм коррекции изложен далее. Минимумы и максимумы завихренности в точке R (рис. 2.1) можно оценить следующим образом:

если $u_R^n + u_L^n < 0$, $u_R^n + u_{RR}^n < 0$, то

$$\begin{aligned} [\max(\omega)]_R &= \max(\omega_R^n, \omega_{CR}^n, \omega_{RR}^n) + \tau Q_R, \\ [\min(\omega)]_R &= \min(\omega_R^n, \omega_{CR}^n, \omega_{RR}^n) + \tau Q_R, \\ Q_R &= \frac{\omega_{CR}^{n+1/2} - \omega_{CR}^n}{\tau/2} + \frac{(u_{RR}^n + u_R^n)(\omega_{RR}^n - \omega_R^n)}{2h_x}; \end{aligned} \quad (2.42)$$

если $u_R^n + u_L^n > 0$, $u_R^n + u_{RR}^n > 0$, то

$$\begin{aligned} [\max(\omega)]_R &= \max(\omega_L^n, \omega_C^n, \omega_R^n) + \tau Q_L, \\ [\min(\omega)]_R &= \min(\omega_L^n, \omega_C^n, \omega_R^n) + \tau Q_L, \\ Q_L &= \frac{\omega_C^{n+1/2} - \omega_C^n}{\tau/2} + \frac{(u_R^n + u_L^n)(\omega_R^n - \omega_L^n)}{2h_x}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

В оригинальный алгоритм коррекции вводится настроечный параметр $\xi > 0$, определяющий ширину зоны коррекции потоковых завихренностей. Этот параметр позволяет регулировать диссипативные и дисперсионные свойства схемы «Кабаре». Изменение максимальных и минимальных значений потоковых завихренностей на новом временном слое осуществляется следующим образом:

$$\begin{cases} [\max(u)]_{\xi R} = [\max(u)]_R + \xi \cdot ([\max(u)]_R - [\min(u)]_R), \\ [\min(u)]_{\xi R} = [\min(u)]_R - \xi \cdot ([\max(u)]_R - [\min(u)]_R). \end{cases} \quad (2.44)$$

Коррекция потоковых завихренностей при $u_R^n + u_L^n < 0$, $u_R^n + u_{RR}^n < 0$:

$$\omega_R^{n+1} = \begin{cases} \tilde{\omega}_R^{n+1}, [\min(\omega)]_{\xi_R} < \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\max(\omega)]_{\xi_R}, \\ [\min(\omega)]_{\xi_R}, \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\min(\omega)]_{\xi_R}, \\ [\max(\omega)]_{\xi_R}, [\max(\omega)]_{\xi_R} < \tilde{\omega}_R^{n+1}. \end{cases} \quad (2.45)$$

Если $u_R^n + u_L^n > 0$, $u_R^n + u_{RR}^n > 0$, то

$$\omega_R^{n+1} = \begin{cases} \tilde{\omega}_R^{n+1}, [\min(\omega)]_{\xi_R} < \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\max(\omega)]_{\xi_R}, \\ [\min(\omega)]_{\xi_R}, \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\min(\omega)]_{\xi_L}, \\ [\max(\omega)]_{\xi_R}, [\max(\omega)]_{\xi_L} < \tilde{\omega}_R^{n+1}. \end{cases} \quad (2.46)$$

Коррекция потоковых завихренностей в точках L, T, B (рис. 2.1) производится аналогичным способом.

Шаг четвертый. Вычисление консервативных переменных на новом временном слое, производимое по следующей схеме:

$$\frac{\omega_C^{n+1} - \omega_C^n}{\tau} + \frac{\overline{u_R \omega_R} - \overline{u_L \omega_L}}{h_x} + \frac{\overline{v_T \omega_T} - \overline{v_B \omega_B}}{h_y} = 0, \quad (2.47)$$

где $\overline{u_f} = u_f^{n+1/2}$; $\overline{v_f} = v_f^{n+1/2}$; $\overline{\omega_f} = \frac{\omega_f^n + \omega_f^{n+1}}{2}$.

В завершение алгоритма по формуле (2.34) рассчитываем шаг по времени на будущем временном слое.

Переменные «завихренность — функция тока»

Данный алгоритм в отличие от предыдущего требует численного решения всего одного уравнения Пуассона за один шаг по времени, что обусловлено особенностями переменных «завихренность — функция тока».

Шаг первый. По явной разностной схеме, имеющей первый порядок аппроксимации по времени и второй порядок по пространству, вычисляются консервативные переменные на $n + 1/2$ временном слое:

$$\frac{\omega_C^{n+1/2} - \omega_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n \omega_R^n - u_L^n \omega_L^n}{h_x} + \frac{v_T^n \omega_T^n - v_B^n \omega_B^n}{h_y} = 0. \quad (2.48)$$

На рис. 2.1 изображен шаблон схемы «Кабаре» для первого и четвертого шагов алгоритма; жирными точками отмечены центры ячеек и граней и показаны их обозначения.

Шаг второй. Находятся потоковые переменные на новом временном слое последовательно для вертикальных и горизонтальных граней. Опишем алгоритм для вертикальных граней (для горизонтальных граней процедура выполняется аналогично). Новые значения потоковых завихренностей найдем с помощью линейной экстраполяции, направление которой будет определяться скоростями на гранях L, R, RR:

$$\tilde{\omega}_R^{n+1} = \begin{cases} 2\omega_C^{n+1/2} - \omega_L^n, u_R^n \geq 0, \\ 2\omega_{CR}^{n+1/2} - \omega_{RR}^n, u_R^n < 0. \end{cases} \quad (2.49)$$

Далее следует процедура нелинейной коррекции потоков, основанная на принципе максимума.

Минимумы и максимумы завихренностей можно оценить следующим образом. Если $u_R^n < 0$, то для правой ячейки

$$\begin{aligned} [\max(\omega)]_R &= \max(\omega_R^n, \omega_{CR}^n, \omega_{RR}^n) + \tau Q_R, \\ [\min(\omega)]_R &= \min(\omega_R^n, \omega_{CR}^n, \omega_{RR}^n) + \tau Q_R, \\ Q_R &= \frac{\omega_{CR}^{n+1/2} - \omega_{CR}^n}{\tau/2} + \frac{(u_R^n + u_{RR}^n)(\omega_{RR}^n - \omega_R^n)}{2h_x}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Аналогично, если $u_R^n \geq 0$, то для левой ячейки

$$\begin{aligned} [\max(\omega)]_L &= \max(\omega_L^n, \omega_C^n, \omega_R^n) + \tau Q_L, \\ [\min(\omega)]_L &= \min(\omega_L^n, \omega_C^n, \omega_R^n) + \tau Q_L, \\ Q_L &= \frac{\omega_C^{n+1/2} - \omega_C^n}{\tau/2} + \frac{(u_L^n + u_R^n)(\omega_R^n - \omega_L^n)}{2h_x}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Здесь дополнительное слагаемое Q_R (Q_L) характеризует изменение завихренности в соответствующей ячейке за счет «сноса» в перпендикулярном направлении (вдоль оси y) и диффузионного «расплывания» за время τ .

Коррекция потоковых величин при $u_R^n < 0$ производится так:

$$\omega_R^{n+1} = \begin{cases} \tilde{\omega}_R^{n+1}, [\min(\omega)]_{\xi R} < \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\max(\omega)]_{\xi R}, \\ [\min(\omega)]_{\xi R}, \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\min(\omega)]_{\xi R}, \\ [\max(\omega)]_{\xi R}, [\max(\omega)]_{\xi R} < \tilde{\omega}_R^{n+1}. \end{cases} \quad (2.52)$$

Аналогично при $u_R^n \geq 0$

$$\omega_R^{n+1} = \begin{cases} \tilde{\omega}_R^{n+1}, [\min(\omega)]_{\xi_L} < \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\max(\omega)]_{\xi_L}, \\ [\min(\omega)]_{\xi_L}, \tilde{\omega}_R^{n+1} < [\min(\omega)]_{\xi_L}, \\ [\max(\omega)]_{\xi_L}, [\max(\omega)]_{\xi_L} < \tilde{\omega}_R^{n+1}. \end{cases} \quad (2.53)$$

Шаг третий. Рассчитываются потоковые скорости на новом слое по времени. Для этого нужно решить уравнение Пуассона с уже известной правой частью относительно неизвестной функции тока.

Будем маркировать индексами 02, 04, 06, 08 потоковые переменные на новом временном слое, заданные в центрах граней расчетных ячеек (см. рис. 2.2). Завихренность в узле 0 будем аппроксимировать так:

$$\omega_0 = \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right)_0 = \frac{v_{02} - v_{06}}{h_x} - \frac{u_{04} - u_{08}}{h_y}. \quad (2.54)$$

Для скоростей на вертикальных гранях (например, для грани 08) можно записать:

$$u_{08} = \frac{\Psi_0 - \Psi_8}{h_y}. \quad (2.55)$$

Аналогично для горизонтальных граней (например, для грани 02):

$$v_{02} = -\frac{\Psi_2 - \Psi_0}{h_x}. \quad (2.56)$$

Завихренность в узле 0 находим по значениям потоковых завихренностей в прилегающих ячейках:

$$\omega_0 = \frac{\{\omega_{02} + \omega_{04} + \omega_{06} + \omega_{08}\}^{n+1}}{4}. \quad (2.57)$$

Подставляя (2.55), (2.56) и (2.57) в (2.54), получаем пятиточечную аппроксимацию лапласиана:

$$\left(\frac{\Psi_2 - 2\Psi_0 + \Psi_6}{h_x^2} + \frac{\Psi_4 - 2\Psi_0 + \Psi_8}{h_y^2} \right) = -\frac{\{\omega_{02} + \omega_{04} + \omega_{06} + \omega_{08}\}^{n+1}}{4}. \quad (2.58)$$

Далее по найденным значениям функции тока ψ согласно формулам (2.55) и (2.56) рассчитаем поле скоростей на новом временном слое.

Шаг четвертый. Находятся значения консервативных завихренностей на новом временном слое. Для этого воспользуемся явной консервативной разностной схемой, обладающей вторым порядком аппроксимации по пространству и по времени:

$$\frac{\omega_C^{n+1} - \omega_C^n}{\tau} + \frac{\bar{u}_R \bar{\omega}_R - \bar{u}_L \bar{\omega}_L}{h_x} + \frac{\bar{v}_T \bar{\omega}_T - \bar{v}_B \bar{\omega}_B}{h_y} = 0, \quad (2.59)$$

где $\bar{u} = (u^{n+1} + u^n) / 2$, $\bar{\omega} = (\omega^{n+1} + \omega^n) / 2$.

Новый шаг по времени, как и в предыдущих случаях, рассчитывается по формуле (2.34).

2.3. Примеры расчетов

Задача о неподвижном изолированном вихре

Свойства предложенных численных алгоритмов хорошо иллюстрируются на задаче об одиночном (изолированном) вихре [35]. Зададим скорость движения жидкости в полярной системе координат с центром в точке $(x_0, y_0) = (\pi, \pi)$:

$$\begin{cases} u_r(r, \varphi) = \alpha f(r_\sigma) \exp[\beta(1 - r_\sigma^2)], & r_\sigma = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} / \sigma, \\ u_\varphi(r, \varphi) = 0, \end{cases} \quad (2.60)$$

где $f(r_\sigma) = r_\sigma$. Полученные скорости проецируются на прямоугольную систему координат. По проекциям скоростей, в свою очередь, в расчетной области строится поле завихренности. Вихрь представляет собой центрально-симметричную структуру, амплитуда которой определяется параметром α , а форма — параметрами β и σ .

Параметры $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,3$, $\sigma = 0,5$ выбраны по следующим соображениям. Во-первых, для достаточного разрешения по пространству вихрь должен занимать значительное количество ячеек расчетной сетки, во-вторых, для исключения взаимодействия вихря с границей расчетной области завихренность и скорость должны стремиться на ней к нулю.

Введем величину, характеризующую среднюю частоту вращения жидкости в вихре:

$$\bar{v} = 1/\pi \int_0^\pi v(r) dr, \quad (2.61)$$

где $v(r) = u_\tau(r, \varphi)/r$ — линейная частота вращения слоев жидкости в зависимости от их расстояния до центра вихря.

Эффективным периодом обращения вихря будем называть величину

$$T_0 = \bar{v}^{-1}. \quad (2.62)$$

При заданных параметрах вихревого течения $T_0 \approx 5,6$.

В непрерывной постановке задачи вихрь будет оставаться неподвижным и сохранять свою форму во времени. При этом сохраняются интегральные характеристики, такие как полная кинетическая энергия и энтропия. При численном расчете эволюции вихря сохранение данных свойств (консервативности по энергии и энтропии, неизменности формы вихря) позволяет судить о качестве используемого алгоритма решения.

Решение проводится в прямоугольной области $G = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$, на которой введена равномерная ортогональная пространственная сетка с количеством ячеек $N_x = N_y = 32$. Шаг сетки вдоль соответствующих координатных осей равен $h_x = 2\pi/N_x$, $h_y = 2\pi/N_y$. Граничные условия периодические. Число Куранта $CFL = 0,3$. Характерный радиус вихря составляет 10 ячеек расчетной сетки. В данной работе приведены результаты численного эксперимента, в котором использовалось обобщение схемы «Кабаре» на случай переменных «скорость — завихренность», результаты моделирования в случае использования других комплектов переменных («скорость — давление», «завихренность — функция тока») полностью аналогичны нижеприведенным. Результаты расчета по схеме «Кабаре» сравниваются с аналогичными, полученными при помощи схемы Аракавы.

Из рис. 2.3 и 2.4 видно, что при использовании обеих схем вихрь практически не изменяет форму вплоть до времени $T = 4400$, что соответствует более чем 750 его оборотам вокруг своей оси. В этот момент отклонение кинетической энергии и энтропии от первоначального значения для исследуемых схем составляет величину, не превышающую 0,1% и 2% соответственно.

После времени $T = 4400$ расчет по схеме Аракавы теряет устойчивость и расходится, вид течения на момент распада вихря представлен на рис. 2.3г, соответствующая зависимость интегральных параметров течения от времени представлена на рис. 2.4. Расчет, проведенный по схеме «Кабаре», сохраняет устойчивость к моменту времени $T = 10\,000$, что соответствует более чем 1750 оборотам вихря вокруг своей оси. К этому времени падение кинетической энергии составляет менее 0,4%, падение энтропии — менее 4%. При этом форма вихря слабо отличается от первоначальной, что показано на рис. 2.3а и 2.3б. При использовании схемы

«Кабаре» достоверно показано, что решение устойчиво вплоть до времени $T = 100\,000$. Ожидается устойчивость решения и на больших временах.

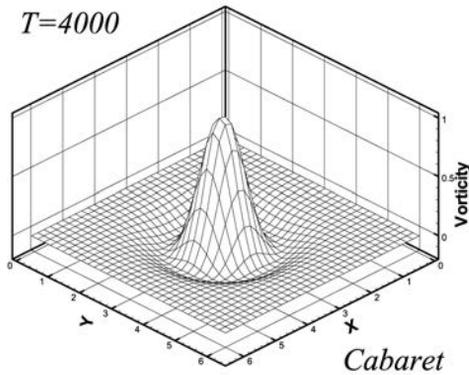


Рис. 2.3а. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Эволюция вихря на момент времени $T = 4000$. Сетка «Кабаре». Сетка 32×32 . CFL = 0,3

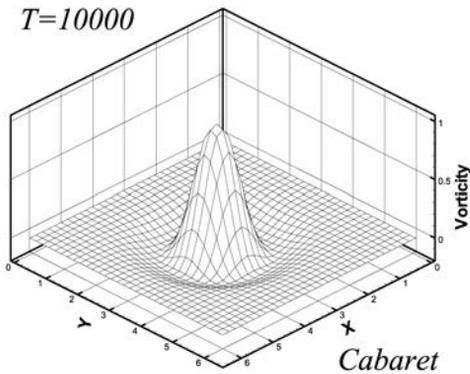


Рис. 2.3б. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Эволюция вихря на момент времени $T = 10\,000$. Сетка «Кабаре». Сетка 32×32 . CFL = 0,3

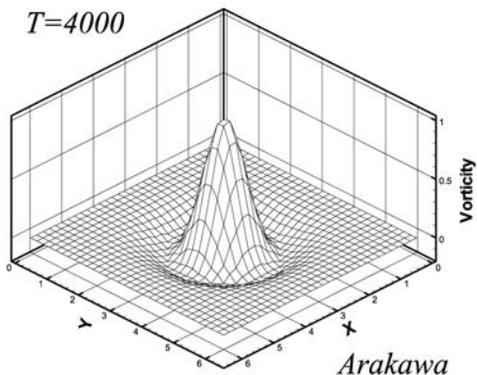


Рис. 2.3в. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Эволюция вихря на момент времени $T = 4000$. Схема Аракавы. Сетка 32×32 . CFL = 0,3

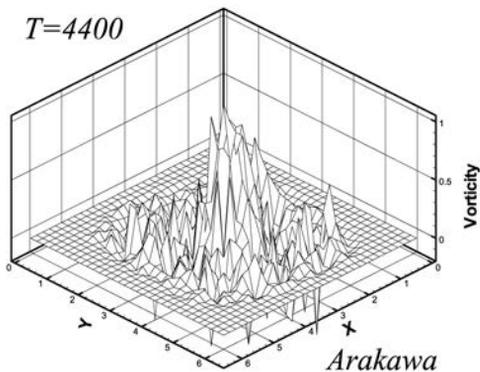


Рис. 2.3г. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Эволюция вихря на момент времени $T = 4400$. Схема Аракавы. Сетка 32×32 .
Решение расходится

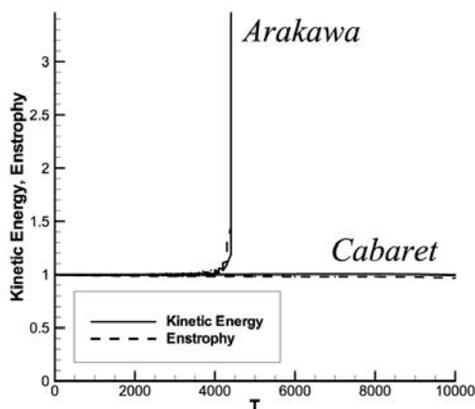


Рис. 2.4. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Зависимость интегральных параметров течения от времени. В расчете по схеме Аракавы интегралы движения уходят на бесконечность, схема «Кабаре» сохраняет устойчивость. Сетка 32×32 . $CFL = 0,3$. $\xi = 0$

Задача о движущемся изолированном вихре

В данной задаче изолированный вихрь (2.58) переносится вдоль оси Oy со скоростью $\pi/3$. За время расчета $T = 96$ вихрь совершает 16 проходов вдоль расчетной области, более 15 раз обращаясь вокруг своей оси. Решение проводится в прямоугольной области $G = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$, на которой введена равномерная ортогональная пространственная сетка с количеством ячеек $N_x \cdot N_y$, где $N_x = N_y = 64$. Шаг сетки вдоль соответствующих координатных осей равен $h_x = 2\pi / N_x$, $h_y = 2\pi / N_y$. Граничные условия периодические. Число Куранта $CFL = 0,3$. Характерный радиус вихря составляет 20 диагоналей ячеек расчетной сетки. В силу идентичности результатов, полученных для разных комплектов переменных, далее приведены расчеты только для комплекта «скорость — завихренность». Результаты расчета по схеме «Кабаре» сравниваются с полученными при помощи схемы Аракавы.

Подвижный вихрь, рассчитанный по схеме «Кабаре», сохраняет самоподобную форму в течение всего расчета, в решении отсутствует паразитная рябь (рис. 2.5).

Схема Аракавы обеспечивается сохранение энергии и энстрофии с точностью 0,1% вплоть до времени $T = 96$, после чего решение расходится (рис. 2.6). Вихрь теряет форму и распадается за несколько проходов через расчетную область.

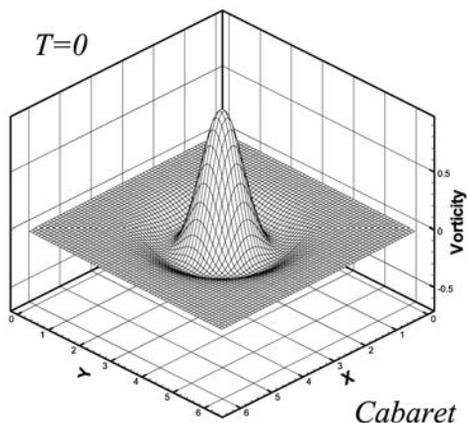


Рис. 2.5а. Моделирование движущегося одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 0$. Схема «Кабаре». Сетка 64×64 . CFL = 0,3

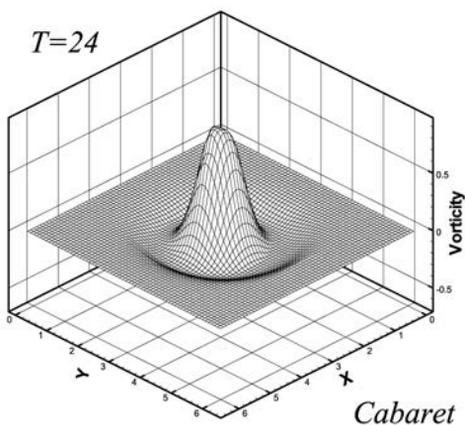


Рис. 2.5б. Моделирование движущегося одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 24$. Схема «Кабаре». Сетка 64×64 . CFL = 0,3

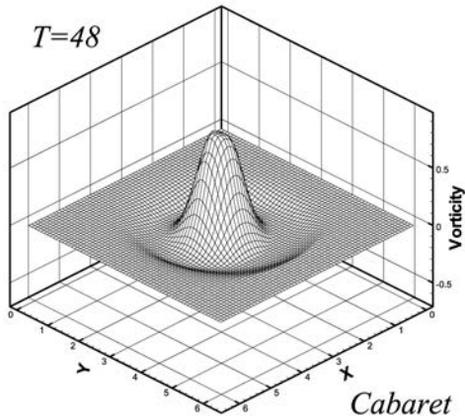


Рис. 2.5в. Моделирование движущегося одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 48$. Схема «Кабаре». Сетка 64×64 . $CFL = 0,3$

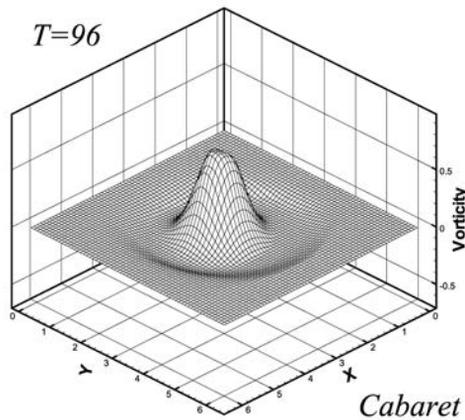


Рис. 2.5г. Моделирование движущегося одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 96$. Схема «Кабаре». Сетка 64×64 . $CFL = 0,3$

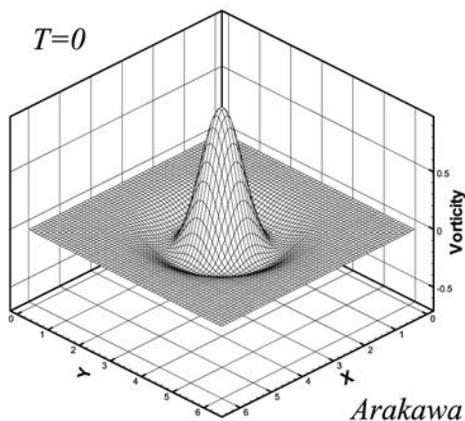


Рис. 2.6а. Моделирование подвижного одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 0$. Схема Аракавы. Сетка 64×64 . $CFL = 0,3$

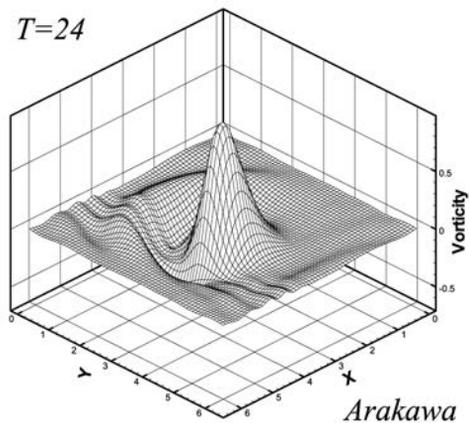


Рис. 2.6б. Моделирование подвижного одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 24$. Схема Аракавы. Сетка 64×64 . $CFL = 0,3$

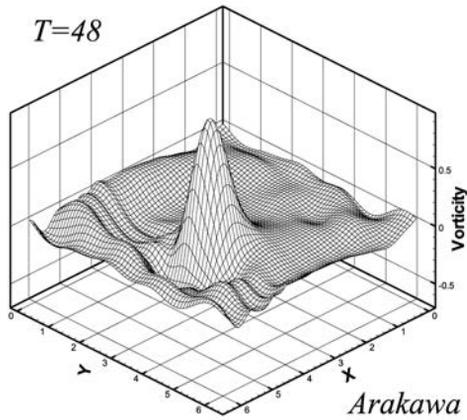


Рис. 2.6в. Моделирование подвижного одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 48$. Схема Аракавы. Сетка 64×64 . CFL = 0,3

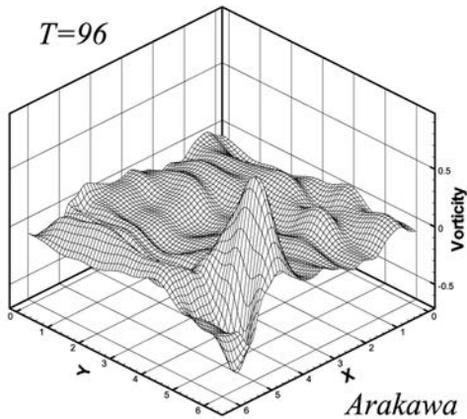


Рис. 2.6г. Моделирование подвижного одиночного вихря. Движение происходит вдоль положительного направления оси Oy . Завихренность в момент времени $T = 96$. Схема Аракавы. Сетка 64×64 . CFL = 0,3

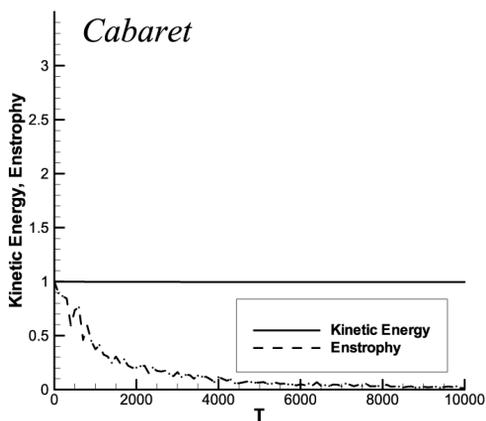


Рис. 2.7а. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Зависимость интегральных параметров течения от времени. Схема «Кабаре». $\xi = 0,00$.

Сетка 64×64 . CFL = 0,3

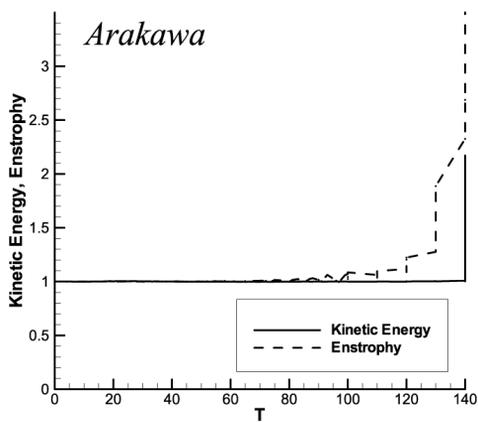


Рис. 2.7б. Моделирование неподвижного одиночного вихря. Зависимость интегральных параметров течения от времени. Схема Аракавы.

Сетка 64×64 . CFL = 0,3

Расчет по схеме «Кабаре» сохраняет кинетическую энергию с точностью 0,1% ко времени $T = 96$ и 4% ко времени $T = 10\,000$. На момент времени $T = 96$ энтропия составляет 90% первоначально значения, на момент времени $T = 10\,000$ — 1% (рис. 2.7а). На рис. 2.7б можно отметить начало распада исходного вихря в момент времени $T = 96$ при расчете по схеме Аракавы.

Задача о затухающей однородной турбулентности

Спектральная плотность кинетической энергии. Зададим случайное поле скоростей, соответствующее начальной спектральной плотности кинетической энергии вида

$$E(k) = Ak^\alpha \exp\left\{-\frac{\alpha}{2}\left(\frac{k}{k_0}\right)^2\right\}, \quad (2.63)$$

где A , α , k_0 — параметры распределения. Вид данного спектра представлен на рис. 2.8. Параметр A нормирует общую кинетическую энергию течения на величину 0,1.

Воспользуемся обратным преобразованием Фурье для нахождения исходного поля скоростей:

$$\begin{cases} u(x, y) = \sum_{k_1} \sum_{k_2} u_{k_1 k_2} \exp(i(k_1 x + k_2 y + \varphi_1)), \\ v(x, y) = \sum_{k_1} \sum_{k_2} v_{k_1 k_2} \exp(i(k_1 x + k_2 y + \varphi_2)), \end{cases} \quad (2.64)$$

где $u_{k_1 k_2}$, $v_{k_1 k_2}$ — коэффициенты Фурье, полученные из энергетического спектра (2.60), φ_1 и φ_2 — фазы, задаваемые случайными величинами с равномерным распределением на отрезке $[0, 2\pi]$. Характерный вид поля скорости и соответствующего ему поля завихренности представлены на рис. 2.9.

Решение проводится в прямоугольной области $G = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$, на которой введена равномерная ортогональная пространственная сетка с количеством ячеек $N_x \cdot N_y$. Моделирование проводится для сеток различной густоты $N_x = N_y = 32, 64, 128, 256$. Шаг сетки вдоль соответствующих координатных осей равен $h_x = 2\pi / N_x$, $h_y = 2\pi / N_y$. Граничные условия периодические. Число Куранта $CFL = 0,3$.

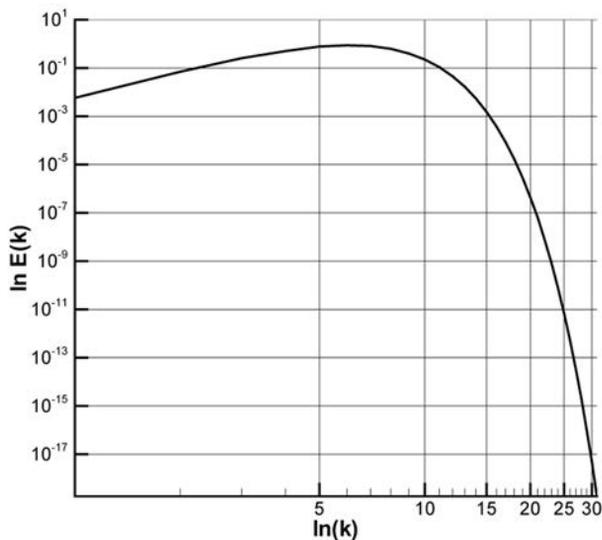


Рис. 2.8. Спектр исходного поля скоростей. Сетка 64×64

На рис. 2.10а—2.10г хорошо показана качественная картина поведения затухающей однородной турбулентности: постепенно кинетическая энергия переходит во все более крупномасштабные пространственные структуры, что соответствует характерному для двумерной турбулентности обратному энергетическому каскаду.

На рис. 2.11—2.13 показано, что на всех рассмотренных сетках наклон спектральных кривых рассчитанной турбулентности соответствует закону « -3 » для всех использованных алгоритмов, что отвечает теории Батчелора. Для сравнения на рис. 2.14 приведены результаты моделирования турбулентности с использованием схемы Аракавы (Arakawa, 1967): хвосты спектральных кривых загибаются вниз из-за искусственной вязкости, введенной в схему для подавления развивающейся в ней нелинейной неустойчивости. Пологие же части спектров отвечают наклонам $-3,8$ и $-4,5$ для сеток 64×64 и 128×128 соответственно.

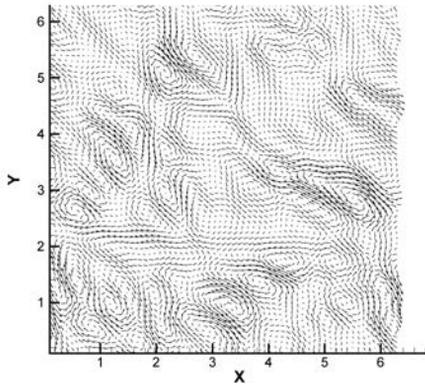


Рис. 2.9а. Характерный вид исходного поля скорости.
Сетка 64×64

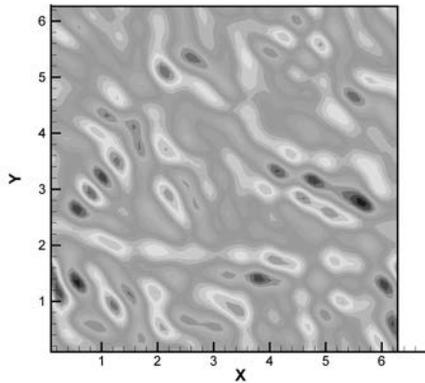


Рис. 2.9б. Характерный вид исходного поля завихренности.
Сетка 64×64

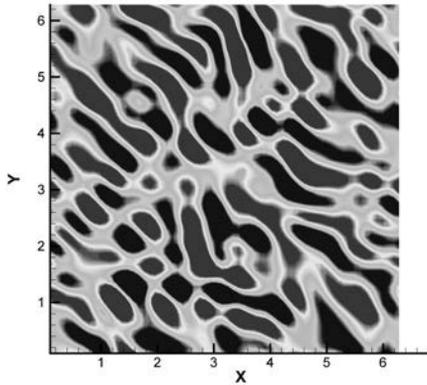


Рис. 2.10а. Изоконтурные поля завихренности в задаче со случайным полем скоростей в момент времени $T = 0$.
Схема «Кабаре». Сетка 64×64

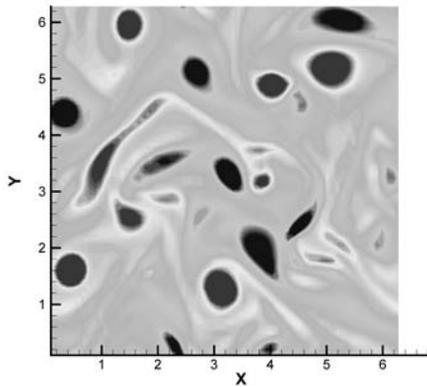


Рис. 2.10б. Изоконтурные поля завихренности в задаче со случайным полем скоростей в момент времени $T = 250$.
Схема «Кабаре». Сетка 64×64

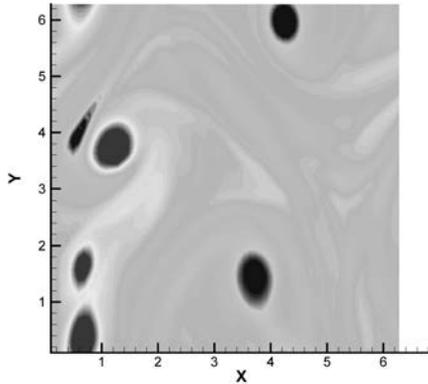


Рис. 2.10в. Изоконтуры поля завихренности в задаче со случайным полем скоростей в момент времени $T = 500$.
Схема «Кабаре». Сетка 64×64

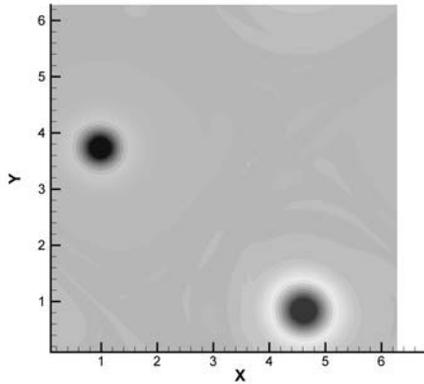


Рис. 2.10г. Изоконтуры поля завихренности в задаче со случайным полем скоростей в момент времени $T = 1000$.
Схема «Кабаре». Сетка 64×64

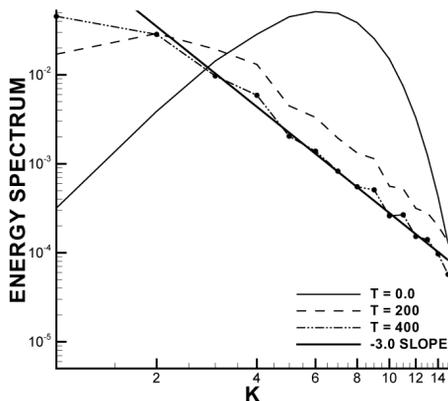


Рис. 2.11а. Спектр энергии в логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 200, 400$. Схема «Кабаре». Переменные «скорость — давление». Сетка 32×32 . Наклон спектральной кривой равен -3

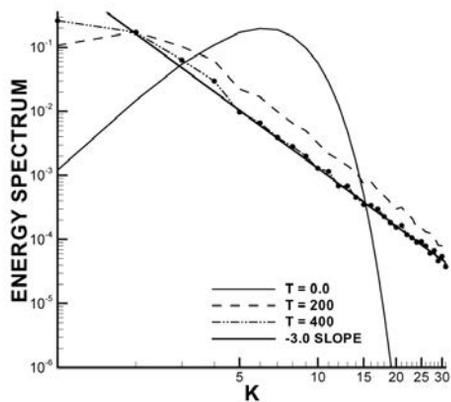


Рис. 2.11б. Спектр энергии в логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 200, 400$. Схема «Кабаре». Переменные «скорость — давление». Сетки $32 \times 32, 64 \times 64$ и 128×128 . Наклон спектральной кривой равен -3

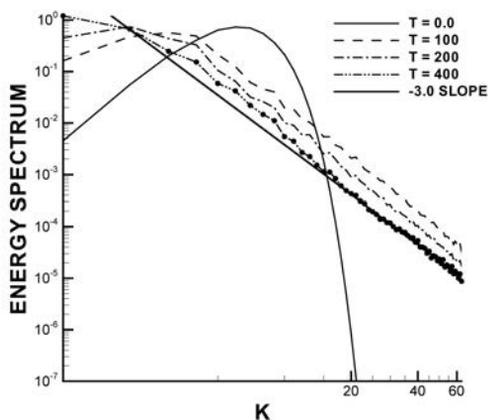


Рис. 2.11в. Спектр в логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 200, 400$. Схема «Кабаре». Переменные «скорость — давление». Сетка 128×128 . Наклон спектральной кривой равен -3

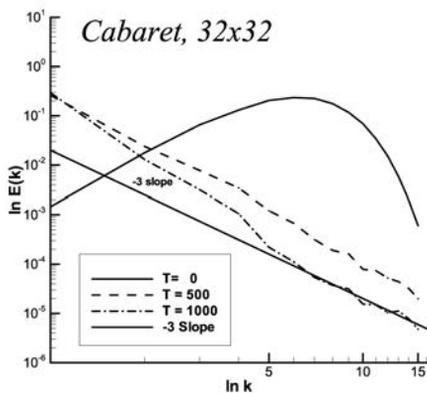


Рис. 2.12а. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 500, 1000$. Схема «Кабаре», $\xi = 0, 20$. Переменные «скорость — завихренность». Сетка 32×32 . Наклон спектральных кривых составляет -3 . CFL = 0,3

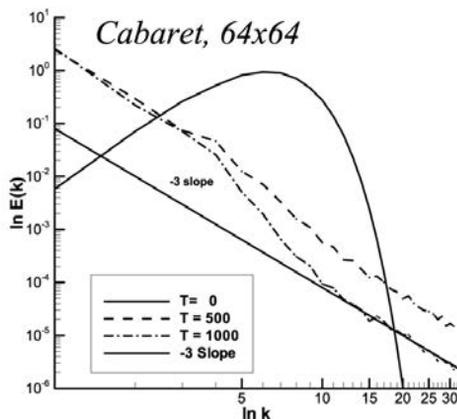


Рис. 2.12б. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 500, 1000$. Схема «Кабаре», $\xi = 0, 20$.

Переменные «скорость — завихренность». Сетка 64×64 . Наклон спектральных кривых составляет -3 . CFL = 0,3

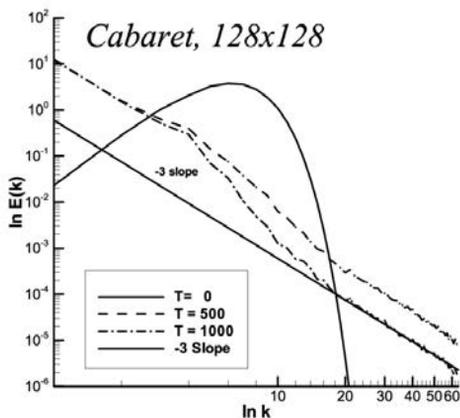


Рис. 2.12в. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 500, 1000$. Схема «Кабаре», $\xi = 0, 20$.

Переменные «скорость — завихренность». Сетка 128×128 . Наклон спектральных кривых составляет -3 . CFL = 0,3

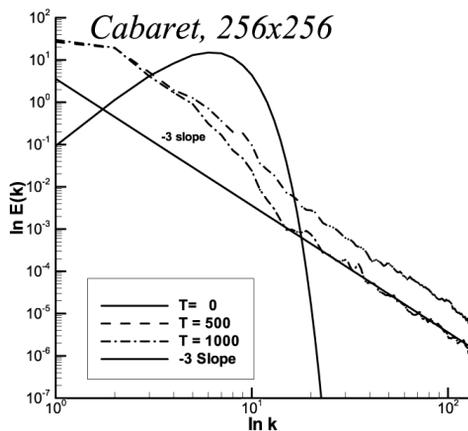


Рис. 2.12г. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 500, 1000$. Схема «Кабаре», $\xi = 0,20$. Переменные «скорость — завихренность». Сетка 256×256 . Наклон спектральных кривых составляет -3 . $CFL = 0,3$

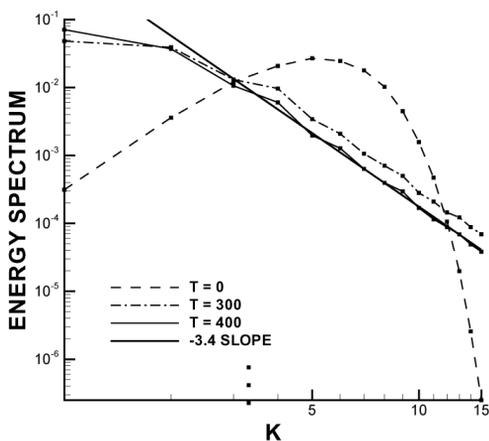


Рис. 2.13а. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 200, 400$. Схема «Кабаре», $\xi = 0,20$. Переменные «завихренность — функция тока». Сетка 32×32 . Наклон спектральных кривых составляет $-3,4$. $CFL = 0,3$

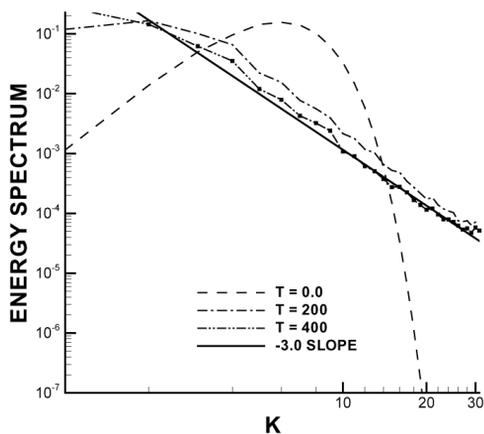


Рис. 2.13б. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 200, 400$. Схема «Кабаре», $\xi = 0, 20$.

Переменные «завихренность — функция тока». Сетка 64×64 .
Наклон спектральных кривых составляет -3 . CFL = 0,3

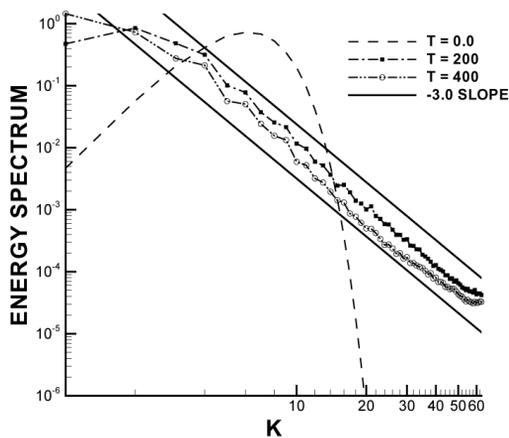


Рис. 2.13в. Спектр плотности кинетической энергии в двойном логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 200, 400$. Схема «Кабаре», $\xi = 0, 20$.

Переменные «завихренность — функция тока». Сетка 128×128 .
Наклон спектральных кривых составляет -3 . CFL = 0,3

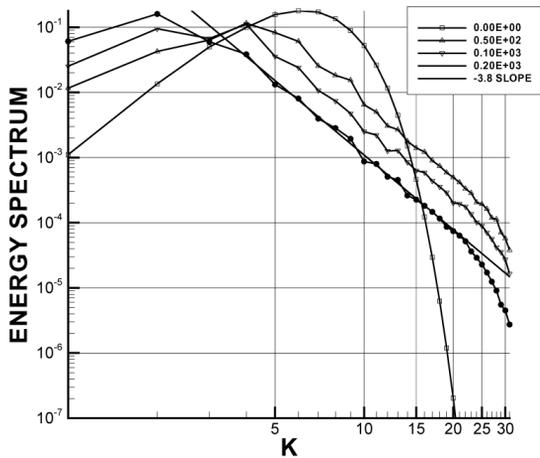


Рис. 2.14а. Спектр в логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 50, 100, 200$. Схема Аракавы. Сетка 64×64 . Наклон спектральной кривой составляет $-3,8$

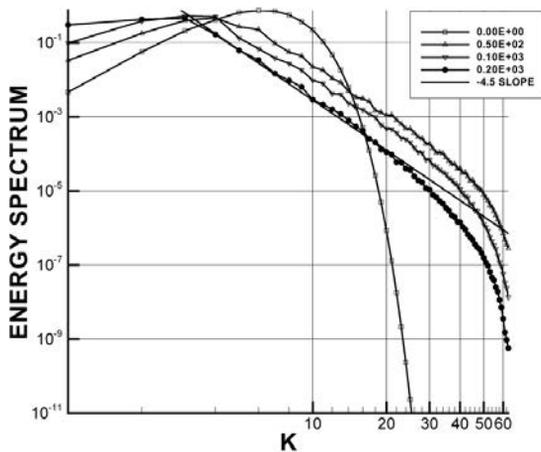


Рис. 2.14б. Спектр в логарифмическом масштабе в моменты времени $T = 0, 50, 100, 200$. Схема Аракавы. Сетка 128×128 . Наклон спектральной кривой составляет $-4,5$

Структурные функции. На рис. 2.15—2.17 показано, что соответствие закону (2.4) структурных функций порядков $q = 1, 2, 3$ хорошо прослеживается для всех рассмотренных алгоритмов на всех рассмотренных сетках.

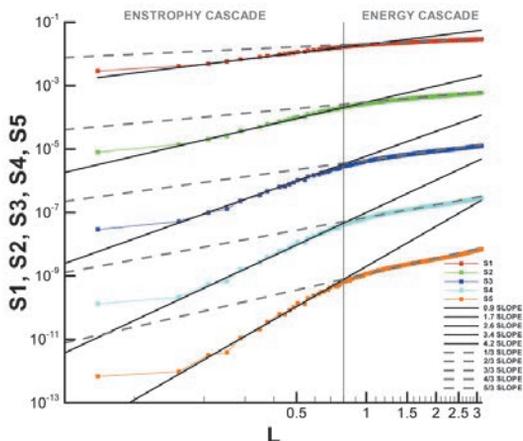


Рис. 2.15а. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «скорость — давление». Сетка 64×64 . $T = 400$. $CFL = 0,3$

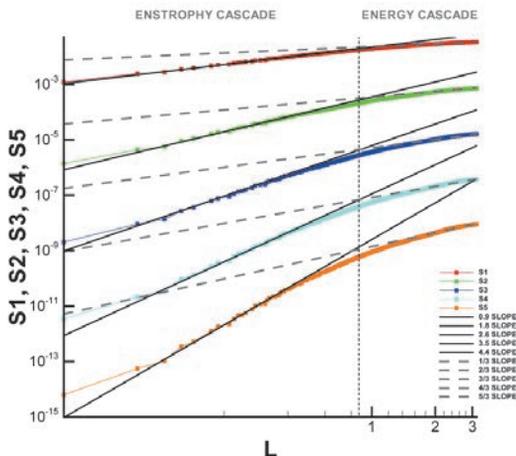


Рис. 2.15б. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «скорость — давление». Сетка 128×128 . $T = 400$. $CFL = 0,3$

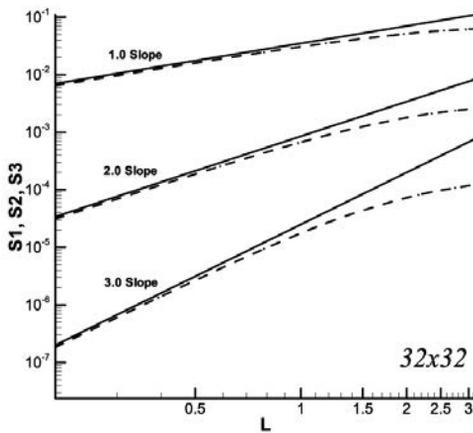


Рис. 2.16а. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «завихренность — скорость». Сетки 32×32. $T = 1000$. $CFL = 0,3$

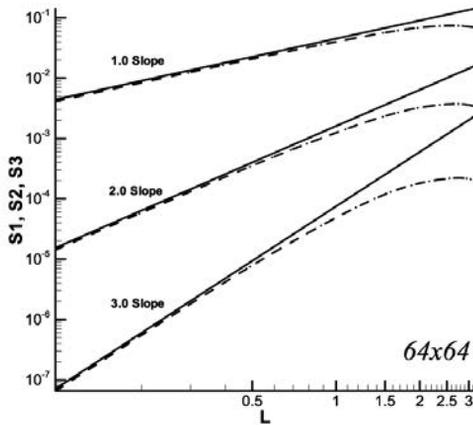


Рис. 2.16б. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «завихренность — скорость». Сетка 64×64. $T = 1000$. $CFL = 0,3$

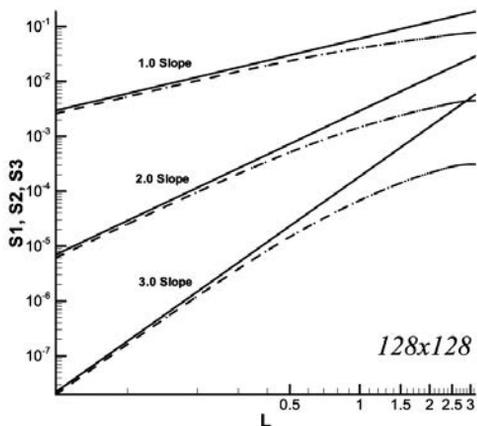


Рис. 2.16в. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «завихренность — скорость». Сетка 128×128 . $T = 1000$. $CFL = 0,3$

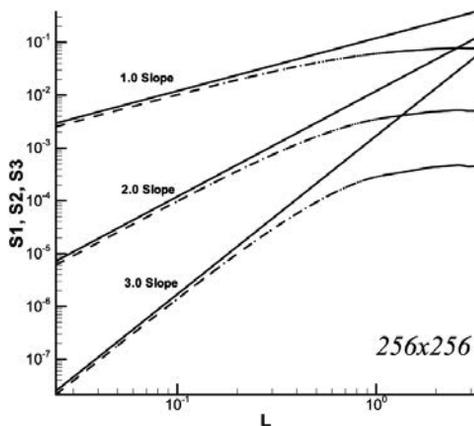


Рис. 2.16г. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «завихренность — скорость». Сетка 256×256 . $T = 1000$. $CFL = 0,3$

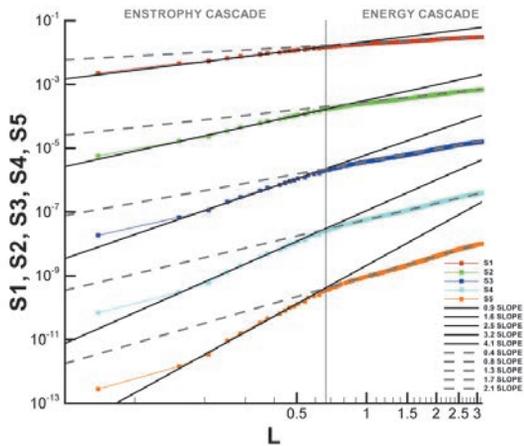


Рис. 2.17а. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «завихренность — функция тока». Сетка 64×64. $T = 400$. $CFL = 0,3$

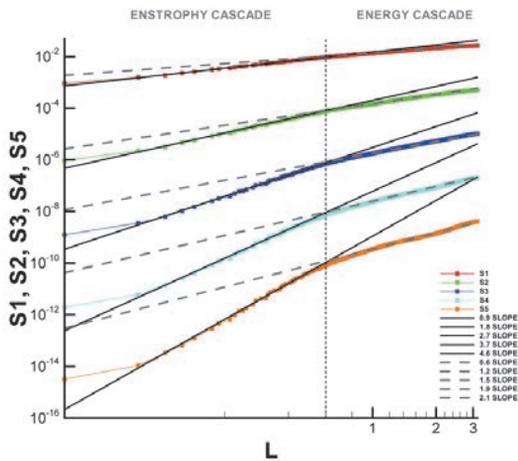


Рис. 2.17б. Структурные функции. Схема «Кабаре» в переменных «завихренность — функция тока». Сетка 128×128. $T = 400$. $CFL = 0,3$

3. Моделирование трехмерных турбулентных течений по схеме «Кабаре»

3.1. Постановка задачи

Рассматривается трехмерное течение несжимаемой жидкости в кубе с периодическими граничными условиями. Система уравнений имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{\partial uw}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \Delta u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial vw}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \Delta v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial uw}{\partial x} + \frac{\partial vw}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \Delta w, \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \end{array} \right. \quad (3.1)$$

где p — давление; μ — коэффициент кинематической вязкости.

3.2. Численный алгоритм

Запишем систему (3.1) в виде

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial z} = -\nabla p + \mathbf{L}, \quad (3.2)$$

где $\mathbf{L} = \mu \cdot \Delta \mathbf{U}$,

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} u^2 \\ uv \\ uw \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} uv \\ v^2 \\ vw \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} uw \\ vw \\ w^2 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Расчетная область — куб $G = \{(x, y), x \in [0, 2\pi], y \in [0, 2\pi], z \in [0, 2\pi]\}$.

Введем на ней равномерную ортогональную сетку

$$\begin{aligned} \Omega_n &= \{(x_i, y_j, z_k), i = 1, N_x, j = 1, N_y, \\ &k = 1, N_z : x_1 = 0 < x_2 < \dots < x_{N_x} = 2\pi, \\ &y_1 = 0 < y_2 < \dots < y_{N_y} = 2\pi, z_1 = 0 < z_2 < \dots < z_{N_z} = 2\pi\}. \end{aligned}$$

В центрах ячеек определим консервативные переменные (и будем нумеровать их полуцелыми индексами), в центрах граней ячеек — потоковые скорости, а в узлах — давление. Консервативные переменные характеризуют реальные физические величины и не подвергаются коррекции по принципу максимума, потоковые же переменные служат только для описания потоков через границы ячеек. В начальный момент времени задается поле консервативных скоростей, по которым согласованным образом (из решения задачи о распаде разрыва) определяются потоковые скорости. Давление определяется силами реакции системы на нарушение условия несжимаемости. Пусть в момент времени t_n известны значения консервативных и потоковых переменных. Аппроксимируем систему уравнений (3.2) неявной консервативной разностной схемой, обладающей вторым порядком аппроксимации на гладких решениях:

$$\frac{U_C^{n+1} - U_C^n}{\tau^n} + \frac{\bar{X}_R - \bar{X}_L}{h_x} + \frac{\bar{Y}_T - \bar{Y}_B}{h_y} + \frac{\bar{Z}_U - \bar{Z}_D}{h_z} = -\{\nabla p\}_C^{n+1/2} + \mathbf{L}_C^{n+1/2}, \quad (3.4)$$

где индексами C, R, L, T, B, U, D обозначены точки $(i+1/2, j+1/2, k+1/2)$, $(i+1, j, k)$, (i, j, k) , $(i, j+1, k)$, $(i, j, k+1)$, (i, j, k) , причем пары (R, L), (T, B), (U, D) относятся к противоположных граням куба с нормальными вдоль осей x , y и z соответственно. Чертой сверху обозначена полусумма переменных с двух временных слоев $\bar{\eta} = \frac{\eta^{n+1} + \eta^n}{2}$. Для вычисления неизвестных потоковых скоростей и давления найдем консервативные скорости на промежуточном слое по времени $t_{n+1/2} = t_n + 0,5\tau^n$ по разностной схеме (3.5)—(3.6).

$$\frac{\tilde{U} - U_C^n}{0,5\tau^n} + \frac{\mathbf{X}_R^n - \mathbf{X}_L^n}{h_x} + \frac{\mathbf{Y}_T^n - \mathbf{Y}_B^n}{h_y} + \frac{\mathbf{Z}_U^n - \mathbf{Z}_D^n}{h_z} = \mathbf{L}_C^n. \quad (3.5)$$

Здесь промежуточное значение \tilde{U} вычисляется без учета давления в правой части.

$$\frac{U_C^{n+1/2} - \tilde{U}}{0,5\tau^n} = -\{\nabla p\}_C^{n+1/2}. \quad (3.6)$$

Потребовав обнуление сеточной дивергенции $\operatorname{div}_h U_C^{n+1/2} = 0$, получим уравнение Пуассона для нахождения давления:

$$\Delta_h p^{n+1/2} = \frac{2}{\tau^n} \operatorname{div}_h \tilde{\mathbf{U}}, \quad (3.7)$$

которое решается методом БПФ (обозначение Δ_h соответствует косому кресту или 27-точечной аппроксимации лапласиана).

Для нахождения новых потоковых скоростей на $(i+1)$ -й грани, перпендикулярной оси x , оценим их значения с одной $\Phi^- \equiv (u^-, v^-, w^-)$ и другой $\Phi^+ \equiv (u^+, v^+, w^+)$ сторон от данной грани и поставим частичную задачу Римана о распаде разрыва. Так как поток — выпуклая функция Хопфа, то задача Римана допускает простое аналитическое решение — поток Годунова. Для схемы «Кабаре» удобно использовать поток Годунова в несколько модифицированном виде, с привлечением консервативных переменных:

$$\Phi_R^{n+1} = \begin{cases} \Phi^-, & \text{если } u_C^{n+1/2} > 0 \text{ и } u_{CR}^{n+1/2} > 0, \\ \Phi^+, & \text{если } u_C^{n+1/2} < 0 \text{ и } u_{CR}^{n+1/2} < 0, \\ (0, v_\phi^n, w_\phi^n), & \text{если } u_C^{n+1/2} < 0 \text{ и } u_{CR}^{n+1/2} > 0, \\ \Phi^-, & \text{если } u_C^{n+1/2} > 0 \text{ и } u_{CR}^{n+1/2} < 0 \text{ и } |u^-| > |u^+|, \\ \Phi^+, & \text{если } u_C^{n+1/2} < 0 \text{ и } u_{CR}^{n+1/2} < 0 \text{ и } |u^-| < |u^+|, \end{cases} \quad (3.8)$$

где $\Phi \equiv (u_\phi, v_\phi, w_\phi)$ — потоковая скорость на гранях с нормалью вдоль оси x . Индекс CR соответствует точке $(i+3/2, j+1/2, k+1/2)$. Нахождение значений слева и справа от грани производится в два этапа: первый — экстраполяция $\tilde{\Phi}^- = 2\mathbf{U}_C^{n+1/2} - \Phi_L^n$, $\tilde{\Phi}^+ = 2\mathbf{U}_{CR}^{n+1/2} - \Phi_{RR}^n$, второй — коррекция по принципу максимума для сохранения свойства монотонности решений. Принцип максимума заключается в том, что при числах Куранта меньше единицы обратная характеристика, выпущенная с нового временного слоя, пересечет область расчетной ячейки в некоторой точке, и переносимое вдоль нее значение должно лежать между минимумом и максимумом соответствующих значений в ячейке на текущем временном слое. Минимумы и максимумы оцениваются следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \max_{U_i}^- &= \max\left((\Phi_i)_L^n, (U_i)_C^{n+1/2}, (\Phi_i)_R^n\right) + \tau^n Q_{U_i}^-, \\
 \min_{U_i}^- &= \min\left((\Phi_i)_L^n, (U_i)_C^{n+1/2}, (\Phi_i)_R^n\right) + \tau^n Q_{U_i}^-, \\
 \max_{U_i}^+ &= \max\left((\Phi_i)_R^n, (U_i)_{CR}^{n+1/2}, (\Phi_i)_{RR}^n\right) + \tau^n Q_{U_i}^+, \\
 \min_{U_i}^+ &= \max\left((\Phi_i)_R^n, (U_i)_{CR}^{n+1/2}, (\Phi_i)_{RR}^n\right) + \tau^n Q_{U_i}^+,
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

где члены $Q_{U_i}^-$, $Q_{U_i}^+$ характеризуют конвективный поток в направлении осей y и z за шаг по времени (3.10); $i = 1, 3$.

$$\begin{aligned}
 Q_{U_i}^- &= \frac{(U_i)_C^{n+1/2} - (U_i)_C^n}{\tau^n / 2} + (\bar{\Phi}_1)_L \cdot \frac{(\Phi_i)_R^n - (\Phi_i)_L^n}{h_x}, \\
 Q_{U_i}^+ &= \frac{(U_i)_{CR}^{n+1/2} - (U_i)_{CR}^n}{\tau^n / 2} + (\bar{\Phi}_1)_R \cdot \frac{(\Phi_i)_{RR}^n - (\Phi_i)_R^n}{h_x}.
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Здесь $(\bar{\Phi}_1)_L = \frac{(u_\Phi)_R + (u_\Phi)_L}{2}$, $(\bar{\Phi}_1)_R = \frac{(u_\Phi)_{RR} + (u_\Phi)_R}{2}$.

Коррекция производится по формулам:

$$\mathbf{U}_i^- = \begin{cases} \tilde{\mathbf{U}}^-, & \text{если } \min_{U_i}^- \leq \tilde{\mathbf{U}}^- \leq \max_{U_i}^-, \\ \min_{U_i}^-, & \text{если } \tilde{\mathbf{U}}^- < \min_{U_i}^-, \\ \max_{U_i}^-, & \text{если } \tilde{\mathbf{U}}^- > \max_{U_i}^-, \end{cases} \tag{3.11}$$

$$\mathbf{U}_i^+ = \begin{cases} \tilde{\mathbf{U}}^+, & \text{если } \min_{U_i}^+ \leq \tilde{\mathbf{U}}^+ \leq \max_{U_i}^+, \\ \min_{U_i}^+, & \text{если } \tilde{\mathbf{U}}^+ < \min_{U_i}^+, \\ \max_{U_i}^+, & \text{если } \tilde{\mathbf{U}}^+ > \max_{U_i}^+. \end{cases} \tag{3.12}$$

Процедура вычисления потоковых переменных на остальных гранях (y и z) полностью аналогична описанной выше (для грани x).

3.3. Общие замечания по алгоритму

На гладких решениях схема имеет второй порядок аппроксимации как по пространству, так и по времени, в том числе и на неравномерной временной сетке. Схема устойчива при числах Куранта $0 < CFL < 1/3$. Шаг по времени переменный и определяется так:

$$\tau = \min \left(\frac{\text{CFL} \cdot h_x}{\max(|u|)}, \frac{\text{CFL} \cdot h_y}{\max(|v|)}, \frac{\text{CFL} \cdot h_z}{\max(|w|)}, \frac{(h_x h_y h_z)^{2/3}}{2\mu} \right). \quad (3.13)$$

3.4. Примеры расчетов

Одиночный вихрь

В качестве начальных условий рассмотрим следующую задачу:

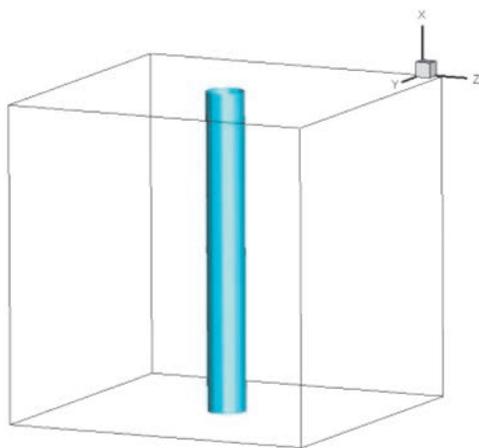
$$\begin{cases} u_r = 0, \\ u_z = 0, \\ u_\varphi = \alpha f(r_\sigma) \exp[\beta(1-r_\sigma^2)], \quad r_\sigma = r/\sigma, \end{cases} \quad (3.14)$$

где f — полином; α , β , σ — положительные константы. Пусть $f(r_\sigma) = r_\sigma$, $\alpha = 0,2$, $\beta = 0,3$, $\sigma = 0,5$. Характерное время оборота такого вихря по окружности $\Delta T \approx 7$. Пусть коэффициент вязкости равен нулю. Граничные условия периодические.

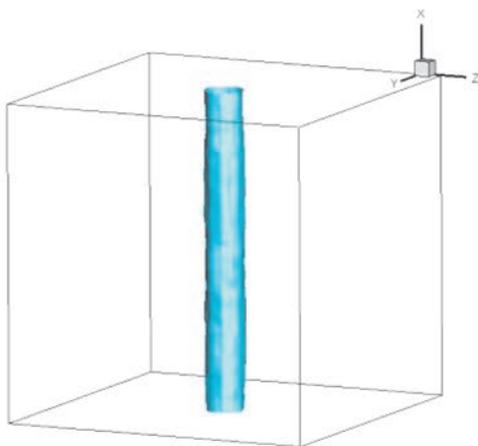
На рис. 3.1 показана эволюция «одиночного» вихря во времени. Расчетная сетка — $32 \times 32 \times 32$. Число Куранта — 0,3. Расчетное время $T = 150 \approx 21,5 \Delta T$. Вихрь сохраняет свою форму в течение примерно 15 оборотов вдоль оси X . Затем происходит «турбулизация» течения и развал вихря.

На рис. 3.2 приведены зависимости интегральных характеристик (энергии и энтропии) от времени. До определенного момента ($T \approx 85$) энергия и энтропия системы изменяются слабо. Затем следуют резкий рост энтропии и, как следствие, рост скорости диссипации энергии.

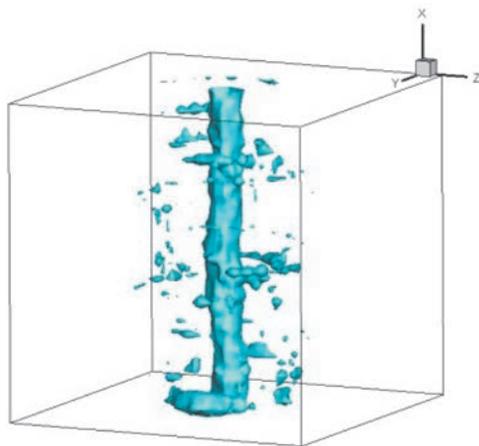
Данные результаты имеют лишь качественное значение, так как одиночный вихрь в трехмерном случае неустойчив. В целом можно говорить о том, что наш алгоритм дает малые фазовые ошибки даже на грубых сетках. Диссипативные свойства тоже относительно неплохие.



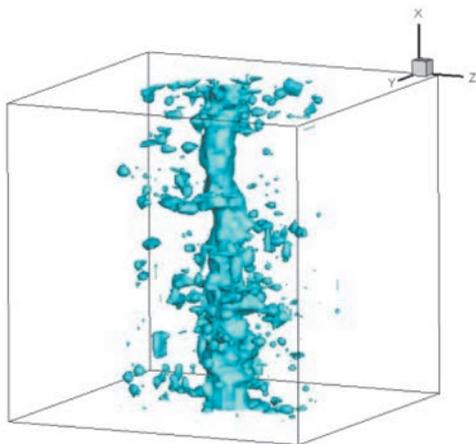
$T = 0$



$T = 75$



$T = 115$



$T = 150$

Рис. 3.1. Изоповерхности поля модуля завихренности в задаче об «одиночном» вихре

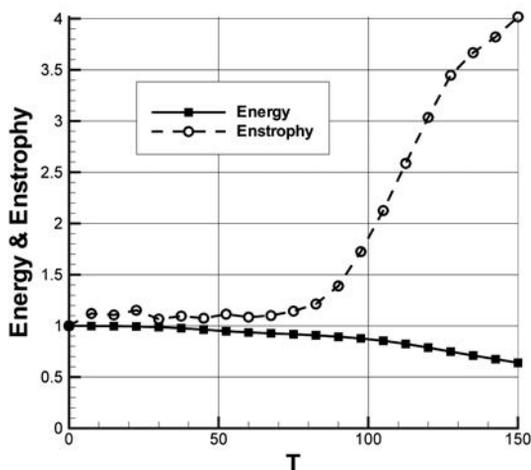


Рис. 3.2. Зависимость энергии и энтропии от времени в задаче об «одиночном вихре»

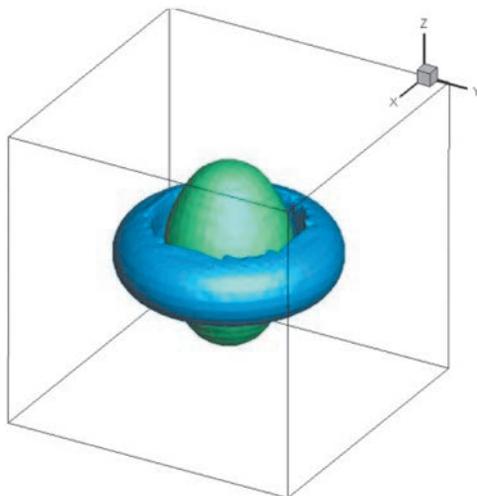
Вихрь Хилла

Рассмотрим следующую задачу [34]. Пусть область завихренной жидкости заключена внутри сферы радиуса a , движущейся с постоянной поступательной скоростью U . Вихревые линии являются концентрическими окружностями с общей осью, проходящей через центр сферы, а линии тока лежат в меридиональных плоскостях. Вне сферы движение потенциально.

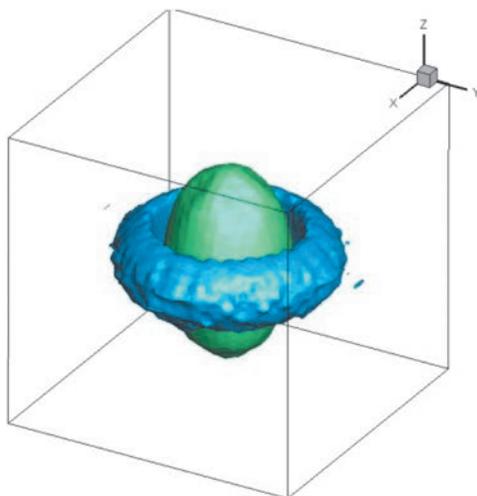
$$\begin{cases}
 u_r = \frac{3}{2}U \frac{rz}{a^2}, \\
 u_z = \frac{3}{2}U \left(1 - \frac{2r^2 + z^2}{a^2}\right) + U, \quad r^2 + z^2 < a^2, \\
 u_r = \frac{3}{2}U \frac{rz}{a^2} \left(\frac{a^2}{r^2 + z^2}\right)^{5/2}, \\
 u_z = U \left[\left(\frac{a^2}{r^2 + z^2}\right)^{5/2} \frac{2z^2 - r^2}{2a^2} - 1 \right] + U, \quad r^2 + z^2 > a^2, \\
 u_\phi = 0.
 \end{cases} \quad (3.15)$$

Пусть $a = \pi/2$, $U = 0,1$, $v = 0$. Время одного «пролета» вихря вдоль оси Z $\Delta T \approx 60$. Перейдем в систему координат, связанную с вихрем (в ней движение будет стационарно), и рассмотрим изоповерхности скорости u_z (рис. 3.3). CFL = 0,3. Сетка — $32 \times 32 \times 32$.

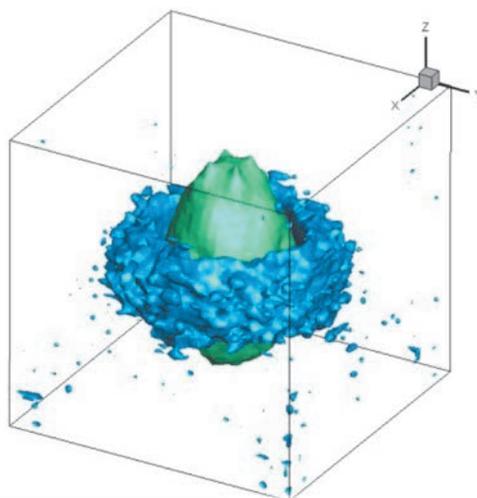
Из рисунков видно, что до момента «турбулизации» вихрь успевает сделать около трех «пролетов» вдоль оси Z . На рис. 3.4 приведены интегральные характеристики течения. Энергия сохраняется с большой точностью (из-за постоянного вклада энергии поступательного движения). Энтропия же начиная с момента $T \approx 50$ (который слабо зависит от густоты расчетной сетки) резко возрастает. Как и в случае «одионого» вихря, можно сделать только качественные выводы о малости фазовых ошибок (центр вихря сохраняет свое положение) и относительно неплохих диссипативных свойствах алгоритма.



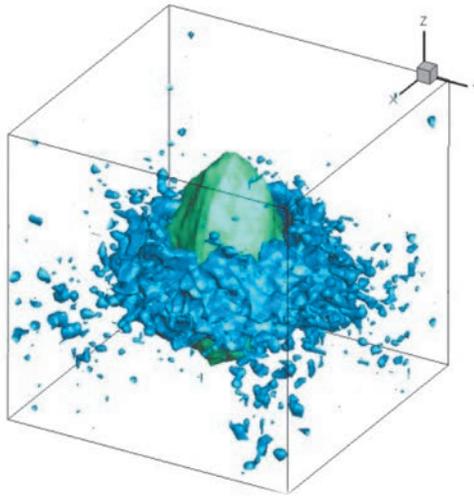
$T = 0$



$T = 50$



$T = 100$



$T = 150$

Рис. 3.3. Изоповерхности поля скорости u_z в задаче о вихре Хилла

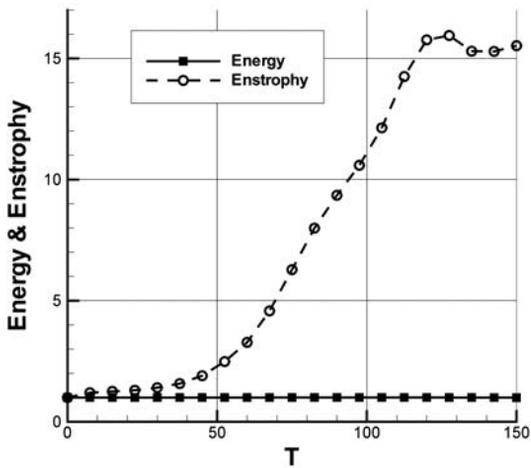


Рис. 3.4. Зависимость энергии и энтропии от времени в задаче о вихре Хилла

Моделирование затухания однородной изотропной турбулентности

Рассмотрим Фурье-образы компонент скоростей в сферической системе координат (3.16). Используя уравнение неразрывности (можно считать радиальную компоненту нулевой: $\hat{u}_r(\mathbf{k}) = 0$):

$$\begin{cases} \hat{u}_r(\mathbf{k}) = 0, \\ \hat{u}_\varphi(\mathbf{k}) = a(k) \cdot \cos(\gamma_1), \\ \hat{u}_\theta(\mathbf{k}) = a(k) \cdot \sin(\gamma_1), \end{cases} \quad (3.16)$$

где γ_1 — случайная равномерно распределенная величина на отрезке

$[0, 2\pi]$; $a(k) = \sqrt{\frac{E(k)}{2\pi k^2}}$; $E(k)$ — начальная спектральная плотность кинетической энергии вида

$$E(k) = Ak^\alpha \exp\left\{-\frac{\alpha}{2}\left(\frac{k}{k_{\max}}\right)^2\right\}, \quad (3.17)$$

где α — крутизна кривой $E(k)$ в области малых волновых чисел; k_{\max} — волновое число, на котором кривая $E(k)$ достигает максимума; A — нормировочный множитель. Условие нормировки имеет вид

$$\int E(k) dk = E_0, \quad (3.18)$$

где E_0 — начальная кинетическая энергия всей системы:

$$E_0 = \int_V \frac{3u_0^2}{2} dV, \quad (3.19)$$

u_0 — начальная характерная величина проекции скорости на некоторую произвольную ось. Подставив зависимость (3.17) в (3.18), получим:

$$A = \frac{2E_0\beta^\zeta}{\Gamma(\zeta)}, \quad \beta = \frac{\alpha}{2k_{\max}^2}, \quad \zeta = \frac{\alpha+1}{2}, \quad (3.20)$$

где $\Gamma(\)$ — гамма-функция. Пусть $\alpha = 2$, $k_{\max} = 3$, $u_0 = 0,04$. Характерное время можно очень грубо оценить как отношение максимального корреляционного масштаба к начальной проекции скорости $\Delta T \sim 80$. Перейдем в прямоугольную декартову систему:

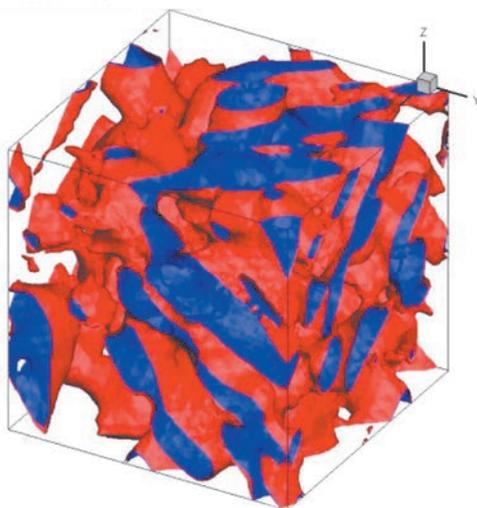
$$\begin{cases} \hat{u}(\mathbf{k}) = -\hat{u}_\varphi(\mathbf{k}) \sin \varphi + \hat{u}_\theta(\mathbf{k}) \cos \theta \cos \varphi, \\ \hat{v}(\mathbf{k}) = -\hat{u}_\varphi(\mathbf{k}) \cos \varphi + \hat{u}_\theta(\mathbf{k}) \cos \theta \sin \varphi, \\ \hat{w}(\mathbf{k}) = -\hat{u}_\theta(\mathbf{k}) \sin \theta \end{cases} \quad (3.21)$$

и воспользуемся обратным преобразованием Фурье для нахождения скоростей в физическом пространстве:

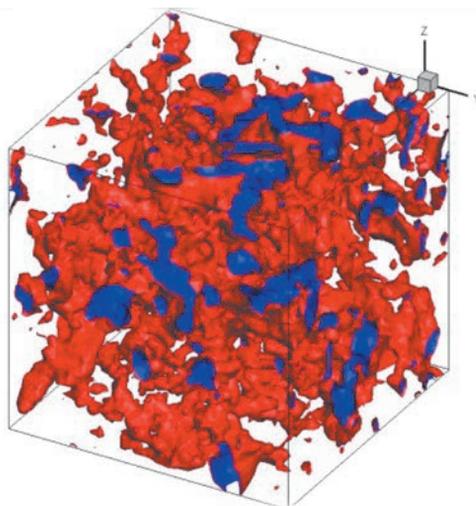
$$\begin{cases} u(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \left[-\hat{u}_\varphi(\mathbf{k}) \sin \varphi \exp(i\gamma_2) + \hat{u}_\theta(\mathbf{k}) \cos \theta \cos \varphi \exp(i\gamma_3) \right] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \\ v(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \left[\hat{u}_\varphi(\mathbf{k}) \cos \varphi \exp(i\gamma_2) + \hat{u}_\theta(\mathbf{k}) \cos \theta \sin \varphi \exp(i\gamma_3) \right] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \\ w(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \left[-\hat{u}_\theta(\mathbf{k}) \sin \theta \exp(i\gamma_3) \right] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \end{cases} \quad (3.22)$$

Случайность поля скоростей моделируется за счет введения случайных равномерно распределенных на отрезке $[0, 2\pi]$ фаз γ_2, γ_3 .

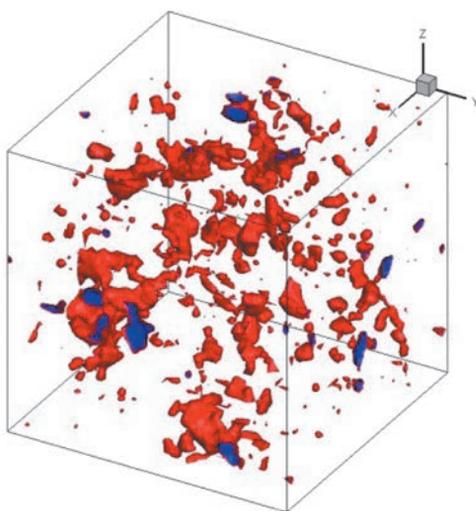
На рис. 3.5 показана эволюция поля завихренности, соответствующей начальному распределению скоростей (3.22), во времени. Граничные условия периодические. Сетка — $32 \times 32 \times 32$. Вязкость нулевая. $CFL = 0,4$.



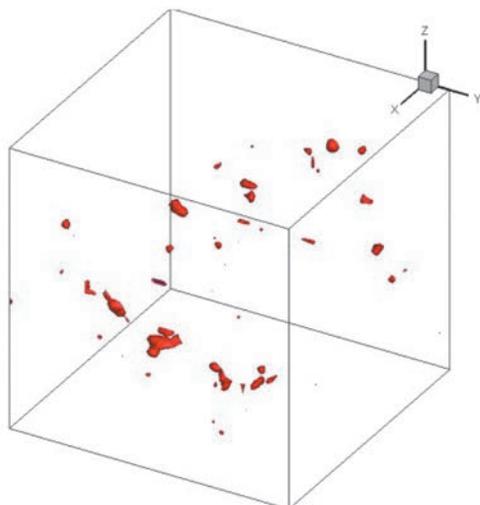
$T = 0$



$T = 80$



$T = 160$



$T = 200$

Рис. 3.5. Изоповерхности поля кинетической энергии в задаче со случайным полем скоростей

На рис. 3.6 показана зависимость интегральных характеристик от времени. Энергия затухает примерно в два раза за время $T \sim 2\Delta T$. Отчетливо прослеживается каскадный механизм передачи энергии от крупных структур к более мелким. Этот процесс приводит к росту энтропии и спиральности (точнее модуля спиральности). К моменту времени $T \sim \Delta T$ в системе возбуждаются самые мелкие масштабы, сопоставимые с размером ячеек, и, как следствие, включается диссипативный механизм схемы «Кабаре», «уводящий» энтропию и спиральность на «подсеточные» масштабы.

Дальнейшее изложение посвящено анализу статистических свойств однородной изотропной турбулентности. Будем осреднять все статистические моменты по набору эквивалентных реализаций случайного поля скоростей (3.22). Эквивалентность означает, что у всех реализаций начальная спектральная плотность кинетической энергии одна и та же (3.17). На рис. 3.7—3.9 приведены энергетические спектры кинетической энергии и спиральности в двойном логарифмическом масштабе на сетках $32 \times 32 \times 32$, $64 \times 64 \times 64$ и $128 \times 128 \times 128$ соответственно. $CFL = 0,3$, $\nu = 0$.

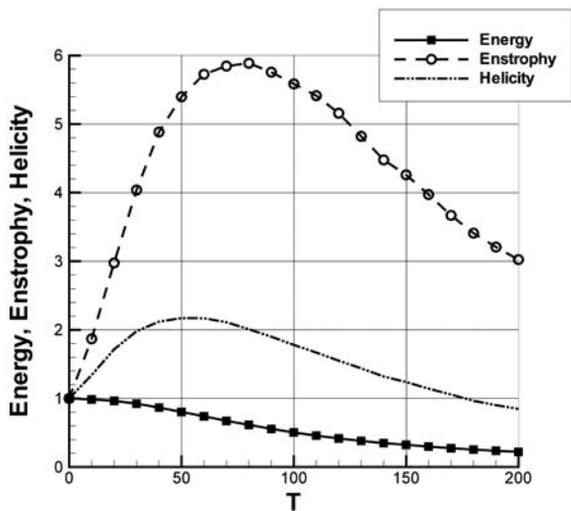
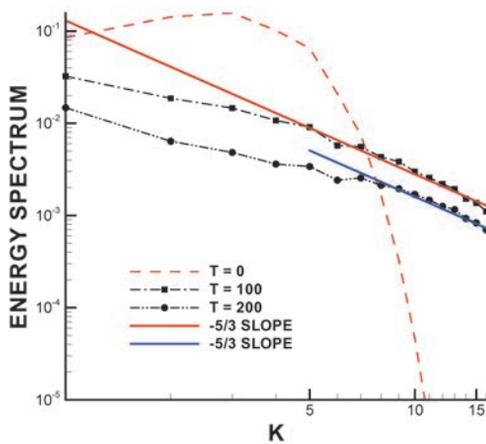


Рис. 3.6. Зависимость энергии, энтропии и спиральности от времени в задаче со случайным полем скоростей



a

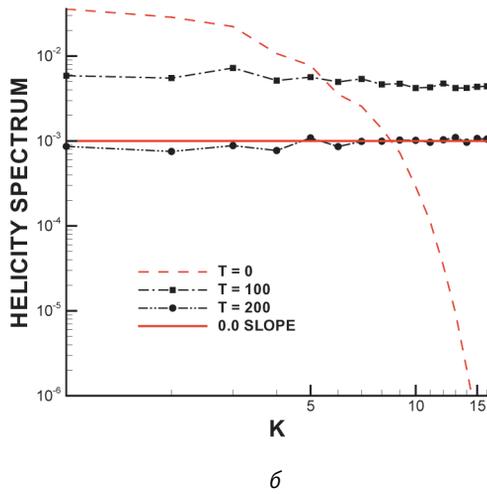
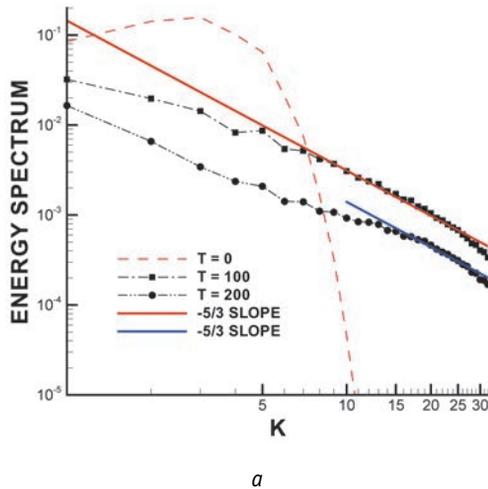


Рис. 3.7. Энергетические спектры энергии $E(k)$ (а) и спиральности $E(k)k^{-2/3}$ (б). Сетка $32 \times 32 \times 32$



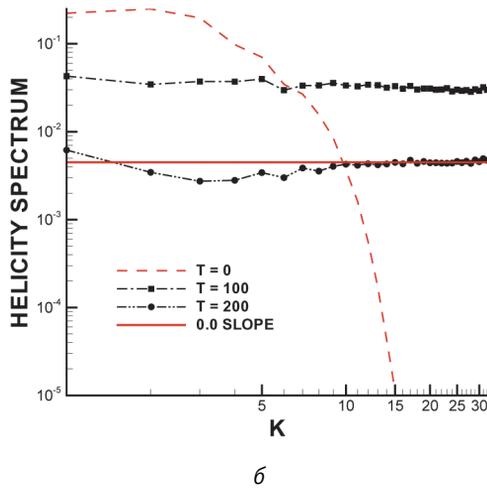
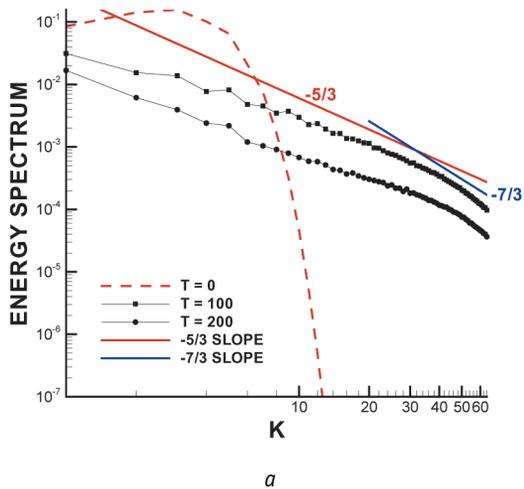


Рис. 3.8. Энергетические спектры энергии $E(k)$ (а) и спиральности $E(k)k^{-2/3}$ (б). Сетка $64 \times 64 \times 64$



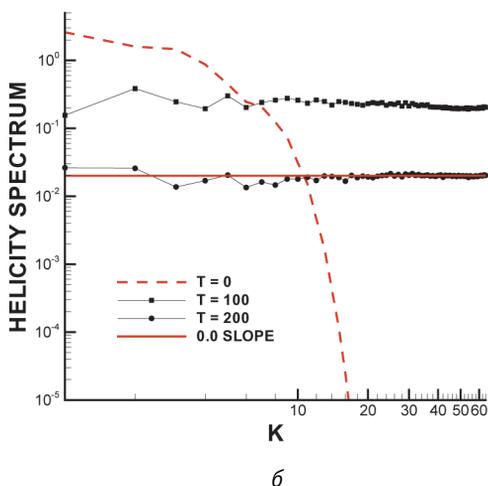


Рис. 3.9. Энергетические спектры энергии $E(k)$ (а) и спиральности $E(k)k^{-2/3}$ (б). Сетка $128 \times 128 \times 128$

На рисунках приводится распределение спектров по пространственным частотам в моменты $T = 100$ и $T = 200$. Можно считать, что каскадный процесс на этих временах уже установился. На сетке $32 \times 32 \times 32$ последние 10—12 гармоник хорошо ложатся на теоретический наклон $-5/3$ (закон Колмогорова). На сетке $64 \times 64 \times 64$ поведение спектральных характеристик примерно такое же. Однако на более подробных сетках (начиная с сетки $128 \times 128 \times 128$) помимо «колмогоровского» наклона отчетливо виден наклон, близкий к $-7/3$, что соответствует каскаду не энергетического а спирального инварианта. Что же касается спектра спиральности, то на всех сетках результаты вплоть до самых высоких гармоник совпадают с формулой (3.28), в которую входит только скорость диссипации энергии и не входит скорость диссипации спиральности.

Еще один инвариант — *спиральность* — введен Моффатом в 1969 г.:

$$H = \int_V (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) dV. \quad (3.23)$$

Спиральность характеризует степень связности вихревых линий в потоке [34]. Поле с отличной от нуля спиральностью представляет собой анизотропный континуум, образованный совокупностью произвольно ориентированных мелкомасштабных вихревых структур, в которых, например, правовращательные вихревые структуры более вероятны, чем левовраща-

тельные. Уравнение баланса для спиральности по аналогии с уравнениями сохранения энергии и энтропии можно представить в виде

$$d_t H = -\nu \int_V (\boldsymbol{\omega} \cdot \text{rot } \boldsymbol{\omega}) dV \equiv -\varepsilon_h. \quad (3.24)$$

По своей природе спиральность H (или *скорость диссипации спиральности* ε_h) является псевдоскаляром, т. е. меняет знак при замене правосторонней системы координат на левостороннюю. Это значительно усложняет теоретический анализ турбулентности. Вообще говоря, было бы правильнее называть величину ε_h не скоростью диссипации, а скоростью генерации спиральности (так как она может принимать как положительные, так и отрицательные значения в разных точках пространства). Можно предположить, что существуют два режима каскадных процессов в системе. В некоторых случаях, по аналогии с двумерной турбулентностью, имеет место каскад сохраняемых величин к противоположным концам инерционного интервала. Однако существует возможность и одновременного прямого каскада обеих величин к малым масштабам. Какой процесс будет иметь место в некоторый данный момент времени, зависит от интегральных свойств рассматриваемой системы, а также от граничных и начальных условий [37]. Из анализа размерности следует, что в областях доминирования спиральных диссипативных потоков распределение энергии по пространственным масштабам примет вид

$$E(k) = C_h \varepsilon_h^{2/3} k^{-7/3}. \quad (3.25)$$

Аналогично для структурных функций можно написать:

$$S_q(l) \sim \varepsilon_h^{q/3} l^{1q/3}. \quad (3.26)$$

Кроме этого рассмотрим спектральную плотность спиральности $E_h(\mathbf{k}) = \int_{|\mathbf{k}|} \langle |h(\mathbf{k})|^2 \rangle d\mathbf{k}$, где $h(\mathbf{k})$ — образ Фурье плотности спиральности.

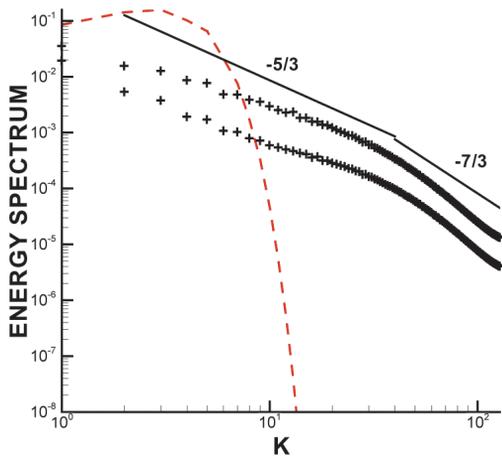
Распределение этой статистической величины в обоих инерционных интервалах будет иметь вид

$$E_h(k) = \tilde{C} \varepsilon^{4/3} k^{2/3} \quad (3.27)$$

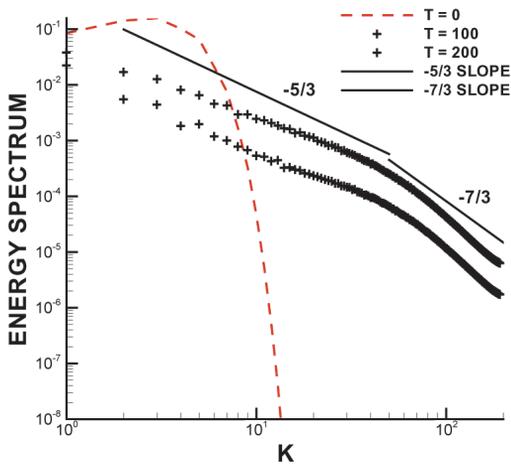
и

$$E_h(k) = \tilde{C}_h \varepsilon_h^{4/3} k^{-2/3}. \quad (3.28)$$

Для исследования этого свойства проведены расчеты энергетического спектра на более подробных сетках $256 \times 256 \times 256$ и $384 \times 384 \times 384$ (рис. 3.10).



Сетка 256×256×256



Сетка 385×385×385

Рис. 3.10. Энергетические спектры $E(k)$ в моменты времени $T = 0, 100, 200$

Начиная с гармоники $k \sim 45$ наклон спектральной характеристики увеличивается и становится близким к $-7/3$. Для сравнения приведем результаты DNS-расчета задачи об однородной изотропной турбулентности в несжимаемой жидкости, взятые из [38]. Эти расчеты проводились в центре информационных технологий университета Нагои в Японии на суперкомпьютере VPP5000. Используемые сетки — 256^3 , 512^3 , 1024^3 , 2048^3 , 4096^3 . Вязкость для каждой сетки подбиралась из условия $k_{\max} \lambda \sim 2$, где λ — колмогоровский масштаб; k_{\max} — самое большое волновое число, разрешаемое сеткой. На рис. 3.11 наклон в инерциальной области спектра равен $-5/3 - \mu$, где $\mu \sim 0,1$. Хотя наклоны получились и круче $-5/3$, все же наклона $-7/3$ нет.

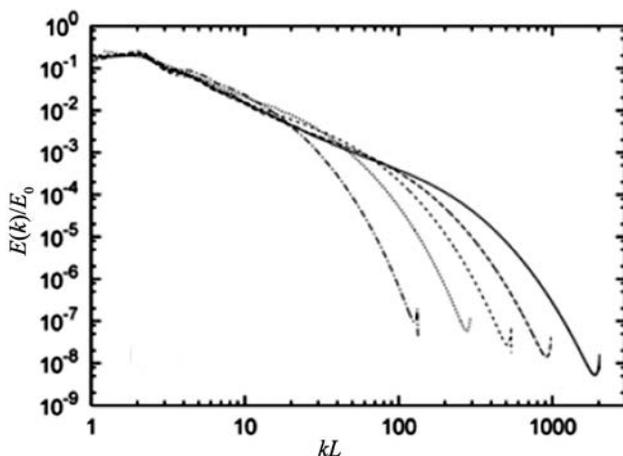


Рис. 3.11. DNS-моделирование турбулентности.
Сетки 256^3 , 512^3 , 1024^3 , 2048^3 , 4096^3

Рассмотрим поведение структурных функций (первых пяти порядков) (рис. 3.12—3.15). Чем выше порядок структурной функции, тем хуже точки ложатся на теоретическую зависимость. На первых двух сетках наклоны соответствуют закону Колмогорова — Обухова. Однако на более подробных сетках помимо колмогоровского наклона на малых масштабах возникает наклон, соответствующий спиральному инварианту (3.26).

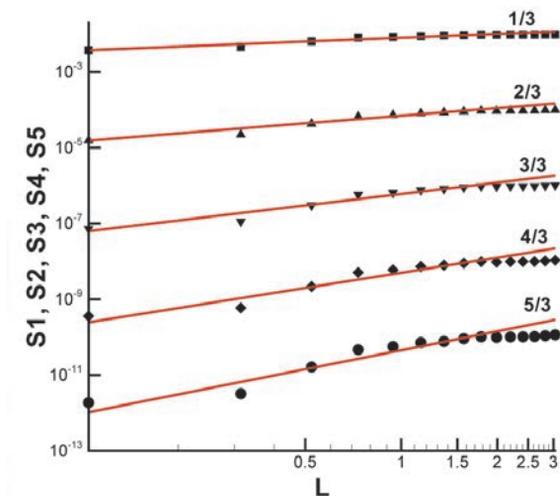


Рис. 3.12. Распределение структурных функций по пространственным масштабам. Сетка $32 \times 32 \times 32$

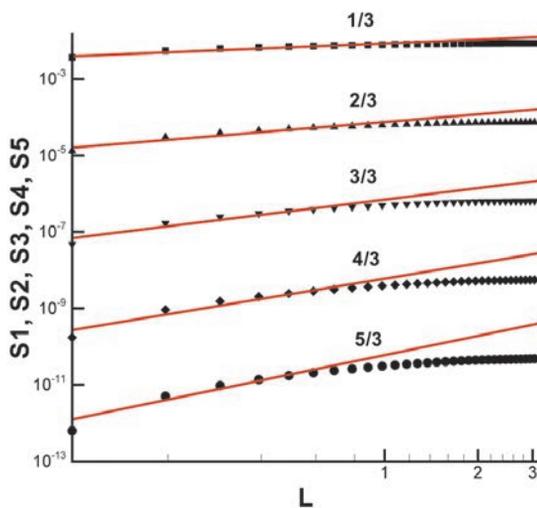


Рис. 3.13. Распределение структурных функций по пространственным масштабам. Сетка $64 \times 64 \times 64$

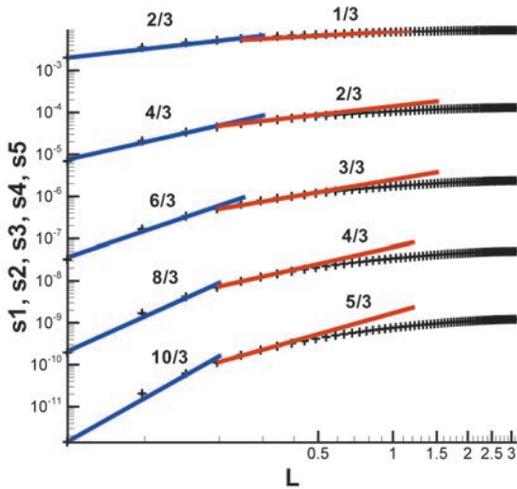


Рис. 3.14. Распределение структурных функций по пространственным масштабам. Сетка $128 \times 128 \times 128$

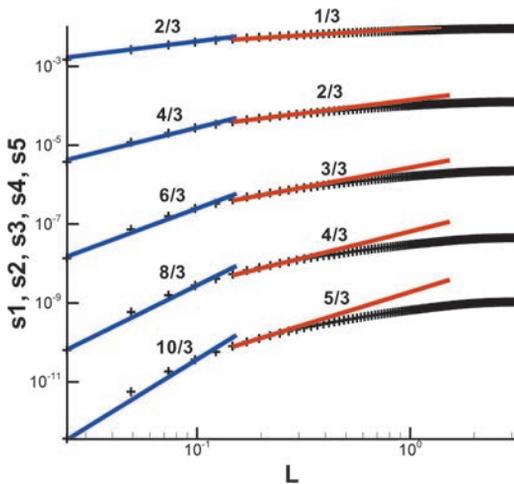


Рис. 3.15. Распределение структурных функций по пространственным масштабам. Сетка $256 \times 256 \times 256$

4. Заключение

В данной работе мы предлагаем новый подход для моделирования турбулентных течений, основанный на использовании алгоритма высокой разрешающей способности CABARET (Compact Accurately Boundary Adjusting high REsolution Technique).

В своем развитии данный алгоритм основывался на нескольких ключевых идеях: бездиссипативности, хороших дисперсионных свойствах, компактности шаблона, монотонности, оптимальной аппроксимации временных и пространственных производных. Эти свойства качественно выделяют методику «Кабаре» среди прочих LES-алгоритмов (ILES-алгоритмов), так как они обеспечивают наиболее правильное поведение каскадных механизмов передачи энергии внутри инерционных интервалов даже на очень грубых сетках.

Отметим основные выводы данной работы.

1. Методика «Кабаре» обобщена на случай двумерной несжимаемой жидкости для трех типов переменных («скорость — давление», «завихренность — функция тока», «завихренность — давление»). Работоспособность предложенных алгоритмов показана на примере тестовых расчетов с одиночными вихревыми структурами и задачи о затухающей однородной турбулентности.
2. Показано, что схема «Кабаре» в двумерном случае обладает свойством бездиссипативности при моделировании одиночных неподвижных вихрей и дает малую диссипацию при моделировании динамики взаимодействия вихрей.
3. Фазовые ошибки, привносимые алгоритмом, малы, что следует из сравнения результатов расчета со схемой Аракавы, которая широко используется для моделирования движения вихрей в несжимаемом случае.
4. Наклоны энергетических спектров и структурных функций при моделировании однородной изотропной турбулентности соответствуют теории двумерной турбулентности Бэтчелора. Причем наклоны сохраняют значение вплоть до самых высоких гармоник, разрешаемых расчетной сеткой.
5. Проведено обобщение методики «Кабаре» на случай трехмерной несжимаемой жидкости в естественных переменных и показано, что полученный алгоритм качественно правильно моделирует поведение локализованных вихрей с относительно малыми диссипативными и дисперсионными ошибками.
6. На грубых сетках в задаче об однородной изотропной турбулентности наклоны энергетических спектров и структурных функций соответствуют теории Колмогорова (K41), однако при более мелком разбиении в области больших волновых чисел появляется влияние спирального инварианта

(наклон спектра близок к $-7/3$). Вопрос о том, должно ли это влияние возникать, остается открытым.

Будем называть «идеальным» (Perfect) такой LES-алгоритм, у которого инерционный интервал турбулентности охватывает все волновые числа, представимые на используемой расчетной сетке. Ясно, что при равных вычислительных затратах на реализацию LES-алгоритм будет тем эффективнее, чем ближе он к PLES-алгоритму (Perfect LES-алгоритму). В настоящей работе показано, что LES-алгоритм на основе схемы «Кабаре» обладает свойствами, близкими к PLES-алгоритмам.

Литература

1. Волков К. Н., Емельянов В. Н. Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. — М.: Физматлит, 2008. — 368 с.
2. Reynolds O. On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion // Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A. — 1895. — Vol. 186. — P. 123—161.
3. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. — М.: Наука. — Ч. 1. — 1965, Ч. 2. — 1967.
4. Рейнольдс А. Дж. Турбулентные течения в инженерных приложениях. — М.: Энергия, 1979. — 408 с.
5. Shia-Hui Peng, Haase W. Advances in Hybrid RANS-LES modeling. — Berlin; Heidelberg: Springer Verl., 2008.
6. Stavros C. Kassinos C., Langer A. Complex Effects in Large Eddy Simulations. — Berlin; Heidelberg: Springer Verl., 2007.
7. Berselli L. C., Plescu T., Layton W. J. Mathematics of Large Eddy Simulation of Turbulent Flows. — Berlin; Heidelberg: Springer Verl., 2006.
8. Volker J. Large Eddy Simulation of Turbulent Incompressible Flows. — Berlin; Heidelberg: Springer Verl., 2004.
9. Love M. D. Subgrid modeling studies with Burgers equation // J. Fluid Mech. — 1980. — Vol. 100, Pt. 1. — P. 87—110.
10. Chollet J. P., Metais O. Predictability of three-dimensional turbulence in large-eddy simulations // Eur. J. Mech., B/Fluids. — 1989. — 8. — P. 523—548.
11. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. — 1983. — 49. — P. 357—393.

12. Boris J. P., Book D. L., Hain K. Flix-corrected transport: Generalisation of the method // J. Comput. Phys. — 1975. — 31. — P. 335—350.
13. Boris J. P., Grinstein F. F., Oran E. S., Kolbe R. L. New insights into large eddy simulation // J. Fluid Dyn. Res. — 1992. — 10. — P. 199—228.
14. Margolin L. G., Rider W. J. A rationale for implicit turbulence modeling // Int. J. for Numerical Methods in Fluids. — 2002. — 39. — P. 821—841.
15. Grinstein F. F., Margolin L. G., Rider W. J. Implicit Large Eddy Simulation. — [S.l.]: Cambridge Univ. Press, 2007.
16. Головизнин В. М., Самарский А. А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Мат. моделирование. — 1998. — Т. 10, № 1. — P. 86—100.
17. Головизнин В. М., Самарский А. А. Некоторые свойства разностной схемы «Кабаре» // Мат. моделирование. — 1998. — Т. 10, № 1. — С. 101—116.
18. Головизнин В. М., Карабасов С. А., Кобринский И. М. Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // Мат. моделирование. — 2003. — Т. 15, № 9. — С. 29—48.
19. Головизнин В. М., Карабасов С. А. Нелинейная коррекция схемы «Кабаре» // Мат. моделирование. — 1998. — Т. 10, № 12. — С. 107—123.
20. Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений: В 2 т. / Под ред. А. А. Саркисова, Г. А. Филиппова. — М.: Наука, 2010. — Т. 2: Численное моделирование. — 368 с.
21. Kraichnan R. H. Inertial ranges in two-dimensional turbulence // Phys. Fluids. — 1967. — 10. — P. 1417—1423.
22. Sommeria J. Experimental study of two-dimensional inverse energy cascade in a square box // J. Fluid Mech. — 1986. — 170. — P. 139—168.
23. Paret J., Tabeling P. Experimental observation of the two-dimensional inverse energy cascade // Phys. Rev. Lett. — 1997. — 79. — P. 4162—4165.
24. Tabeling P., Hansen A. E., Paret J. Forced and decaying 2D turbulence: Experimental study // Lecture notes in physics. — 1998. — Vol. 511. — P. 145—169.

25. *Tabeling P.* Two-dimensional turbulence: a physicist approach // *Physics Reports*. — 2002. — Vol. 362. — P. 1—62.
26. *Колмогоров А. Н.* Локальная структура турбулентности в несжимаемой вязкой жидкости при очень больших числах Рейнольдса // *Докл. АН СССР*. — 1941. — Т. 30, № 4. — С. 299—303.
27. *Фрик П. Г.* Турбулентность: подходы и модели. — Москва; Ижевск: Ин-т компьютер. исслед., 2003. — С. 156—161.
28. *Borue V.* Inverse energy cascade in stationary two-dimensional homogeneous turbulence. // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 72. — P. 1475—1478.
29. *Chasnov J. R.* On the decay of two-dimensional turbulence // *Phys. Fluids*. — 1997. — Vol. 9, № 1. — P. 171—180.
30. *Kida S., Yamada M., Ohkitani K.* The energy spectrum in the universal range of two-dimensional turbulence // *Fluid Dynamics Research*. — 1988. — 4. — P. 271—301.
31. *Batchelor G. K.* Computation of the energy spectrum in homogeneous two-dimensional turbulence // *Phys. of Fluids*. — 1967. — Vol. 12, Suppl. 2. — P. 233—239.
32. *Herring J. R., Orszag S. A., Kraichnan R. H., Fox D. J.* Decay of two-dimensional turbulence homogeneous turbulence // *J. Fluid Mech.* — 1974. — Vol. 66. — P. 417—444.
33. *Maltrud M. E., Vallis G. K.* Energy spectra and coherent structures in forced two-dimensional and beta-plane turbulence // *J. Fluid Mech.* — 1991. — 228. — P. 321—342.
34. *Алексеевко С. В., Куйбин П. А., Окулов В. Л.* Введение в теорию концентрированных вихрей. — Новосибирск: Ин-т теплофизики СО РАН, 2003. — 504 с.
35. *Arakawa A.* Computational Design for Long-Term Numerical Integration of the Equations of Fluid Motion: Two-Dimensional Incompressible Flow. — Pt. II // *J. of Comp. Phys.* — 1997. — 135. — P. 103—114.
36. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. — М.: Мир, 1980. — С. 160—161.
37. *Колесниченко А. В., Маров М. Я.* О влиянии спиральности на эволюцию турбулентности в солнечном турбулентном облаке // *Астроном. вестн.* — 2007. — Т. 41, № 1. — С. 1—20.
38. *Kaneda Y., Ishihara T.* High-resolution direct numerical simulation of turbulence // *J. of Turbulence*. — 2006. — Vol. 7, № 20.
39. *Goloviznin V. M., Semenov V. N., Korotkin I. A., Kerbasov S. A.* A novel computational method for modelling stochastic advection in

- heterogeneous media // *Transport in Porous Media*. — 2007. — Vol. 66, № 3. — P. 439456.
40. Hansen M. O. L. Vorticity–velocity formulation of the 3D Navier–Stokes equations in cylindrical co-ordinates // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. — 2003. — 41. — P. 29–45.
 41. Lesieur M. *Turbulence in Fluids*. — [S.l.]: Springer, 2008.
 42. Margolin L. G., Rider W. J. The design and construction of implicit LES models // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. — 2005. — 47. — P. 1173–1179.
 43. Arovitola A., Denaro F. M. On the application of congruent upwind discretizations for large eddy simulations // *J. of Computational Physics*. — 2004. — Vol. 194. — P. 329–343.
 44. Brun C., Juve D., Manhart M., Munz C.-D. *Numerical Simulation of Turbulent Flows and Noise Generation*. — Berlin; Heidelberg: Springer Verl., 2009.
 45. Dubois Th., Jauberteau F., Temam R. *Dynamic Multilevel Methods and the Numerical Simulation of Turbulence*. — [S.l.]: Cambridge Univ. Press, 1999.
 46. Karabasov S. A., Goloviznin V. M. A New Efficient High-Resolution Method for Non-Linear problems in Aeroacoustics // *AIAA J.* — 2007. — Vol. 45, № 12. — P. 2861–2871.
 47. Karabasov S. A., Goloviznin V. M. Compact Accurately Boundary Adjusting high-Resolution Technique for Fluid Dynamics // *J. Comput. Phys.* — 2009. — 228. — P. 7426–7451.
 48. Karabasov S. A., Berloff P. S., Goloviznin V. M. CABARET in the Ocean Gyres // *J. Ocean Model.* — 2009. — 30. — P. 155–168.
 49. Berloff P., Karabasov S., Farrar J. T., Kamenkovich I. On Latency of Multiple Zonal Jets in the Oceans // *J. Fluid Mech.* — In print.

Новый беспараметрический вычислительный метод прямого моделирования термоконвективных течений в замкнутых двумерных и трехмерных областях

В. М. Головизнин, С. А. Карабасов, И. А. Короткин, С. А. Финогенов

1. Введение

Под термином «естественная (или свободная) конвекция» в общем случае подразумевают движение жидкости или газа, возникающее за счет сил Архимеда при наличии неоднородности плотности жидкости (газа) в поле массовых сил. Мы будем понимать под этим термином термогравитационную конвекцию, т. е. случай, когда неоднородности связаны с неравномерным нагревом жидкости, и течение возникает в поле силы тяжести. При этом будем рассматривать жидкости и газы, плотность которых падает с ростом температуры (например, вода в интервале температур 0—4°C имеет аномальное поведение).

Задача о естественной конвекции в замкнутых областях при заданных температурах на боковых поверхностях встречается во многих инженерно-технических установках и конструкциях начиная от обычных стеклопакетов в окнах и заканчивая сложнейшими системами охлаждения и теплоотвода в атомных реакторах. Это одна из первых классических задач конвективного теплообмена, которая решалась на основе уравнений Навье — Стокса. Считается, что первым сформулировал и дал приближенные решения данной задачи еще Бэтчелор в 1954 г. [1]. Затем практически сразу последовали первые попытки провести численное моделирование [2; 3] и сравнить его с известными на тот момент результатами экспериментов. Действительно, в силу простоты постановки эта задача имеет не только практическое значение, но и является очень удобным и распространенным тестом для разрабатываемых вычислительных методов и моделей турбулентности.

Физической особенностью естественной конвекции в замкнутых областях при боковом подогреве является взаимодействие восходящего и нисходящего конвективных потоков, в результате которого устанавливается выраженная стратификация вдоль вертикальной оси и формируется до-

вольно сложная и существенно зависящая от числа Рэлея и геометрии области вихревая структура течения. Все эти особенности сложного течения включая переход к турбулентному режиму конвекции удаётся с достаточной для практических целей точностью рассчитать на основе численного решения нестационарных уравнений Навье—Стокса.

Получение детальных данных о характере тепломассообмена и его свойствах, очевидно, невозможно без эффективной вычислительной методики, которая моделировала бы все особенности структуры свободноконвективного течения. Анализ монографии [4] показывает, что режимы течения связаны не только с числом Рэлея и геометрией области, но и со свойствами жидкости (газа). К настоящему времени разработано множество методов численного моделирования термоконвекции, которые позволяют в принципе проводить исследования для различной геометрии области в достаточно широком диапазоне изменения чисел Рэлея и Прандтля, однако методические и технические трудности ограничивают диапазон применения большинства из этих методов в области больших чисел Рэлея [5; 6]. Основная часть работ по математическому моделированию связана с решением задач термоконвекции при малых и умеренных числах Рэлея.

Проблема быстрого и точного моделирования свободноконвективного течения при очень больших числах Рэлея (например, больше 10^{11}) актуальна до сих пор. Для решения такого рода задач требуются очень подробные сетки в пристеночной области для разрешения пограничного слоя. Именно в тонком пограничном слое сосредотачивается основной перепад температур и происходит вихревой теплообмен со стенкой, который необходимо разрешать. Толщина этого слоя может быть оценена по формуле [7]

$$\delta = \left(\frac{L_y L_x^3}{Gr} \right)^{1/4} = \left(\frac{L_y L_x^3}{Ra} Pr \right)^{1/4}, \quad (1)$$

где Gr , Ra , Pr — основные безразмерные параметры, характеризующие геометрию области, граничные условия и физические свойства теплоносителя; L_x и L_y — геометрические размеры области по горизонтали и вертикали соответственно.

Из данной формулы видно, что уже при числе Рэлея 10^{11} в единичной квадратной области, заполненной воздухом ($Pr = 0,71$), образуется пограничный слой толщиной всего около $1/600$ от ширины области. Иными словами, чтобы корректно промоделировать пристеночное течение газа при данном числе Рэлея, потребуются исключительно подробная сетка даже в двумерной постановке. Между тем на практике в промышленных установках встречаются течения с числом Рэлея гораздо выше 10^{11} — 10^{14} и даже 10^{17} .

Развитие современной вычислительной техники и технологий параллельных вычислений привело к тому, что вполне можно рассчитать задачи на сетках, состоящих из миллиарда ячеек. Последние публикации (например, [8]) показывают, что прямым численным моделированием (DNS) на сетке $128 \times 682 \times 1278$ (а это порядка 100 млн узлов) решена задача о тепловой конвекции в вертикальном слое при числе Рэлея 10^{11} . Однако даже сегодня такие расчеты очень дороги и длительны, а при еще больших числах Рэлея становятся пока просто невозможны.

Итак, при исследовании свободноконвективных течений при экстремально высоких Рэлеях особую актуальность приобретают вычислительные методы, не требующие колоссального количества расчетных узлов, но остающиеся при этом достаточно точными для практических задач. Один из таких методов — схема «Кабаре», имеющая в своей основе только нестационарную систему уравнений Навье—Стокса, приближение Буссинеска, уравнение теплопроводности и ряд базовых принципов вычислительной математики (таких, как принцип максимума и принцип наименьшего возрастания парциальной локальной вариации [9; 10]).

Схема «Кабаре», являясь консервативной, второго порядка аппроксимации, позволяет использовать очень грубые сетки, точно передавая при этом все особенности свободноконвективного турбулентного течения, в том числе образование и взаимодействие вихрей, перенос тепла, пульсации температуры. Например, как показано ниже, упомянутая здесь задача о тепловой конвекции в вертикальном слое при числе Рэлея 10^{11} может быть успешно решена на сетке всего $8 \times 16 \times 40$ ячеек (при должном сгущении). В кубической области при данном числе Рэлея достаточно сетки $20 \times 20 \times 20$ ячеек. При этом результаты (например, тепловой поток от горячей стенки внутрь области) будут полностью согласованы с результатами DNS, а используемые при расчетах сетки (8000 ячеек против 10^8 при моделировании методом DNS в [8]) и, как следствие, затраты вычислительных ресурсов не идут ни в какое сравнение с последними.

Настоящая работа посвящена описанию схемы «Кабаре» и всесторонней верификации этого алгоритма с различными численными методами, экспериментами и эмпирическими соотношениями. Результаты, полученные по двумерной схеме «Кабаре», будут также соотноситься и с результатами трехмерных численных методик и экспериментов в случае, когда течение в трехмерной области оказывается квазидвумерным или близким к двумерному. Все расчеты при этом выполнены на показательно грубых сетках для наглядной демонстрации высокой эффективности новой схемы и ее потенциала.

2. Схема «Кабаре» для моделирования тепловой конвекции несжимаемой жидкости в двумерном случае

2.1. Математическая модель

Рассматривается естественная конвекция несжимаемой жидкости (газа) в замкнутой прямоугольной области со сторонами $H \times L$, где H — высота области, L — ее ширина (рис. 1). Температуры левой и правой стенок постоянны и равны соответственно T_c и T_h , $T_c < T_h$. Верхняя и нижняя стенки теплоизолированы. Вектор силы тяжести \vec{g} направлен вниз вдоль оси y . На всех четырех стенках обе компоненты скорости жидкости обращаются в ноль (условие прилипания).

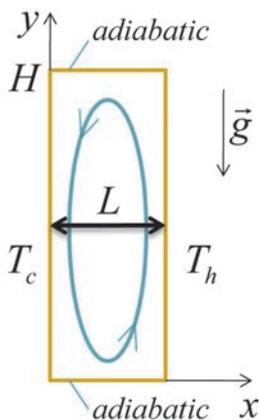


Рис. 1. Тепловая конвекция в прямоугольной области

Пусть $T(x, y)$ — температура жидкости внутри области, $u(x, y)$ и $v(x, y)$ — компоненты скорости жидкости, где $x \in [0, L]$, $y \in [0, H]$.

Граничные условия по температуре для вертикальных стенок, таким образом, будут иметь вид

$$T(x, y)|_{x=0} = T_c; \quad T(x, y)|_{x=L} = T_h. \quad (2)$$

Для горизонтальных стенок:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=H} = 0. \quad (3)$$

Условие прилипания на стенках области:

$$\begin{aligned} u(x, y)|_{x=0} = u(x, y)|_{x=L} = u(x, y)|_{y=0} = u(x, y)|_{y=H} = 0, \\ v(x, y)|_{x=0} = v(x, y)|_{x=L} = v(x, y)|_{y=0} = v(x, y)|_{y=H} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Исходной для расчета является система нестационарных уравнений тепловой конвекции несжимаемой «жидкости Буссинеска» в двумерном случае:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \nu \Delta u + \beta g_x (T - T_0), \quad (6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \nu \Delta v + \beta g_y (T - T_0), \quad (7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} = \alpha \Delta T. \quad (8)$$

Здесь ν — кинематическая вязкость ($\nu = \mu/\rho$, где μ и ρ — соответственно динамическая вязкость и плотность); α — коэффициент температуропроводности ($\alpha = \frac{\kappa}{c_p \rho}$, где κ и c_p — коэффициент теплопроводности и теплоемкость жидкости); β — коэффициент объемного теплового расширения жидкости; g_x и g_y — компоненты ускорения свободного падения; T_0 — равновесная температура; $P(x, y)$ — давление; Δ — оператор Лапласа.

Физические и геометрические параметры задачи описываются главным образом двумя основными безразмерными параметрами. Это число Рэлея

$$Ra = \frac{\beta g (T_h - T_c) L^3}{\alpha \nu} \quad (9)$$

и число Прандтля

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}. \quad (10)$$

Кроме этих двух параметров важную роль играет такой геометрический параметр, как аспектное соотношение сторон расчетной области $A = H/L$ — отношение высоты области к ее ширине.

Возникающий между изотермическими стенками теплообмен характеризуется еще одним безразмерным параметром — числом Нуссельта. Например, среднее число Нуссельта левой стенки, можно записать следующим образом:

$$\text{Nu}_{\text{wall}} = \left\langle \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} \right\rangle \frac{L}{T_h - T_c}. \quad (11)$$

Число Нуссельта представляет собой отношение среднего потока тепла при наличии конвекции к потоку тепла, переносимому путем теплопроводности.

2.2. Дискретизация задачи

На рассматриваемую область $H \times L$ наложим прямоугольную расчетную сетку с N_y узлами по вертикали и N_x узлами по горизонтали (рис. 2). Занумеруем узлы по горизонтальной оси от 1 до N_x , а по вертикальной — от 1 до N_y . Таким образом, получим прямоугольную сетку, содержащую $N_x \cdot N_y$ узлов или $(N_x - 1) \cdot (N_y - 1)$ ячеек. Граничные узлы при этом ложатся на границу области.

Схема «Кабаре» оперирует с двумя типами переменных: консервативными, относящимися к центрам ячеек, и потоковыми, которые относятся к центрам граней ячеек. Консервативные переменные будут иметь дробную нумерацию, потоковые — смешанную (рис. 2). При численном решении уравнений Навье—Стокса потребуется решать уравнение для давления. Давление, как и дивергенция скорости, рассчитанная по консервативным переменным, будет относиться непосредственно к узлам расчетной сетки и иметь целую нумерацию.

Пусть у каждой переменной верхний индекс обозначает номер слоя по времени, нижний — пространственное положение переменной на расчетной сетке, для чего введем локальные обозначения, как показано на рис. 3.

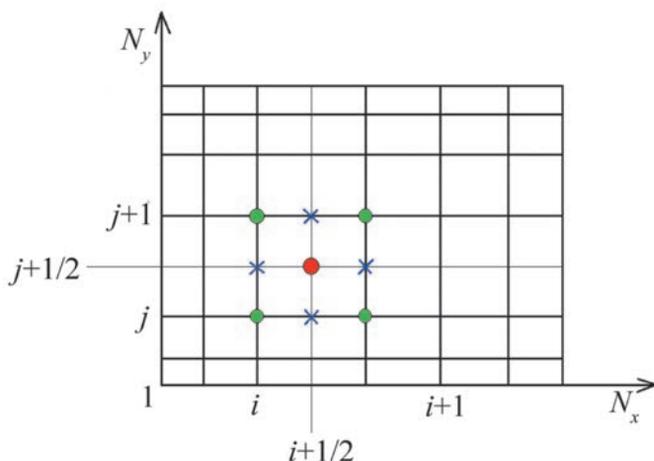


Рис. 2. Наложение на расчетную область регулярной прямоугольной сетки

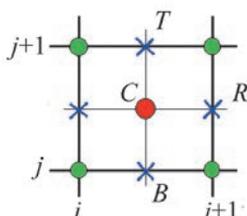


Рис. 3. Локальные обозначения переменных

Обозначим консервативные переменные (компоненты скорости и температуру) соответствующими прописными буквами (U , V , T), потоковые — строчными (u , v , θ). Горизонтальный шаг сетки (расстояние между узлами) — h_x , вертикальный — h_y . Шаг по времени — τ .

В дискретном виде алгоритм решения системы уравнений (5)—(8) представляет собой последовательность трех стандартных этапов (фаз) с некоторыми дополнениями.

В *фазе 1* вычисляются промежуточные значения консервативных переменных на половинном временном слое:

$$\frac{\tilde{U}_C^{n+1/2} - U_C^n}{\tau/2} + \frac{(u_R^n)^2 - (u_L^n)^2}{h_x} + \frac{u_T^n v_T^n - u_B^n v_B^n}{h_y} = \nu \Delta_h U_C^n + \beta g_x (T_C^n - T_0), \quad (12)$$

$$\frac{\tilde{V}_C^{n+1/2} - V_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n v_R^n - u_L^n v_L^n}{h_x} + \frac{(v_T^n)^2 - (v_B^n)^2}{h_y} = \nu \Delta_h V_C^n + \beta g_y (T_C^n - T_0), \quad (13)$$

$$\frac{T_C^{n+1/2} - T_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n \theta_R^n - u_L^n \theta_L^n}{h_x} + \frac{v_T^n \theta_T^n - v_B^n \theta_B^n}{h_y} = \alpha \Delta_h T_C^n. \quad (14)$$

Здесь Δ_h — численный лапласиан.

Из последних трех уравнений при заданных граничных условиях могут быть найдены предварительные значения консервативных компонент скоростей $\tilde{U}_C^{n+1/2}$ и $\tilde{V}_C^{n+1/2}$, а также консервативные значения температуры $T_C^{n+1/2}$ на половинном временном слое. Для нахождения окончательных значений консервативных скоростей на половинном слое воспользуемся фазой 1а, в которой учтено давление:

$$\frac{U_C^{n+1/2} - \tilde{U}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h p^{n+1/2}, \quad (15)$$

$$\frac{V_C^{n+1/2} - \tilde{V}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h p^{n+1/2}. \quad (16)$$

Если расписать численные операторы дифференцирования в последних двух выражениях, получим:

$$\frac{U_C^{n+1/2} - \tilde{U}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \frac{(p_{RT}^{n+1/2} + p_{RB}^{n+1/2}) - (p_{LT}^{n+1/2} + p_{LB}^{n+1/2})}{2h_x}, \quad (17)$$

$$\frac{V_C^{n+1/2} - \tilde{V}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \frac{(p_{RT}^{n+1/2} + p_{LT}^{n+1/2}) - (p_{RB}^{n+1/2} + p_{LB}^{n+1/2})}{2h_y}. \quad (18)$$

Двойные нижние индексы при давлении обозначают узел, к которому принадлежит данное давление (рис. 4).

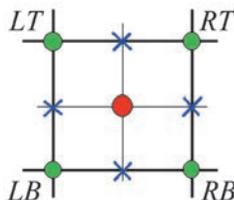


Рис. 4. Локальные обозначения переменных, принадлежащих к узлам сетки

Взяв производную по x от обеих частей уравнения (15), производную по y от обеих частей уравнения (16) и сложив полученные выражения, придем к уравнению

$$\left\{ \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h U_C^{n+1/2} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h V_C^{n+1/2} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h \tilde{U}_C^{n+1/2} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h \tilde{V}_C^{n+1/2} \right\} \frac{2}{\tau} =$$

$$= - \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]_h p^{n+1/2} - \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} \right]_h p^{n+1/2} \quad (19)$$

или

$$\left(\operatorname{div}_h \mathbf{V}_C^{n+1/2} - \operatorname{div}_h \tilde{\mathbf{V}}_C^{n+1/2} \right) \frac{2}{\tau} = -\Delta_h p^{n+1/2}. \quad (20)$$

Из уравнения (5) следует, что $\operatorname{div}_h \mathbf{V}_C^{n+1/2} = 0$. Таким образом, получаем уравнение Пуассона для давления:

$$\Delta_h p^{n+1/2} = \frac{2}{\tau} \operatorname{div}_h \tilde{\mathbf{V}}_C^{n+1/2}. \quad (21)$$

Из последнего уравнения итерационными методами можно найти величины $p^{n+1/2}$ для подстановки в уравнения (17)-(18).

В фазе 2 рассчитываются потоковые величины на новом временном слое по следующему алгоритму.

1. Если $U_{CL} > 0$ и $U_{CR} > 0$ (рис. 5), то

$$u_i^{n+1} = 2U_{CL} - u_{i-1}^n, \quad v_i^{n+1} = 2V_{CL} - v_{i-1}^n, \quad \theta_i^{n+1} = 2T_{CL} - \theta_{i-1}^n. \quad (22)$$

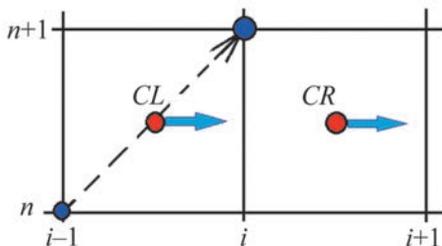


Рис. 5. Вычисление потоковых переменных на новом временном слое, течение направлено вправо

2. Если $U_{CL} < 0$ и $U_{CR} < 0$ (рис. 6), то

$$u_i^{n+1} = 2U_{CR} - u_{i+1}^n, \quad v_i^{n+1} = 2V_R - v_{i+1}^n, \quad \theta_i^{n+1} = 2T_{CR} - \theta_{i+1}^n. \quad (23)$$

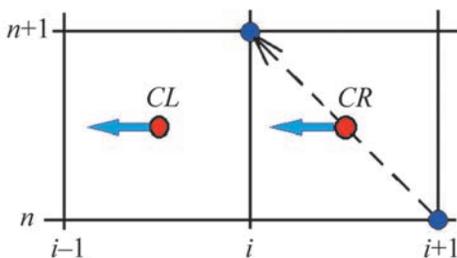


Рис. 6. Вычисление потоковых переменных на новом временном слое (течение направлено влево)

3. Если $U_{CL} < 0$ и $U_{CR} > 0$ (рис. 7), то

$$u_i^{n+1} = 0, \quad v_i^{n+1} = v_{i-1}^n, \quad \theta_i^{n+1} = \theta_{i-1}^n. \quad (24)$$

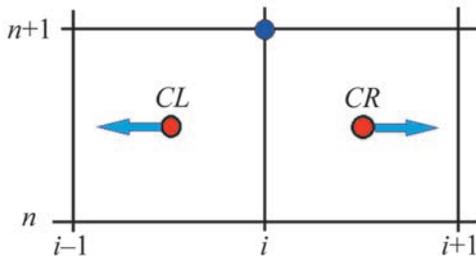


Рис. 7. Конфликт потоков (течение в соседних ячейках разнонаправлено)

4. Если $U_{CL} \geq 0$ и $U_{CR} \leq 0$ (рис. 8), то в каждой точке вычисляем два варианта потоковой переменной u_i^{n+1} : по формулам (22) и (23). Из них согласно принципу минимума парциальной локальной вариации [10] выбираем ту переменную, значение которой по модулю больше:

$$u_i^{n+1} = \max \left\{ \left| 2U_{CL} - u_{i-1}^n \right|, \left| 2U_{CR} - u_{i+1}^n \right| \right\}. \quad (25)$$

Если $\left| 2U_{CL} - u_{i-1}^n \right| > \left| 2U_{CR} - u_{i+1}^n \right|$, то переменные v_i^{n+1} и θ_i^{n+1} вычисляются по формулам (22), в противном случае — по формулам (23).

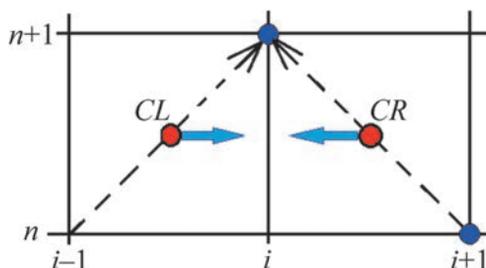


Рис. 8. Конфликт потоков (течение в соседних ячейках сонаправлено)

Совершенно аналогично производится расчет новых потоковых переменных по другому пространственному направлению.

Полученные значения потоковых переменных на новом временном слое не окончательные. Они должны быть скорректированы в соответствии с принципом максимума следующим образом. Пусть какая-либо из потоковых переменных, например, θ , была вычислена исходя из данных в ячейке C (см. рис. 3). И пусть

$$\theta_{\max} = \max \left\{ \theta_L^n, \theta_R^n, \theta_T^n, \theta_B^n, T_C^{n+1/2} \right\} + \tau Q_{\theta C}, \quad (26)$$

$$\theta_{\min} = \min \left\{ \theta_L^n, \theta_R^n, \theta_T^n, \theta_B^n, T_C^{n+1/2} \right\} + \tau Q_{\theta C}. \quad (27)$$

В последних двух уравнениях $Q_{\theta C}$ получается из характеристической формы исходной системы уравнений (5)—(8). Например, для потоковой переменной температуры на вертикальной грани $\theta_{i,j+1/2}$

$$Q_{\theta C} = \frac{T_C^{n+1/2} - T_C^n}{\tau/2} + \frac{u_L^n + u_R^n}{2} \frac{\theta_R^n - \theta_L^n}{h_x}. \quad (28)$$

Тогда значение корректируемой потоковой переменной модифицируется:

$$\theta^{n+1} = \begin{cases} \theta^{n+1}, & \text{если } \theta_{\min} \leq \theta^{n+1} \leq \theta_{\max}, \\ \theta_{\min}, & \text{если } \theta^{n+1} < \theta_{\min}, \\ \theta_{\max}, & \text{если } \theta^{n+1} > \theta_{\max}. \end{cases} \quad (29)$$

Следующий шаг — приведение скорректированных потоковых переменных скорости к дивергентному виду. Для этого требуется разрешить уравнение Пуассона для давления для потоковых переменных аналогично тому, как это было сделано в фазе 1а. Основное отличие заключается в том, что для потоковых переменных давление относится не к узлам, а к центрам ячеек.

Таким образом, будут найдены все потоковые переменные на новом временном слое $n + 1$, и их дивергенция в каждой точке будет равна нулю.

В фазе 3 вычисляются окончательные значения консервативных скоростей и температур на новом временном слое. При этом в отличие от фазы 1 шаг по времени берется целый:

$$\frac{T_C^{n+1} - T_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \{ \mathbf{L}T_h(u^n, v^n, \theta^n) + \mathbf{L}T_h(u^{n+1}, v^{n+1}, \theta^{n+1}) \} = \alpha \Delta_h T_C^{n+1/2}, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} & \frac{U_C^{n+1} - U_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \{ \mathbf{L}U_h(u^n, v^n) + \mathbf{L}U_h(u^{n+1}, v^{n+1}) \} = \\ & = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h p^{n+1/2} + \nu \Delta_h U_C^{n+1/2} + \beta g_x \left(\frac{1}{2} (T_C^{n+1} + T_C^n) - T_0 \right), \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} & \frac{V_C^{n+1} - V_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \{ \mathbf{L}V_h(u^n, v^n) + \mathbf{L}V_h(u^{n+1}, v^{n+1}) \} = \\ & = - \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)_h p^{n+1/2} + \nu \Delta_h V_C^{n+1/2} + \beta g_y \left[\frac{1}{2} (T_C^{n+1} + T_C^n) - T_0 \right], \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$\mathbf{L}U_h(u^n, v^n) = \frac{(u_R^n)^2 - (u_L^n)^2}{h_x} + \frac{u_T^n v_T^n - u_B^n v_B^n}{h_y}, \quad (33)$$

$$\mathbf{L}V_h(u^n, v^n) = \frac{u_R^n v_R^n - u_L^n v_L^n}{h_x} + \frac{(v_T^n)^2 - (v_B^n)^2}{h_y}, \quad (34)$$

Численный лапласиан некоторой переменной F_C в ячейке C может быть записан в следующем виде:

$$\Delta_h F_C = \operatorname{div}_h (\operatorname{grad}_h F_C) = \frac{f_R - f_L}{h_x} - \frac{f_T - f_B}{h_y}, \quad (39)$$

где f — потоки через соответствующие грани ячейки C :

$$f_R = \frac{F_{CR} - F_C}{h_x}, \quad f_T = \frac{F_{CT} - F_C}{h_y}, \quad f_B = \frac{F_C - F_{CB}}{h_y}. \quad (40)$$

Для простоты, чтобы не перегружать описание переменными, в данном случае будем считать расчетную сетку равномерной.

Поток через левую (лежащую на стенке) грань будет зависеть от граничного условия. Если задано граничное условие второго рода, то поток на стенке f_L явно определен. Например, если речь идет о температуре и об условии полной теплоизоляции на стенке, то $f_L = 0$.

Если задано граничное условие первого рода (т. е. значение переменной на стенке — F_L), то поток f_L необходимо аппроксимировать по известному значению переменной на границе. Аппроксимация с первым порядком действует только одну ближайшую к стенке консервативную переменную:

$$f_L = \frac{F_C - F_L}{h_x/2}. \quad (41)$$

При квадратичной аппроксимации в формулу для потока на стенке включается ближайшая потоковая переменная F_R :

$$f_L = \frac{4F_C - 3F_L - F_R}{h_x}. \quad (42)$$

Последнее выражение для потока на стенке может также использоваться и при вычислении локального числа Нуссельта в каждой пристеночной ячейке области.

3. Верификация двумерной схемы «Кабаре» при различных числах Рэлея

3.1. Задача Дэвиса. Течение в квадратной области

Рассмотрим двумерное течение газа в квадрате со сторонами 1×1 . Ускорение силы тяжести направлено вниз и равно единице. $Pr = 0,71$. Обе компоненты скорости на всех границах расчетной области равны нулю (условие прилипания). Помимо этого на горизонтальных стенках — адиабатические граничные условия, вертикальные стенки имеют постоянную температуру $T_h = 1$ и $T_c = 0$ (рис. 10).

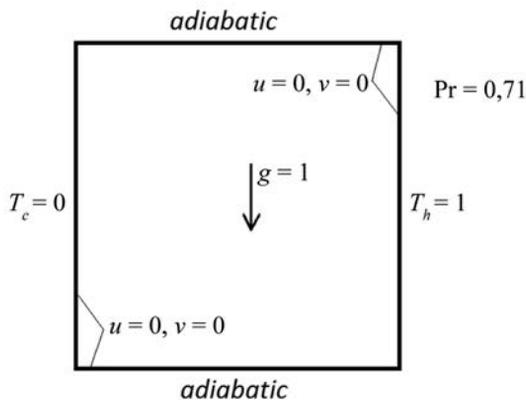


Рис. 10. Постановка задачи Дэвиса

Данная задача подробно рассмотрена и численно решена Дэвисом [11] в 1983 г. с помощью тщательно верифицированного разностного метода второго порядка при следующих числах Рэлея: 10^3 , 10^4 , 10^5 и 10^6 . Автор использовал сгущающиеся сетки 10×10 , 20×20 , 40×40 , 62×62 и 80×80 ячеек. Получены максимальные значения компонент скоростей, средние и максимальные тепловые потоки (числа Нуссельта). Заявлено, что представленные Дэвисом результаты, экстраполированные при сгущении сетки, совпадают с экспериментальными данными в пределах 1% для сравнительно больших чисел Рэлея (порядка 10^6), и в пределах 0,1% — для малых (порядка 10^3), что подтверждают более поздние расчеты и эксперименты. Эти результаты до сих пор являются эталонными для многих исследователей [12].

Таким образом, задачу Дэвиса и полученные им результаты можно взять за основу при тестировании схемы «Кабаре» в ламинарном случае. В турбулентном случае, при $Ra > 10^6$, задача Дэвиса также решена другими авторами, например, [12; 13]. Несмотря на некоторые расхождения в их результатах, проведем сравнение и с ними, доведя число Рэлея до 10^{11} . Дальнейшее его увеличение в данном тесте нецелесообразно, так как нет достоверных данных, с которыми можно было бы провести сравнение. Тесты при больших Ra проведены при других соотношениях сторон расчетной области (см. ниже).

Кроме численных результатов других авторов для верификации можно принять во внимание эмпирический закон [14; 15], согласно которому среднее число Нуссельта в турбулентном режиме зависит от числа Рэлея:

$$Nu = 0,182Ra^{0,275}. \quad (43)$$

В первой серии расчетов по схеме «Кабаре» выберем равномерную квадратную сетку 50×50 ячеек. Ширина ячейки при этом составит 0,02, что согласно (1) соответствует ширине пограничного слоя при $Ra \approx 4 \cdot 10^6$. Таким образом, следует ожидать, что на данной сетке тест Дэвиса пройдет успешно вплоть до чисел Рэлея порядка 10^6 .

В табл. 1 представлены результаты численных экспериментов Дэвиса (экстраполированные при сгущении сетки), современные данные Диксита [12] (полученные на сетках вплоть до 512×512) и результаты, полученные по схеме «Кабаре» на равномерной сетке 50×50 ячеек. Здесь максимальные значения скоростей вычислялись на линиях, проведенных перпендикулярно сторонам через центр области. Ниже в скобках приведены x - и y -координаты найденных максимумов. Также представлены найденные значения средних чисел Нуссельта и соответствующие отклонения в процентах от эталонных результатов, полученных Дэвисом и Дикситом.

Как и было предсказано выше, на данной сетке схема «Кабаре» демонстрирует прекрасную согласованность результатов с данными Дэвиса до чисел Рэлея порядка 10^6 . Для более высоких чисел Рэлея недостаточно хорошо разрешается пристеночный градиент температуры и области с максимальной скоростью теплоносителя. Это не является недостатком используемой разностной схемы. Ниже показано, что сгущение сетки вблизи стенок без увеличения общего числа ячеек позволит решить эту проблему. Более того, мы даже уменьшим общее число расчетных ячеек.

На примере задачи Дэвиса с числом Рэлея 10^6 исследуем сходимость результатов, полученных по схеме «Кабаре», на последовательности сгущающихся сеток — от 10×10 до 400×400 .

Таблица 1. Верификационная таблица к задаче Дэвиса, равномерная сетка 50×50 ячеек

Ra	U_{\max} (y)	V_{\max} (x)	Nu	U_{\max} (y)	V_{\max} (x)	Nu (отклонение)
	<i>Дэвис [11], экстраполяция</i>			<i>«Кабаре», 50×50 ячеек</i>		
10^3	3,469 (0,813)	3,697 (0,178)	1,117	3,605 (0,81)	3,645 (0,17)	1,112 (0,4%)
10^4	16,178 (0,823)	19,617 (0,119)	2,238	16,038 (0,83)	19,521 (0,13)	2,221 (0,8%)
10^5	34,730 (0,855)	68,590 (0,066)	4,509	34,870 (0,85)	68,403 (0,07)	4,526 (0,4%)
10^6	64,630 (0,850)	219,36 (0,0379)	8,817	63,0 (0,85)	212,56 (0,03)	8,868 (0,6%)
	<i>Диксит [12]</i>			<i>«Кабаре», 50×50 ячеек</i>		
10^7	164,236 (0,851)	701,922 (0,02)	16,79	137,4 (0,91)	569,9 (0,03)	17,179 (2,3%)
10^8	389,877 (0,937)	2241,37 (0,0112)	30,506	535 (0,93)	1920 (0,01)	34,73 (14%)
10^9	503,24 (0,966)	6820,1 (0,0064)	57,350	1640 (0,93)	5200 (0,01)	54,9 (4,3%)
10^{10}	2323	21463	103,663	5900	10800	64,5

В табл. 2 представлены результаты расчетов по схеме «Кабаре» на различных сетках при $Ra=10^6$.

Таблица 2. Сходимость результатов на последовательности сгущающихся сеток

Расчетная сетка	h_x	U_{\max} (y)	V_{\max} (x)	Nu	Отклонение
10×10	0,1	51,6 (0,85)	187,8 (0,05)	9,191	5%
20×20	0,05	56,3 (0,925)	197,4 (0,025)	9,670	10%
30×30	0,0333	59,18 (0,883)	192,4 (0,05)	9,040	2,5%
40×40	0,025	62,3 (0,862)	212,7 (0,037)	8,889	0,8%
50×50	0,02	63,0 (0,85)	212,6 (0,03)	8,868	0,6%

Окончание табл. 2.

Расчетная сетка	h_x	$U_{\max} (y)$	$V_{\max} (x)$	Nu	Отклонение
70×70	0,0143	63,15 (0,85)	218,9 (0,036)	8,848	0,35%
100×100	0,01	64,14 (0,855)	220,14 (0,035)	8,840	0,26%
200×200	0,005	64,74 (0,8525)	221,15 (0,0375)	8,837	0,23%
400×400	0,0025	64,79 (0,8513)	220,81 (0,0388)	8,821	0,05%
Davis		64,63 (0,850)	219,36 (0,0379)	8,817	

Как видно из этих данных, максимальные скорости, их координаты и средние числа Нуссельта при измельчении сетки приближаются к эталонным данным Дэвиса. На самой подробной сетке расхождение данных не превышает 0,1%, что значительно меньше, чем достоверность результатов Дэвиса.

На рис. 11 представлена зависимость среднего числа Нуссельта, полученного по схеме «Кабаре», от числа узлов N_x по одному из направлений при $Ra = 10^6$. Четко прослеживается сходимость результата при сгущении сетки.

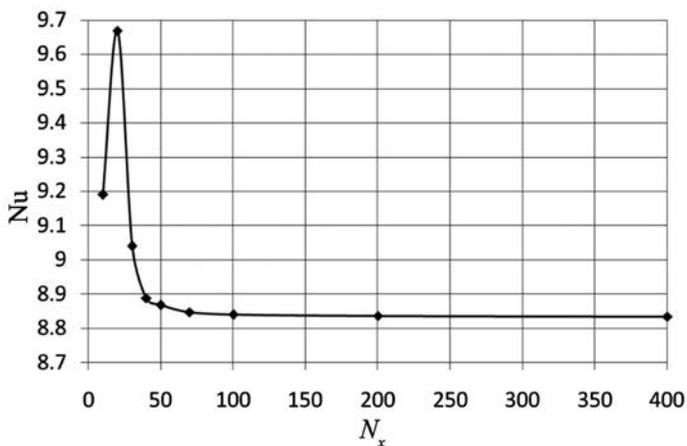


Рис. 11. Зависимость среднего числа Нуссельта от числа узлов вдоль одного из направлений при $Ra = 10^6$

Рассмотрим результаты работы схемы «Кабаре» на сгущенной к стенкам, но при этом достаточно грубой сетке — 20×20 ячеек (рис. 12). Видно, что внутри области ячейки очень грубые, а на границах — очень вытянутые. Соотношение сторон ячеек вблизи стенки достигает 72, что не мешает предложенному алгоритму успешно воспроизводить основные характеристики течения.

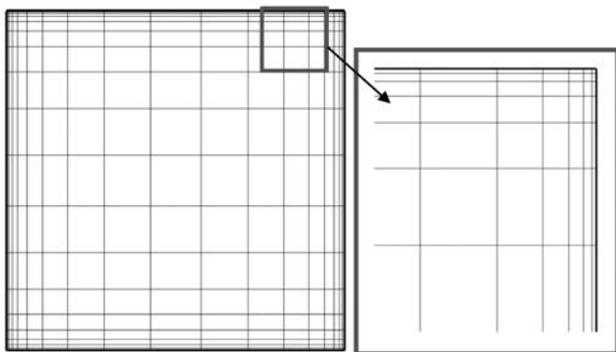


Рис. 12. Пример сгущающейся расчетной сетки 20×20 ячеек для задачи Дэвиса

В табл. 3 представлены минимальные шаги расчетной сетки (вблизи стенок), максимальные компоненты скорости с их координатами, средние числа Нуссельта и получившиеся отклонения от результатов Дэвиса (при $Ra \leq 10^6$) и Диксита (при $Ra > 10^6$).

Таблица 3. Результаты расчетов по схеме «Кабаре» на сгущающейся сетке 20×20 ячеек

Ra	h_{\min}	U_{\max} (y)	V_{\max} (x)	Nu	Отклонение
10^3	0,0297	3,596 (0,829)	3,677 (0,171)	1,117	0%
10^4	0,0297	15,927 (0,829)	19,516 (0,125)	2,236	0,09%
10^5	0,00893	38,542 (0,872)	67,265 (0,0531)	4,516	0,16%
10^6	0,00203	74,125 (0,893)	219,941 (0,0333)	8,822	0,06%
10^7	0,00203	167 (0,893)	701 (0,0175)	16,63	1,0%

Окончание табл. 3.

Ra	h_{\min}	U_{\max} (y)	V_{\max} (x)	Nu	Отклонение
10^8	0,00203	482 (0,939)	2100 (0,0086)	30,3	0,7%
10^9	0,00203	1020 (0,9667)	6700 (0,0086)	55,6	3,1%
10^{10}	0,00203	2100	22000	100,3	3,2%
10^{11}	0,00203	6300	50500	174	1,8% [16] 5,4% [13]

Следует отметить, что Дэвис и Диксит считали на гораздо более подробных сгущающихся сетках. При $Ra \geq 10^9$ сетка у Диксита достигала 512 узлов по каждому из направлений, т. е. общее число узлов более чем в 600 раз больше, чем в демонстрационных расчетах по схеме «Кабаре».

На рис. 13 представлено распределение температуры при числе Рэлея 10^{10} в один из моментов времени, когда течение в области установилось (в том смысле, что средние по времени характеристики течения больше не меняются, но течение при этом имеет турбулентный нестационарный характер).

Наблюдается четко выраженная стратификация по температуре. Среднее число Нуссельта при данном числе Рэлея — порядка 100,3 (см. табл. 3), максимальная скорость достигает 22 000, что с хорошей точностью совпадает с данными Диксита (см. табл. 1).

При высоких числах Рэлея в установившемся режиме течение теплоносителя происходит в основном непосредственно вблизи стенок. Иными словами, кинетическая энергия газа сосредоточена в тонком пристеночном слое. Этот пристеночный слой уверенно разрешает предложенная методика до тех пор, пока его толщина не меньше тонкой ячейки вблизи стенки. Из формулы (1) и данных о минимальной ширине пристеночной ячейки (табл. 3) можно получить оценку, что «переломный момент» для данной сетки наступит при числах Рэлея порядка 10^{10} — 10^{11} . Действительно, даже при $Ra = 10^{11}$ результаты работы схемы хорошо согласуются с данными [13] и [16].

На рис. 14 сведены известные численные, эмпирические данные по средним числам Нуссельта, и результаты, полученные по схеме «Кабаре» на равномерной сетке 50×50 ячеек без сгущения и на грубой сетке 20×20 ячеек со сгущением.

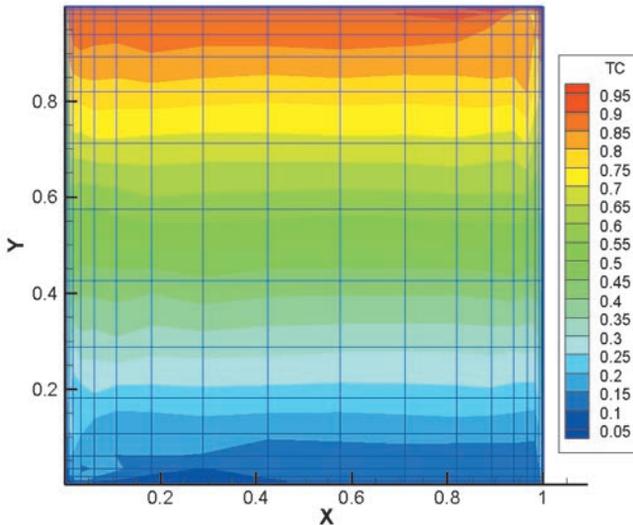


Рис. 13. Распределение температуры на сетке 20×20 ячеек при $Ra = 10^{10}$

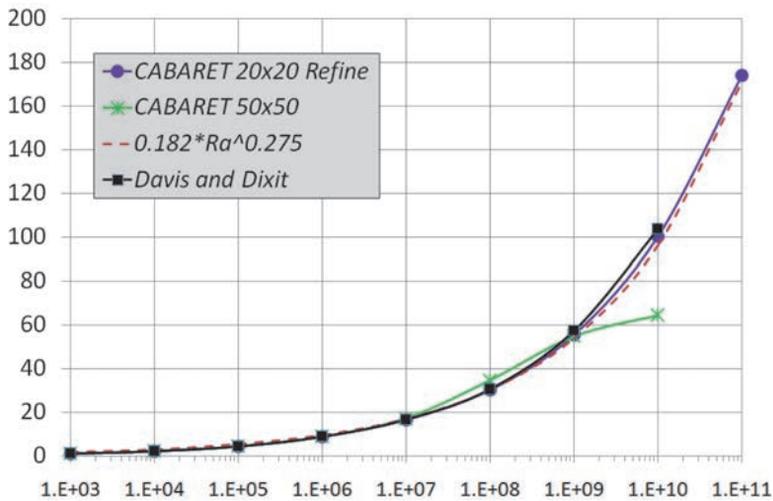


Рис. 14. Зависимость среднего числа Нуссельта от Рэлея, полученная по схеме «Кабаре» на сетке 20×20 со сгущением, на сетке 50×50 без сгущения, по формуле (43) и Дэвисом и Дикситом

Эти же данные сведены в табл. 4. Видно, что вплоть до чисел Рэлея 10^{11} описанная методика на сгущающихся сетках демонстрирует совпадение результатов и с эмпирической формулой (43).

Таблица 4. Средние числа Нуссельта в зависимости от числа Рэлея, полученные различными авторами, по формуле (43), по схеме «Кабаре» на сетке 50×50 без сгущения и на сетке 20×20 со сгущением

Ra	Дэвис, Диксит	$0,182 Ra^{0,275}$	«Кабаре», 50×50	«Кабаре», 20×20 со сгущением
10^3	1,117	1,216	1,112	1,117
10^4	2,238	2,291	2,221	2,236
10^5	4,509	4,316	4,526	4,516
10^6	8,817	8,130	8,868	8,822
10^7	16,79	15,31	17,179	16,63
10^8	30,506	28,85	34,73	30,3
10^9	57,35	54,33	54,9	55,6
10^{10}	103,66	102,3	64,5	100,3
10^{11}	171,0 [16] 165,1 [13]	192,8	—	174

Таким образом, данный общепринятый классический тест показал, что схема «Кабаре» в двумерном случае уверенно воспроизводит такие базовые характеристики термоконвективного течения, как, например, средний тепловой поток и распределение пиковых значений скоростей даже на исключительно грубых сетках с сильно вытянутыми ячейками.

3.2. Ламинарный двумерный тест ERCOFTAC

Данный тест практически полностью повторяет предыдущий, отличия состоят только в числовых параметрах задачи. На рис. 15 представлена рассматриваемая расчетная область — квадрат со сторонами L . Температура правой стенки — T_c , левой — T_h . Верхняя и нижняя стенки адиабатически изолированы. На всех границах области — условие прилипания по скорости.

Параметры среды заданы явно через размерные константы. Плотность $\rho = 1,19 \text{ кг/м}^3$, динамическая вязкость $\mu = 1,8 \cdot 10^{-5} \text{ кг/м} \cdot \text{с}$, коэффициент термического расширения $\beta = 0,00341 \text{ К}^{-1}$, число Прандтля $Pr = 0,71$, ускорение свободного падения $g = 9,81 \text{ м/с}^2$, температура горячей стенки $T_h = 12 \text{ К}$, холодной — $T_c = 2 \text{ К}$.

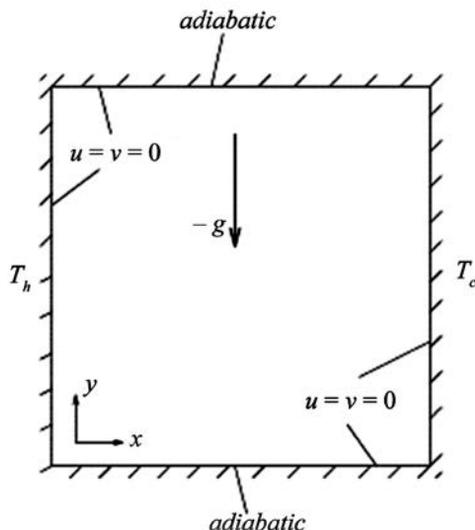


Рис. 15. Расчетная область и граничные условия

Данная задача решена численно на достаточно подробных сетках (вплоть до 320×320) с использованием современных вычислительных методов [17]. Для чисел Рэлея 10^4 , 10^5 и 10^6 получены установившиеся распределения скоростей и температур в расчетной области, а также средние и максимальные числа Нуссельта, характеризующие теплообмен.

В табл. 5 приведены результаты численных экспериментов, описание которых размещено в базе знаний ERCOFTAC [18] и в работе [17]. Также приведены результаты, полученные по схеме «Кабаре» на равномерной сетке 50×50 ячеек.

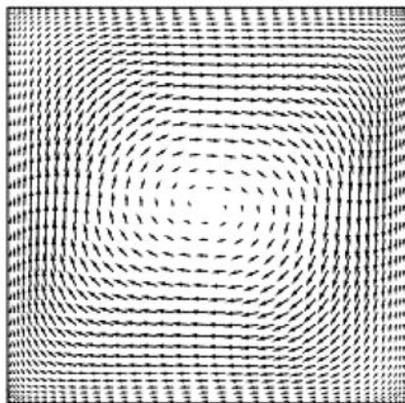
Таблица 5. Верификационная таблица к ламинарной задаче ERCOFRAC

Ra	L	Nu	Nu _{max}	Nu («Кабаре»)	Отклонение, %
10^4	0,021277	2,24475	3,53087	2,245	0,01
10^5	0,045841	4,52164	7,72013	4,523	0,03
10^6	0,098761	8,82513	17,536	8,783	0,50

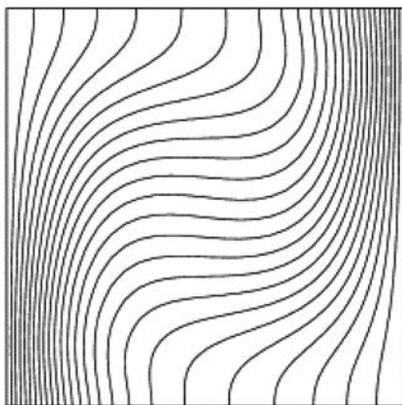
Из табл. 5 видно, что для чисел Рэлея 10^4 и 10^5 результаты, полученные по схеме «Кабаре» и из [17], [18], практически полностью совпадают (в пределах 0,03%). Для числа Рэлея 10^6 результат также хорошо соотносится с

эталонным (в пределах 0,5%), причем при измельчении сетки отклонение от эталонного значения Nu продолжает падать.

На рис. 16—18 представлены распределения полей скоростей и температур в установившемся режиме течения для различных чисел Рэлея, полученные по схеме «Кабаре». Данные распределения полностью соответствуют результатам, представленным в базе знаний ERCOFTAC.

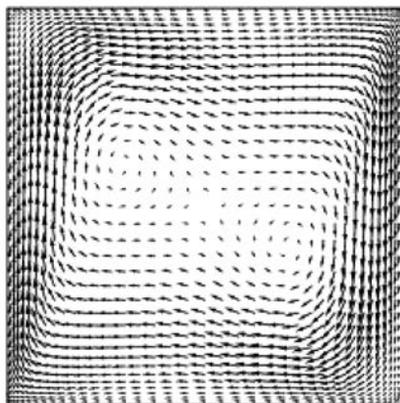


a

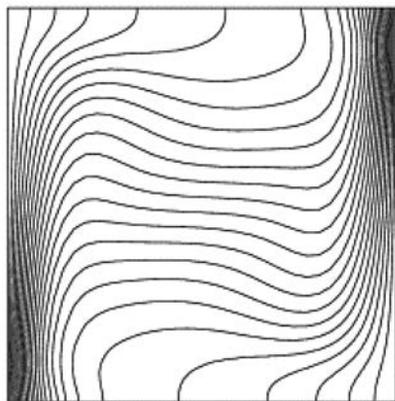


б

Рис. 16. Векторы скорости (а) и изолинии температур (б) при ламинарном течении в квадратной области при $Ra = 10^4$

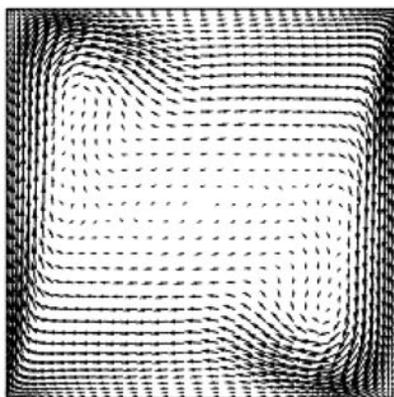


а

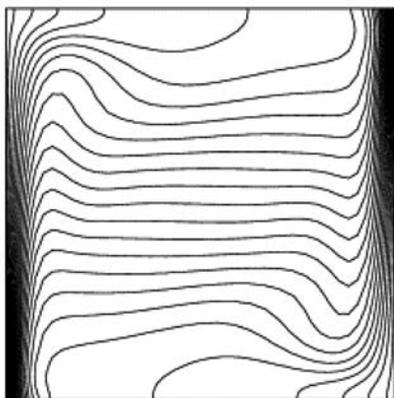


б

Рис. 17. Векторы скорости (а) и изолинии температур (б) при ламинарном течении в квадратной области при $Ra = 10^5$



а



б

Рис. 18. Векторы скорости (а) и изолинии температур (б) при ламинарном течении в квадратной области при $Ra=10^6$

3.3. Вертикальный слой в турбулентном режиме

Рассматривается теплообмен в воздушном зазоре между двумя вертикальными плоскими пластинами с разной температурой. Высота зазора — 0,25 м, ширина — 0,025 м. Температура горячей поверхности — 150°C , холодной — 50°C .

В качестве рабочей среды выбран газ со следующими характеристиками:

$$\text{кинематическая вязкость } \nu = 2,313 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с};$$

$$\text{число Прандтля } Pr = 0,69 ;$$

$$\text{теплопроводность } \lambda = 0,00032 \text{ Вт/м} \cdot \text{ }^\circ\text{C};$$

$$\text{коэффициент объемного расширения } \beta = \frac{1}{373} \approx 0,00268 \text{ К}^{-1}.$$

Таким образом,

$$Gr = \frac{\beta g \delta^3 \Delta T}{\nu^2} = 7,68 \cdot 10^8,$$

$$Ra = Gr Pr = 5,3 \cdot 10^8.$$

Согласно экспериментальным данным Дропкина и Сомерскейла [19, с. 242] средний тепловой поток через горячую и холодную стенки в данной постановке задачи составляет $47,13 \text{ Вт/м}^2$ (среднее число Нуссельта — 36,82).

В общем случае для области параметров $0,02 < Pr < 11560$, $5 < H/L < 18$, $10^4 < Ra < 7 \cdot 10^8$ (H/L — соотношение высоты и ширины области) средние числа Нуссельта могут быть описаны формулой [19]

$$Nu = 0,05 Ra^{0,33} Pr^{0,074}. \quad (44)$$

В монографии [4] обобщены результаты семи различных экспериментов, по которым выписана аналогичная формула. Однако показатели степени при числах Рэлея и Прандтля колеблются в пределах 20%. Разброс достаточно велик, что говорит о сложности данного вида течений и неоднозначности последней формулы. Совпадение численных оценок с данной формулой в пределах 10—20% будет удовлетворительным результатом.

По схеме «Кабаре» на равномерных сетках для числа Рэлея $5,3 \cdot 10^8$ получены следующие результаты:

$$\text{сетка } 30 \times 300: Nu = 28,6 \text{ (отклонение } 22\%);$$

$$\text{сетка } 50 \times 500: Nu = 35,9 \text{ (отклонение } 2,5\%);$$

$$\text{сетка } 100 \times 1000: Nu = 36,7 \text{ (отклонение менее } 1\%).$$

На рис. 19 в качестве примера представлено, как выглядит распределение температуры в вертикальном слое при $Ra = 5,3 \cdot 10^8$. Это расчет по схеме «Кабаре» на равномерной сетке 50×500 ячеек. Движение воздуха еще не

установилось, отчетливо видны вихревые структуры различных масштабов. Вихревое течение будет наблюдаться и в установившемся режиме, только вихри будут сосредоточены в основном вблизи стенок области. Внутри области будет температурная стратификация.

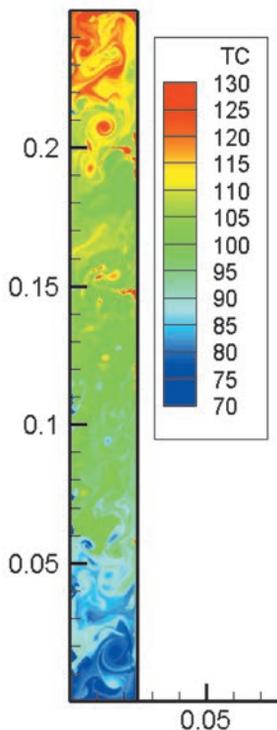


Рис. 19. Распределение температуры в один из моментов времени

Использование сгущающихся сеток позволяет сократить число ячеек по горизонтальному направлению от холодной стенки к горячей до 40. Расчеты показали, что на сетке 40×80 ячеек при числе Рэлея вблизи потолка области применимости эмпирической формулы (44) удастся добиться совпадения в пределах 5%.

3.4. Горизонтальный слой в турбулентном режиме

Постановка данной задачи повторяет предыдущую, меняется только направление силы тяжести. Рассматривается теплообмен между двумя горизонтальными пластинами с заданной температурой. Холодная пластина

находится сверху, горячая — внизу. Вектор силы тяжести направлен вертикально вниз.

Для области параметров $0,02 < Pr < 11\,560$, $5 < H/L < 18$, $10^4 < Ra < 7 \cdot 10^8$ (H/L — соотношение высоты и ширины области) средние числа Нуссельта можно описать формулой [19]

$$Nu = 0,07 Ra^{0,33} Pr^{0,074}. \quad (45)$$

Отличие от соотношения (44) заключается в коэффициенте пропорциональности. Тепловой поток при горизонтальном положении слоя должен быть выше в 1,4 раза.

Для числа Рэлея $5,3 \cdot 10^8$ по формуле (45) среднее число Нуссельта должно быть порядка 51,55. По схеме «Кабаре» на равномерной сетке 50×500 результат согласуется с эмпирическим в пределах 8%: $Nu \approx 47,2$. Характер течения при этом существенно отличается от случая, когда слой расположен вертикально. При подогреве снизу образуются восходящие и нисходящие струи, которые формируют 10 крупных вихрей, как показано на рис. 20.

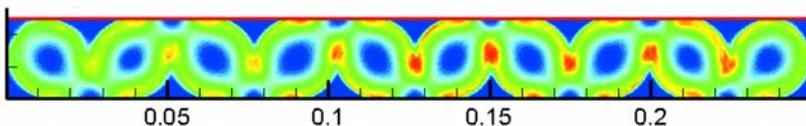


Рис. 20. Демонстрация вихревой структуры течения с помощью осредненного по времени распределения кинетической энергии

Положение и количество данных вихрей устойчиво во времени. Вследствие этого вблизи горизонтальных границ образуются устойчивые локальные температурные «всплески» и «провалы» (рис. 21). Успешное моделирование подобных температурных возмущений на стенках может быть интересно с инженерной точки зрения для оценки ресурса каналов, труб.

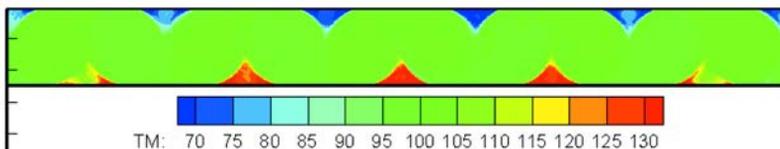


Рис. 21. Распределение средней по времени температуры

4. Схема «Кабаре» для моделирования тепловой конвекции несжимаемой жидкости в трехмерном случае

4.1. Математическая модель

Рассматривается естественная конвекция в трехмерной области в форме параллелепипеда со сторонами $H \times L \times D$, где H — высота области, L — ее ширина, D — глубина (рис. 22). Температуры левой и правой вертикальных стенок постоянны и равны соответственно T_c и T_h , $T_c < T_h$. Верхняя и нижняя, а также передняя и задняя стенки теплоизолированы. Сила тяжести направлена вертикально вниз вдоль оси x . На левой, правой, верхней и нижней стенках все три компоненты скорости жидкости (газа) обращаются в ноль (условие прилипания). На передней и задней стенках — условие проскальзывания. Это условие необходимо для моделирования двумерных задач в трехмерной постановке.

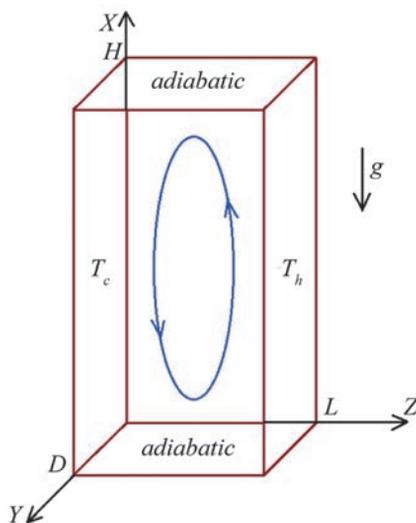


Рис. 22. Тепловая конвекция в трехмерной области

Пусть $T(x, y, z)$ — температура жидкости внутри области, $u(x, y, z)$, $v(x, y, z)$ и $w(x, y, z)$ — компоненты скорости жидкости по каждому из

направлений соответственно, $P(x, y, z)$ — давление, где $x \in [0, L]$,
 $y \in [0, H]$, $z \in [0, D]$.

Граничные условия по температуре для вертикальных изотермических
стенок, таким образом, будут иметь вид

$$T(x, y, z)|_{z=0} = T_c; \quad T(x, y, z)|_{z=L} = T_h.$$

Для вертикальных адиабатических и горизонтальных стенок

$$\frac{\partial T}{\partial y}\bigg|_{y=0} = \frac{\partial T}{\partial y}\bigg|_{y=D} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=H} = 0.$$

Граничные условия по давлению задаются из условия непротекания жид-
кости

$$\frac{\partial P}{\partial \vec{n}}\bigg|_{\delta} = 0,$$

где \vec{n} — нормаль к границе δ расчетной области.

Условие прилипания на стенках области:

$$\begin{aligned} u(x, y, z)|_{z=0} = u(x, y, z)|_{z=L} = u(x, y, z)|_{x=0} = u(x, y, z)|_{x=H} = 0, \\ v(x, y, z)|_{z=0} = v(x, y, z)|_{z=L} = v(x, y, z)|_{x=0} = v(x, y, z)|_{x=H} = 0, \\ w(x, y, z)|_{z=0} = w(x, y, z)|_{z=L} = w(x, y, z)|_{x=0} = w(x, y, z)|_{x=H} = 0. \end{aligned}$$

Условие проскальзывания:

$$\begin{aligned} v(x, y, z)|_{y=0} = v(x, y, z)|_{y=D} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{y=0} = \frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{y=D} = \frac{\partial w}{\partial y}\bigg|_{y=0} = \frac{\partial w}{\partial y}\bigg|_{y=D} = 0. \end{aligned}$$

Исходной для расчета является система нестационарных уравнений тепло-
вой конвекции несжимаемой «жидкости Буссинеска» в трехмерном случае:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (46)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{\partial uw}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \nu \Delta u + \beta g_x (T - T_0), \quad (47)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial vw}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \nu \Delta v + \beta g_y (T - T_0), \quad (48)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial uw}{\partial x} + \frac{\partial vw}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \nu \Delta w + \beta g_z (T - T_0), \quad (49)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} + \frac{\partial wT}{\partial z} = \alpha \Delta T, \quad (50)$$

где ν — кинематическая вязкость ($\nu = \mu/\rho$, где μ и ρ — соответственно динамическая вязкость и плотность); α — коэффициент температуропроводности ($\alpha = \frac{\kappa}{c_p \rho}$, где κ и c_p — коэффициент теплопроводности и теплоемкость жидкости); β — коэффициент объемного теплового расширения жидкости; g_x , g_y и g_z — компоненты ускорения свободного падения; T_0 — равновесная температура; Δ — оператор Лапласа.

Физические и геометрические параметры задачи описываются, как и в двумерном случае, двумя основными безразмерными параметрами: числом Рэлея

$$Ra = \frac{\beta g (T_h - T_c) L^3}{\alpha \nu} \quad (51)$$

и числом Прандтля

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}. \quad (52)$$

Также важную роль играет аспектное соотношение сторон расчетной области $A = H/L$ — отношение высоты области к ее ширине.

Возникающий между изотермическими стенками теплообмен характеризуется средним числом Нуссельта. Например, среднее число Нуссельта левой стенки, можно записать следующим образом:

$$Nu_{\text{wall}} = \left\langle \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{z=0} \right\rangle \frac{L}{T_h - T_c}. \quad (53)$$

4.2. Дискретизация задачи

На рассматриваемую область $H \times D \times L$ наложим прямоугольную расчетную сетку с $N_x \cdot N_y \cdot N_z$ узлами. Занумеруем узлы по оси x от 1 до N_x , по оси y — от 1 до N_y , по оси z — от 1 до N_z . Таким образом, получим прямоугольную неравномерную сетку, содержащую $N_x \cdot N_y \cdot N_z$ узлов или $(N_x - 1) \cdot (N_y - 1) \cdot (N_z - 1)$ ячеек. Граничные узлы ложатся на границу области. На рис. 23 для наглядности представлено сечение расчетной сетки, лежащее в плоскости Oxy .

Схема «Кабаре» в трехмерном случае оперирует с двумя типами переменных: консервативными, относящимися к центрам ячеек, и потоковыми, которые относятся к центрам граней ячеек. Консервативные переменные будут иметь дробную нумерацию, потоковые — смешанную (см. рис. 23).

При численном решении уравнений Навье—Стокса потребуются решать трехмерное эллиптическое уравнение для давления. Давление, как и дивергенция скорости, рассчитанная по консервативным переменным, будет относиться непосредственно к узлам расчетной сетки и иметь целую нумерацию. Пусть у каждой переменной верхний индекс обозначает номер слоя по времени, нижний — пространственное положение переменной на расчетной сетке, для чего введем локальные обозначения, как показано на рис. 24. Здесь консервативная переменная **C** относится к центру ячейки, потоковые переменные **Up**, **Down**, **Right**, **Left**, **Front**, **Back** — к центрам граней ячейки.

Обозначим консервативные переменные (компоненты скорости и температуру) соответствующими прописными буквами (U, v, T), потоковые — строчными (u, v, θ). Шаги сетки (расстояние между узлами) по каждому из пространственных направлений — h_x, h_y, h_z . Шаг по времени — τ .

В дискретном виде алгоритм решения системы уравнений (46)—(50) представляет собой последовательность трех стандартных этапов (фаз), совершенно аналогичных описанным выше для двумерного случая.

В фазе 1 вычисляются промежуточные значения консервативных переменных на половинном временном слое:

$$\frac{T_C^{n+1/2} - T_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n \theta_R^n - u_L^n \theta_L^n}{h_x} + \frac{v_F^n \theta_F^n - v_B^n \theta_B^n}{h_y} + \frac{w_U^n \theta_U^n - w_D^n \theta_D^n}{h_z} = \alpha \Delta_h T_C^n, \quad (54)$$

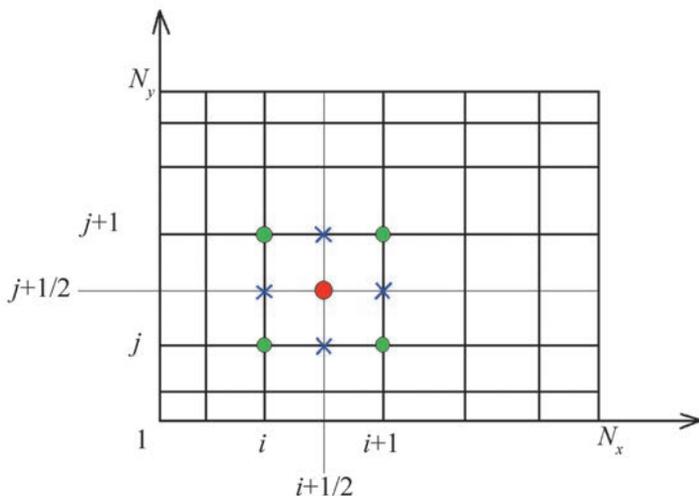


Рис. 23. Наложение на расчетную область регулярной прямоугольной сетки

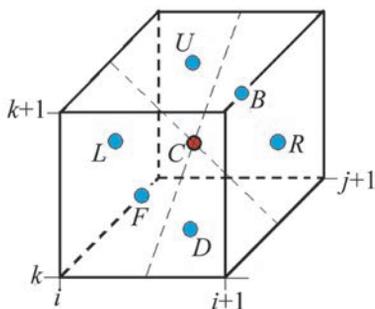


Рис. 24. Локальные обозначения переменных

$$\frac{\tilde{U}_C^{n+1/2} - U_C^n}{\tau/2} + \frac{(u_R^n)^2 - (u_L^n)^2}{h_x} + \frac{u_F^n v_F^n - u_B^n v_B^n}{h_y} + \frac{u_U^n w_U^n - u_D^n w_D^n}{h_z} = \quad (55)$$

$$= \nu \Delta_h U_C^n + \beta g_x (T_C^{n+1/2} - T_0),$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{V}_C^{n+1/2} - V_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n v_R^n - u_L^n v_L^n}{h_x} + \frac{(v_F^n)^2 - (v_B^n)^2}{h_y} + \frac{w_U^n v_U^n - w_D^n v_D^n}{h_z} = \\ = \nu \Delta_h V_C^n + \beta g_y (T_C^{n+1/2} - T_0), \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{W}_C^{n+1/2} - W_C^n}{\tau/2} + \frac{u_R^n w_R^n - u_L^n w_L^n}{h_x} + \frac{v_F^n w_F^n - v_B^n w_B^n}{h_y} + \frac{(w_U^n)^2 - (w_D^n)^2}{h_z} = \\ = \nu \Delta_h W_C^n + \beta g_z (T_C^n - T_0). \end{aligned} \quad (57)$$

Здесь Δ_h — численный трехмерный лапласиан.

Из последних четырех уравнений при заданных граничных условиях могут быть найдены предварительные значения консервативных компонент скоростей $\tilde{U}_C^{n+1/2}$, $\tilde{V}_C^{n+1/2}$ и $\tilde{W}_C^{n+1/2}$, а также консервативные значения температуры $T_C^{n+1/2}$ на половинном временном слое. Для нахождения окончательных значений консервативных скоростей на половинном слое воспользуемся *фазой 1a*, в которой учтено давление:

$$\frac{U_C^{n+1/2} - \tilde{U}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h p^{n+1/2}, \quad (58)$$

$$\frac{V_C^{n+1/2} - \tilde{V}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h p^{n+1/2}, \quad (59)$$

$$\frac{W_C^{n+1/2} - \tilde{W}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_h p^{n+1/2}. \quad (60)$$

Если расписать численные операторы дифференцирования в последних двух выражениях, получим:

$$\begin{aligned} \frac{U_C^{n+1/2} - \tilde{U}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = \\ = - \frac{(p_3^{n+1/2} + p_4^{n+1/2} + p_7^{n+1/2} + p_8^{n+1/2}) - (p_1^{n+1/2} + p_2^{n+1/2} + p_5^{n+1/2} + p_6^{n+1/2})}{4h_x}, \end{aligned} \quad (61)$$

$$\frac{V_C^{n+1/2} - \tilde{V}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \frac{(p_2^{n+1/2} + p_3^{n+1/2} + p_6^{n+1/2} + p_7^{n+1/2}) - (p_1^{n+1/2} + p_4^{n+1/2} + p_5^{n+1/2} + p_8^{n+1/2})}{4h_y}, \quad (62)$$

$$\frac{W_C^{n+1/2} - \tilde{W}_C^{n+1/2}}{\tau/2} = - \frac{(p_5^{n+1/2} + p_6^{n+1/2} + p_7^{n+1/2} + p_8^{n+1/2}) - (p_1^{n+1/2} + p_2^{n+1/2} + p_3^{n+1/2} + p_4^{n+1/2})}{4h_z}. \quad (63)$$

Цифровые нижние индексы при давлении обозначают узел, к которому принадлежит данное давление (рис. 25).

Взяв производную по x от обеих частей уравнения (61), производную по y от обеих частей уравнения (62), затем производную по z от обеих частей уравнения (63) и сложив полученные выражения, придем к уравнению

$$\left\{ \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h U_C^{n+1/2} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h V_C^{n+1/2} + \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_h W_C^{n+1/2} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h \tilde{U}_C^{n+1/2} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h \tilde{V}_C^{n+1/2} - \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_h \tilde{W}_C^{n+1/2} \right\} \frac{2}{\tau} = - \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]_h p^{n+1/2} - \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} \right]_h p^{n+1/2} - \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]_h p^{n+1/2} \quad (64)$$

или

$$\left(\operatorname{div}_h \mathbf{V}_C^{n+1/2} - \operatorname{div}_h \tilde{\mathbf{V}}_C^{n+1/2} \right) \frac{2}{\tau} = -\Delta_h p^{n+1/2}, \quad (65)$$

где

$$\mathbf{V} = (U, V, W). \quad (66)$$

Из уравнения (46) следует, что $\operatorname{div}_h \mathbf{V}_C^{n+1/2} = 0$. Таким образом, получаем уравнение Пуассона для давления:

$$\Delta_h p^{n+1/2} = \frac{2}{\tau} \operatorname{div}_h \tilde{\mathbf{V}}_C^{n+1/2}. \quad (67)$$

Из последнего уравнения можно найти величины $p^{n+1/2}$ для подстановки в уравнения (61)—(63).

В фазе 2 рассчитываются потоковые величины на новом временном слое. Расчет производится совершенно аналогично двумерному случаю линейной экстраполяцией новых потоковых переменных по известным промежуточным консервативным и старым потоковым переменным (рис. 26) с учетом принципа максимума и принципа наименьшей парциальной локальной вариации. Добавляется только третье пространственное измерение.

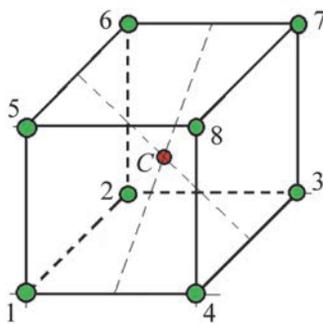


Рис. 25. Локальные обозначения переменных, принадлежащих к узлам сетки

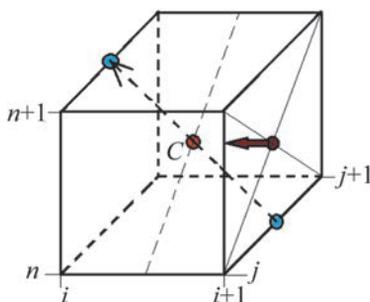


Рис. 26. Вычисление потоковых величин на новом временном слое

В фазе 3 вычисляются окончательные значения консервативных скоростей и температур на новом временном слое. При этом, как и в двумерном случае, шаг по времени берется целый:

$$\frac{T_C^{n+1} - T_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{L}T_h(u^n, v^n, w^n, \theta^n) + \mathbf{L}T_h(u^{n+1}, v^{n+1}, w^{n+1}, \theta^{n+1}) \right\} = \alpha \Delta_h T_C^{n+1/2}, \quad (68)$$

$$\begin{aligned} \frac{U_C^{n+1} - U_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{L}U_h(u^n, v^n, w^n) + \mathbf{L}U_h(u^{n+1}, v^{n+1}, w^{n+1}) \right\} = \\ = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \right]_h p^{n+1/2} + \nu \Delta_h U_C^{n+1/2} + \beta g_x (T_C^{n+1/2} - T_0), \end{aligned} \quad (69)$$

$$\begin{aligned} \frac{V_C^{n+1} - V_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{L}V_h(u^n, v^n, w^n) + \mathbf{L}V_h(u^{n+1}, v^{n+1}, w^{n+1}) \right\} = \\ = - \left[\frac{\partial}{\partial y} \right]_h p^{n+1/2} + \nu \Delta_h V_C^{n+1/2} + \beta g_y (T_C^{n+1/2} - T_0), \end{aligned} \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \frac{W_C^{n+1} - W_C^n}{\tau} + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{L}W_h(u^n, v^n, w^n) + \mathbf{L}W_h(u^{n+1}, v^{n+1}, w^{n+1}) \right\} = \\ = - \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_h p^{n+1/2} + \nu \Delta_h W_C^{n+1/2} + \beta g_z (T_C^{n+1/2} - T_0), \end{aligned} \quad (71)$$

где

$$\mathbf{L}T_h(u^n, v^n, w^n, \theta^n) = \frac{u_R^n \theta_R^n - u_L^n \theta_L^n}{h_x} + \frac{v_F^n \theta_F^n - v_B^n \theta_B^n}{h_y} + \frac{w_U^n \theta_U^n - w_D^n \theta_D^n}{h_z}, \quad (72)$$

$$\mathbf{L}U_h(u^n, v^n, w^n) = \frac{(u_R^n)^2 - (u_L^n)^2}{h_x} + \frac{u_F^n v_F^n - u_B^n v_B^n}{h_y} + \frac{u_U^n w_U^n - u_D^n w_D^n}{h_z}, \quad (73)$$

$$\mathbf{L}V_h(u^n, v^n, w^n) = \frac{u_R^n v_R^n - u_L^n v_L^n}{h_x} + \frac{(v_F^n)^2 - (v_B^n)^2}{h_y} + \frac{w_U^n v_U^n - w_D^n v_D^n}{h_z}, \quad (74)$$

$$\mathbf{L}W_h(u^n, v^n, w^n) = \frac{u_R^n w_R^n - u_L^n w_L^n}{h_x} + \frac{v_F^n w_F^n - v_B^n w_B^n}{h_y} + \frac{(w_U^n)^2 - (w_D^n)^2}{h_z}. \quad (75)$$

Таким образом, при заданных граничных условиях по известным значениям консервативных переменных на временном слое n однозначно определяются значения всех консервативных переменных на слое $n+1$. После чего цикл, состоящий из трех описанных фаз, повторяется.

5. Верификация трехмерной схемы «Кабаре» при различных числах Рэлея

5.1. Задача Дэвиса. Течение в кубической области

Постановка задачи Дэвиса в двумерном случае подробно изложена в разделе 3.1. Это классический двумерный тест, который легко может быть обобщен на трехмерный случай. Достаточно задать «лишнее» третье измерение единичной длины и условия проскальзывания (или периодичности) на стенках, перпендикулярных новой третьей оси.

Таким образом, рассмотрим трехмерное течение газа в кубе со сторонами $1 \times 1 \times 1$. Ускорение силы тяжести направлено вниз и равно единице. $Pr = 0,71$. Вертикальные стенки (левая и правая) имеют постоянную температуру $T_h = 1$ и $T_c = 0$, остальные адиабатически изолированы. Проведем сравнение результатов двумерных расчетов Дэвиса [11] и Диксита [12] с результатами работы предложенного трехмерного алгоритма «Кабаре» на сгущающейся расчетной сетке $20 \times 20 \times 20$ ячеек (рис. 27).

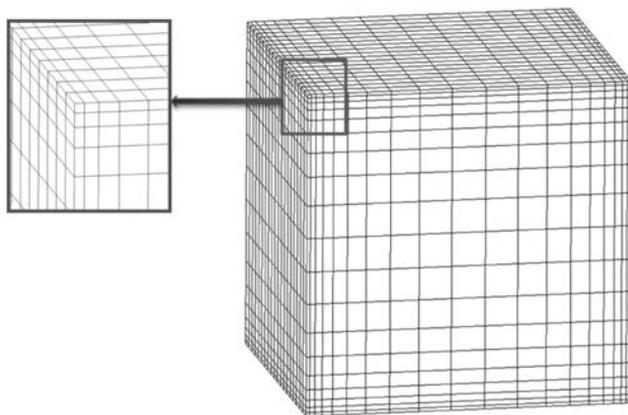


Рис. 27. Сгущающаяся расчетная сетка $20 \times 20 \times 20$ ячеек

В табл. 5 представлены результаты численных экспериментов Дэвиса (экстраполированные при сгущении сетки), современные данные Диксита (полученные на сетках вплоть до 512×512), оценки по эмпирической формуле (43) и результаты, полученные по схеме «Кабаре» на сгущающейся сетке $20 \times 20 \times 20$ ячеек. Приведены средние числа Нуссельта и соответствующие отклонения в процентах от эталонных результатов обоих авторов. На рис. 28 полученные данные представлены на одном графике.

Таблица 5. Средние числа Нуссельта в зависимости от числа Рэлея, полученные различными авторами, по формуле (43) и по схеме «Кабаре» на сетке 20×20×20 со сгущением

Ra	Дэвис, Диксит	$0,182 \cdot Ra^{0,275}$	«Кабаре», 20×20×20 со сгущением (отклонение)
10^3	1,117	1,216	1,115 (0,2%)
10^4	2,238	2,291	2,234 (0,2%)
10^5	4,509	4,316	4,529 (0,4%)
10^6	8,817	8,130	8,893 (0,9%)
10^7	16,79	15,31	17,26 (2,8%)
10^8	30,506	28,85	31,55 (3,4%)
10^9	57,35	54,33	60,9 (6,2%)
10^{10}	103,66	102,3	108,1 (4,3%)

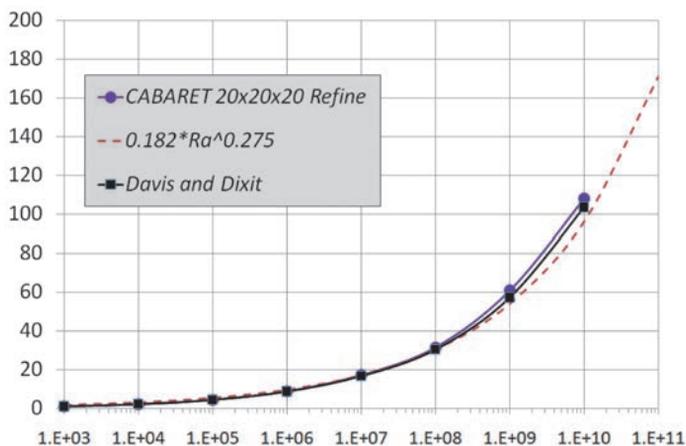


Рис. 28. Зависимость среднего числа Нуссельта от числа Рэлея, полученная по схеме «Кабаре» на сетке 20x20x20 со сгущением, по формуле (43), Дэвисом и другими авторами

Трехмерный алгоритм «Кабаре» демонстрирует хорошую согласованность с данными Дэвиса и Диксита. Причем начиная с чисел Рэлея порядка 10^6 — 10^7 наблюдаются слегка завышенные оценки средних чисел Нуссельта. Это связано с тем, что при $Ra > 10^6$ течение переходит в турбулентный режим и становится полностью трехмерным. Вихревое течение проявляется не только по вертикальному и горизонтальному направлениям, но и в глубину расчетной области, что не могло не повлиять на теплообмен с изотермическими стенками. Теплопередача, вызванная конвекцией по всем трем пространственным направлениям, возросла по сравнению с чисто двумерным случаем, и, следовательно, стали выше средние числа Нуссельта.

5.2. Трехмерный турбулентный тест ERCOFTAC

Для исследования естественной конвекции воздуха в вытянутой прямоугольной области был проведен следующий эксперимент [20; 21]. Область в форме параллелепипеда со сторонами $H = 2,18$ м, $W = 0,076$ м и $D = 0,52$ м заполнена воздухом при нормальном давлении (рис. 29). Разность температур между левой и правой вертикальными стенками поддерживается постоянной и составляет $19,6^\circ\text{C}$ и $39,9^\circ\text{C}$ (два варианта). Остальные стенки адиабатически изолированы.

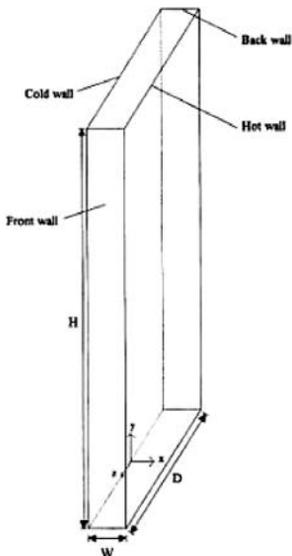


Рис. 29. Расчетная область к турбулентному тесту ERCOFTAC

Стенки параллелепипеда непроницаемы, скорость теплоносителя на границах области равна нулю (условие прилипания).

В расчетах приняты следующие параметры:

кинематическая вязкость — $0,151 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$;

число Прандтля — $0,71$;

температуропроводность — $0,2127 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$;

коэффициент температурного линейного расширения — $0,3272 \cdot 10^{-2} \text{ К}^{-1}$;

ускорение свободного падения — $9,81 \text{ м}/\text{с}^2$.

Таким образом, эксперимент проведен при двух различных числах Рэлея: $0,86 \cdot 10^6$ и $1,43 \cdot 10^6$ (число Рэлея рассчитано по ширине области).

Помимо средних характеристик теплоотдачи в эксперименте были изменены пульсации температуры в трех контрольных точках. Места, в которых размещены датчики, измеряющие пульсации температуры, находятся на середине высоты области, между адиабатическими вертикальными стенками, на расстоянии $0,005$, $0,0381$ и $0,0712$ м от холодной стенки (рис. 30). Значения температур с датчиков считывались с временным интервалом $0,015674$ с.

При данных параметрах в эксперименте течение газа между пластинами было полностью турбулентным. Экспериментально получены следующие средние числа Нуссельта: $5,85$ — для течения с $Ra = 0,86 \cdot 10^6$, $7,57$ — для течения с $Ra = 1,43 \cdot 10^6$.

Данная тестовая задача была также решена численно как с помощью стандартной $k-\varepsilon$ -модели, так и с помощью ее модификаций в работе [22]. Кроме того, имеются результаты более ранних экспериментов в очень похожей экспериментальной установке [23].

При расчетах по схеме «Кабаре» использовался параллельный алгоритм на сетке $800 \times 100 \times 100$ ячеек. При этом расчетная область разбивалась на 8 подобластей $100 \times 100 \times 100$ ячеек каждая (рис. 31). Расчет производился в каждой из подобластей отдельным процессором независимо, граничные условия при этом выбирались исходя из условий шивки. На каждом шагу по времени между процессорами по необходимости выполнялся обмен данными на границах подобластей.

Все полученные и найденные в упомянутых выше работах средние числа Нуссельта сведены в табл. 6.

Следует отметить, что исследуемая область очень сильно вытянута. Аспектное соотношение продольной и поперечной сторон составляет примерно $28,7$. Если число Рэлея вычислять по длинной стороне, оно возрастает примерно в $2 \cdot 10^4$ раз и составит порядка 10^{10} .

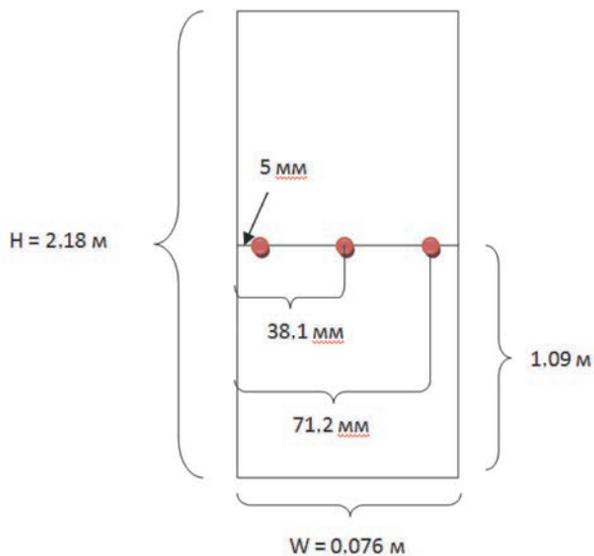


Рис. 30. Расположение датчиков, измеряющих пульсации температур в расчетной области (соотношение сторон на схеме не сохранено)

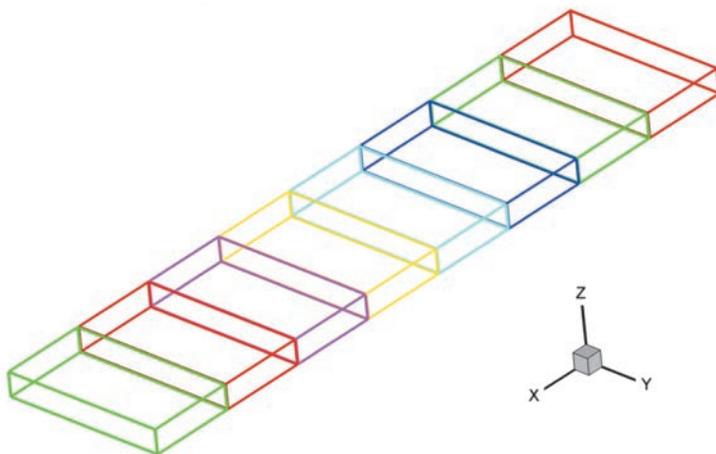


Рис. 31. Распределение расчетной области по процессорам

Это соответствует ярко выраженному турбулентному режиму течения, и не каждый вычислительный метод, как видно из последней таблицы, способен с достаточной точностью предсказать даже такую осредненную характеристику теплопередачи, как среднее число Нуссельта. Более того, заметно заниженный результат получился в более ранних экспериментах [23].

Таблица 6. Средние числа Нуссельта, полученные с помощью различных экспериментальных и вычислительных методик

Ra	Эксперимент [20] и [21]	Эксперимент [23]	k - ε -модель	k - ε -модель + Yap correction	k - ε -модель + Yap + GGDH	«Кабаре», сетка $800 \times 100 \times 100$ (отклонение)
$0,86 \cdot 10^6$	5,85	4,9	6,53	4,66	4,74	5,75 (2%)
$1,43 \cdot 10^6$	7,57	—	—	—	—	6,9 (9%)

Как видно из графика зависимости числа Нуссельта от времени (рис. 32) для $Ra = 0,86 \cdot 10^6$, течение в расчетной области имеет выраженный нестационарный характер. Интенсивность теплообмена со стенками постоянно флуктуирует и колеблется от 5,5 до примерно 6,0.

В среднем результат, полученный по схеме «Кабаре», очень хорошо согласуется с данными последнего эксперимента (в пределах 2%, см. табл. 6). Среднее число Нуссельта, полученное при большем числе Рэлея ($1,43 \cdot 10^6$), согласуется с экспериментом в пределах 9%. Но исследованиями других авторов этот экспериментальный результат не подтвержден.

Нестационарность, сложность течения в таких вытянутых областях хорошо прослеживается на рис. 33 и 34 (для наглядности расчетные области растянуты по ширине в два раза). На рис. 33 слева представлено распределение температуры в сечении расчетной области в один из моментов времени. Отчетливо видны возникающие и отрывающиеся от стенок тепловые струи, завихрения. При этом, если осреднить полученное распределение температуры по времени, получим ровную стратифицированную картину, как показано на рис. 33 справа.

Хаотический, вихревой характер течения ярко демонстрирует рис. 34, где представлены мгновенные распределения отдельных компонент скоростей — u , v и w . Видно, что течение в области полностью трехмерное. Максимальные скорости по вертикальному направлению достигают 35 см/с, по двум горизонтальным — 25 см/с.

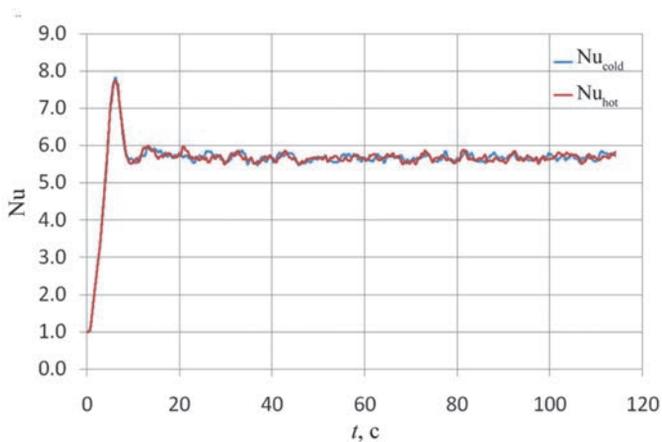


Рис. 32. Зависимость среднего числа Нуссельта для горячей и холодной стенок от времени

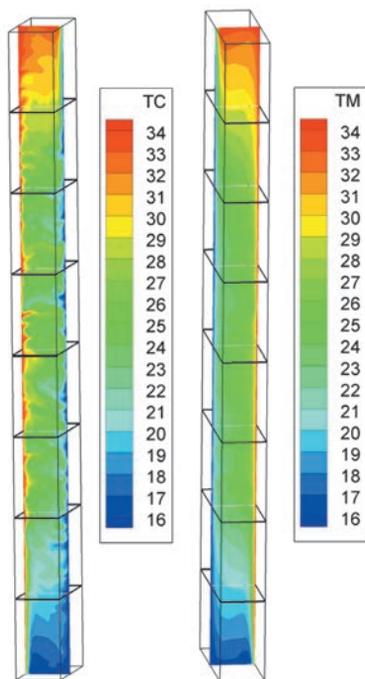


Рис. 33. Слева — распределение температуры в сечении расчетной области, справа — осредненное по времени распределение температуры

Образование вихрей, струй приводит к тому, что температура в заданной точке расчетной области может сильно флуктуировать. Эти флуктуации в трех точках были измерены экспериментально при двух данных числах Рэлея (рис. 35).

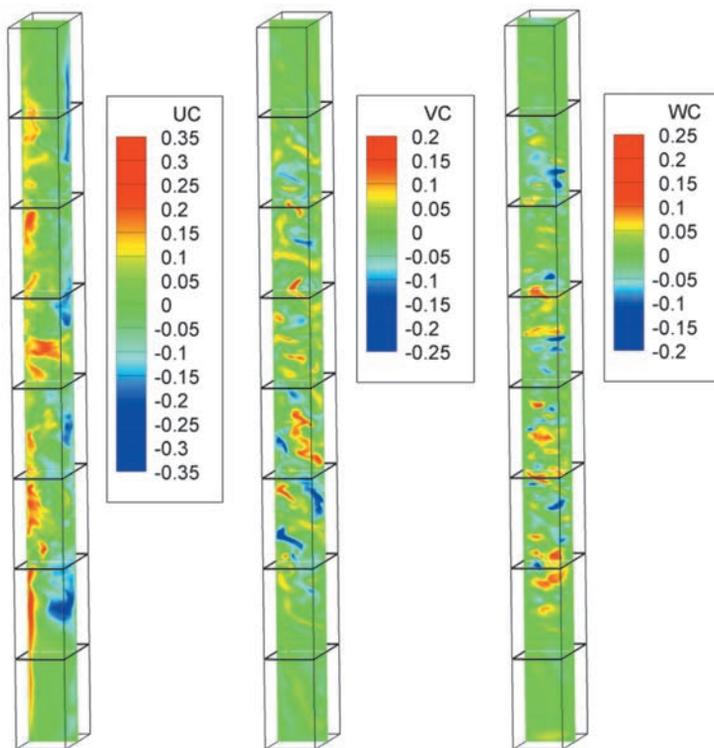
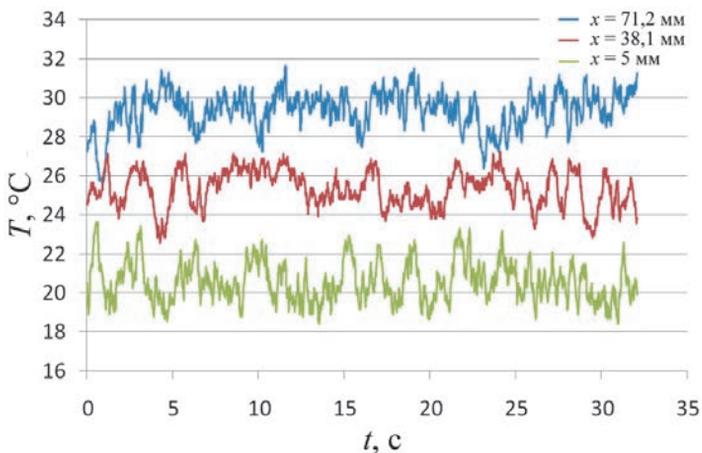
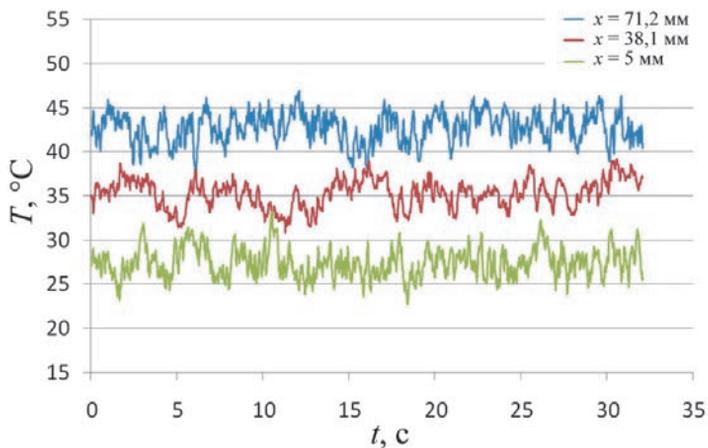


Рис. 34. Распределения компонент скоростей u , v и w (соответственно слева, посредине и справа) в сечении расчетной области в один из моментов времени

Из данных эксперимента следует, что при меньших числах Рэлея пульсации температуры достигают примерно 6°C — это при перепаде температур между пластинами в $19,6^\circ\text{C}$. При почти вдвое большем перепаде, $39,9^\circ\text{C}$, амплитуда пульсаций достигает порядка 10°C . Это существенный разброс, который с инженерной точки зрения может представлять большой интерес. Ни одна методика, базирующаяся на осреднении базовых характеристик течения (например, k - ε -модели), не способна воспроизвести данные флуктуации в принципе. Методы DNS потребуют для таких чисел Рэлея исключительно подробные расчетные сетки.



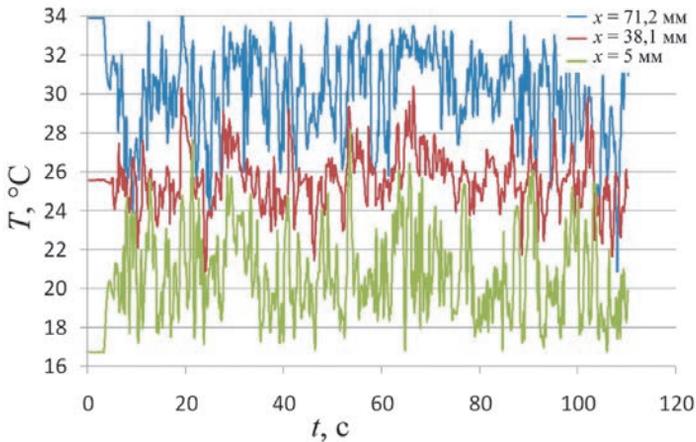
а



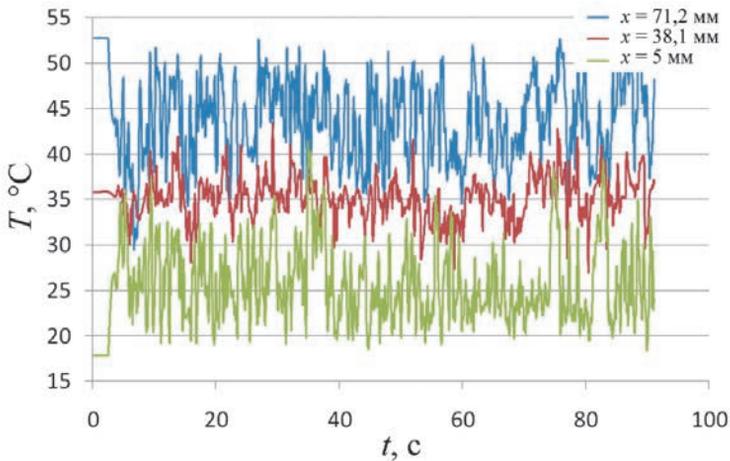
б

Рис. 35. Флуктуации температуры на различных расстояниях от холодной стенки. Данные эксперимента: а — при $Ra = 0,86 \cdot 10^6$, б — при $Ra = 1,43 \cdot 10^6$

Как показано на рис. 36, метод «Кабаре» на сетке $800 \times 100 \times 100$ ячеек успешно разрешил возникающие флуктуации.



а



б

Рис. 36. Флуктуации температуры на различных расстояниях от холодной стенки, полученные по схеме «Кабаре»: а — при $Ra = 0,86 \cdot 10^6$, б — при $Ra = 1,43 \cdot 10^6$

Амплитуды расчетных пульсаций для двух рассматриваемых чисел Рэлея достигают соответственно 10°C и 20°C . Это почти вдвое больше, чем в эксперименте, что может быть связано с теплоемкостью датчиков, их инерционностью и влиянием на движение газа.

В связи с этим целесообразно сравнить спектральные характеристики полученных пульсаций. На рис. 37 в двойном логарифмическом масштабе представлены спектры флуктуаций температуры около холодной стенки для числа $Ra = 0,86 \cdot 10^6$, полученные экспериментально и по схеме «Кабаре». Видно, что предложенная вычислительная методика уверенно описывает температурные пульсации практически во всем диапазоне волновых чисел.

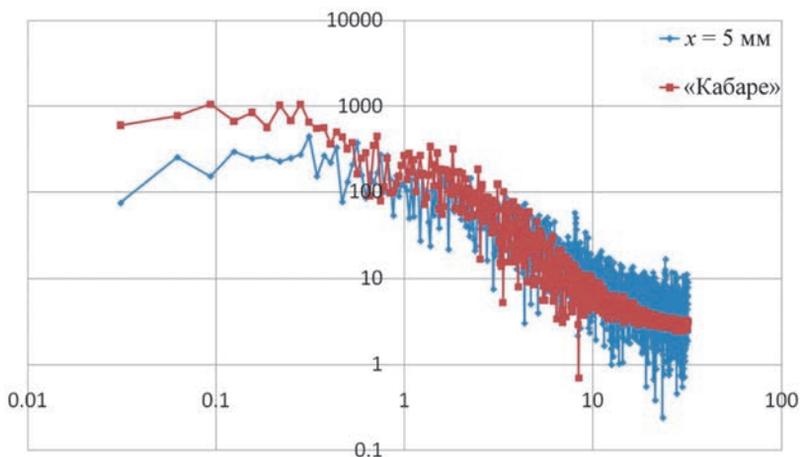


Рис. 37. Спектры пульсаций температуры вблизи холодной стенки для $Ra = 0,86 \cdot 10^6$, полученные экспериментально и по схеме «Кабаре»

Спектры в других точках области выглядят аналогично представленному примеру.

Таким образом, в сравнении с результатами реального эксперимента было показано, что трехмерная схема «Кабаре» способна не только надежно предсказывать средние характеристики трехмерного термоконвективного течения, но и успешно моделировать основные особенности развитого турбулентного движения, образование вихрей, возникновение температурных пульсаций.

5.3. Тепловая конвекция в замкнутой области в форме параллелепипеда с соотношением сторон 1:4

Естественная конвекция в замкнутой области в форме параллелепипеда с соотношением сторон $L/H = 1/4$ (рис. 38) подробно рассмотрена в серии работ [8; 14; 15]. Как и в предыдущих тестах, противоположные вертикальные стенки имеют постоянную температуру, остальные стенки теплоизолированы. Ускорение силы тяжести направлено вертикально вниз.

Данная задача решена авторами при нескольких числах Рэлея с использованием метода DNS, а также различными инновационными методиками, которые, как и схема «Кабаре», позволяют получить удовлетворительный результат на грубых сетках.

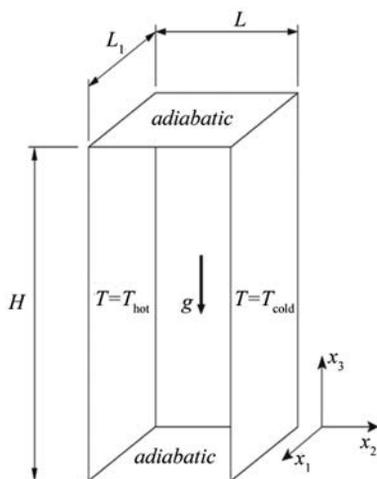


Рис. 38. Расчетная область (пропорции не соблюдены)

Сравним результаты работы новых и, как заявляют авторы, беспараметрических методик, описанных в [8; 14; 15], с результатами расчетов по трехмерной схеме «Кабаре», которая также является беспараметрическим методом. Зададим достаточно высокое число Рэлея — 10^{10} (максимальное, при котором проведен расчет DNS). Расчетную сетку выберем самую грубую из тех, которые использовали авторы в своих публикациях, — $40 \times 8 \times 16$ ячеек со сгущением (рис. 39).

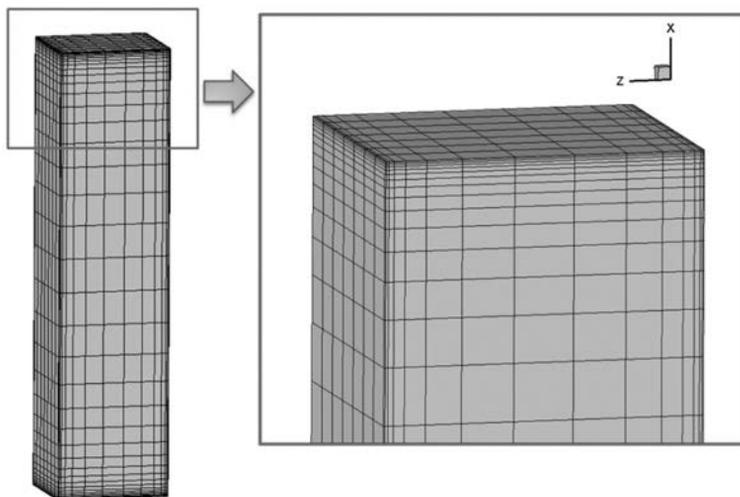


Рис. 39. Расчетная сетка $40 \times 8 \times 16$ ячеек и ее фрагмент

Для данного числа Рэлея построены примеры изоповерхностей температуры в некоторый момент времени, полученные методом DNS и по схеме «Кабаре» (рис. 40). На рис. 40 видно, что характер течения существенно турбулентный и трехмерный. Образуются вихри различных масштабов. Общая картина течения, полученная методами DNS и «Кабаре», очень похожа, при этом DNS-расчет выполнялся на сетке $128 \times 190 \times 462$ узлов.

Установившееся течение в расчетной области выглядит, как показано на рис. 41, где представлены изоповерхности температуры. Наблюдается полная температурная стратификация по всей высоте параллелепипеда. При этом вблизи границ течение остается вихревым.

Среднее число Нуссельта на стенках с течением времени сходится к величине 101,0 (рис. 42). Этот результат очень хорошо согласуется как с результатами расчета методом DNS, так и с данными беспараметрических методик RM1 и RM2 из [8; 14; 15] на грубых сетках, а также с эмпирической формулой (табл. 7). Как видно из приведенных данных, метод «Кабаре» показал точность, сравнимую с полученной новейшим методом RM2 на такой же сетке. Метод RM1 требует более подробных сеток. Вычислительная эффективность схемы «Кабаре» превосходит DNS-метод более чем в 2000 раз за счет возможности использовать гораздо более грубую сетку.

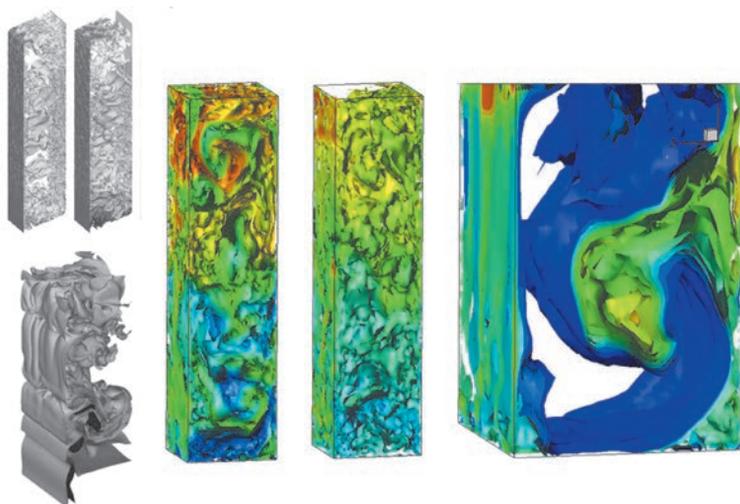


Рис. 40. Изоповерхности температуры, полученные методом DNS (слева, черно-белое изображение) и изоповерхности температуры, полученные методом «Кабаре» (справа, цветное изображение)

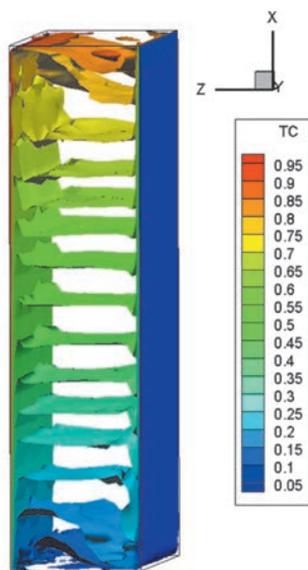


Рис. 41. Изоповерхности температуры в установившемся режиме течения, полученные методом «Кабаре»

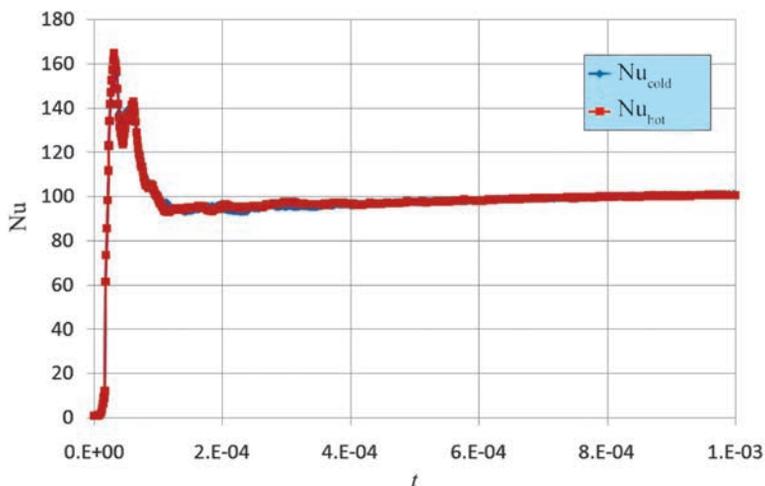


Рис. 42. Зависимость среднего числа Нуссельта от времени

Таблица 7. Сравнение средних чисел Нуссельта, полученных с применением различных методик

F. X. Trias et al.			0,182 Ra ^{0,275}	«Кабаре»
DNS	RM1	RM2		
128×190×462	16×34×80	8×17×40	102,35	8×16×40
101,9	100,8	102,2		101,0

Таким образом, описанная в настоящей работе вычислительная методика расчета термоконвективных течений в замкнутых трехмерных областях как минимум не хуже лучших известных методик. А тот факт, что метод «Кабаре» обладает минимальным сеточным шаблоном, легко обобщается на случай косоугольных неструктурированных расчетных сеток и эффективно может быть распараллелен для запуска на современных суперкомпьютерах, делает этот метод одной из передовых технологий для моделирования турбулентных течений и естественной конвекции.

6. Заключение

Использование прямого численного моделирования в чистом виде для реальных инженерно-технических задач в геометрически сложных областях сопряжено со значительными вычислительными трудностями. При высоких числах Рэлея метод DNS становится слишком ресурсоемким и практически неприменимым даже для современных кластерных суперкомпьютеров из-за необходимости на сеточном уровне разрешать сверхмалые колмогоровские масштабы. С другой стороны, точность и физическая адекватность результатов, полученных прямыми методами, достаточно высока по сравнению, например, с моделями, в основе которых лежит осреднение основных переменных, введение дополнительных эмпирических параметров или прочие допущения и ограничения. В связи с этим в настоящее время особенно актуальными и, безусловно, перспективными являются численные методики, объединяющие в себе все преимущества прямых методов, оставаясь при этом гораздо менее ресурсоемкими. Семейство таких методик, которые при огрублении сетки не теряют большинство характеристик течения (коротковолновые гармоники энергетических спектров, например), известно как «методы Perfect LES». Один из подходов, претендующий на то, чтобы называться Perfect LES-методом, получил название «метод “Кабаре”» и последнее десятилетие активно развивается в ИБРАЭ РАН как универсальный высокоэффективный алгоритм численного решения систем гиперболических уравнений. В частности, данный метод успешно применен для моделирования тепловой конвекции несжимаемой жидкости в замкнутых двумерных и трехмерных областях. Как показано в настоящей работе, схема «Кабаре» не содержит никаких настроечных коэффициентов, искусственных параметров и вспомогательных моделей. Данная схема по сути является лишь способом непосредственной дискретизации нестационарных уравнений Навье—Стокса и теплопроводности, записанных в консервативной форме с учетом приближения Буссинеска. Этого, как показано на примерах различных тестовых задач, вполне достаточно, поскольку все основные свойства свободноконвективного течения, включая его турбулизацию при высоких числах Рэлея, пульсации скорости и температуры, образование вихрей, уже заложены в исходную математическую модель — систему уравнений Навье—Стокса. Более того, схема «Кабаре» позволяет точно промоделировать важнейшие характеристики турбулентной термоконвекции даже на достаточно грубых сетках (иначе это был бы простой DNS), что наглядно продемонстрировано в данной работе на разнообразных верификационных тестах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 09-01-00569-а «Дальнейшее развитие схемы КАБАРЕ и алгоритма прыжкового переноса».

Литература

1. *Batchelor G. K.* Heat transfer by free convection across a closed cavity between vertical boundaries at different temperatures // *Q. Appl. Math.* — 1954. — 12. — P. 209—233.
2. *Poots G.* Heat transfer by laminar free convection in enclosed plane gas layers // *Q. Appl. Math.* — 1958. — 11. — P. 257—273.
3. *Hellums J. D., Churchill S. W.* Transient and steady state free and natural convection, numerical solutions // *AIChE J.* — 1962. — 8. — P. 690—695.
4. *Полежаев В. И., Бунэ А. В., Везуб Н. А.* Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье—Стокса. — М.: Наука, 1987.
5. *Ньюэл М., Шмидт Ф.* Теплоотдача при ламинарной естественной конвекции в прямоугольной замкнутой полости // *Теплопередача.* — 1970. — 92, № 1. — P. 106—117.
6. *Elder J. W.* Numerical experiments with free convection in a vertical slot // *J. of Fluid Mechanics.* — 1966. — 24. — P. 823—843.
7. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. — Т. 6: Гидродинамика. — М.: Наука, 1986.
8. *Trias F. X.* et al. Direct numerical simulation of a differentially heated cavity of aspect ratio 4 with Rayleigh numbers up to 1011. — Pt. I: Numerical methods and time-averaged flow // *Intern. J. of Heat and Mass Transfer.* — 2010. — 53, 4. — P. 665—673.
9. *Головизнин В. М.* и др. Аномальная диффузия радионуклидов в сильнонеоднородных геологических формациях / Под ред. Л. А. Большова. — М.: Наука, 2010.
10. *Головизнин В. М.* и др. Аномальная диффузия радионуклидов в сильнонеоднородных геологических формациях // *ЖВМиМФ.* — 2011. — 51, 5. — P. 1—17.
11. *Vahl Davis G. D.* Natural Convection of Air in a Square Cavity: A Bench Mark Numerical Solution // *Intern. J. for Numerical Methods in Fluids.* — 1983. — 3. — P. 249—264.
12. *Dixit H., Babu V.* Simulation of high Rayleigh number natural convection in a square cavity using the lattice Boltzmann method // *Intern. J. of Heat and Mass Transfer.* — 2006. — 49. — P. 727—739.
13. *Barakos G., Mitsoulis E., Assimacopoulos D.* Natural Convection Flow in a Square Cavity Revisited: Laminar and Turbulent Models with Wall Functions // *Intern. J. for Numerical Methods in Fluids.* — 1994. — 18. — P. 695—719.

14. *Trias F. X.* et al. Parameter-free symmetry-preserving regularization modeling of a turbulent differentially heated cavity // *Computers & Fluids*. — 2010. — 39, 10. — P. 1815—1831.
15. *Trias F. X.* et al. Direct numerical simulation of a differentially heated cavity of aspect ratio 4 with Rayleigh numbers up to 1011. — Pt. II: Heat transfer and flow dynamics // *Intern. J. of Heat and Mass Transfer*. — 2010. — 53. — P. 674—683.
16. *Henkes R. A. W. M., van der Vlugt F. F., Hoogendoorn C. J.* Natural convection flow in a square cavity calculated with low-Reynolds-number turbulence models // *Intern. J. of Heat and Mass Transfer*. — 1991. — 34. — P. 1543—1557.
17. *Hortmann M., Perić M., Scheuerer G.* Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: benchmark solutions // *Intern. J. for Numerical Methods in Fluids*. — 1990. — 11. — P. 189—207.
18. ERCOFTAC QNET Knowledge Base Wiki // http://uriah.dedi.melbourne.co.uk/w/index.php/Main_Page.
19. *Кутателадзе С. С.* Основы теории теплообмена: Изд. 5-е перераб. и доп. — М.: Атомиздат, 1979.
20. *Betts P. L., Bokhari I. H.* Experiments on turbulent natural convection in an enclosed tall cavity // *Intern. J. of Heat and Fluid Flow*. — 2000. — 21. — P. 675—683.
21. *Bokhari I. H.* Turbulent Natural Convection in a Tall Cavity / Univ. of Manchester Inst. of Science and Technology (UMIST). — [S.l.], 1996.
22. *Ince N. Z., Launder B. E.* On the computation of buoyancy-driven turbulent flows in rectangular enclosures // *Intern. J. of Heat and Fluid Flow*. — 1989. — 10, 2. — P. 110—117.
23. *Betts P. L., Dafa'Alla A. A.* Turbulent buoyant air flow in a tall rectangular cavity // ASME Annual Winter Meeting. 1986.

Аномальные режимы переноса примеси в регулярно-неоднородных резкоконтрастных средах

Л. А. Большов, О. А. Дворецкая, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев

1. Введение

В последние десятилетия аномальные режимы переноса являются предметом интенсивных исследований и темой многих обзоров, наиболее популярными из которых являются [1—3]. Аномальными принято называть режимы переноса, при которых зависимость размера основной области локализации примеси от времени описывается формулой

$$R \sim t^\gamma \quad (1.1)$$

с показателем $\gamma \neq 1/2$. Различают субдиффузионные ($\gamma < 1/2$) и супердиффузионные ($\gamma > 1/2$) режимы [2]. Реализация таких режимов может быть обусловлена различными причинами. Например, в среде, где основным механизмом переноса является случайная адвекция, возможен супердиффузионный режим переноса, если флуктуации поля скоростей адвекции достаточно сильно скоррелированы. В качестве основной предпосылки реализации субдиффузионных режимов следует назвать наличие в среде ловушек, которые могут удерживать частицы примеси значительную часть времени, тем самым замедляя процесс переноса. Аномальные режимы переноса возникают при просачивании и фильтрации влаги в пористых средах [4; 5], переносе зарядов в аморфных твердых телах [6; 7], диффузии молекул в клеточных мембранах [8; 9].

Геологические формации представляют собой пример сильнонеоднородных, контрастных сред, описание процессов переноса в которых имеет важный практический интерес. В частности, именно слабопроницаемые геологические формации рассматриваются в качестве основных кандидатов для решения проблемы изоляции радиоактивных отходов. Так, при захоронении долгоживущих радиоактивных отходов [10], ожидается, что в среднесрочной перспективе (на сотни и, возможно, тысячи лет) надежность захоронений будет обеспечена созданием инженерных защитных сооружений. Состояние же их в долгосрочной перспективе (на сотни тысяч лет и более) зависит от эффективности естественных геологических

барьеров. Также геологическую среду используют для захоронения химических отходов. И в этом случае она должна выполнять функцию барьера.

Понятно, что для проведения оценок надежности захоронений требуются знания закономерностей миграции примесей в сильнонеоднородных средах, каковыми являются геологические формации.

В последние десятилетия накоплен обширный массив данных полевых наблюдений [11—22], свидетельствующих, что процессы переноса в геологических средах во многих случаях не описываются классическими закономерностями, базирующимися на законах Дарси и Фика, и расхождение может достигать нескольких порядков [23]. В связи с этим в ИБРАЭ РАН были поставлены и ведутся теоретические исследования аномальных процессов переноса в сильнонеоднородных средах применительно к проблеме захоронения радиоактивных отходов. В нашей статье [24], опубликованной в предыдущем сборнике этой серии, был начат обзор результатов, полученных в ИБРАЭ РАН. В [24] выявлен ряд специфических особенностей геологических сред, способных привести к аномальной диффузии, и представлены четыре физических модели, отражающие указанные особенности и демонстрирующие неклассические режимы переноса.

Для формирования режимов переноса наиболее существенны два фактора. Первый состоит в том, что неоднородные структуры натуральных сетей трещин в скалистых породах обладают, как правило, фрактальной геометрией и образуют перколяционные среды. Это служит основанием для установления в среде медленно (по степенному закону) убывающих корреляций характеристик среды, что, в частности, относится к корреляциям скорости инфильтрации влаги по трещинам. Такое положение создает предпосылки для реализации быстрых (супердиффузионных) режимов переноса примеси. Второй фактор заключается в наличии резкого контраста в распределении характеристик геологических сред. Слабопроницаемая подсистема, роль которой играют матрица трещиноватой геологической среды и мертвые концы перколяционных кластеров, отвечающих сети трещин, действуют для частиц примеси, как ловушки. В итоге возникает тенденция к медленным (субдиффузионным) режимам переноса.

В [24] влияние контраста на формирование режима переноса было исследовано нами в рамках простой модели Дыхне. В ней перенос примеси рассматривается в системе, состоящей из среды с высокой проницаемостью, ограниченной в одном либо двух измерениях, и среды с низкой проницаемостью, заполняющей остальное пространство. В качестве физического механизма переноса частиц как в «быстрой», так и в «медленной» среде рассматривается классическая диффузия. Однако в практических задачах миграции примеси в геологических средах реализуется скорее ситуация, когда механизмом переноса в «быстрой» среде (трещинах) наряду с диффузией является адвекция. В связи с этим в настоящей статье представле-

ны модели переноса в регулярно-неоднородных резкоконтрастных средах с учетом указанного механизма.

Целью работы является исследование переноса примеси в регулярно-неоднородных резкоконтрастных средах. Будут рассмотрены следующие модели: квазиодномерные (в плоской и цилиндрической геометрии) гребешковые структуры, квазидвумерная гребешковая структура, обобщенная модель Дыхне и модель переноса примеси в сильноконтрастной среде при наличии диффузионного барьера.

Первоначально интерес к гребешковой структуре был обусловлен тем, что эта структура в некотором смысле является аналогом системы трещин в горных породах: остов гребешка (сильно проницаемая среда) играет роль магистральной трещины, а зубцы (слабопроницаемая среда) — более мелкие ответвления от основной трещины.

В наших исследованиях гребешковая модель является также основой для развития обобщенной модели Дыхне, в которой «медленная» среда (слабопроницаемая матрица, окружающая трещину) играет роль не только ловушки, но и при определенных условиях основного канала переноса. Модель с диффузионным барьером представляет собой наиболее приближенную к реальной постановке задачу о захоронении источника загрязнений, при которых место захоронения отделено от естественной геологической среды защитным слабопроницаемым слоем (например, слоем бентонитовых глин).

2. Общая постановка задач

Во всех задачах, которые будут рассмотрены в данной статье, перенос примеси происходит в среде, состоящей из двух частей: остова, внутри которого перенос осуществляется сравнительно быстро, и окружающей его «медленной» среды (матрицы). Как остов, так и матрица могут иметь различную геометрию.

Будем полагать, что перенос примеси в сильнопроницаемом остове происходит за счет адвекции и диффузии в соответствии с классическим уравнением

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{u} \nabla n = D \Delta n, \quad (2.1)$$

где \vec{u} — скорость адвекции; n — распределение концентрации частиц в сильнопроницаемой среде. Далее будем называть n концентрацией активных частиц примеси или просто концентрацией.

Перенос примеси в слабопроницаемой среде происходит только за счет диффузии. Будем обозначать концентрацию частиц в этой части среды символом c . Уравнение для c имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = d \Delta c. \quad (2.2)$$

Граничные условия заключаются в непрерывности концентрации и нормальной компоненты плотности потока частиц на границе двух сред.

Мы рассматриваем задачу с начальными условиями, так что в момент времени $t = 0$ частицы с пространственным распределением $n^{(0)}(\vec{r})$ занимают некоторый объем размером $\sigma_0 < a$, где a — толщина сильно проницаемой среды. Будут рассмотрены два случая: частицы в начальный момент сосредоточены в сильнопроницаемой среде (разделы 3—5) и частицы изначально находятся внутри слабопроницаемой матрицы (раздел 6).

В настоящем разделе мы рассмотрим постановку, когда в начальный момент примесь находится в остове (случай 1). Специфика постановки для второго случая проанализирована в разделе 6.

Мы считаем, что быстрая среда (остов) ограничена в l измерениях:

1. $l = 1$. В этом случае остов имеет вид плоскости, простирающейся до бесконечности в двух измерениях и имеющей конечную толщину порядка a .
2. $l = 2$. Здесь остов имеет вид прямого цилиндра (не обязательно круглого сечения) с площадью поперечного сечения S .

Нас будет интересовать поведение концентрации $n(\vec{r}, t)$ на временах

$$t \gg t_0. \quad (2.3)$$

Выражения для t_0 для случаев 1 и 2 имеют следующий вид:

$$t_0 = a^2 / 4D \quad \text{для } l = 1, \quad (2.4)$$

$$t_0 = \max\{S, L^2\} / 4D \quad \text{для } l = 2, \quad (2.5)$$

где L — расстояние между зубцами, если речь идет о гребешковой структуре (см. ниже, раздел 4). Условие (2.3) означает, что распределение активных частиц однородно по координатам, вдоль которых быстрая среда (остов) ограничена.

Проинтегрируем уравнение (2.1) по l координатам, затем выполним преобразование Фурье по остальным координатам и преобразование Лапласа по времени. Получим

$$\left(Dk^2 + i\bar{u}\bar{k} + p\right)n_{p\bar{k}} + \frac{q_{p\bar{k}}}{S_l} = \frac{N_0}{S_l}, \quad (2.6)$$

где

$$n_{p\bar{k}} = \int_0^{\infty} dt \int d^{3-l} \rho \exp(-pt - i\bar{k}\bar{\rho}) n(\bar{r}, t) \quad (2.7)$$

есть Фурье—Лаплас-образ концентрации активных частиц, усредненной по l координатам; $S_1 = a$; $S_2 = S$; $q_{p\bar{k}}$ — Фурье—Лаплас-образ плотности потока частиц через границу, отнесенной к единице ее площади для $l=1$ и к единице длины для $l=2$; $\bar{\rho}$ и \bar{k} — $(3-l)$ -мерные радиус-вектор и волновой вектор соответственно; $N_0 = N(0)$, где $N(t)$ — полное число активных частиц.

Учитывая линейность задачи, запишем связь потока $q_{p\bar{k}}$ с концентрацией $n_{p,\bar{k}}$ в следующем виде:

$$q_{p\bar{k}} = S_l M(p, \bar{k}) n_{p,\bar{k}}. \quad (2.8)$$

Вид функции $M(p, \bar{k})$ зависит от конфигурации среды. Он будет установлен ниже исходя из решения уравнения (2.2) и с учетом граничных условий для каждой конкретной модели среды.

Подставляя (2.8) в (2.6) и решая полученное уравнение относительно $n_{p,\bar{k}}$, приходим к общему выражению для концентрации активных частиц:

$$n(\bar{\rho}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{r}' G(\bar{\rho} - \bar{\rho}', t) \bar{n}^{(0)}(\bar{\rho}'), \quad (2.9)$$

где $\bar{n}^{(0)}(\bar{\rho})$ — начальное распределение, усредненное по S_l ; $G(\bar{\rho}, t)$ — функция Грина

$$G(\bar{\rho}, t) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int \frac{d^{3-l} k}{(2\pi)^{3-l}} \frac{1}{Dk^2 + i\bar{u}\bar{k} + p + M(p, \bar{k})} \exp(i\bar{k}\bar{\rho} + pt), \quad (2.10)$$

$\text{Re } b > 0$.

Режим переноса определяют две ключевые характеристики: дрейфовый снос \bar{X} и дисперсия $\sigma(t)$:

$$\bar{X} = \frac{1}{N(t)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\rho} n(\bar{\rho}, t) \rho, \quad (2.11)$$

$$(\sigma(t))^2 = \frac{1}{N(t)} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\rho} n(\bar{\rho}, t) (\bar{\rho} - \bar{X})^2.$$

Нас будет интересовать поведение системы на временах, когда $\sigma(t) \gg R(0)$, где $R(0)$ — размер облака примеси в начальный момент. В этом случае для концентрации активных частиц справедливо выражение

$$n(\bar{\rho}, t) \cong \frac{N_0}{S_l} G(\bar{\rho}, t), \quad (2.12)$$

где $N_0 \equiv S_l \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{n}^{(0)}(\bar{\rho}) d\bar{\rho}$ — полное число частиц в начальный момент времени.

Полное число активных частиц можно получить, проинтегрировав выражение (2.12) по $(3-l)$ -мерному радиус-вектору и умножив его на S_l :

$$N(t) = N_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\rho} G(\bar{\rho}, t). \quad (2.13)$$

Перейдем к рассмотрению моделей конкретных неоднородных контрастных сред.

3. Квазиодномерные гребешковые структуры

Гребешковые структуры неоднократно становились предметом исследований [25—30]. Еще одной причиной столь пристального внимания к ним помимо указанных во введении являлось их определенное сходство с перколяционным кластером. Остов и зубцы гребешковой структуры в некотором смысле являются аналогами хребта (backbone) и свободных концов (dangling ends) перколяционного кластера соответственно. Случайные блуждания в одномерной гребешковой структуре с зубцами бесконечной и конечной, распределенной по некоторому закону, длины исследовались в [25; 26; 27] соответственно. В этих работах был получен субдиффузионный режим, при котором зависимость размера основной области локализации примеси от времени описывалась зависимостью (1.1) с $\gamma < 1/2$. Авторы [28; 29] рассматривали одномерный гребешок при наличии адвекции и диффузии в хребте и только диффузии в зубцах. Однако, на наш

взгляд, «одномерность» модели не позволила получить ряд важных результатов. В [30] была исследована трехмерная гребешковая структура с зубцами различной формы и диффузией в качестве механизма переноса. Несмотря на популярность гребешковых структур среди исследователей, некоторые вопросы все еще остаются открытыми: миграция частиц в гребешковой структуре с конечной длиной зубцов при наличии адвекции и диффузии в хребте, «тонкая структура» хвостов концентрации.

В данном разделе мы рассмотрим квазиодномерную гребешковую структуру, которая ограничена в двух измерениях, т. е. $l = 2$. Название «квазиодномерная» связано с размерностью уравнения, которое нам придется решать, а не с размерностью структуры (рис. 1). С помощью процедуры усреднения перейдем от трехмерного уравнения (2.1) к одномерному (2.6). Ниже будем полагать, что в хребте имеют место диффузия и адвекция, а в зубцах — только диффузия. Если вернуться к аналогии с системой трещин в геологических формациях, такая постановка описывает ситуацию, когда в основной трещине присутствует вода, и перенос радионуклидов происходит в направлении потока воды за счет адвекции. По всем остальным направлениям, как в магистральной трещине, так и в примыкающих к ней мелким трещинам, перенос происходит за счет диффузии.

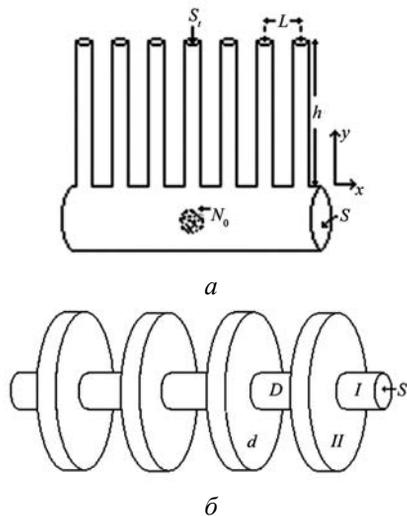


Рис.1. Квазиодномерная гребешковая структура:
а — с конечными зубцами цилиндрической формы,
б — с бесконечными зубцами в виде дисков

Гребешковая структура состоит из хребта и периодической системы зубцов. Сильнопроницаемая среда — хребет представляет собой прямой цилиндр, бесконечный по направлению x , с площадью поперечного сечения S . Совокупность зубцов составляет слабопроницаемую среду. Мы рассмотрим наборы зубцов в двух геометриях.

В первом случае (рис. 1а) зубцы являются прямыми цилиндрами с продольным размером h и осью, направленной по нормали к поверхности хребта. Во втором случае (рис. 1б) зубцы имеют вид дисков бесконечного радиуса.

Границу между зубцом и остовом будем считать плоской. Ее площадь обозначим S_i , а расстояние между зубцами — L . Гребешковая структура может являться резкоконтрастной средой не только когда $d \ll D$, но и когда $d \sim D$ — при условии, что зубцы расположены довольно редко, т. е. $\sqrt{S_i} \ll L$. Будем полагать, что между зубцами частицы перемещаться не могут и вообще область вне заданной структуры для них недоступна.

3.1. Квазиодномерная гребешковая структура с зубцами в виде цилиндров конечной длины

На временах $t \gg t_0$ справедливо одномерное уравнение (2.6), следовательно, концентрация активных частиц является функцией только от координаты x и времени t . В свою очередь, концентрация внутри отдельного зубца $c(y, t; x)$ зависит от соответствующей ему продольной координаты y , времени t и как от параметра — от координаты x . Таким образом, рассматриваемая задача фактически сводится к одномерной. Именно поэтому данную модель мы назвали квазиодномерной.

По закону Фика для потока частиц из хребта в зубцы справедливо выражение

$$q_{pk} = -\frac{S_i}{L} d \frac{\partial c_{pk}}{\partial y} \Big|_{y=+0}. \quad (3.1)$$

Решая уравнение (2.2) с учетом граничных условий

$$\frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y=h} = 0, \quad c(0, t; x) = n(x, t), \quad (3.2)$$

получаем концентрацию частиц в зубцах $c(y, t; x)$ и, подставляя ее в (3.1), находим выражение для функции $M(p, \bar{k})$:

$$M(p, \bar{k}) = \sqrt{p/t_1} \tanh(\sqrt{pt_2}), \quad (3.3)$$

где

$$t_1 = \frac{1}{d} \left(\frac{LS}{S_i} \right)^2, \quad (3.4)$$

$$t_2 = \frac{h^2}{4d}. \quad (3.5)$$

Смысл введенных характерных времен в следующем. На временах t_1 количество частиц в зубцах становится того же порядка, что и в хребте; t_2 есть характерное время диффузии примеси в зубцы на расстояние порядка размера зубцов h .

Везде далее будем предполагать, что t_1 и t_2 удовлетворяют неравенству

$$t_1 \ll t_2. \quad (3.6)$$

Выполним интегрирование по \bar{k} в выражении (2.10) и получим:

$$G(x, t) = \frac{1}{u} \exp\left(\frac{ux}{D} \theta(-x)\right) \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{\exp\{-\Phi(p; |x|, t)\}}{\Lambda(p)}; \quad \text{Re } b > 0, \quad (3.7)$$

где

$$\Phi(p; x, t) = \frac{ux}{2D} [\Lambda(p) - 1] - pt, \quad (3.8)$$

$$\Lambda(p) = \sqrt{1 + t_u \left[p + \sqrt{p/t_1} \tanh(\sqrt{pt_2}) \right]} \quad (3.9)$$

и

$$t_u = 4D/u^2. \quad (3.10)$$

Заметим, что t_u — время, когда смещение облака примеси за счет адвекции становится сопоставимым с размером его диффузионного расплывания.

С помощью (3.7) найдем связь между значениями G -функции при $x < 0$ и $x > 0$:

$$G(-|x|, t) = \exp\left(-\frac{u|x|}{D}\right) G(|x|, t). \quad (3.11)$$

Принимая во внимание данное соотношение, далее будем рассматривать только положительные значения координаты x .

3.1.1. Режимы переноса и структура хвостов концентрации

Поведение функции Грина и структура хвостов концентрации зависят от соотношения между характерными временами t_u , t_1 , t_2 и рассматриваемого интервала времени. Рассмотрим возможные случаи.

I. $t_u \ll t_1$. Случай быстрой адвекции.

I.1. $t \ll t_u$. Этот случай равносителен пределу $u \rightarrow 0$, $t_1 \rightarrow \infty$. Поэтому здесь функция Грина принимает вид, соответствующий известному выражению для классической диффузии:

$$G(x, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right). \quad (3.12)$$

I.2. $t_u \ll t \ll t_2$. В этом интервале основной вклад в интеграл по переменной Лапласа (3.7) дают значения $t_2^{-1} \ll p \ll t_u^{-1}$. Поэтому для величин $\Lambda(p)$ и $\Phi(p; x, t)$ из (3.8) и (3.9) справедливы приближения:

$$\Lambda(p) \cong 1 + \frac{t_u}{2} \left(p + \sqrt{\frac{p}{t_1} - \frac{1}{4} t_u p^2} \right), \quad (3.13)$$

$$\Phi(p; x, t) = \frac{x}{u} \left(\sqrt{\frac{p}{t_1} - \frac{1}{4} t_u p^2} \right) - pt', \quad (3.14)$$

где $t' = t - \frac{x}{u}$ (напомним, что $x > 0$).

Ниже мы убедимся в том, что структура G -функции существенно различается в зависимости от того, больше или меньше текущее время t характерного времени

$$t_3 = (t_u t_1^2)^{1/3}. \quad (3.15)$$

Формально это определяется тем, какое из двух слагаемых в скобках правой части равенства (3.14) является доминирующим при интегрировании в (3.7).

Проанализируем далее отдельно случаи $t_u \ll t \ll t_3$ и $t_3 \ll t \ll t_2$.

1.2a. $t_u \ll t \ll t_3$. Рассмотрим сначала основную (не асимптотическую) область изменения пространственной переменной x . Предположим, что для данного интервала времени существенные значения переменной интегрирования в (3.7) определяются слагаемым $\sim p^2$ из (3.14). Тогда эти значения имеют порядок $p \sim (t_u t)^{-1/2}$. Для них слагаемое, пропорциональ-

ное \sqrt{p} в (3.14), имеет оценку $\frac{x}{u} \sqrt{\frac{p}{t_1}} \sim \left(\frac{x}{ut_3}\right)^{3/4}$.

Дальнейшие вычисления покажут, что в основной области пространственная переменная x удовлетворяет неравенству $x < ut$. С учетом этого обстоятельства приходим к неравенству

$$\frac{x}{u} \sqrt{\frac{p}{t_1}} < \left(\frac{t}{t_3}\right)^{3/4} \ll 1, \quad (3.16)$$

которое подтверждает сделанное выше предположение и, таким образом, позволяет пренебречь слагаемым $\sim \sqrt{p}$ из (3.14) при вычислении интеграла в (3.7). В итоге получаем

$$G(x, t) \cong (4\pi Dt)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}\right\}. \quad (3.17)$$

Это выражение соответствует режиму адвекции при наличии диффузии. Дрейфовый сдвиг и дисперсия в данном режиме равны соответственно

$$X = ut, \quad \sigma = \sqrt{2Dt}, \quad (3.18)$$

откуда следует неравенство $\sigma \ll X$.

Выражение (3.17) справедливо там, где экспонента в нем не слишком мала в сравнении с единицей. В далеких крыльях функции $G(x, t)$ (в асимптотиках) следует при интегрировании в (3.7) воспользоваться методом перевала. С помощью уравнения

$$\frac{\partial}{\partial p_0} \Phi(p_0; x, t) = 0$$

находим точку перевала $p_0 = -t'/2t_u t$. Необходимо обратить внимание на то, что величина p_0 вещественна и имеет знак, противоположный знаку t' . Это значит, что выражение (3.17) продолжает быть справедливым в далеком правом крыле (т. е. при $t' < 0$) функции $G(x, t)$. Иная ситуация складывается для левого крыла распределения (при $t' > 0$). Здесь точка перевала отрицательна. Поэтому при вычислении асимптотики следует учитывать вклад (обозначим его $\delta_b G$), возникающий от интегрирования по берегам разреза влево от точки ветвления функции $\Phi(p; x, t)|_{p=0}$. Точка ветвления функции обусловлена присутствием слагаемого $\sim \sqrt{p}$ в $\Phi(p; x, t)$. Чтобы найти вышеупомянутый вклад, следует пренебречь слагаемым $\sim p^2$ в $\Phi(p; x, t)$ из (3.14), затем в (3.7) произвести разложение подынтегрального выражения до первого порядка по величинам $\sim \sqrt{p}$. В результате находим

$$\delta_b G(x, t) \cong \frac{ut_u + 2x}{4u^2} \frac{1}{\sqrt{\pi t_1 t^3}}. \quad (3.19)$$

Стоит отметить, что выражение (3.17), насколько нам известно, не встречалось ранее в работах, посвященных гребешковым структурам. Однако вклад (3.19) приводит к необычному поведению распределения концентрации на временах $t_u \ll t \ll t_3$. Обладая степенным убыванием $\propto (x-ut)^{-3/2}$, вклад $\delta_b G$ перебивает экспоненциальное убывание (3.17) на относительно далеких расстояниях от центра пика. Сравнивая выражения (3.17) и (3.19), заключаем, что вклад (3.19) является определяющим, когда $t' > \sqrt{t_u t \ln\left(\frac{t_3}{t}\right)}$.

На временах $t_u \ll t \ll t_3$ реализуется режим, близкий к классической адвекции-диффузии с почти симметричным гауссовым профилем концентрации, слегка «испорченным» присутствием степенного шлейфа (3.19). Поведение функции Грина изображено на рис. 2.

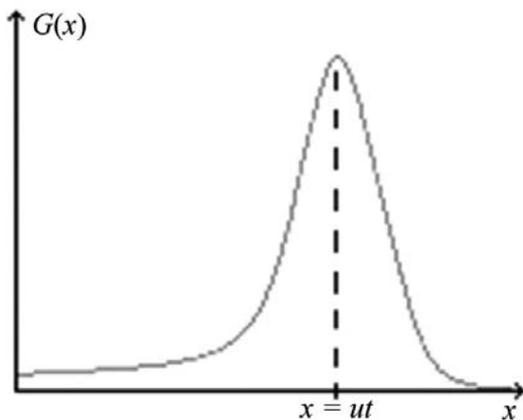


Рис. 2. Качественное поведение функции Грина на временах $t_u \ll t \ll t_3$

I.2b. $t_3 \ll t \ll t_2$. В соответствии с оценкой (3.16) при переходе от интервала $t_u \ll t \ll t_3$ к интервалу $t_3 \ll t \ll t_1$ слагаемые $\sim p^2$ и \sqrt{p} в (3.14) меняются ролями. Поэтому в этом случае справедлива аппроксимация

$$\Phi(p; x' t') \cong \frac{x}{u} \sqrt{\frac{p}{t_1}} - p t'. \quad (3.20)$$

Подставляя (3.20) в (3.7), находим:

$$G(x, t') = \frac{x + ut_u/2}{ut'} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_u t'}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_u t'}\right), \quad (3.21)$$

где

$$D_u = u^2 t_1. \quad (3.22)$$

В асимптотических участках функции Грина следует воспользоваться методом перевала. При $t' > 0$ имеются две точки перевала. Естественно, принимать во внимание следует только ту из них, которая приводит к меньшему значению показателя экспоненты. При $|t'| \gg t(t_u/2t_1)^{1/3}$ таковой является точка $p_0 = \frac{x^2}{4D_u t'^2}$. Ее вклад сводится к выражению (3.21).

В области $|t'| \ll t(t_u/2t_1)^{1/3}$ остается только одна точка перевала, $p_0 \equiv (t_u^2 t_1)^{-1/3}$, вклад от которой с точностью до предэкспоненциального множителя характеризуется выражением:

$$G(x, t) \propto \exp\left(-\frac{3t}{4t_3}\right). \quad (3.23)$$

При отрицательных значениях переменной t' также имеется только одна точка перевала $p_0 = -t'/2t_u t$, если $t' < 0$ и $|t'| \gg t(t_u/2t_1)^{1/3}$. Ее вклад сводится к выражению (3.23).

Выражение (3.21) справедливо во всем интервале $t_3 \ll t \ll t_2$. Однако качественное поведение функции $G(x, t)$ сильно различается в двух случаях: $t_3 \ll t \ll t_1$ и $t_1 \ll t \ll t_2$.

На временах $t_3 \ll t \ll t_1$ дрейфовый снос и дисперсия (ширина пика) равны соответственно

$$X = ut, \quad \sigma \sim ut^2/t_1, \quad (3.24)$$

откуда следует $X \gg \sigma$. Соответственно числитель дроби в показателе экспоненты в (3.21) можно заменить на $(ut)^2$, и тогда получаем

$$G(x, t') = \frac{x + ut_u/2}{ut'} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_u t'}} \exp\left(-\frac{t^2}{4t_1 t'}\right). \quad (3.25)$$

Таким образом, здесь реализуется режим адвекции с резко асимметричным профилем концентрации (рис. 3). При этом левое крыло распределения концентрации имеет форму степенного шлейфа, а правое — короткое экспоненциальное в далеком участке переходит в классическую Гауссову форму.

На первый взгляд появление степенного шлейфа на временах $t \ll t_1$ весьма неожиданно, так как зубцы еще не оказывают существенного влияния на процесс переноса примеси. Но столь необычное поведение распределения концентрации вполне объяснимо: часть активных частиц уходит в зубцы, когда пик распределения поравнялся с зубцом; затем пик двигается дальше, и выходит, что в зубце частиц больше, чем в хребте. Чтобы восстановить равновесие, частицы из данного зубца возвращаются в хребет.

Таким образом, наличие степенного шлейфа обусловлено уходом частиц в зубцы с последующим возвращением в хребет.

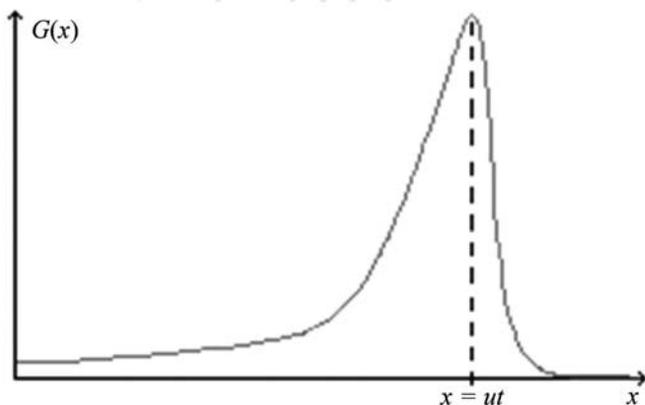


Рис. 3. Качественное поведение функции Грина на временах $t_3 \ll t \ll t_1$

На временах $t_1 \ll t \ll t_2$ дрейфовый снос и дисперсия имеют один порядок:

$$X \sim \sigma \sim \sqrt{D_u t}, \quad (3.26)$$

но при этом $\sqrt{D_u t} \ll ut$. Следовательно, в выражении (3.21) t' можно заменить на t , если речь идет об основной области распределения примеси или первой ступени хвоста. В результате находим

$$G(x, t) = \frac{x + ut_u/2}{ut} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_u t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_u t}\right). \quad (3.27)$$

Этот режим впервые был установлен в [31] и назван квазидиффузией. Несмотря на то что в режиме квазидиффузии дисперсия зависит от времени по классическому закону $\sigma \sim t^{1/2}$, данный режим является аномальным хотя бы потому, что полное число активных частиц не сохраняется.

Вторая и третья ступени хвоста концентрации в данном интервале полностью совпадают с полученными для случая 1.2b.

1.3. $t \gg t_2$. В данном интервале существенную роль играют значения переменной Лапласа $p \ll t_2^{-1}$. Следовательно, можно использовать аппроксимацию:

$$\tanh(\sqrt{pt_2}) \cong \sqrt{pt_2} - \frac{1}{3}(\sqrt{pt_2})^3. \quad (3.28)$$

Тогда (3.14) принимает вид

$$\Phi(p; x, t) \cong -\frac{x\tilde{D}_u}{\tilde{u}^3} p^2 - p\tilde{t}', \quad pt_2 \ll 1, \quad (3.29)$$

где введены обозначения:

$$\tilde{u} = u\sqrt{t_1/t_2}, \quad \tilde{D}_u \cong D_u/3, \quad \tilde{t}' = t - x/\tilde{u}. \quad (3.30)$$

Подставляя выражение (3.29) в (3.7), получаем

$$G(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{4\pi\tilde{D}_u t}} \sqrt{\frac{t_1}{t_2}} \exp\left\{-\frac{(x - \tilde{u}t)^2}{4\tilde{D}_u t}\right\}. \quad (3.31)$$

Данное выражение соответствует режиму классической адвекции-диффузии с перенормированными значениями скорости дрейфа и коэффициента диффузии. Назовем этот режим медленной классической адвекцией-диффузией. Здесь дрейфовый снос и дисперсия равны соответственно

$$X = \tilde{u}t, \quad \sigma = \sqrt{2\tilde{D}_u t}, \quad (3.32)$$

так что $\sigma \ll X$.

Наряду с основной областью выражение (3.31) описывает также распределение частиц в ближнем асимптотическом участке — до тех пор, пока точка перевала удовлетворяет неравенству $p_0 t_2 < 1$. Следующая ступень асимптотики отвечает выражению $p_0 \gtrsim t_2^{-1}$. Она соответствует режиму квазидиффузии и описывается выражением (3.27). Условная граница между ступенями концентрационного хвоста отвечает расстояниям $x - \tilde{u}t \sim \tilde{u}t$, где функция Грина имеет вид

$$G(x, t) \propto \exp(-t/t_2). \quad (3.33)$$

Третья ступень хвоста начинается, когда $|t'| \sim t(t_u/2t_1)^{1/3}$ и имеет вид (3.12), когда $|t'| > t(t_u/2t_1)^{1/3}$.

II. $t_1 \ll t_u^2/t_1 \ll t_2$. Случай сравнительно длинных зубцов.

Здесь на временах $t \ll t_u^2/t_1$ для $\Lambda(p)$ из (3.9) можно использовать аппроксимацию

$$\Lambda(p) \cong \frac{2}{u} \sqrt{D(p + \sqrt{p/t_1})}. \quad (3.34)$$

II.1. $t \ll t_1$. На этих временах поведение примеси полностью аналогично случаю I.1.

II.2. $t_1 \ll t \ll t_u^2/t_1$. Членом порядка $\sim p$ под корнем (3.34) следует пренебречь. Подставляя (3.34) в (3.7), находим:

$$G(x, t) \cong \frac{1}{2} \left(\frac{t_1}{D^2 t^3} \right)^{1/4} F(\xi), \quad \xi = \frac{x}{\sqrt{D\sqrt{t_1}t}}. \quad (3.35)$$

$$F(\xi) = \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} s^{-1/4} \exp(\xi s^{1/4} - s), \quad s = pt, \quad \text{Re } a > 0.$$

Данное выражение соответствует режиму субдиффузии. Дисперсия примеси описывается формулой $\sigma \sim \sqrt{D\sqrt{t_1}t}$. Ближайшая к основному облаку ступень асимптотики имеет вид

$$G(x, t) \cong \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{t_1}{D^2 t^3} \right)^{1/4} \left(\frac{\xi}{4} \right)^{1/3} \exp \left\{ -3 \left(\frac{\xi}{4} \right)^{4/3} \right\}. \quad (3.36)$$

Аналогичное выражение было получено в работе [26]. Вторая ступень хвоста ($p_0 t_1 > 1$) описывается классическим диффузионным выражением (3.12). На условной границе между двумя участками асимптотики (при $\xi \sim 4(t/3t_1)^{3/4}$) имеет место оценка

$$G(x, t) \sim (4\pi Dt)^{-1/2} \exp(-t/t_1).$$

II.3. $t_u^2/t_1 \ll t \ll t_2$. В этом интервале для основной области и ближней асимптотики справедливо квазидиффузионное выражение (3.27). Вторая ступень переднего фронта соответствует субдиффузионной асимптотике

(3.36). Она сменяется третьей ступенью, отвечающей классической диффузии (3.12).

II.4. $t \gg t_2$. Вывод для основной области и ближних участков переднего и заднего фронта в этом интервале, формально совпадая со случаем I.3, приводит к выражению для режима замедленной адвекции-диффузии (3.31). В этом случае хвост концентрации состоит из четырех ступеней. Вторая, третья и четвертая ступени определяются выражениями (3.31), (3.36), (3.27) и (3.12) соответственно.

Подробный анализ поведения концентрации на далеких расстояниях позволяет заключить, что хвосты концентрации имеют многоступенчатую структуру, а смена режимов переноса происходит согласно следующей закономерности: с увеличением расстояний осуществляется режим переноса, характерный для пика распределения в более раннем временном интервале. Аналогичные свойства хвостов концентрации были установлены ранее в [32—35]. Далее анализ хвостов концентрации мы не приводим, так как, используя вышеупомянутую закономерность, выражения для концентрации в хвостах легко установить.

III. $t_u^2/t_1 \gg t_2$. Случай сравнительно коротких зубцов.

III.1. Поведение примеси на временах $t \ll t_1$ аналогично случаю I.1.

III.2. В интервале $t_1 \ll t \ll t_2$ поведение полностью совпадает со случаем II.2.

III.3. $t_2 \ll t \ll t_u \sqrt{t_2/t_1}$. Здесь для пика распределения и первой ступени хвоста концентрации может быть использована аппроксимация

$$\tanh(\sqrt{pt_2}) \cong \sqrt{pt_2}, \quad u \rightarrow 0.$$

Для функции Грина несложно получить

$$G(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{4\pi\tilde{D}t}} \sqrt{\frac{t_1}{t_2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4\tilde{D}t}\right\}, \quad (3.37)$$

где

$$\tilde{D} = \sqrt{t_1/t_2} D. \quad (3.38)$$

Данное выражение соответствует режиму замедленной классической диффузии.

III.4. $t \gg t_u \sqrt{t_2/t_1}$. Данный случай совпадает со случаем I.3, если эффективный коэффициент диффузии заменить на \tilde{D} .

Используя полученные выше результаты, можно проанализировать поведение концентрации активных частиц в случае, когда в хребте имеет место только диффузия, а адвекция отсутствует [35]. Достаточно положить $u \rightarrow 0$, тогда $t_u \rightarrow \infty$. В результате задача существенно упрощается, и реализуются только три режима переноса:

- $t \ll t_1$ — классическая диффузия (3.12);
- $t_1 \ll t \ll t_2$ — субдиффузия (3.36);
- $t \gg t_2$ — замедленная классическая диффузия (3.37).

Отметим, что если положить длину зубцов бесконечной $h \rightarrow \infty$, то $t_2 \rightarrow \infty$ и, следовательно, перенос в режиме замедленной классической диффузии не наступает [35]. Конечная длина зубцов приводит к тому, что распределение примеси между зубцами и хребтом приходит в равновесие. В новом равновесном состоянии диффузия идет в режиме замедленной классической диффузии.

3.1.2. Полное число активных частиц

Используя (2.13), можно получить зависимость полного числа активных частиц от времени:

$$\begin{aligned} N(t) &\cong N_0, \quad t \ll t_1, \\ N(t) &\cong N_0 \sqrt{\frac{t_1}{\pi t}}, \quad t_1 \ll t \ll t_2, \\ N(t) &\cong N_0 \sqrt{\frac{t_1}{t_2}}, \quad t \gg t_2. \end{aligned} \tag{3.39}$$

Очевидно, на временах $t \ll t_1$ частицы в зубцах практически отсутствуют. Когда $t \gg t_1$, большая часть частиц уже находится в зубцах и отношение $N(t)/N_0$ обратно пропорционально суммарному объему в зубцах, занятому частицами. На временах $t_1 \ll t \ll t_2$ частицы уходят в зубцы и $N(t) \sim \sqrt{t}$. Аналогичное замечание сделано в работе [30]. Соотношение $N(t) \sim \sqrt{t}$ было также найдено авторами [26; 27; 32]. Наконец, когда $t \gg t_2$, зубцы уже до отказа насыщены частицами, и полное число активных частиц снова становится постоянным, но уже много меньше первоначального $N(t) \ll N_0$. Таким образом, зубцы в гребешковой структуре работают как ловушки. Похожий эффект (эффект мертвых концов) наблюдается в перколяционных средах [25].

Проще говоря, динамика системы такова: сначала миграция примесей происходит так, как будто зубцов просто нет, далее частицы начинают проникать в зубцы, в определенный момент зубцы насыщаются, и миграция снова происходит, также как и в отсутствие зубцов, но в среде, характеристики которой (коэффициент диффузии, скорость адвекции) отличаются от первоначальных.

На рис. 4 представлена зависимость $N(t)$ в логарифмическом масштабе. Для построения графика использовалась интерполяционная функция.

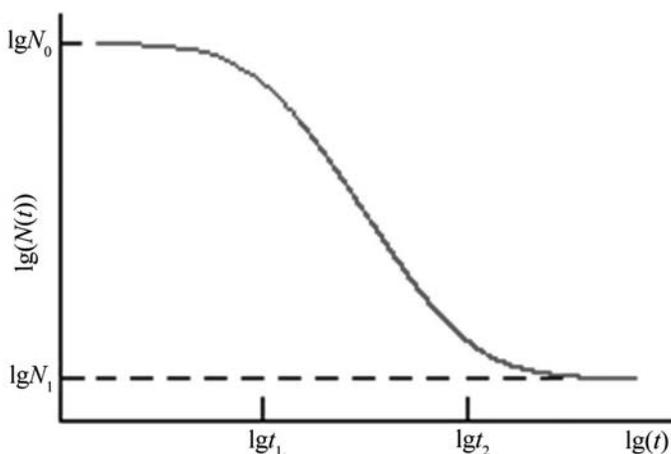


Рис. 4. Зависимость полного числа частиц от времени

3.1.3. Обсуждение результатов и выводы

Как было показано выше, в квазиодномерной гребешковой структуре с конечной длиной зубцов реализуются семь различных режимов переноса: классическая диффузия, субдиффузия, медленная классическая диффузия, квазидиффузия, два типа медленной классической адвекции-диффузии и классическая адвекция-диффузия. Первые три режима обусловлены наличием диффузии. Если исключить адвекцию из нашей модели, то лишь эти режимы и будут реализовываться [35]. Причем второй и третий режимы связаны с уходом частиц в зубцы, а следующие четыре обусловлены наличием адвекции в хребте. Более того, все они за исключением классической адвекции-диффузии — результат взаимодействия двух факторов: адвекции и ухода частиц в зубцы. Стоит отметить, что «медленные режимы» — это фактически классические режимы с перенормированными коэффициентами. Данные режимы являются следствием «насыщения» зубцов. Предположим, гребешковая структура имеет беско-

нечные зубцы, тогда насыщения не произойдет, и «медленные режимы» не возникнут.

Перенос примесей в одномерной и квазиодномерной гребешковой структуре с бесконечными зубцами при наличии только диффузии в хребте исследовался в [30] и [35] соответственно. Кроме того, авторы [30] рассмотрели различные модификации гребешковой структуры (разветвленная гребешковая структура, гирлянды и пр.). Однако таким вопросам, как перенос примеси в гребешковой структуре при наличии адвекции и диффузии в хребте, тонкая структура хвостов концентрации, в этих работах внимание не уделялось.

Результаты, полученные в подразделе 3.1.2, позволяют выявить закономерность, в соответствии с которой осуществляется смена режимов переноса в хвостах концентрации: с увеличением расстояний поведение концентрации определяется режимом переноса, который был характерен для пика распределения в более раннем временном интервале. Аналогичная закономерность была установлена в [33; 35; 36].

Неожиданное на первый взгляд поведение частиц примеси наблюдается на временах $t_u \ll t \ll t_1$. С одной стороны, количество частиц в зубцах все еще относительно мало, следовательно, наличие зубцов не должно оказывать заметного влияния на распределение концентрации, с другой — уход частиц в зубцы приводит к значительному уширению пика. К тому же в левом крыле распределения происходит медленное степенное убывание, а в правом — даже более быстрое, чем гауссово: $G(x, t) \sim \exp(-t^2 / 4t_1(t - x/u))$.

3.2. Квазиодномерная гребешковая структура с зубцами в виде дисков бесконечного радиуса

Решая уравнение (2.2) в цилиндрической геометрии и подставляя выражение для потока в соотношение (2.6), находим функцию $M(p, \vec{k})$, которая в логарифмическом приближении имеет вид

$$M(p, \vec{k}) = \left[\tilde{t}_1 \ln \left(\frac{H}{p \tilde{t}_1} \right) \right]^{-1}. \quad (3.40)$$

Здесь

$$\tilde{t}_1 = \frac{1}{d} \left(\frac{S}{P} \right)^2, \quad (3.41)$$

где P — периметр поперечного сечения цилиндра; $H \sim 1$ зависит от формы сечения.

При $t \gg \tilde{t}_1$ функция Грина G' в выражении (3.21) имеет вид

$$G'(x, t) = \frac{1}{u} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{\exp\left\{pt - \frac{xu}{2D} \left[\sqrt{1+t_u(p+M(p))} - 1 \right]\right\}}{\sqrt{1+t_u(p+M(p))}}. \quad (3.42)$$

Схожее выражение было получено в разделе 3.1 — см. (3.7).

В данном разделе ограничимся описанием поведения частиц примеси в основном облаке и ближней части хвоста. Асимптотики концентрации на больших расстояниях обсудим в разделе, посвященном обобщенной модели Дыхне.

В зависимости от соотношения между временами t_u — см. (3.10) — и \tilde{t}_1 реализуются различные последовательности режимов переноса.

I. $t_u \ll \tilde{t}_1$ Данный случай сравнительно быстрой адвекции частично совпадает со случаем I из предыдущего раздела.

I.1. В интервале $t \ll t_u$ реализуется одномерная классическая диффузия (3.12).

I.2a. $t_u \ll t \ll t_3$, где t_3 определяется формулой (3.15), в которой t_1 заменяется на \tilde{t}_1 .

Проводя рассуждения, аналогичные тем, что имели место в случае I.2a из раздела 3.1, получаем, что пик распределения описывается выражением (3.17). Вычисление вклада, который в левом крыле распределения является определяющим вдали от пика, дает (3.19).

I.2b. $t_3 \ll t \ll \tilde{t}_1$. Для этого интервала опять-таки воспользуемся теми же соображениями, что и в предыдущем разделе в случае I.2b. Тогда получаем режим квазидиффузии (3.21).

I.2c. $t \gg \tilde{t}_1$. В этом интервале появляется новый режим переноса, при котором пик концентрации распространяется со скоростью

$$R_2(t) = u\tilde{t}_1 \ln t / \tilde{t}_1. \quad (3.43)$$

Функция Грина в этом случае вплоть до ближнего фрагмента хвоста описывается формулой

$$G'(x, t) \approx \sqrt{\frac{t_1}{t}} \frac{1}{\pi R_2(t)} \left(\frac{ut_u + x}{R_2(t)} \right) \exp\left(-\frac{x}{R_2(t)} \right). \quad (3.44)$$

Это первый из логарифмических режимов, реализующихся в модели гребешковой структуры с цилиндрической геометрией сильно проницаемой среды.

II. $\tilde{t}_1 \ll t_u$. Случай сравнительно медленной адвекции.

II.1. На временах $t \ll \tilde{t}_1$ реализуется одномерная классическая диффузия (3.12).

II.2a. При $\tilde{t}_1 \ll t \ll \tilde{t}_3$, где

$$\tilde{t}_3 = t_1 \exp(t_u/t_1), \quad (3.45)$$

для функции Грина в основном облаке и ближнем фрагменте хвоста имеем

$$G'(x, t) \approx \sqrt{\frac{t_1}{t}} \frac{1}{\pi R_1(t)} \left(1 + \frac{x}{R_1(t)} \right) \exp\left(-\frac{x}{R_1(t)} \right), \quad (3.46)$$

где

$$R_1(t) = \sqrt{Dt_1 \ln t/t_1}. \quad (3.47)$$

Данный режим носит название логарифмической субдиффузии [33], так как $\sigma \sim \sqrt{Dt_1 \ln t/t_1}$.

II.1.3. $t \gg \tilde{t}_3$ — справедливо выражение (3.44).

В данном случае цилиндрической геометрии полное число активных частиц на временах $t \gg \tilde{t}_1$ монотонно убывает, как

$$N(t) \cong N_0 \frac{\tilde{t}_1}{t}. \quad (3.48)$$

3.3. Краткие выводы

Из результатов раздела следует, что в случае дискообразных зубцов появляются два новых, логарифмических режима переноса. Они наиболее медленные из возможных режимов переноса примесей в регулярно-неоднородных средах, поскольку отношение «мощности» ловушек частиц, которыми являются дискообразные зубцы, к мощности хребта является максимально возможным.

4. Квазидвумерная гребешковая структура

Квазидвумерная гребешковая структура ограничена в одном измерении, т. е. $l = 1$. Название «квазидвумерная», как и «квазиодномерная», связано не с размерностью структуры, а с размерностью уравнения (2.6), которое нам придется решать. В данном случае оно оказывается двумерным.

4.1. Особенности постановки задачи

Рассмотрим модификацию разобранный в разделе 3.1 задачи — квазидвумерную гребешковую структуру с бесконечными зубцами (т. е. $h \rightarrow \infty$, а значит, и $t_2 \rightarrow \infty$), ограниченную в одном измерении (рис. 5). Теперь хребет представляет собой плоскопараллельный слой шириной a , а каждый зубец является бесконечным по оси y параллелепипедом с шириной b , расстояние между зубцами — L .

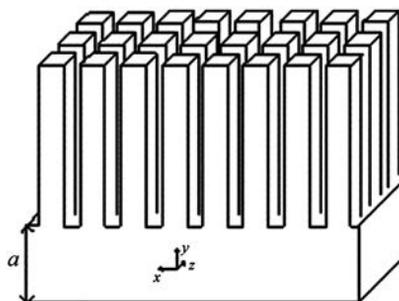


Рис. 5. Квазидвумерная гребешковая структура с бесконечными зубцами

Как было отмечено выше, нам придется иметь дело с двумерным уравнением (2.1), а значит, и с двумерной функцией Грина $G(\vec{r}, t)$.

Функция $M(p, \vec{k})$ из (2.8) имеет вид

$$M(p, \vec{k}) = \sqrt{p/t_1}. \quad (4.1)$$

В данном разделе выражение для t_1 имеет вид

$$t_1 = \frac{a^2}{d} \left(\frac{L}{b} \right)^2. \quad (4.2)$$

После интегрирования по волновому вектору \vec{k} в выражении (2.10), получим:

$$G(\vec{\rho}, t) = \frac{\exp(\vec{u}\vec{\rho}/2D)}{2\pi D} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} K_0(\Lambda(p)u\rho/2D), \quad \text{Re} b > 0, \quad (4.3)$$

где K_0 — функция Макдональда (модифицированная функция Бесселя второго рода) нулевого порядка;

$$\Lambda(p) = \sqrt{1 + t_u \left(p + \sqrt{p/t_1} \right)}. \quad (4.4)$$

4.2. Режимы переноса и структура хвостов концентрации

Пространственная переменная $\vec{\rho}$ зависит от продольной x и поперечной z координат. Как мы увидим далее, перенос примеси в продольном и поперечном направлениях может существенно отличаться. Поэтому необходимо различать продольную и поперечную диффузию. Как и в предыдущих разделах, поведение системы определяется соотношением между характерными временами t_u и t_1 .

I. $t_u \ll t_1$.

I.1. $t \ll t_u$. Этот случай равносителен переходу к пределу $u \rightarrow 0$, $t_u \rightarrow \infty$ в выражении (4.3). Поэтому здесь функция Грина принимает вид, соответствующий известному выражению для двумерной классической диффузии:

$$G(\vec{\rho}, t) \cong \frac{1}{4\pi Dt} \exp\left(-\frac{\vec{\rho}^2}{4Dt}\right). \quad (4.5)$$

I.2. $t_u \ll t \ll t_1$. В этом интервале аргумент функции Макдональда из (4.3) много больше единицы, поэтому можно воспользоваться хорошо известной асимптотикой:

$$K_0(z) \approx \sqrt{\pi/2z} \cdot e^{-z}, \quad z \gg 1.$$

Тогда получим следующее выражение для функции Грина:

$$G(\vec{\rho}, t) = \frac{\exp(\vec{u}\vec{\rho}/2D)}{2\sqrt{2\pi D u \rho}} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{\exp(-\Lambda(p)u\rho/2D)}{\sqrt{\Lambda(p)}}, \quad \text{Re} b > 0. \quad (4.6)$$

Для величины $\Lambda(p)$ справедлива формула (4.4). Как и в случае I.2 раздела 3.1, структура G -функции существенно различается в зависимости от того, является текущее время t больше или меньше характерного времени t_3 — см. (3.15). Поэтому проанализируем по отдельности случаи $t_u \ll t \ll t_3$ и $t \gg t_3$.

I.2a. $t_u \ll t \ll t_3$. Рассмотрим сначала основную (не асимптотическую) область изменения пространственной переменной $\bar{\rho}$. Далее необходимо провести такие же рассуждения, как и в случае I.2a раздела 2.1, в соответствующих формулах x заменить на $\bar{\rho}$, после чего получим:

$$G(\bar{\rho}, t) \cong \frac{1}{4\pi Dt} \exp\left(-\frac{(\bar{\rho} - \bar{u}t)^2}{4Dt}\right). \quad (4.7)$$

Данное выражение, как известно, характерно для двумерной диффузии при наличии адвекции. Дрейфовый сдвиг и дисперсия в данном режиме составляют

$$X = ut, \quad \sigma = \sqrt{4Dt},$$

откуда $\sigma \ll X$. Выражение (4.7) справедливо там, где экспонента в нем не слишком мала в сравнении с единицей. В далеких крыльях функции $G(\bar{\rho}, t)$ (в асимптотиках) следует при интегрировании в (4.6) воспользоваться методом перевала. Проводя рассуждения, как и в случае I.2a раздела 3.1, приходим к необходимости вычислить вклад, возникающий от интегрирования по берегам разреза влево от точки ветвления функции $\Lambda(p)$. В результате находим:

$$\delta G = \frac{ut_u + 4\rho}{16\pi\sqrt{2D\rho u^3 t_1 t'^3}} \exp\left[-\frac{u\rho}{2D}(1 - \cos\varphi)\right], \quad (4.8)$$

где $\cos\varphi = \frac{x}{\rho}$, $t' = t - \frac{\rho}{u}$.

На временах $t_u \ll t \ll t_3$ имеем режим, близкий к классической диффузии при наличии адвекции с почти симметричным гауссовым профилем концентрации, слегка «испорченным» присутствием степенного шлейфа (4.8).

I.2b. $t_3 \ll t \ll t_1$. В данном случае справедлива аппроксимация

$$\Lambda(p) \cong 1 + \frac{t_u}{2} \left(p + \sqrt{p/t_1} \right). \quad (4.9)$$

С учетом (4.9) находим из (4.6)

$$G(\bar{p}, t) \cong \frac{ut_u + 4\rho}{16\pi\sqrt{2D\rho u^3 t_1 t'^3}} \exp \left[-\frac{u\rho}{2D} (1 - \cos \varphi) - \frac{\rho^2}{4D_u t'} \right], \quad (4.10)$$

где D_u определяется формулой (3.22).

В асимптотических участках функции Грина следует воспользоваться методом перевала. При $t' > 0$ имеется две точки перевала. Естественно, принимать во внимание следует только ту из них, которая приводит к меньшему значению показателя экспоненты. При $|t'| \gg t(t_u/2t_1)^{1/3}$ таковой

является точка $p_0 = \frac{\rho^2}{4D_u t'^2}$. Ее вклад сводится к выражению (4.10).

В области $|t'| \ll t(t_u/2t_1)^{1/3}$ остается только одна точка перевала $p_0 \cong (t_u^2 t_1)^{-1/3}$. Ее вклад совпадает с выражением (3.23). При отрицательных значениях переменной t' также имеется только одна точка перевала $p_0 = -t'/2t_u t$, если $t' < 0$ и $|t'| \gg t(t_u/2t_1)^{1/3}$, она дает вклад (4.7).

Выражение (4.10) справедливо во всем интервале $t \gg t_3$. Однако качественное поведение функции $G(x, t)$ сильно различается в двух случаях: $t_3 \ll t \ll t_1$ и $t \gg t_1$.

На временах $t_3 \ll t \ll t_1$ дрейфовый снос и дисперсия (ширина пика) определяются выражениями

$$X = ut, \quad \sigma \sim ut^2/t_1.$$

Очевидно, что $X \gg \sigma$. Тогда, также как и в случае I.2b раздела 3.1, \bar{p}^2 можно заменить на $(ut)^2$ в показателе экспоненты (4.10):

$$G(\bar{p}, t) \cong \frac{ut_u + 4\rho}{4\sqrt{2D\rho u^3 t_1 t'^3}} \exp \left[-\frac{u\rho}{2D} (1 - \cos \varphi) - \frac{t^2}{4D_u t'} \right]. \quad (4.11)$$

Таким образом, реализуется режим адвекции с резко асимметричным профилем концентрации. При этом левое крыло распределения концентрации

имеет форму степенного шлейфа, а правое — короткое экспоненциальное, в далеком участке переходящее в классическую гауссову форму.

1.2с. $t \gg t_1$. На временах $t \gg t_1$ дрейфовый снос и дисперсия имеют один порядок:

$$X \sim \sigma \sim \sqrt{D_u t}$$

и $\sqrt{D_u t} \ll ut$. Следовательно, t' можно заменить на t в выражении (4.10), если речь идет о пике распределения или первой ступени хвоста. В результате находим

$$G(\bar{\rho}, t) \cong \frac{ut_u + 4\rho}{16\pi\sqrt{2D\rho u^3 t_1^3}} \exp\left[-\frac{u\rho}{2D}(1 - \cos\varphi) - \frac{\rho^2}{4D_u t}\right]. \quad (4.12)$$

Вторая и третья ступени хвоста концентрации в режиме квазидиффузии полностью совпадают с уже полученными для случая 1.2b.

Все вышеприведенные результаты справедливы для продольной диффузии. Посмотрим, что происходит в поперечном направлении.

Очевидно, что в случаях 1.1 и 1.2a реализуется классическая диффузия. Рассмотрим показатель экспоненты из (4.10). Принимая во внимание, что $x = ut$, получаем

$$\frac{u\rho}{2D}(1 - \cos\varphi) \cong \frac{uy^2}{4Dx} \approx \frac{y^2}{4Dt}.$$

Заметим, что $D \ll D_u$, так как мы рассматриваем случай $t_u \ll t_1$. Следова-

тельно, $\frac{y^2}{4Dt} \gg \frac{\rho^2}{4D_u t_1}$, что позволяет заменить показатель экспоненты на

$\frac{y^2}{4Dt}$, и мы снова имеем дело с классической диффузией.

В случае 1.2с с учетом $\sigma \sim \sqrt{D_u t}$ находим показатель экспоненты в (4.12):

$$\frac{u\rho}{2D}(1 - \cos\varphi) \cong \frac{uy^2}{4Dx} \approx \frac{uy^2}{4D\sqrt{D_u t}} \approx \frac{y^2}{4D\sqrt{t_1 t}},$$

что соответствует субдиффузионному режиму.

Таким образом, в поперечном направлении на временах $t \ll t_1$ реализуется классическая диффузия, а на временах $t \gg t_1$ — субдиффузия.

II. $t_u \gg t_1$. На временах меньших, чем t_u^2/t_1 , можно использовать аппроксимацию

$$\Lambda(p) \cong \frac{2}{u} \sqrt{D(p + \sqrt{p/t_1})}. \quad (4.13)$$

II.1. $t \ll t_1$. Этот случай полностью аналогичен случаю I.1.

II.2. $t_1 \ll t \ll t_u^2/t_1$. Данный случай аналогичен случаю II.2 из раздела 3.1: членом порядка $\sim p$ в выражении под корнем (4.13) следует пренебречь и воспользоваться методом перевала:

$$G(\bar{\rho}, t) = \frac{1}{2\pi Dt} F(\eta), \quad (4.14)$$

где

$$F(\eta) = 4 \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} e^s K_0(2\eta^{1/2} s^{1/4}), \quad s = pt, \quad \eta = \frac{\rho^2}{4D\sqrt{tt_1}}.$$

Здесь $\sigma \sim \sqrt{D\sqrt{t_1 t}}$, следовательно, выражение (4.14) соответствует режиму субдиффузии. Первую ступень хвоста найдем, воспользовавшись асимптотическим выражением для функции Макдональда:

$$G(\bar{\rho}, t) \cong \frac{1}{2\sqrt{6\pi Dt}} \exp\left\{-3\left(\frac{\eta}{4}\right)^{2/3}\right\}. \quad (4.15)$$

II.3. $t \gg t_u^2/t_1$. В этом интервале для основной области и первой ступени хвоста справедливо квазидиффузионное выражение (4.12).

В поперечном направлении, как и в случае I, на временах $t \ll t_1$ реализуется классическая диффузия, а на временах $t \gg t_1$ — субдиффузия.

4.3. Обсуждение результатов и выводы

В заключение отметим, что в квазидвумерной гребешковой структуре с бесконечными зубцами реализуются те же режимы переноса, что и в квазиодномерной с бесконечными зубцами: классическая диффузия, классическая адвекция-диффузия, субдиффузия, квазидиффузия. Тем не менее исследование переноса примеси в квазидвумерном гребешке было необходимо по двум причинам. Во-первых, как показано в следующем разделе, функцию Грина обобщенной модели Дыхне можно представить через

функцию Грина квазидвумерного гребешка с бесконечными зубцами, т. е. рассмотренная задача отчасти является вспомогательной, поэтому и случай конечной длины зубцов в данном разделе мы не рассматривали. Как влияет конечная длина зубцов на перенос примеси в гребешке, мы уже выяснили в разделе 2.1. В частности, возникают «медленные» режимы переноса. Во-вторых, «квазидвумерность» приводит к тому, что диффузия в продольном и поперечном направлениях происходит по-разному. В поперечном направлении реализуются всего два режима: классическая диффузия (на временах $t \ll t_1$) и субдиффузия (на временах $t \gg t_1$). Этого и следовало ожидать, ведь наличие адвекции не оказывает влияния на миграцию в поперечном направлении, поскольку скорость адвекции направлена по оси x . Следовательно, режимы, обусловленные адвекцией, не возникают.

5. Обобщенная модель Дыхне

Модель Дыхне является простым, но важным примером контрастной среды. Впервые она исследовалась в [36]. Были найдены характерные режимы миграции частиц, получены оценки зависимости размера облака частиц от времени для каждого режима и показано, что происходит смена режимов во времени. Детальное исследование пространственно-временных характеристик концентрации примеси в модели Дыхне проводилось в [33]. В настоящей работе мы проведем анализ переноса примеси в обобщенной модели Дыхне. Отличие обобщенной модели Дыхне от простой состоит в наличии адвекции в хребте. Адвекция приводит к появлению «новых» режимов переноса.

5.1. Особенности постановки задачи

Исследуется перенос примеси в резкоконтрастной среде, состоящей из сильно- и слабопроницаемых областей (рис. 6). Область I представляет собой плоскопараллельный слой (рис. 6а) либо прямой цилиндр (рис. 6б). Область II занимает всю остальную часть пространства. Перенос в среде, заполняющей область I , определяется адвекцией с постоянной скоростью u и диффузией с коэффициентом D . Перенос в области II определяется диффузией с коэффициентом d . Рассматривается случай

$$D \gg d. \quad (5.1)$$

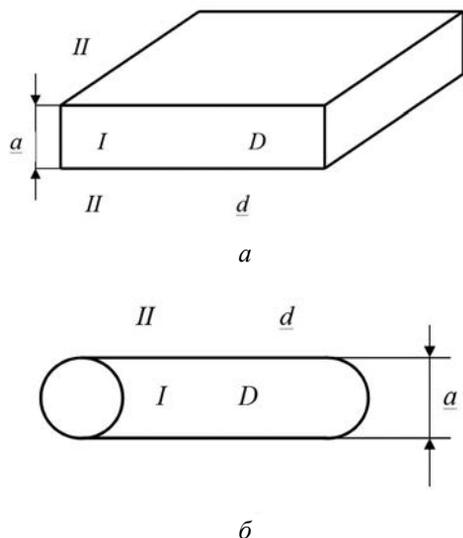


Рис. 6. Геометрия задачи в случаях плоско-параллельного слоя (а) и прямого цилиндра (б)

Для нахождения функции Грина (2.10), аналогично тому, как это делалось в предыдущих разделах, необходимо определить выражение для функции $M(p, \vec{k})$. Заметим, что теперь в представлении Фурье — Лапласа уравнение (2.2) имеет вид

$$\left(p + dk^2 + \frac{d^2}{dy^2} \right) c_{p\vec{k}}(y) = 0.$$

Отсюда следует, что определенная соотношением (2.8) функция $M(p, \vec{k})$ зависит от своих аргументов следующим образом: $M(p, \vec{k}) = M(p + dk^2)$. Поэтому в выражении (2.10) удобно сделать замену переменной интегрирования: $p \rightarrow p' = p + dk^2$. Тогда функция Грина в представлении Фурье — Лапласа приобретает вид (ниже мы опускаем штрих над p):

$$G_{p\vec{k}} = G'_{p\vec{k}} \exp(-dk^2 t), \quad (5.2)$$

где

$$G'_{pk} = \left[Dk^2 + i\bar{u}\bar{k} + p + M(p) \right]^{-1}. \quad (5.3)$$

Здесь учтено $D - d \approx D$.

Используя свойства свертки, находим

$$G(\bar{\rho}, t) = \frac{1}{4\pi dt} \int_{-\infty}^{+\infty} d^{(3-l)}\bar{\rho}' \exp\left(-\frac{(\bar{\rho}-\bar{\rho}')^2}{4dt}\right) G'(\bar{\rho}', t). \quad (5.4)$$

Здесь функция $G'(\bar{\rho}, t)$ дается обратным преобразованием Фурье — Лапласа функции G'_{pk} , определенной в (5.3). Функция $G'(\bar{\rho}, t)$ вычислялась в разделах 3 и 4.

Из (5.4) нетрудно видеть, что на временах, когда дисперсия $\sigma = \sqrt{4dt}$, определяемая переносом примеси по слабо проницаемой среде II, мала по сравнению с дисперсией σ' , определяемой функцией G' вспомогательной задачи, поведение примеси описывается закономерностями, полученными в разделах 3 и 4. В обратном случае, перенос примеси в основном облаке (в том числе и активных частиц в среде I) определяется переносом по слабопроницаемой среде.

Из анализа поведения асимптотики концентрации в случае плоскопараллельной геометрии вспомогательной задачи (см. раздел 3.1) следует, что при смене режимов переноса в основном облаке со временем, структура хвостов концентрации активных частиц становится многоступенчатой: чем дальше мы отдаляемся от основного облака, тем более ранний из уже реализованных режимов переноса описывает поведение в хвосте. Данный вывод еще раз подтверждает установленное ранее правило [33; 36]. Поэтому мы сочли целесообразным не выписывать каждый раз структуру формирующегося хвоста, а ограничиться описанием последовательности реализующихся режимов переноса в основном облаке, откуда структура хвоста без труда восстанавливается.

Далее рассмотрим перенос примеси в обобщенной модели Дыхне для двух конфигураций среды, изображенных на рис. 6.

Плоскопараллельный слой ($l=1$, рис. 6а). В данном случае перенос в поперечном направлении происходит так же, как и в простой модели Дыхне [36].

В продольном направлении поведение концентрации зависит от соотношения между параметрами t_1 и t_u , где t_u определяется формулой (3.10), а выражение для t_1 имеет вид

$$t_1 = \frac{a^2}{4d}. \quad (5.5)$$

1. Если $t_u \gg t_1 D/d$, адвекция практически не влияет на формирование профиля концентрации. Здесь можно считать $u \rightarrow 0$, тогда выражение (2.10) полностью совпадает с функцией Грина модели Дыхне, полученной в [33], и миграция примеси происходит так же, как в простой модели Дыхне:

- при $t \ll t_1$ имеет место классическая диффузия (4.5);
- далее при $t_1 \ll t \ll t_2$, где

$$t_2 = t_1 \left(\frac{D}{d} \right)^2, \quad (5.6)$$

- следует режим субдиффузии (4.15);
- при $t \gg t_2$ наступает медленная классическая диффузия:

$$G(\rho, t) \cong \frac{a}{\sqrt[3]{4\pi dt}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4dt}\right). \quad (5.7)$$

2. Если характерные времена связаны соотношением $t_1 \ll t_u \ll t_1 D/d$, то имеет место следующая последовательность режимов:

- при $t \ll t_1$ — двумерная классическая диффузия (4.5);
- далее, при $t_1 \ll t \ll t_u^2/t_1$ - субдиффузия (4.14);
- а затем при $t_u^2/t_1 \ll t$ — квазидиффузия второго типа (4.12).

3. При столь больших значениях скорости u , что $t_u \ll t_1$, реализуются следующие режимы:

- $t \ll t_u$ — классическая двумерная диффузия (4.5);
- $t_u \ll t \ll t_3$ — классическая адвекция-диффузия (4.7);
- $t_3 \ll t \ll t_1$ — квазидиффузия первого типа (4.10);
- $t_1 \ll t$ — квазидиффузия второго типа (4.12).

Отметим, что в случаях 2 и 3 режим медленной диффузии не наступает, так как дисперсия, определяемая переносом по быстрой среде $\sigma' \sim \sqrt{D_u t}$ оказывается больше дисперсии, определяемой режимом (5.7).

Прямой цилиндр ($l = 2$, см. рис. 6б). В этом случае задача для активных частиц является одномерной. Последовательность режимов переноса определяется соотношением между параметрами t_u , \tilde{t}_1 и $\frac{D}{d}$.

1. При $\tilde{t}_1 \ln D/d \ll t_u$ задача полностью совпадает со случаем прямого цилиндра простой модели Дыхне [33; 36]. Действительно, на временах $t \ll t_u$ адвекция вообще роли не играет. Более того, при условии $\tilde{t}_1 \ln D/d \ll t_u$ время t_u оказывается настолько велико, что влияние адвекции на перенос примеси оказывается пренебрежимо малым и на временах $t \gg t_u$ — перенос частиц в слабопроницаемой среде вносит куда более значительный вклад.

В итоге из результатов для простой модели Дыхне следует:

- на временах $t \ll \tilde{t}_1$ имеет место классическая одномерная диффузия (3.12);
- на временах $\tilde{t}_1 \ll t \ll \tilde{t}_2$ — логарифмическая субдиффузия (3.46);
- при $t \gg \tilde{t}_2$, где

$$\tilde{t}_2 = \tilde{t}_1 \frac{D}{d} \ln \frac{D}{d}, \quad (5.8)$$

— медленная классическая диффузия (5.7), если в формуле (5.7) положить $\rho = x$.

2. При $\tilde{t}_1 \ll t_u \ll \tilde{t}_1 \ln \frac{D}{d}$, также как и для цилиндрической гребенки, реализуется последовательность режимов (3.12), (3.46), (3.44), после чего при $t \gg \tilde{t}_2^1$, где

$$\tilde{t}_2^1 = \tilde{t}_1 \frac{D_u}{d} \ln^2 \frac{D_u}{d}, \quad (5.9)$$

устанавливается режим медленной диффузии (5.7).

3. При $t_u \ll \tilde{t}_1$ систематика режимов переноса следующая. Вплоть до времени \tilde{t}_2^1 сохраняется последовательность режимов (3.12), (3.17) с левым

крылом (3.19), (3.21) и (3.44), после чего при $t \gg \tilde{t}_2^1$ доминирующей становится медленная классическая диффузия (5.7).

Отметим, что для прямого цилиндра при любом соотношении между \tilde{t}_1 и t_u окончательным режимом является режим медленной диффузии (5.7).

5.2. Обсуждение результатов и выводы

Итак, мы проанализировали перенос примеси в рамках обобщенной модели Дыхне, включающей помимо диффузии (как простая модель Дыхне) также и адвекцию в сильно проницаемой среде. Показано, что выражение для концентрации активных частиц (частиц в сильно проницаемой среде) представляется в виде свертки функций Грина вспомогательной задачи, для которой в слабопроницаемой среде отсутствует продольная диффузия, и задачи диффузии примеси в слабопроницаемой среде.

По сравнению с простой моделью Дыхне в обобщенной модели возникают новые режимы переноса, возможность реализации которых определяется соотношением между характерными временами t_u и t_1 . При малых скоростях адвекции обобщенная модель сводится к простой модели [33; 36], и режим переноса последовательно проходит стадии быстрой классической диффузии, субдиффузии и медленной классической диффузии. При больших скоростях в плоскопараллельном случае возможны режимы адвекции-диффузии с сильно анизотропным профилем концентрации (степенным шлейфом позади фронта), а также режим квазидиффузии, при котором дисперсия определяется как скоростью адвекции в сильно проницаемой среде, так и диффузией в слабопроницаемой матрице.

Еще один результат обобщенной модели Дыхне в геометрии плоскопараллельного слоя состоит в отличии режимов переноса в продольном (относительно скорости адвекции) и поперечном направлениях.

В обобщенной модели Дыхне в цилиндрической геометрии при больших значениях скоростей адвекции появляется новый режим логарифмической субдиффузии, более быстрый по сравнению с субдиффузионным режимом, полученным ранее для простой модели Дыхне [33; 36].

Следует отметить качественное отличие роли, которую играет сильнопроницаемая среда в формировании режима переноса примеси активных частиц на предельно больших временах для двух геометрий. В случае плоскопараллельного слоя окончательный (по времени) режим переноса зависит от величины скорости адвекции в сильнопроницаемой среде, и при достаточно большой скорости ею и определяется (квазидиффузионный режим с D_u). Для цилиндрической геометрии конечным всегда является режим

медленной диффузии, определяемый коэффициентом d слабопроницаемой среды.

Проведенный анализ асимптотического поведения концентрации на больших расстояниях для плоскопараллельной геометрии вспомогательной задачи обобщенной модели Дыхне показал, что наличие адвекции не влияет на установленный ранее вывод (см. [33; 36]) о связи смены режимов переноса со структурой хвостов. А именно, что по мере увеличения времени смена режимов переноса приводит к возникновению сложной структуры асимптотики концентрации: чем более удален фрагмент хвоста, тем более ранний режим переноса определяет его форму.

6. Обобщенная модель Дыхне с источником в слабопроницаемой среде

6.1. Постановка задачи

В данном разделе мы рассмотрим перенос примеси в рамках обобщенной модели Дыхне, но теперь источник будет точечным и расположен в слабопроницаемой среде (матрице) на расстоянии $h \gg a$ от трещины (рис. 7). Начальное условие имеет вид

$$c(\vec{\rho}, z; 0) = N_0 \delta(z - h - a/2) \delta(\vec{\rho}). \quad (6.1)$$

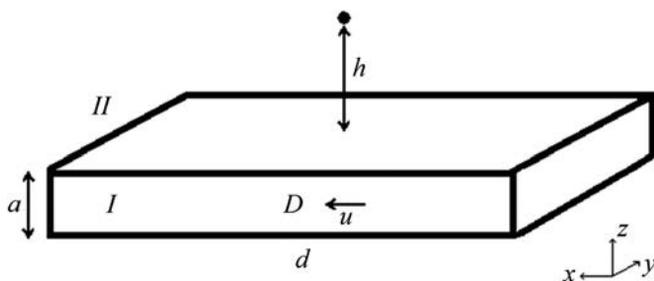


Рис. 7. Геометрия задачи

Таким образом, на пути распространения примеси возникает диффузионный барьер. Уравнения (2.1) и (2.2) по-прежнему описывают миграцию частиц примеси в трещине и матрице соответственно.

6.2. Основные соотношения

На временах $t \gg \sqrt{t_0 t_h}$ распределение концентрации в трещине по z практически однородно, поэтому уравнение (2.1) можно усреднить по этой переменной. Тогда в переменных Фурье—Лапласа уравнения (2.1), (2.2) примут вид

$$(p + i\bar{\mu}k + Dk^2)n_{p\bar{k}} = -q_{p\bar{k}}/a, \quad (6.2)$$

$$\left(p + dk^2 - d \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)c_{p\bar{k}} = N_0\delta(y - h - a/2), \quad (6.3)$$

где $q_{p\bar{k}} = -d \frac{\partial c_{p\bar{k}}}{\partial y} \Big|_{z=+a/2-0}$ — плотность потока частиц в представлении Фурье—Лапласа.

Решив уравнение (6.3), найдем поток $q_{p\bar{k}}$ и подставим в (6.2), откуда концентрация в переменных Фурье — Лапласа

$$n_{p\bar{k}} = \frac{N_0}{a} \frac{e^{-2\sqrt{pt_h - dk^2}t}}{Dk^2 + i\bar{\mu}k + p + \sqrt{p/t_1}}. \quad (6.4)$$

Заметим, что в пространстве Фурье—Лапласа выражения для концентрации в рассматриваемой задаче и в задаче из предыдущего раздела, где диффузионный барьер отсутствовал, связаны простым соотношением

$$n_{p\bar{k}} = e^{-2\sqrt{pt_h}} n_{p\bar{k}}^*. \quad (6.5)$$

Здесь и далее знаком «*» будем обозначать результаты, полученные для задачи из раздела 6.

$$n_{p\bar{k}}^* = \frac{N_0}{a} \frac{e^{-dk^2t}}{Dk^2 + i\bar{\mu}k + p + \sqrt{p/t_1}}. \quad (6.6)$$

Выражение (6.6) может быть получено и непосредственно в результате решения уравнений (6.2), (6.3), если заменить начальное условие (6.1) на следующее:

$$c(\bar{\rho}, z; 0) = N_0\delta(z)\delta(\bar{\rho}).$$

Обратное преобразование Фурье — Лапласа от функции (6.5) дает

$$n(\bar{\rho}, t) = \int_0^t dt' \sqrt{\frac{t_h}{\pi(t-t')^3}} \exp\left(-\frac{t_h}{t-t'}\right) n^*(\bar{\rho}, t'). \quad (6.7)$$

Здесь

$$n^*(\bar{\rho}, t') = \frac{e^{i\bar{\rho}/2D}}{2\pi D} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{e^{p t'} dp}{2\pi i} \int \frac{d^2 \rho'}{4\pi d t'} e^{-\frac{(\bar{\rho}-\rho')^2}{4d t'}} K_0(\rho'/Z(p)), \quad \text{Re } b > 0 \quad (6.8)$$

и $\rho' = |\bar{\rho}'|$, K_0 — функция Макдональда (функция Бесселя второго рода) нулевого порядка, а $Z(p)$ имеет вид

$$Z(p) = 2D/u \sqrt{1+t_u(p+\sqrt{p/t_1})}, \quad (6.9)$$

где $t_u = 4D/u^2$.

Заметим, что выражение (6.7) является сверткой двух функций. Аналогичным образом выглядело бы распределение концентрации активных частиц, если бы источник был непрерывным, а не точечным, и располагался вдоль границы между матрицей и трещиной, а функция источника имела вид $e^{-\frac{t_h}{t}} \sqrt{\frac{t_h}{\pi t^3}}$. Причем на временах $t \gg t_h$, где $t_h = h^2/4d$, функция $n^*(\bar{\rho}, t')$ почти не меняется с ростом t' . Тогда, выполнив интегрирование в (6.7), получим

$$n(\bar{\rho}, t) \cong n^*(\bar{\rho}, t). \quad (6.10)$$

Как и следовало ожидать, на столь больших временах концентрация ведет себя так, как будто источник располагается в трещине, поэтому нас будет интересовать противоположный случай:

$$t \ll t_h. \quad (6.11)$$

Далее показано, что на этих временах диффузионный барьер оказывает существенное влияние на миграцию частиц примеси.

Обе подынтегральные функции в (6.7) являются довольно резкими, причем $n^*(\bar{\rho}, t')$ с увеличением ρ резко убывает. Ниже показано, что экспоненциальная функция оказывается более резкой, если рассматриваемые расстояния недостаточно велики:

$$\rho/Z(t_h/t^2) \ll t_h/t, \quad (6.12)$$

где $Z(t_h/t^2)$ определяется формулой (6.9).

Заметим, что экспонента из (6.7) резко убывает с ростом t' . Разложим ее показатель в ряд Тейлора:

$$e^{-\frac{t_h}{t-t'}} \cong e^{-\frac{t_h}{t}} e^{\frac{t'_h}{t^2}}. \quad (6.13)$$

Введем понятие эффективного источника. Как уже отмечалось, фактически мы имеем дело с непрерывным источником, расположенным вдоль верхней границы между матрицей и трещиной. При $t' = t^2/t_h$ экспонента (6.13) убывает в e раз, следовательно, можно считать, что эффективный источник работает только в течение интервала времени, равного $t_{\text{ef}} = t^2/t_h$.

Принимая во внимание разложение (6.13), сделаем подстановку $t^2/t_h \rightarrow s$ в (6.7) и получим

$$n(\bar{\rho}, t) = \sqrt{\frac{t_h}{\pi t^3}} e^{-t_h/t} \int_0^{\infty} dt' e^{-st'} n^*(\bar{\rho}, t'). \quad (6.14)$$

Заметим, что здесь интеграл является преобразованием Лапласа от функции $n^*(\bar{\rho}, t')$, где $s = t_h/t^2$ — переменная Лапласа. Таким образом, с учетом (6.8) находим

$$n(\bar{\rho}, t) = \sqrt{\frac{t_h}{\pi t^3}} \frac{e^{-\bar{u}\bar{\rho}/2D - t_h/t}}{2\pi D} \int \frac{d^2\rho'}{4\pi dt} e^{\frac{(\bar{\rho}-\bar{\rho}')}{4dt}} K_0\left[\rho'/Z(t_h/t^2)\right], \quad (6.15)$$

где $Z(t_h/t^2)$ определяется формулой (6.9).

На расстояниях $\rho \ll Z(t_h/t^2)$ функцию Макдональда можно аппроксимировать следующим образом:

$$K_0(w) \sim -\ln w, \quad w \ll 1,$$

тогда выражение (6.15) принимает вид

$$n(\bar{\rho}, t) \cong N_0 \sqrt{\frac{t_h}{\pi t^3}} \frac{e^{-t_h/t} e^{\bar{u}\bar{\rho}/2D}}{2\pi D} \begin{cases} \ln(Z(t_h/t^2)/\rho), & \sqrt{dt} \ll \rho \ll Z(t_h/t^2), \\ \ln(Z(t_h/t^2)/\sqrt{4dt}), & \rho \ll \sqrt{dt}. \end{cases} \quad (6.16)$$

Если же $\rho \gg Z(t_h/t^2)$, необходимо использовать другую аппроксимацию:

$$K_0(w) \sim e^{-w} \sqrt{\pi/2w}, \quad w \gg 1. \quad (6.17)$$

Подставляем (6.17) в (6.15), тогда надо заметить, что концентрация определяется выражением (6.15), только когда справедливо $\rho/Z(t_h/t^2) \ll t_h/t$.

Рассмотрим поведение концентрации для обратного случая $\rho/Z(t_h/t^2) \gg t_h/t$. Согласно результатам [37] функцию $n^*(\bar{\rho}, t')$ можно представить в виде

$$n^*(\bar{\rho}, t') \sim \exp(-\Phi(\bar{\rho}, t')), \quad (6.18)$$

где $\Phi(\bar{\rho}, t) \sim [\bar{\rho}/R^*(t)]^\alpha$, а величины $R^*(t)$ и α определяются режимом переноса в трещине [37].

Подставим (6.18) в (6.7) и произведем замену переменной $t' \rightarrow t - t'$. Получим

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \int_0^\infty \sqrt{\frac{t_h}{\pi t'^3}} \exp(-t_h/t' - \Phi(\bar{\rho}, t - t')) dt'. \quad (6.19)$$

Разложим функцию $\Phi(\bar{\rho}, t - t')$ в ряд Тейлора в окрестности точки $t' = 0$:

$$\Phi(\bar{\rho}, t) + t' \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\bar{\rho}, t).$$

Используя это разложение, интеграл (6.19) будем вычислять методом перевала. Найдем значение перевальной точки:

$$t'_0 = \sqrt{t_h / \frac{\partial \Phi(\bar{\rho}, t)}{\partial t}},$$

и тогда

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \exp\left(-2\sqrt{t_h \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\bar{\rho}, t)} - \Phi(\bar{\rho}, t)\right). \quad (6.20)$$

Далее показано, что это выражение определяет концентрацию на далеких расстояниях (хвосты концентрации), точнее в удаленных участках хвоста, в то время как для ближней ступени хвоста справедливо (6.15).

6.3. Режимы переноса

В зависимости от соотношения между характерными временами t_u, t_1, t_h, t_2 , где $t_2 = t_1 (D/d)^2$, можно выделить несколько случаев, однако мы рассмотрим два наиболее интересных: $t_u \ll t_1 \ll t_h$ и $t_1 \ll t_h \ll t_u, t_2$. Если рассматривать времена $t \ll t_h$, в первом случае адвекция существенно влияет на процесс переноса примеси, а во втором ее влиянием можно пренебречь. Вообще говоря, влияние адвекции становится существенным на временах $t \gg \sqrt{t_u t_h}$, а обратный уход частиц из трещины в матрицу — когда $t \gg \sqrt{t_1 t_h}$. Перейдем к рассмотрению указанных случаев.

1. $t_u \ll t_1 \ll t_h$. Заметим, что функцию $Z(p)$ из (6.9) можно аппроксимировать более простой, если рассмотреть предельные случаи, точнее, временные интервалы.

Далее будет показано, что если расстояния такие, что $Z(t_h/t^2) \ll \rho \ll Z(t_h/t^2)t_h/t$, тогда основное облако и ближняя ступень хвоста концентрации определяются выражением (6.15).

Если $Z(t_h/t^2) \ll \sqrt{dt}$, то из выражения (6.7) находим

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \exp\left(-\frac{\rho^2 + h^2}{4dt}\right). \quad (6.21)$$

Данное выражение соответствует режиму медленной классической диффузии.

1.1. $t \ll \sqrt{t_u t_h}$. Здесь справедливо равенство $Z(t_h/t^2) \cong \sqrt{Dt^2/t_h}$. Тогда, подставляя его в (6.15), находим

$$n(\bar{\rho}, t) \cong N_0 \frac{1}{2\sqrt{2\pi Dt}} \left(\frac{\sqrt{Dt_h}}{\rho}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{t_h}{t} - \frac{\rho}{\sqrt{Dt^2/t_h}}\right). \quad (6.22)$$

Отсюда размер основного облака

$$R(t) \sim \sqrt{Dt^2/t_h}. \quad (6.23)$$

1.2. $\sqrt{t_u t_h} \ll t \ll \sqrt{t_1 t_h}$. В этом временном интервале можно использовать аппроксимацию $Z(t_h/t^2) \cong 2D/u(1+t_u t_h/t^2)$, тогда из (6.15) следует:

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \exp\left(-\frac{t_h}{t} - \frac{\rho}{ut^2/t_h} - \frac{\rho}{ut_u}(1 - \cos \varphi)\right), \quad (6.24)$$

где $\cos \varphi = \frac{(\vec{u} \cdot \vec{\rho})}{|\vec{u}| |\vec{\rho}|}$,

а размер основного облака имеет вид

$$R(t) \sim ut^2/t_h. \quad (6.25)$$

1.3. $t \gg \sqrt{t_1 t_h}$. С учетом $Z(t_h/t^2) \cong 2D/u(1 + t_u \sqrt{t_h/t_1 t^2})$ и (6.15), находим

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \exp\left(-\frac{t_h}{t} - \frac{\rho}{ut\sqrt{t_1/t_h}} - \frac{\rho}{ut_u}(1 - \cos \varphi)\right), \quad (6.26)$$

тогда размер основного облака

$$R(t) \sim ut\sqrt{t_1/t_h} \ll ut. \quad (6.27)$$

Следует отметить, что выражения для размера основного облака можно получить и более простым способом, не решая уравнения (6.2), (6.3), а используя понятие эффективного времени и результаты раздела 5. Каким образом это сделать, покажем для второго случая.

2. $t_1 \ll t_h \ll t_u, t_2$. Как уже было замечено, в этом случае адвекция не оказывает влияния на процесс переноса примеси, тогда

$$R(t) \sim R^*(t^2/t_h), \quad (6.28)$$

где $R^*(t)$ — размер основного облака в обобщенной модели Дыхне с источником в трещине (см. раздел 5). Напомним, какие результаты были получены для случая $t_u \gg t_1$:

$$R^*(t) = \begin{cases} \sqrt{4Dt}, & t \ll t_1, \\ \sqrt{4D\sqrt{t_1}t}, & t_1 \ll t \ll t_2, \\ \sqrt{4dt}, & t \gg t_2. \end{cases}$$

Таким образом, с учетом (6.28) находим

$$R(t) \sim \begin{cases} \sqrt{Dt^2/t_h}, & t \ll \sqrt{t_1 t_h}, \\ \sqrt{Dt\sqrt{t_1/t_h}}, & \sqrt{t_1 t_h} \ll t \ll t_h. \end{cases} \quad (6.29)$$

Здесь реализуются только два режима переноса, так как мы положили $t_2 \gg t_h$.

В случае $t_u \ll t_1 \ll t_h$ влиянием адвекции на перенос пренебречь нельзя, поэтому

$$R(t) \sim \max \left\{ R^* (t^2/t_h), X^* (t^2/t_h) \right\},$$

где $X^*(t)$ — дрейфовый снос в задаче из раздела 5.

Покажем, что на временах $t \ll \sqrt{t_0 t_h}$, где $t_0 = a^2/4D$, частицы примеси скапливаются вблизи верхней границы между трещиной и матрицей, и распределение концентрации активных частиц сильно неоднородно по z . В результате действия эффективного источника скопление частиц у границы происходит в слое толщиной $\delta z \sim \sqrt{Dt_{ef}}$. Очевидно, что распределение концентрации активных частиц неоднородно по z , только если $\delta z \ll a$, т. е. $\sqrt{Dt^2/t_h} \ll a$, откуда $t \ll \sqrt{t_0 t_h}$. Заметим, что на таких малых временах реализуются только два режима переноса, соответствующие (6.23), (6.25), так как $\sqrt{t_1 t_h} \gg \sqrt{t_0 t_h}$.

Итак, мы получили размер основного облака и распределение концентрации для различных временных интервалов. Благодаря диффузионному барьеру все режимы переноса (6.22), (6.24), (6.26) содержат экспоненциально малый множитель e^{-t/t_h} , а выражения для размера основного облака — множитель $t_h/t \ll 1$. Таким образом, на временах (6.11) диффузионный барьер приводит к экспоненциальному затуханию мощности источника и более медленному увеличению размера основного облака по сравнению с характерным для задачи из раздела 5.

6.4. Хвосты концентрации

Модификация хвостов концентрации по сравнению с полученными для обобщенной модели Дыхне с источником в трещине в раздела 5 — еще одно следствие наличия диффузионного барьера.

Проанализируем структуру хвостов концентрации для случая 1 ($t_u \ll t_1 \ll t_h$). В зависимости от рассматриваемого временного интервала

для ближней ступени хвоста справедливо одно из выражений (6.22), (6.24), (6.26). Расстояния $\rho \gg Z(t_h/t^2)t_h/t$ соответствуют более удаленным участкам хвоста, и концентрация определяется формулой (6.20), причем структура хвостов отличается для различных временных интервалов. Однако наблюдается закономерность: с увеличением расстояний реализуется тот режим переноса, который был характерен для основного облака в более раннем временном интервале. Мы рассмотрим времена $t \gg \sqrt{t_1 t_h}$, для других интервалов хвосты концентрации могут быть получены аналогичным образом.

Если расстояния такие, что $Z(t_h/t^2)t_h/t \ll \rho \ll ut$, то

$$\Phi(\bar{\rho}, t) = (\rho/R(t))^2, \quad R(t) = \sqrt{4u^2 t_1 t},$$

и концентрация

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \exp\left(-\rho \sqrt{\frac{t_h}{u^2 t_1 t^2}} - \frac{\rho^2}{4u^2 t_1 t}\right). \quad (6.30)$$

Если же расстояния $\rho \gg ut$, то

$$\Phi(\bar{\rho}, t) = (\rho/R(t))^2, \quad R(t) = \sqrt{4Dt},$$

и согласно (6.20)

$$n(\bar{\rho}, t) \sim \exp\left(-\rho \sqrt{\frac{t_h}{Dt^2}} - \frac{\rho^2}{4Dt}\right). \quad (6.31)$$

Таким образом, на временах $t \gg \sqrt{t_1 t_h}$ хвост концентрации состоит из трех частей: ближняя ступень хвоста определяется выражением (6.26), следующая — выражением (6.30) и последняя — (6.31).

6.5. Полное число активных частиц

Проанализируем зависимость полного числа частиц от времени

$$N(t) = N_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\rho} n(\bar{\rho}, t). \quad (6.32)$$

С учетом (6.4) находим

$$N(t) = N_0 \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{e^{-2\sqrt{pt_h + pt}}}{p + \sqrt{p/t_1}}, \quad \text{Re } b > 0. \quad (6.33)$$

На временах $t \ll t_1$ вторым слагаемым в знаменателе можно пренебречь, тогда получим

$$N(t) \cong N_0 \text{erfc}(t_h/t), \quad (6.34)$$

где дополнительная функция ошибок

$$\text{erfc}(w) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_w^{\infty} e^{-v^2} dv.$$

Если к тому же выполнено (6.11), то справедливо асимптотическое выражение для функции ошибок

$$\text{erfc}(w) = \frac{e^{-w^2}}{w\sqrt{\pi}}, \quad w \gg 1, \quad (6.35)$$

где $w = t_h/t \gg 1$.

Используя (6.35), выражение (6.34) можно переписать в виде

$$\text{erfc}(w) = \frac{N_0}{\sqrt{\pi t t_h/t}} e^{-t_h/t}. \quad (6.36)$$

На временах $t \gg t_1$ пренебрегаем первым слагаемым в (6.33) и получаем

$$N(t) = \frac{N_0}{\sqrt{\pi t/t_1}} e^{-t_h/t}. \quad (6.37)$$

Зависимость (6.37) представлена на рис. 8.

Отметим, что характер зависимости определяют два фактора: работа эффективного источника и обратный диффузионный поток из трещины в матрицу. На временах $t \ll t_h$ полное число активных частиц экспоненциально мало и возрастает с течением времени благодаря первому фактору. Функция $N(t)$ достигает максимума при $t = 2t_h$, а затем убывает как $N(t) \propto t^{-1/2}$ благодаря второму фактору.

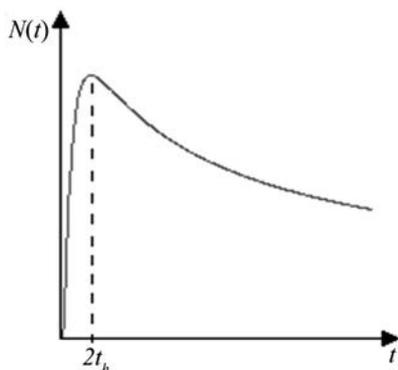


Рис. 8. Зависимость полного числа активных частиц от времени

6.6. Обсуждение и выводы

Мы исследовали перенос примеси в обобщенной модели Дыхне при наличии диффузионного барьера, который возникает, если расположить источник в слабопроницаемой среде вдали от сильнопроницаемой. На временах $t \ll t_h$ диффузионный барьер существенно влияет на процессы переноса примеси в трещине. Сравнив результаты с теми, что были получены в разделе 5 для задачи, где диффузионный барьер отсутствовал, можно заключить, что последний приводит к: 1) перенормировке мощности источника, точнее, экспоненциальному затуханию мощности, 2) более медленному расплыванию основного облака, 3) модификации хвостов концентрации. Было установлено, что в зависимости от интервала времени реализуется один из следующих режимов: $R(t) \sim ut^2 / t_h$, $R(t) \sim ut \sqrt{t_1 / t_h}$, $R(t) \sim t \sqrt{D / t_h}$, $\sqrt{Dt} \sqrt{t_1 / t_h}$ где $R(t)$ — размер основного облака.

7. Заключение

Цель настоящей статьи состояла в определении режимов переноса и детальном описании поведения концентрации примеси при ее миграции в регулярно-неоднородных резкоконтрастных средах. Исследовалась ситуация, когда механизмом переноса в быстрой среде является диффузия и адвекция с постоянной скоростью, а в медленной среде — только диффузия. Показано, что одновременное присутствие «быстрых» путей переноса и слабопроницаемых областей (ловушек) приводит к нетривиальному по-

ведению примеси, не описываемому в рамках классического режима адвекции-диффузии.

Основные результаты работы состоят в следующем.

1. В квазиодномерной гребешковой структуре с конечной длиной зубцов возможны семь различных режимов переноса: классическая диффузия, субдиффузия (дисперсия частиц определяется законом $\sigma \sim t^{1/4}$), медленная классическая диффузия, квазидиффузия, два типа медленной классической адвекции-диффузии и классическая адвекция-диффузия. Первые три режима обусловлены наличием в быстрой среде диффузии, а следующие четыре — наличием адвекции. Для гребешковой структуры с зубцами в виде дисков характерны логарифмические режимы. Они наиболее медленные из возможных режимов переноса в неоднородных средах, поскольку в этом случае отношение «мощности» зубцов к «мощности» остова максимально.

2. Для квазидвумерной гребешковой структуры сохраняются основные закономерности, полученные для квазиодномерного случая, но теперь диффузия в продольном (в направлении скорости адвекции) и поперечном направлениях происходит различным образом. В продольном направлении могут реализоваться все режимы из п. 1. В поперечном направлении возможны только два режима: классическая диффузия на временах $t \ll t_1$ и субдиффузия — а на временах $t \gg t_1$.

3. Перенос в обобщенной модели Дыхне в основном описывается режимами, полученными для гребешковых структур. Принципиальным является различие в поведении системы на больших временах. Для плоскопараллельного слоя окончательный (по времени) режим переноса определяется скоростью адвекции u : а) при больших значениях u окончательным является режим квазидиффузии с $D_u = u^2 t_1$, б) при малых u — режим медленной классической диффузии с коэффициентом диффузии d слабопроницаемой среды. Для цилиндрической геометрии конечным всегда является режим медленной диффузии.

4. Для обобщенной модели Дыхне с источником в матрице на временах $t \ll t_h$, где $t_h = h^2/4d$ — характерное время диффузии от источника до трещины, диффузионный барьер существенно влияет на процессы переноса и, в частности, приводит к: а) экспоненциальному затуханию мощности источника, б) более медленному расплыванию облака локализации примеси, в) модификации хвостов концентрации. В зависимости от интервала времени реализуется один из следующих режимов переноса: $R(t) \sim t\sqrt{D/t_h}$, $R(t) \sim \sqrt{Dt}\sqrt{t_1/t_h}$, $R(t) \sim ut^2/t_h$, $R(t) \sim ut\sqrt{t_1/t_h}$, где $R(t)$ — размер облака локализации примеси (основного облака).

5. Важным фактором переноса примеси в контрастных средах при наличии адвекции является то, что слабопроницаемая среда выполняет функцию ловушки. В результате обмена частицами между «быстрой» средой и ловушками происходит существенная деформация основного облака примеси: позади пика концентрации отрастает степенной шлейф.

6. Во всех исследованных моделях асимптотика профиля концентрации на больших расстояниях и больших временах является многоступенчатой. Ближняя ступень асимптотики определяется режимом переноса, характерным для текущего интервала времени, следующая ступень задается режимом, соответствующим предыдущему интервалу времени, и т. д. Чем более удалена ступень концентрационного хвоста от источника, тем более ранний режим переноса ее определяет.

7. Вся совокупность параметров, описывающих свойства среды, может быть сведена к четырем характерным временам. Они определяются условиями, соответственно имеющими вид: 1) относительные доли частиц в быстрой и медленной среде сравниваются, 2) перенос за счет адвекции становится одного порядка с диффузионным расплыванием облака примеси, 3) медленная среда насыщается, 4) размер облака примеси становится больше расстояния от источника до трещины, если источник расположен в матрице. Соотношение между этими временами является ключевым фактором, который определяет последовательность режимов переноса.

В дальнейших исследованиях предполагается рассмотреть альтернативные физические процессы, приводящие к неклассическим режимам переноса, а именно проанализировать роль коллоидного механизма, а также влияние сорбции примеси в матрице.

Литература

1. *Bouchaud J. P., Georges A.* Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications // *Phys. Rep.* — 1990. — Vol. 195. — P. 127.
2. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography, and transport in random media // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64. — P. 961
3. *ben-Avraham D., Havlin S.* Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems. — [S. l.]: Cambridge Univ. Press, 2000. — P. 315
4. *El Abd A. E. G., Milczarek J. J.* Neutron radiography study of water absorption in porous building materials: anomalous diffusion analysis // *J. Phys. D.* — 2004. — Vol. 37. — P. 2305.
5. *Klemm A., Mueller H.-P., Kimmich R.* Nmr microscopy of pore-space backbones in rock, sponge, and sand in comparison with ran-

- dom percolation model objects // *Phys. Rev. E.* — 1997. — Vol. 55. — P. 4413—4423.
6. *Scher H., Lax M.* Stochastic transport in a disordered solid. — I: Theory // *Phys. Rev. B.* — 1973. — Vol. 7. — P. 4491—4502.
 7. *Bernasconi J., Beyeler H. U., Strässler S., Alexander S.* Anomalous frequency-dependent conductivity in disordered one-dimensional systems // *Phys. Rev. Lett.* — 1979. — Vol. 42. — P. 819—822.
 8. *Weiss M., Hashimoto H., Nilsson T.* Anomalous protein diffusion in living cells as seen by fluorescence correlation spectroscopy // *Biophys J.* — 2003. — Vol. 84 (6). — P. 4043.
 9. *Ritchie K., Shan X.-Y., Kondo J.* et al. Detection of non-Brownian diffusion in the cell membrane in single molecule tracking // *Biophys. J.* — 2005. — Vol. 88. — P. 2266—2277.
 10. The Disposal of Radioactive Waste on Land / National Research Council (NRC). — Washington DC: National Academy Press, 1957.
 11. *Becker M., Shapiro A.* Tracer transport in fractured crystalline rock: Evidence of nondiffusive breakthrough tailing // *Water Resour. Res.* — 2000. — Vol. 36. — P. 1677.
 12. *Neretnieks I.* A note on fracture flow dispersion mechanisms in the ground // *Water Resour. Res.* — 1983. — Vol. 19 (2). — P. 364—370.
 13. *Gelhar L. W., Welty C., Rehfeldt K. R.* Stochastic analysis of dispersion in unsteady flow in heterogeneous aquifers // *Water Resour. Res.* — 1992. — Vol. 28 (7). — P. 1955.
 14. *Neuman S. P.* Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media // *Water Resour. Res.* — 1990. — Vol. 26 (8). — P. 1749.
 15. *Tsang C. F., Neretnieks I.* Seepage into drifts with mechanical degradation // *Rev. Geophys.* — 1998. — Vol. 36 (2). — P. 275.
 16. *Foster S. S. D.* The Chalk groundwater tritium anomaly—a possible explanation // *J. Hydrol.* — 1975. — Vol. 25. — P. 159—165.
 17. *Neretnieks I. J.* Diffusion in the rock matrix: An important factor in radionuclide retardation // *Geophys. Res.* — 1980. — 85 (B8). — P. 4379—4397.
 18. *Feenstra S., Cherry J. A., Sudicky E. A., Haq Z.* Matrix diffusion effects on contaminant migration from an injection well in fractured sandstone // *Ground Water.* — 1984. — Vol. 22 (3). — P. 307—316.
 19. *McKay L. D., Gillham R. W., Cherry J. A.* Field experiments in a fractured clay till. — 2: Solute and colloid transport // *Water Resour. Res.* — 1993. — Vol. 29 (12). — P. 3879—3890.

20. *Hadermann J., Heer W.* The Grimsel (Switzerland) migration experiment: integrating field experiments, laboratory investigations and modelling // *J. Contam. Hydrol.* — 1996. — Vol. 21. — P. 87—100.
21. *Lapcevic P. A., Novakowski K. S., Sudicky E. A.* The interpretation of a tracer experiment conducted in a single fracture under conditions of natural groundwater flow // *Water Resour. Res.* — 1999. — Vol. 35 (8). — P. 2301—2312.
22. *Wendland E., Himmelsbach T.* Transport simulation with stochastic aperture for a single fracture—comparison with a laboratory experiment // *Advance Water. Res.* — 2002. — 25 (1). — P. 19—32.
23. *Bolshov L., Kondratenko P., Pruess K., Semenov V.* Nonclassical Transport Processes in Geologic Media: Review of Field and Laboratory Observations and Basic Physical Concepts // *Vadoze Zone J.* — 2008. — Vol. 7 (4). — P. 1181—1190.
24. *Большов Л. А., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.* Аномальный перенос примеси в сильнонеоднородных средах применительно к проблеме захоронения радиоактивных отходов // *Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений.* — Т. 1: Теория и эксперимент / Под. ред. акад. РАН А. А. Саркисова и Г. А. Филиппова; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН. — М.: Наука, 2010. — С. 56—122.
25. *Havlin S., Weiss G. H.* Some properties of a random walk on a comb structure // *Physica A.* — 1986. — 134. — P. 474—482.
26. *Архинчеев В. Е., Баскин Е. М.* Аномальная диффузия и дрейф в гребешковой модели перколяционных кластеров // *ЖЭТФ.* — 1991. — Т. 100. — С. 292—300.
27. *Havlin Sh., Kiefer J. E., Weiss G. H.* Anomalous diffusion on a random comb-like structure // *Phys. Rev. A.* — 1987. — Vol. 36. — P. 803.
28. *Iomin A., Baskin E.* Superdiffusion on a comb structure // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93. — P. 120603.
29. *Iomin A., Baskin E.* Negative superdiffusion due to inhomogeneous convection // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 71. — P. 061101.
30. *Забурдаев В. Ю., Попов П. В., Романов А. С., Чукбар К. В.* Стохастический транспорт в сложных гребешковых структурах // *ЖЭТФ.* — 2008. — Т. 133, вып. 5. — С. 1140.
31. *Чукбар К. В.* Квазидиффузия пассивного скаляра // *ЖЭТФ.* — 1996. — Т. 109. — С. 1335.
32. *Dvoretckaya O. A., Kondratenko P. S.* Asymptotic concentration distributions in the presence of advection and diffusion on a comb structure // *Phys. Rev. E.* — 2009. — Vol. 79. — P. 41128.

33. Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Асимптотические режимы и структура хвостов концентрации в модели Дыхне // ЖЭТФ. — 2007. — Т. 131. — С. 494.
34. Дыхне А. М., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Перенос примеси в перколяционных средах // Письма в ЖЭТФ. — Т. 80 (6). — С. 464—467.
35. Дворецкая О. А., Кондратенко П. С. Физические модели аномального переноса примеси в сильно неоднородных средах // Труды ИБРАЭ РАН / Науч. ред. Л. А. Большов. — Вып. 7. — М.: Наука, 2008.
36. Dykhne A. M., Dranikov I. L., Kondratenko P. S., Popov A. V. Anomalous diffusion in regular heterogeneous media // J. of Hydraulic Research. — 2005. — Vol. 43 (2). — P. 213.
37. Дворецкая О. А., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Аномальная диффузия в обобщенной модели Дыхне // ЖЭТФ. — 2010. — Т. 137 (1). — С. 67—76.

Аномальные режимы переноса примеси, обусловленные процессами сорбции в геологических средах

Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев

1. Введение

Надежность изоляции радионуклидов в подземных хранилищах радиоактивных отходов и отработавшего ядерного топлива в значительной степени определяется защитными свойствами вмещающих пород. Для описания указанных свойств необходимы математические модели, адекватно описывающие перенос радиоактивных загрязнений в геологических средах. Обширный массив полевых наблюдений, накопленных к настоящему времени, свидетельствует, что перенос в сильнонеоднородных средах, далеко не всегда описывается классическими закономерностями, при этом расхождение может составлять многие порядки. В нашей предыдущей статье [1] мы представили ряд моделей, в которых аномальные режимы переноса были обусловлены резким контрастом и (или) фрактальными свойствами этих сред. Так, было показано, что в случае регулярно-неоднородных резкоконтрастных сред доминирующими режимами переноса могут быть субдиффузия и квазидиффузия, а для случайно-неоднородных сред с фрактальными свойствами характерным является супердиффузионный режим.

В указанной работе полагалось, что частицы переносимой примеси являются инертными, т. е. не взаимодействуют с геологической средой, оставаясь в виде первоначального раствора. Однако существует большое количество типов примесей (в том числе ионы урана и плутония), которые могут активно взаимодействовать с геологической матрицей. В результате такого взаимодействия перенос примеси может как замедляться (если речь идет о сорбции частиц примеси на поверхности трещин), так и ускоряться (когда сорбция примеси происходит на коллоидных частицах). Все это приводит к возникновению новых режимов переноса, которые в большинстве своем также носят аномальный характер.

Целью данной работы является разработка моделей и описание аномальных режимов переноса в сильнонеоднородных резкоконтрастных средах при учете различных типов сорбции.

В разделе 2.1 представлена модель переноса примеси в статистически-однородной сорбирующей среде, характеризуемой двойной пористостью:

хорошопроницаемыми трещинами и слабопроницаемыми блоками. В разделе 2.2 аналогичная модель развита для сред с фрактальными свойствами. Модель, описывающая перенос в регулярно-неоднородной резкоконтрастной среде при наличии коллоидов, представлена в разделе 3.1. В разделе 3.2 описан коллоидный перенос примеси во фрактальных средах. В заключении сформулированы основные следствия, касающиеся аномальных процессов переноса в геологических средах с учетом сорбции.

2. Режимы переноса, обусловленные сорбцией в неподвижной матрице

Одним из основных факторов, определяющих замедление переноса загрязнений в геологической среде, является сорбция примеси вмещающими породами. Как правило, при моделировании влияния сорбции на перенос используется предположение, что растворенная и адсорбированная компоненты находятся в равновесии и их концентрации однозначно связаны коэффициентом распределения k_D . При таком предположении описание переноса сводится к уравнению для одной компоненты (концентрации в растворе), которое сохраняет свой вид адвекции-диффузии, но параметры, описывающие перенос (скорость адвекции и коэффициент дисперсии), уменьшаются в R раз [2; 3]: $\bar{u}_{ef} = \frac{\bar{u}}{R}$, $D_{ef} = \frac{D}{R}$. Параметр R носит название коэффициента задержки и, в свою очередь, определяется коэффициентом равновесного распределения k_D : $R = 1 + k_D$.

Для обоснования справедливости такого подхода необходимо, чтобы время установления равновесия было мало. Если мы имеем дело с однородной пористой средой, то переносимая в растворе примесь адсорбируется на поверхности каналов, по которым происходит просачивание влаги. В этом случае время установления равновесия — характерное время диффузии примеси в растворе на масштабах порядка апертуры канала $2a$. При $a \sim 1 \mu m$ и коэффициенте молекулярной диффузии примеси в растворе $D_m \approx 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$ имеем $\tau \approx a^2/D_m \sim 10^{-2} \text{ с}$, что в практически важных случаях оправдывает применение равновесного приближения для однородной пористой среды.

Однако часто, например, для трещиновато-пористых сред, приближение однородной пористости является недостаточным. В этом случае описание строится на базе двупористой модели [4], в рамках которой среда представляется как совокупность двух подсистем: (1) хорошо проницаемых

каналов (как правило, соответствующих сетке трещин) и (2) слабопроницаемых пористых блоков, заполняющих пространство между каналами (трещинами). Основным механизмом переноса примеси на большие расстояния здесь является адвекция по подсистеме (1), в то время как блоки играют роль ловушек, тормозящих процесс переноса. Если вмещающая среда способна адсорбировать примесь, то процесс сорбции будет происходить не только на поверхности трещин, формирующих первую подсистему, но и на стенках мелких каналов, образующих слабопроницаемую пористость блоков. В этом случае характерное время установления равновесия будет порядка $\tilde{\tau} \sim b^2/\tilde{d}$, где $2b$ — характерный размер блоков (рис. 1); \tilde{d} — эффективный коэффициент диффузии примеси в блоках. Коэффициент диффузии примеси в блоках существенно меньше коэффициента молекулярной диффузии в растворе: $\tilde{d} \ll D_m$, что является следствием двух факторов: сильной изогнутости каналов, по которым происходит диффузия примеси внутри блоков, и уменьшения \tilde{d} в R раз вследствие сорбции, поскольку для данной подсистемы равновесие между растворенной и сорбированной примесью устанавливается быстро и внутри блоков справедливо приближение равновесной модели.

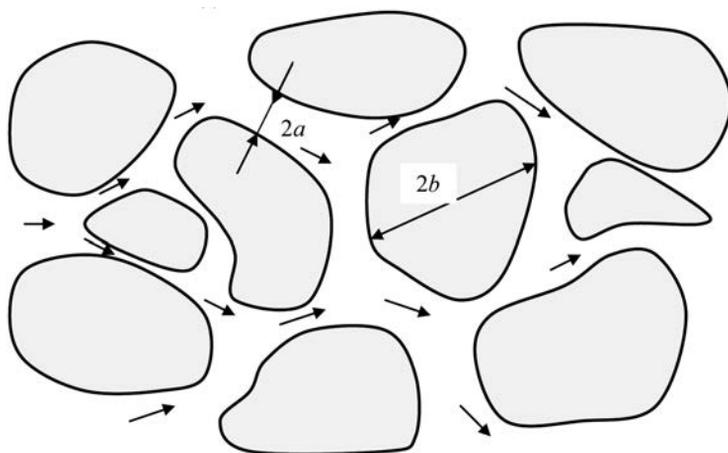


Рис. 1. Схематическое изображение двупористой среды

С точки зрения классификации процессов переноса геологические среды с неоднородной пористостью можно разбить на три больших класса: регулярно-неоднородные, неупорядоченные статистически-однородные и фрактальные. Наиболее часто геологические формации с неоднородной пористостью можно, по-видимому, отнести к статистически-однородным неупоря-

доченным средам. Для таких сред характерные размеры блоков b порядка расстояния между трещинами и могут меняться в широких пределах (см., например, [5]). Если для оценки взять $b \sim 10$ см, $\tilde{d} \sim 10^{-8}$ см²/с, то характерное время составит $\tilde{\tau} \sim 10^{10}$ с ≈ 300 лет, в течение которых пользоваться равновесным приближением для описания миграции примеси нельзя. Можно показать, что аналогичные ограничения на применимость равновесного приближения имеются и для регулярно-неоднородных и фрактальных сред. В разделе 2.1 построена модель переноса для статистически-однородных двупористых сред, учитывающая конечную скорость процессов сорбции. В разделе 2.2 представлена модель переноса, учитывающая сорбцию, для фрактальных сред. Учет сорбции для задач переноса в регулярно-неоднородных средах рассмотрен в разделе 3.

2.1. Статистически-однородные трещиновато-пористые среды

2.1.1. Постановка задачи

Перенос примеси внутри насыщенных влагой трещин описывается классическим уравнением адвекции-диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{v}c - D_m \vec{\nabla}c) = 0, \quad (1)$$

где c — концентрация примеси в растворе в трещинах; $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}, t)$ — локальная скорость течения в трещинах.

После стандартного усреднения уравнения (1) по пространству на масштабах много больше характерного размера блоков b (см. рис. 1), получаем (см., например, [6]):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{u}\bar{c} - D\vec{\nabla}\bar{c}) = -Q, \quad (2)$$

где $\bar{c} = V^{-1} \int_V c d^3r$; V — объем усреднения ($V \gg b^3$); \bar{u} — средняя скорость просачивания; D — коэффициент (в общем случае тензор) дисперсии; Q — плотность стока частиц примеси из раствора внутри трещин в блоки в пересчете на единицу объема. Коэффициент дисперсии D содержит две части, одна из которых определяется вкладом молекулярной диффузии D_m , а вторая — флуктуирующим гидродинамическим переносом [6]. Точное вычисление D — довольно сложная задача, поэтому для оценок будем ориентироваться на результаты экспериментальных данных,

компилированных в [7]. Согласно этим результатам $D \sim D_m$ при числе

Пекле $Pe \leq 1$, а при $Pe \gg 1$, $D \sim D_m Pe$, где $Pe = \frac{bu}{D_m}$. Учитывая, что ми-

грация примеси на большие расстояния определяется переносом по системе трещин, ниже примесь в трещинах мы называем активной примесью.

Будем решать задачу с начальным условием

$$\bar{c}(\bar{r}, t = 0) = \bar{c}^{(0)}(\bar{r}). \quad (3)$$

В представлении Фурье—Лапласа уравнение (2) принимает вид

$$(p + ik\bar{u} + Dk^2)\bar{c}_{p,\bar{k}} = -Q_{p,\bar{k}} + \bar{c}_k^{(0)}, \quad (4)$$

где $\bar{c}_k^{(0)}$ — Фурье-образ начального распределения примеси $\bar{c}^{(0)}(\bar{r})$.

В силу линейности задачи связь между $Q_{p,\bar{k}}$ и $\bar{c}_{p,\bar{k}}$ также должна быть линейной. Кроме того, считаем, что поступление примеси в блоки происходит только из раствора в трещинах, т. е. блоки не обмениваются примесью непосредственно друг с другом. В итоге имеем

$$Q_{p,\bar{k}} = \Lambda(p) \cdot \bar{c}_{p,\bar{k}}, \quad (5)$$

где вид функции $\Lambda(p)$ будет определен позже.

Из уравнения (4) и выражения (5) для концентрации активной примеси в представлении Фурье—Лапласа следует:

$$\bar{c}_{p\bar{k}} = \frac{\bar{c}_k^{(0)}}{p + \Lambda(p) + ik\bar{u} + Dk^2}, \quad (6)$$

С помощью обратного преобразования Фурье — Лапласа $\bar{c}_{p\bar{k}}$ находим

$$\bar{c}(t, r) = \int d^3\bar{r}' G(t, \bar{r} - \bar{r}') \bar{c}^{(0)}(\bar{r}'), \quad (7)$$

где функция Грина $G(t, \bar{r})$ определяется выражением

$$G(t, \bar{r}) = \frac{\exp\left(\frac{\bar{u}\bar{r}}{2D}\right)}{4\pi D r} \int_{l-i\infty}^{l+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(-\Phi(p; t, r)), \quad \text{Re } l > 0, r = |\bar{r}|, \quad (8)$$

где

$$\Phi(p; t, r) = \frac{ur}{2D} \sqrt{1 + t_u (p + \Lambda(p))} - pt, \quad (9)$$

и введено характерное время

$$t_u = \frac{4D}{u^2}. \quad (10)$$

Для определения $\Lambda(p)$ вычислим поток примеси на отдельный блок.

Уравнение для концентрации примеси n в поровом растворе внутри блока имеет вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_m \Delta n. \quad (11)$$

Усредняя (11) по пространству внутри блока (на масштабах много больше размеров пор, но много меньше b) и учитывая, что для концентрации примеси в растворе \bar{n} применимо приближение равновесной сорбции, получаем уравнение

$$R \frac{\partial \bar{n}}{\partial t} = d \Delta \bar{n}, \quad (12)$$

где эффективный коэффициент диффузии d учитывает свойства среды блоков (пористость, искривленность путей миграции).

В начальный момент времени примеси в блоках нет:

$$\bar{n}(r, t = 0) = 0. \quad (13)$$

Условие на границе блока (в силу того, что концентрация активных частиц \bar{c} усредняется на масштабах много больших b) имеет вид

$$\bar{n}|_B = A\bar{c}, \quad (14)$$

где

$$A = \varphi_b / \varphi_{fr}. \quad (15)$$

Здесь φ_b — величина пористости в блоках; φ_{fr} — удельная доля объема, занимаемого трещинами.

Поток примеси из пространства внутри трещин на один блок определяется выражением

$$q = -d \oint_{S_b} \bar{\nabla} \bar{n} d\bar{S}, \quad (16)$$

где интегрирование производится по поверхности блока S_b . Вводя объем, приходящийся на один блок V_b , для плотности стоков в уравнении (2), имеем

$$Q = \frac{q}{V_b}. \quad (17)$$

Найдем выражения для $\Lambda(p)$ в двух предельных случаях: больших и малых p . Для этого заметим, что режим переноса примеси внутри блока существенно различается на больших и малых временах. А именно на временах $t \ll t_b$, где

$$t_b = \left(\frac{V_b}{S_b} \right)^2 \frac{1}{\tilde{d}}, \quad (18)$$

$$\tilde{d} = \frac{d}{R}, \quad (19)$$

примесь, ушедшая в блок, занимает лишь узкий слой вблизи поверхности блока. В этом случае задачу диффузии примеси в блок можно рассматривать как одномерную. Тогда в представлении Лапласа уравнение (12) принимает вид

$$\frac{p}{\tilde{d}} \bar{n} = \frac{\partial^2 \bar{n}}{\partial x^2}, \quad (20)$$

где ось x направлена вглубь блока по нормали к границе с началом на его поверхности. Решение, убывающее при $x \rightarrow \infty$, с учетом граничного условия (14) имеет вид

$$\bar{n} = A \bar{c} \exp\left(-\sqrt{\frac{p}{\tilde{d}}} x\right). \quad (21)$$

Подставляя (21) в (16) и затем в (17), получаем

$$Q_{p,\bar{k}} \cong \sqrt{\frac{p}{t_a}} \bar{c}_{p,\bar{k}}, \quad (22)$$

где введено новое характерное время

$$t_a = \left(\frac{V_b}{S_b AR} \right)^2 \frac{1}{\tilde{d}}. \quad (23)$$

В итоге, замечая, что интервал $t \ll t_b$ соответствует значениям переменной Лапласа $p \gg t_b^{-1}$, с учетом (5) для функции $\Lambda(p)$ имеем

$$\Lambda(p) \approx \sqrt{\frac{p}{t_a}} \text{ при } pt_b \gg 1. \quad (24)$$

Перейдем к временам $t \gg t_b$. Удобно выделить в уравнении (12) малый параметр. Для этого обезразмерим пространственную координату на величину $\tilde{b} = V_b/S_b$, которая приблизительно равна характерному размеру блока: $\bar{r} \rightarrow \tilde{\bar{r}} = \bar{r}/\tilde{b}$, так что уравнение (12) примет вид

$$\alpha \bar{n} = \tilde{\Delta} \tilde{\bar{n}}, \quad (25)$$

где $\alpha = pt_b \ll 1$, и абсолютные значения новых координат меняются в интервале порядка единицы. На рассматриваемых временах примесь в блоках распределена практически однородно, причем $\bar{n} \equiv A\bar{c}$ на границе блока и $\bar{n} < A\bar{c}$ внутри блока. Тогда можем представить \bar{n} в виде

$$\bar{n} = A\bar{c} \left(1 - f(\tilde{\bar{r}}) \right), \quad (26)$$

где $f(\tilde{\bar{r}}) = 0$ на границе блока и $f(\tilde{\bar{r}}) > 0$ внутри блока. Поскольку в (25) имеется малый параметр, будем искать решение в виде ряда теории возмущений. С точностью до членов первого порядка малости имеем $f(\tilde{\bar{r}}) \approx \alpha f_1(\tilde{\bar{r}})$, где f_1 удовлетворяет условиям: $\tilde{\Delta} f_1 = -1$ внутри блока и $f_1 = 0$ на его границе. Переходя в (16) от поверхностного интеграла к объемному и воспользовавшись уравнением (25) и выражением (26), получаем для плотности стоков соотношение

$$Q \equiv \frac{d\alpha A}{V_b \tilde{b}^2} \left\{ \int_V dV - \alpha \int_{V_b} f_1(\tilde{\bar{r}}) dV \right\} \bar{c}. \quad (27)$$

Отсюда с учетом (5) для $\Lambda(p)$ получаем

$$\Lambda(p) \approx p \sqrt{\frac{t_b}{t_a}} (1 - Bpt_b) \text{ при } pt_b \ll 1, \quad (28)$$

где B — множитель порядка единицы, зависящий от формы блока.

Введенные времена (18) и (23) имеют следующий смысл. Параметр t_a характеризует время, когда количество примеси, ушедшей в блок, сравнивается с количеством примеси в трещине, а параметр t_b — время установления равновесия между примесью в трещинах и блоках. В настоящей работе полагаем

$$t_b \gg t_a. \quad (29)$$

Режим переноса определяется двумя важными величинами: средним смещением центра масс облака примеси вдоль средней скорости течения $\langle \vec{r} \rangle$ и дисперсией примеси $\sigma(t)$:

$$\langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{N(t)} \int d^3 \vec{r} \vec{r} \bar{c}(t, \vec{r}), \quad (30)$$

$$[\sigma(t)]^2 = \frac{1}{N(t)} \int d^3 \vec{r} (\vec{r} - \langle \vec{r} \rangle)^2 \bar{c}(t, \vec{r}), \quad (31)$$

где

$$N(t) = \int d^3 \vec{r} \bar{c}(t, \vec{r}) \quad (32)$$

есть полное число активных частиц примеси в момент времени t .

Далее будем рассматривать перенос примеси на временах, когда $\sigma(t) \gg \sigma_0$, где $\sigma_0 = \sigma(t=0)$. Поэтому согласно уравнению для концентрации активных частиц справедливо следующее выражение:

$$\bar{c}(t, \vec{r}) = N_0 G(t, \vec{r}). \quad (33)$$

Полное число активных частиц примеси выражается через нулевую Фурье-гармонику функции Грина:

$$N(t) = \int \frac{dp}{2\pi i} G_{p, \vec{k} | \vec{k}=0} \exp(pt). \quad (34)$$

Выражения (8) и (9) во многом аналогичны выражениям, полученным в задачах о миграции примеси в гребешковых структурах [8] и в резко-

контрастных средах в рамках модели Дыхне [9]. Поэтому в дальнейшем анализе будем следовать методу, развитому в указанных работах.

2.1.2. Режимы переноса и асимптотики концентрации

Поведение функции Грина и структура асимптотики концентрации зависят от соотношения между характерными временами t_u , t_a и t_b . Проанализируем это поведение для различных случаев.

Как обычно, считаем, что в основном облаке главный вклад в интеграл (8) определяется значениями переменной Лапласа, удовлетворяющими соотношению $pt \sim 1$, а в асимптотиках концентрации — $pt > 1$.

$$(1) t_u \ll t_a.$$

(1.1) $t \ll t_u$. В этом интервале можно перейти к пределу $u \rightarrow 0$, $t_a \rightarrow \infty$. Поэтому здесь функция Грина принимает вид, соответствующий известному выражению классической диффузии:

$$G(\bar{r}, t) \cong \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\bar{r}^2}{4Dt}\right). \quad (35)$$

(1.2) $t_u \ll t \ll t_b$. В основном облаке имеем $t_b^{-1} \ll p \ll t_u^{-1}$, и при интегрировании выражения (8) можно использовать следующее разложение функции $\Phi(p; t, r)$:

$$\Phi(p; t, r) = \frac{ru}{2D} + \frac{r}{u} \left(\sqrt{\frac{p}{t_a}} - \frac{t_u}{4} p^2 \right) - pt', \quad (36)$$

где $t' = t - r/u$.

Как следует из дальнейших вычислений, поведение функции Грина существенно различается на временах меньше и больше характерного времени $t_* = (t_u t_a^2)^{1/3}$.

(1.2.а) $t_u \ll t \ll t_*$. Во-первых, рассмотрим поведение концентрации в основном облаке примеси. Предположим, что в данном интервале времени слагаемым, пропорциональным \sqrt{p} , в формуле (36) можно пренебречь. Тогда вычисление интеграла (8) приводит к выражению

$$G(\bar{p}, t) \cong \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\bar{r} - \bar{u}t)^2}{4Dt}\right). \quad (37)$$

При вычислении интеграла вблизи пика концентрации $\bar{r} = \bar{u}t$ характерные значения p , дающие основной вклад при интегрировании (8), имеют вид $p \sim (t_u t)^{-1/2}$, откуда следует оценка слагаемого, пропорционального \sqrt{p} , в (36):

$$\frac{r}{u} \sqrt{\frac{p}{t_a}} \sim \left(\frac{r}{ut_*}\right)^{3/4}. \quad (38)$$

Поскольку в области основного облака пространственная переменная удовлетворяет неравенству $r \leq ut$, то из (38) следует оценка

$$\frac{r}{u} \sqrt{\frac{p}{t_a}} \leq \left(\frac{r}{ut_*}\right)^{3/4} \ll 1,$$

которая подтверждает сделанное выше предположение.

Таким образом, перенос основной массы примеси, описываемый (37), происходит в режиме трехмерной классической адвекции-диффузии. Среднее смещение частиц и дисперсия равны соответственно $\langle \bar{r} \rangle = \bar{u}t$ и $\sigma = \sqrt{4Dt}$.

Выражение (37) справедливо там, где экспонента не слишком мала по сравнению с единицей. В далеких крыльях функции $G(t, \bar{r})$ (в асимптотиках) при интегрировании в формуле следует воспользоваться методом перевала. В соответствии с уравнением $\partial\Phi(p; \bar{r}, t)/\partial p|_{p=p_0} = 0$ находим перевальную точку $p_0 \approx -2t'/t_u t$. Поскольку величина p_0 вещественна и имеет знак, противоположный знаку t' , поведение в крыльях различно впереди пика основного облака и за ним. В далеком переднем крыле ($t' < 0$) остается справедливо выражение (37). Позади пика $t' > 0$ и, следовательно, $p_0 < 0$, поэтому при смещении контура интегрирования к перевальной точке влево последний «цепляется» за точку ветвления $p = 0$, обусловленную слагаемым порядка \sqrt{p} в (36). В итоге возникает добавочный вклад δG , определяемый интегралами вдоль берегов разреза. После подстановки (36) в (8) и разложения подынтегрального выражения до первого порядка по \sqrt{p} находим

$$\delta G = \frac{1}{(4\pi D t')^{3/2}} \left(\frac{t_u}{t_a} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{ru}{2D} (1 - \cos \varphi) \right], \quad (39)$$

где

$$\cos \varphi = \frac{(\vec{r}\vec{u})}{ru}.$$

По мере уменьшения r концентрация, определяемая δG , убывая по степенному закону, существенно превышает вклад от $G(t, \vec{r})$ — см. (37) — и фактически диктует поведение концентрации в области, где выполняется условие $t' > \sqrt{t_u t \ln(t_*/t)}$.

Таким образом, на временах $t_u \ll t \ll t_*$ перенос происходит в режиме, практически совпадающем с классической адвекцией-диффузией с почти симметричным гауссовым профилем, модифицированным позади фронта степенным шлейфом.

(1.2.6) $t_* \ll t \ll t_b$. В этом интервале в области основного облака примеси главным в разложении (36) становится член, пропорциональный \sqrt{p} , так что справедлива аппроксимация

$$\Phi(p; t, \vec{r}) \approx \frac{ru}{2D} + \frac{r}{u} \sqrt{\frac{p}{t_a}} - pt'. \quad (40)$$

С учетом (40) при $t' > 0$ из (8) находим

$$G \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2} D t' \sqrt{D_u t'}} \exp \left[-\frac{ru}{2D} (1 - \cos \varphi) - \frac{r^2}{4D_u t'} \right], \quad (41)$$

где

$$D_u = u^2 t_a. \quad (42)$$

Выражение (41) справедливо во всем временном интервале $t_* \ll t \ll t_b$. Однако режим переноса качественно отличается в двух диапазонах: $t_* \ll t \ll t_a$ и $t_a \ll t \ll t_b$.

На временах $t_* \ll t \ll t_a$ среднее смещение облака частиц $\langle \vec{r} \rangle = \vec{u}t$, в то время как расплывание облака определяется выражением $\sigma(t) \sim ut^2/t_a$.

Поскольку $\langle r \rangle \gg \sigma(t)$, мы можем заменить в показателе экспоненты r^2 на $u^2 t^2$. В итоге выражение для функции Грина примет вид

$$G \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2} D t' \sqrt{D_u t'}} \exp \left[-\frac{ru}{2D} (1 - \cos \varphi) - \frac{t^2}{4t_a t'} \right]. \quad (43)$$

Таким образом, в данном диапазоне времени режимом переноса будет являться адвекция с резко анизотропным профилем концентрации. Позади максимума концентрации профиль характеризуется степенным убыванием, тогда как на переднем фронте концентрация убывает сначала резко экспоненциально, а затем по Гауссу.

На временах $t_a \ll t \ll t_b$ средняя величина смещения частиц примеси и их дисперсия одного порядка, $\langle r \rangle \sim \sigma(t) \sim \sqrt{D_u t}$. Поэтому в области основного облака и в области первой ступени хвоста концентрации можно заменить t' на t в (41). В итоге имеем

$$G \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2} D t \sqrt{D_u t}} \exp \left[-\frac{ru}{2D} (1 - \cos \varphi) - \frac{r^2}{4D_u t} \right]. \quad (44)$$

Существенно, что на этих временах $t \gg t_a$ полное число активных частиц убывает со временем:

$$N(t) \approx N_0 \sqrt{\frac{t_a}{\pi t}}. \quad (45)$$

Режим переноса аналогичный (44) и (45) был впервые найден для одномерного случая в [10] и получил название квазидиффузии. Заметим, что зависимости $\langle r \rangle \sim \sigma \sim t^{1/2}$ при квазидиффузионном режиме аналогичны зависимостям при классической диффузии, однако полное число частиц в данном случае не сохраняется. Поэтому данный режим следует считать аномальным режимом переноса.

Для вычисления концентрации в хвосте используем метод перевала.

В области, определяемой условием $t' \gg t \left(\frac{t_u}{2t_a} \right)^{1/3}$, перевальная точка,

дающая наиболее медленное убывание концентрации, определяется выражением $p_0 = \frac{r^2}{4D_u t'^2}$. Вклад от этой точки сводится к выражению (41).

Для значений $|t'| \ll t \left(\frac{t_u}{2t_a} \right)^{1/3}$ перевальная точка имеет вид $p_0 \equiv (t_u^2 t_a)^{-1/3}$, что дает для области вблизи $r \approx ut$ следующую оценку для функции Грина: $G \propto \exp\left(-\frac{3t}{4t_*}\right)$.

При $r \gg ut$ перевальная точка приобретает вид $p_0 \equiv \frac{r^2}{4Dt^2}$, что приводит к классической диффузионной форме профиля концентрации (35).

(1.3) $t \gg t_b$. На этих временах для основного облака и первой степени хвоста концентрации главный вклад дают значения переменной Лапласа $p \ll t_b^{-1}$. Воспользовавшись разложением $\Lambda(p)$ (28), получаем

$$\Phi(p; t, r) \equiv \frac{ru}{2D} - p\tilde{r} - \frac{r\tilde{D}_u}{\tilde{u}^3} p^2, \quad (46)$$

где введены обозначения $\tilde{u} = u \left(M \sqrt{\frac{t_b}{t_a}} \right)^{-1}$, $\tilde{D}_u = \frac{B}{M^2} D_u$ и $\tilde{r} = t - r/\tilde{u}$.

Подставляя (46) в (8), получаем

$$G \equiv \frac{1}{(4\pi)^{3/2} D\tilde{D}_u^{1/2} t^{3/2}} \exp \left[-\frac{ru}{2D} (1 - \cos \varphi) - \frac{(\tilde{r} - \tilde{u}t)^2}{4\tilde{D}_u t} \right]. \quad (47)$$

В области максимальной концентрации ($\tilde{r} \sim \tilde{u}t$) данный режим очень близок к режиму классической адвекции-диффузии с модифицированными скоростью адвекции и диффузионным коэффициентом. Будем называть этот режим медленной адвекцией I. Среднее смещение примеси в этом случае $\langle r \rangle = \tilde{u}t$, дисперсия — $\sigma = \sqrt{2\tilde{D}_u t}$, откуда следует $\langle r \rangle \ll \sigma$.

Отметим, что полное число частиц в этом режиме не зависит от времени и определяется формулой

$$N(t) \approx \left(M \sqrt{\frac{t_b}{t_a}} \right)^{-1} N_0. \quad (48)$$

$$(2) t_a \ll t_u^2/t_a \ll t_b.$$

При вычислении функции Грина на временах $t \ll t_u^2/t_a$ можно пользоваться следующим приближением для функции Φ :

$$\Phi(p; t, r) \cong \frac{r}{\sqrt{D}} \sqrt{p + \sqrt{\frac{p}{t_a}}} - pt. \quad (49)$$

(2.1) $t \ll t_a$. Этот случай полностью аналогичен случаю (1.1).

(2.2) $t_a \ll t \ll t_u^2/t_a$. В этом диапазоне можно пренебречь слагаемым $\sim p$ под корнем в (49). Подставляя выражение для Φ в (8), получаем

$$G(t, \bar{r}) \cong \frac{1}{4\pi Dtr} F(\xi), \quad \xi = \frac{r}{\sqrt{D\sqrt{t_a t}}}. \quad (50)$$

$$F(\xi) \cong \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} \exp(s - \xi s^{1/4}), \quad s = pt, \quad \text{Re } a > 0. \quad (51)$$

Это выражение соответствует субдиффузионному режиму, который ранее был исследован в [11; 12; 13]. При этом режиме дисперсия частиц $\sigma \sim \sqrt{D\sqrt{t_a t}}$. Используя (51), нетрудно получить выражение для первой степени асимптотики концентрации

$$G(t, \bar{r}) \cong \frac{1}{\sqrt{24\pi^3} Dtr} \left(\frac{\xi}{4}\right)^{1/3} \exp\left(-3\left(\frac{\xi}{4}\right)^{4/3}\right). \quad (52)$$

Вторая ступень асимптотики соответствует классическому диффузионному выражению (35). На границе между первой и второй степенями асимптотики (где $\xi \sim 4(t/3t_a)^{3/4}$) порядок функции Грина определяется выражением

$$G(t, \bar{r}) \sim (4\pi Dt)^{-1/3} \exp(-t/t_a). \quad (53)$$

(2.3) $t_u^2/t_a \ll t \ll t_b$. В этом временном интервале реализуется режим квазидиффузии — см. (44) — в основном облаке и первой ступени хвоста. Вторая ступень определяется выражением (52), а третья описывается классической диффузией — см. (35).

(2.4) $t \gg t_b$. Вывод для основного облака и первой ступени хвоста проводится аналогично случаю (1.3) и приводит к выражению, описывающую медлен-

ную адвекцию I (см. (47)). На этих временах хвост состоит из четырех ступеней, описываемых формулами (47), (44), (52) и (35) соответственно.

$$(3) \quad t_u^2/t_a \gg t_b.$$

(3.1) $t \ll t_a$. Этот случай совпадает со случаем (1.1), так что перенос определяется классической диффузией.

(3.2) $t_a \ll t \ll t_b$. В этом случае реализуется режим субдиффузии — см. случай (2.2).

(3.3) $t_b \ll t \ll t_u \sqrt{t_b/t_a}$. Здесь можно воспользоваться приближением (28), а также $u \rightarrow 0$ для области основного облака примеси и первой ступени хвоста. В результате с учетом (29) получим

$$G(t, \vec{r}) \equiv \frac{3}{(4\pi\tilde{D}t)^{3/2}} \sqrt{\frac{t_a}{t_b}} \exp\left(-\frac{r^2}{4\tilde{D}t}\right), \quad (54)$$

где

$$\tilde{D} = D \cdot \left(M \sqrt{\frac{t_b}{t_a}} \right)^{-1}. \quad (55)$$

Данный режим соответствует медленной классической диффузии.

(3.4) $t \gg t_u \sqrt{t_b/t_a}$. Формально этот случай совпадает со случаем (1.3), так что функция Грина (47) описывает поведение концентрации в основном облаке и первой ступени хвоста. Однако в данном случае коэффициент диффузии \tilde{D}_u должен быть заменен на \tilde{D} , введенный формулой (55). Будем называть этот режим медленной адвекцией II.

Анализ поведения концентрации на асимптотически больших расстояниях показывает, что хвосты имеют многоступенчатую структуру и справедлива следующая закономерность: по мере увеличения расстояния от источника реализуются режимы переноса основного облака примеси в более ранние интервалы времени. Такая закономерность в структуре хвостов была установлена ранее в работах [14; 12].

2.2. Среды с фрактальными свойствами

Другим типом трещиновато-пористых геологических формаций являются среды, обладающие перколяционными свойствами, которые можно охарактеризовать следующим образом [1; 15; 29]. Перколяционные среды состоят из непрерывающихся областей (перколяционных кластеров),

так что перенос возможен только внутри каждого кластера, но не между ними. Состояние перколяционной среды описывается корреляционной длиной ξ . На масштабах больше ξ среда статистически однородна, а на масштабах меньше ξ кластеры являются случайными фракталами. В данной работе мы ограничимся описанием переноса на расстояниях меньше ξ . Кроме того, будем считать, что среда находится выше порога протекания, так что имеется бесконечный кластер, перенос по которому пространственно неограничен. Важным топологическим свойством перколяционных кластеров является то, что они могут быть разбиты на две части — остов (bb) и набор мертвых концов (de). Остов связывает удаленные части кластера, и именно вдоль него происходит просачивание влаги. Каждый мертвый конец связан с (bb) в единственном месте, друг с другом мертвые концы непосредственно не связаны. Схематически перколяционный кластер изображен на рис. 2.

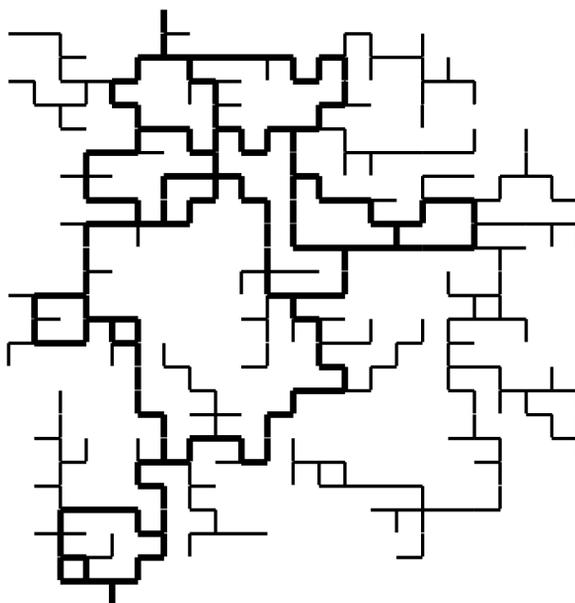


Рис. 2. Схематическое изображение перколяционного кластера

Определяющим механизмом переноса примеси на большие расстояния по системе трещин в геологических средах является адвекция потоком влаги, протекающей по (bb) перколяционного кластера. Следствием фрактальной природы (bb) является медленное (степенное) убывание корреляций скорости адвекции [15]. С другой стороны, когда растворенная примесь диф-

фундирует в (de) , ее перемещение ограничено размерами данного мертвого конца, и для дальнейшего перемещения ей необходимо вернуться в (bb) . Таким образом, мертвые концы играют роль ловушек, которые в конечном итоге замедляют процесс переноса. Однако имеется существенное отличие данного случая от статистически однородных сред. Поскольку фрактальная размерность (bb) больше (de) , «емкость» подсистемы, соответствующая ловушкам, существенно превосходит «емкость» подсистемы, соответствующей каналам с активной примесью. Поэтому до тех пор пока размеры облака примеси не превосходят корреляционной длины (т. е. среда остается фрактальной), ловушки не будут успевать насыщаться. Формально это соответствует тому, что время t_b из предыдущего раздела стремится к бесконечности.

При наличии в среде сорбции необходимо учесть, что осаждение примеси происходит не только на поверхности трещин, формирующих остов, но и на поверхности трещин, составляющих мертвые концы. Поэтому общий адсорбционный поток примеси будет определяться диффузионным потоком в ловушки. В этом случае режимы переноса могут быть описаны в рамках модели переноса в двупористых фрактальных средах [15].

Для концентрации примеси в трещинах $c(\vec{r}, t)$ справедливо уравнение непрерывности (1), где поле скоростей $\vec{v}(\vec{r})$ описывает инфильтрационный поток вдоль (bb) перколяционного кластера. Данная величина обладает следующими свойствами.

Как показано в [15], поле скоростей удовлетворяет условию несжимаемости $\text{div} \vec{v} = 0$. В общем случае $\vec{v}(\vec{r})$ содержит среднюю и флуктуирующую части, но поскольку нас интересуют масштабы много меньше корреляционной длины, то в этом случае (см., например, [29]) вклад средней скорости в перенос оказывается много меньше вклада флуктуирующей компоненты, и в дальнейшем им можно пренебречь (т. е. полагать $\langle \vec{v}(\vec{r}) \rangle = 0$) и подразумевать под \vec{v} только флуктуирующую часть.

В области $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \gg a$ (a — нижняя граница области фрактальности) отсутствует параметр длины, который определял бы поведение системы. Поэтому можно полагать, что поле скоростей потока инфильтрации является самоподобным, так что n -точечный коррелятор скорости, определяемый соотношением

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \langle v_{i_1}(\vec{r}_1) v_{i_2}(\vec{r}_2) \dots v_{i_n}(\vec{r}_n) \rangle, \quad (56)$$

является однородной функцией порядка $-nh$ при $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \gg a$ (для всех пар \vec{r}_i, \vec{r}_j):

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\lambda \vec{r}_1, \lambda \vec{r}_2, \dots, \lambda \vec{r}_n) = \lambda^{-nh} K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n). \quad (57)$$

Введенный в (57) параметр h является основной величиной, характеризующей поведение поля скоростей, и в общем случае зависит от характеристик системы трещин, таких как их пространственное распределение, распределение по длинам, а также от фрактальных свойств их границ.

Для концентрации растворенной примеси, усредненной по ансамблю реализаций, $\bar{c}(\vec{r}, t) \equiv \langle c(\vec{r}, t) \rangle$, из (1) получаем следующее уравнение:

$$\partial \bar{c} / \partial t + \Phi + \text{div} \vec{q} = 0. \quad (58)$$

Здесь $\vec{q}(\vec{r}, t)$ — макроскопическая плотность потока; Φ — плотность стоков, описывающая диффузионный уход примеси в мертвые концы перколяционного кластера и их последующую сорбцию на стенках каналов, формирующих пористость блоков. Ниже будем рассматривать задачу с начальными условиями типа (3), так что распределение концентрации выражается через $c^0(\vec{r})$ и функцию Грина $G(\vec{r}, t)$ с помощью формулы (7).

На временах, когда размер облака примеси много больше его первоначального размера, а именно такие времена представляют основной интерес, для концентрации справедливо (33). Таким образом, характеристики переноса будут полностью определяться поведением функции Грина, для описания которой нам необходимо рассмотреть свойства $\vec{q}(\vec{r}, t)$ и Φ . Рассмотрим эти величины по отдельности.

Поскольку мы анализируем случай с нулевой средней скоростью, плотность потока удовлетворяет очевидному требованию быть равной нулю при постоянной концентрации. Принимая во внимание принцип причинности (концентрация в данный момент времени может зависеть от значений концентрации только в предыдущие моменты), в линейном приближении по концентрации имеем [1; 15; 18]

$$q_i(\vec{r}, t) = - \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r}' f_{ij}(\vec{r}', t') \frac{\partial \bar{c}(\vec{r} - \vec{r}', t - t')}{\partial r_j}. \quad (59)$$

где функция отклика $f_{ij}(\vec{r}, t)$ определяется распределением скорости адвекции.

Как указывалось выше, для фрактальной среды на масштабах $r \gg a$ отсутствует какой-либо параметр размерности длины. Это позволило нам воспользоваться результатами теории критических явлений [17] и проанализировать процессы переноса при $r \gg a$ с точки зрения их масштабной инвариантности. В рамках данной теории каждая из величин, входящая в уравнения, обладает своей масштабной размерностью, их знание и позволяет выписать решение. В [1; 15; 18] на основе полученных масштабных размерностей было построено выражение для функции Грина. Было показано, что поведение функции Грина принципиально различно для разных значений параметра h . При $h > 1$ имеет место классический скейлинг, поскольку в этом случае перенос определяется корреляциями скорости на малых расстояниях, и перенос происходит в режиме классической диффузии. При $h < 1$ основной вклад в перенос вносят длинные коррелированные скачки примеси («полеты Леви»). В этом случае при условии, что действием ловушек можно пренебречь и положить Φ в (58) равным нулю, функция Грина может быть представлена в виде [18]

$$G_\gamma(\vec{r}, t) = \frac{1}{R_\gamma^3(t)} \Omega(\zeta), \quad (60)$$

где $\Omega(0) \sim 1$; $\Omega(\zeta) \rightarrow 0$ для $\zeta \rightarrow \infty$;

$$\zeta = \frac{r}{R_\gamma(t)}. \quad (61)$$

Величина $R_\gamma(t)$, определяемая как

$$R_\gamma(t) = (a^h V t)^\gamma, \quad \gamma = \frac{1}{1+h}, \quad (62)$$

описывает размер облака примеси в момент времени t . Поскольку при $h < 1$ имеем $\gamma > 1/2$, то в этом случае перенос происходит в режиме супердиффузии.

Асимптотическое выражение на больших расстояниях описывается выражением [18; 19]

$$G_\gamma(\vec{r}, t) \cong \frac{A}{(4\pi R_\gamma^2)^{3/2}} \zeta^{\frac{3(2\gamma-1)}{2(1-\gamma)}} \exp\left(-B\zeta^{\frac{1}{1-\gamma}}\right), \quad r \gg R_\gamma(t), \quad (63)$$

где константы A и B порядка единицы.

Рассмотрим теперь, к каким последствиям приводит наличие ловушек, $\Phi \neq 0$.

Согласно результатам [12; 19] в общем случае слагаемое $\Phi(\vec{r}, t)$, описывающее присутствие в среде ловушек, имеет вид интегро-дифференциального оператора

$$\Phi(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^t \varphi(t-t')c(\vec{r}, t')dt', \quad (64)$$

ядро которого $\varphi(t)$ зависит от времени обратно-степенным образом.

В результате функция Грина для этого случая может быть представлена в виде

$$G(\vec{r}, t) = G_{\beta}(\vec{r}, t) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r} + pt}}{p\pi(p)(1 + \psi(\bar{\eta}))}, \quad (65)$$

где $p\psi(\bar{\eta})$ — Фурье—Лаплас-образ функции отклика $f_{ij}(\vec{r}, t)$ из (59),

$$\bar{\eta} = k^2 \left(\frac{p\pi(p)}{Va^h} \right)^{-\frac{2}{1+h}}, \quad (66)$$

а $p\pi(p)$ — Лаплас образ ядра $\phi(t)$ из (64), которое определяется так:

$$\pi(p) = (pt_1)^{-\alpha}, \quad p < t_1^{-1}, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (67)$$

Параметр t_1 характеризует время, когда количество примеси, ушедшей в блок, сравнивается с количеством примеси в трещине, т. е. соответствует времени t_a раздела 2.1.

Из (65) и (33) следует, что в присутствии ловушек полное число активных частиц (32) становится зависящим от времени. Подставляя (65) в (33) и затем в (32), получаем

$$N(t) = N_0 \frac{1}{2\pi i} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{p\pi(p)} e^{pt}, \quad \text{Re } b > 0, \quad (68)$$

где $N_0 = N(0)$. Интегрирование (68) приводит к выражению для полного числа частиц

$$N(t) \approx N_0 \left(\frac{t_1}{t} \right)^{-\alpha}, \quad t > t_1. \quad (69)$$

Принимая во внимание (69), структуру функции Грина (65) можно представить в виде

$$G_\beta(\vec{r}, t) \cong \frac{N(t)}{N_0} \frac{1}{R_\beta^3(t)} \Psi(\tilde{\zeta}). \quad (70)$$

Здесь функция $\Psi(\tilde{\zeta})$ аналогично $\Omega(\zeta)$ ведет себя следующим образом:

$\Psi(0) \sim 1$, $\Psi(\tilde{\zeta}) \ll 1$, $\tilde{\zeta} \gg 1$; переменная $\tilde{\zeta}$ определяется так:

$$\tilde{\zeta} = r/R_\beta(t), \quad (71)$$

а для размера облака примеси справедливо выражение

$$R_\beta(t) = (a^h V t_1^\alpha t^{1-\alpha})^{1/h}, \quad t \gg t_1. \quad (72)$$

Отсюда следует, что показатель экспоненты, определяющий скорость роста облака примеси со временем ($R_\beta \propto t^\beta$), равен

$$\beta = \frac{1-\alpha}{1+h}. \quad (73)$$

Таким образом, в зависимости от соотношения между величинами α и h перенос может происходить как в режиме супер- ($\beta > 1/2$), так и субдиффузии ($\beta < 1/2$).

Асимптотическое поведение на больших расстояниях нетрудно найти из (65):

$$G_\beta(r, t) \propto \exp\left(-\tilde{A} \tilde{\zeta}^{1/(1-\beta)}\right). \quad (74)$$

Здесь константа \tilde{A} порядка единицы.

Функции Грина G_γ и G_β и соответствующие им зависимости R_γ и R_β описывают перенос примеси во фрактальных трещиновато-пористых средах с сорбцией.

2.3. Выводы

Таким образом, в разделе 2 развиты модели и описаны режимы переноса примеси для двух разных типов трещиновато-пористых сред для случая, когда переносимая примесь адсорбируется на поверхности неподвижной матрицы. Показано, что в большом диапазоне времени отсутствует равновесие между подвижной и адсорбированной фракциями примеси, так что процесс переноса описывается режимами, качественно отличающимися от классического режима адвекции-диффузии, имеющего место в общепринятой модели равновесной сорбции.

Для случая, когда среда переноса обладает свойством статистической однородности, совокупность и последовательность режимов переноса определяется соотношением между тремя характерными временами t_a , t_b и t_u . Выделены три случая: $t_u \ll t_a$, $t_a \ll t_u^2/t_a \ll t_b$, $t_u^2 \gg t_a t_b$ (в работе полагается $t_a \ll t_b$). В первом случае ($t_u \ll t_a$, средняя скорость течения велика) реализуется последовательность пяти режимов: классической диффузии, классической адвекции-диффузии, адвекции со степенным шлейфом, квазидиффузии, медленной адвекции I. При $t_a \ll t_u^2/t_a \ll t_a$ последовательность режимов следующая: классическая диффузия, субдиффузия, квазидиффузия, медленная адвекция I. В случае малой средней скорости адвекции, $t_u^2 \gg t_a t_b$, реализуются классическая диффузия, субдиффузия, медленная классическая диффузия, медленная адвекция II.

Важным результатом настоящей модели является то, что на больших временах, когда имеет место равновесие между растворенной и адсорбированной фазами, поведение системы может отличаться от результатов общепринятой равновесной модели, в которой перенос примеси описывается режимом адвекции-диффузии с уменьшенными в R раз скоростью адвекции и коэффициентом дисперсии: $\bar{u}_{\text{ef}} = \frac{\bar{u}}{R}$, $D_{\text{ef}} = \frac{D}{R}$. Совпадение между результатами моделей имеет место только при достаточно медленной средней скорости течения, когда выполняется соотношение $t_u^2 \gg t_a t_b$. В этом случае $R \approx M \sqrt{t_b/t_a} \gg 1$. В обратном пределе, если $t_u^2 \ll t_a t_b$, средняя скорость движения максимума концентрации по-прежнему имеет вид $\bar{u}_{\text{ef}} = \frac{\bar{u}}{R}$, однако расплывание облака примеси определяется взаимодействием примеси с ловушками, так что эффективный коэффициент дисперсии $\tilde{D}_u \approx u^2 t_a$. Учитывая условие $t_u^2 \ll t_a t_b$, получаем $\tilde{D}_u \gg D_{\text{ef}} \approx D/R$, т. е.

расплавление облака примеси происходит гораздо быстрее, чем в соответствии с общепринятой равновесной моделью.

Для случая, когда система обладает фрактальными свойствами и корреляторы скорости убывают достаточно медленно ($h < 1$), перенос примеси описывается двумя режимами. На малых временах, $t < t_1$, характер и скорость переноса полностью определяются случайной адвекцией и режимом переноса является супердиффузия. На временах $t \gg t_1$ становится существенным уход примеси в ловушки, образованные мертвыми концами перколяционного кластера, и последующая сорбция примеси на поверхности трещин, формирующих мертвые концы. В результате режим переноса меняется, причем в зависимости от соотношения между характеристиками

адвекции h и ловушек α он может носить как супер- $\left(\frac{1-\alpha}{1+h} > \frac{1}{2}\right)$, так и

субдиффузионный $\left(\frac{1-\alpha}{1+h} < \frac{1}{2}\right)$ характер.

Поведение концентрации на расстояниях от источника много больших размеров облака примеси описывается многоступенчатыми хвостами. С увеличением расстояния характер убывания в хвостах диктуется все более ранними по времени режимами.

3. Режимы переноса, обусловленные коллоидным механизмом

В этом и следующем разделах мы рассмотрим перенос примеси в сильно-неоднородных резко-контрастных средах, обусловленный сорбцией на коллоидах.

В последние десятилетия обусловленный сорбцией на коллоидах перенос примеси привлекает повышенное внимание исследователей. В то время как перенос растворенной компоненты может существенно замедляться такими механизмами, как уход примеси в слабопроницаемую матрицу или сорбция на поверхности каналов, образующих пути переноса, влияние этих механизмов на транспорт коллоидной компоненты несущественно. Например, влияние ловушек на движение коллоидов в значительной степени подавлено ввиду больших размеров коллоидных частиц. Поэтому наличие сорбирующих коллоидов может приводить к эффективному ускорению переноса загрязнений в геологических средах.

Большинство имеющихся к настоящему времени моделей предполагает наличие равновесия между растворенной и сорбированной на коллоидах

фазами [20; 21; 22; 23], что приводит к серьезной недооценке концентрации примеси на больших расстояниях. Для исправления этого несоответствия в ряде моделей были попытки в том или ином виде включить различные кинетические эффекты при описании взаимодействия отдельных компонент примеси (например, полагать быстрым процесс сорбции и медленным — десорбции). Например, в [24] сорбция предполагалась необратимой (время десорбции равнялось бесконечности). В некоторых моделях (см., например, [25]) была также попытка учесть динамику самих коллоидных частиц, обусловленную их возможностью прилипать к стенкам каналов или притягиваться к свободной поверхности в ненасыщенных потоках. В моделях другого типа [26] сорбция рассматривалась как равновесная в одних областях и как идущая с конечной скоростью в других (так называемое двухячеечное приближение).

Следует отметить, что все упомянутые модели предполагали среду миграции однородной (другими словами, использовали приближение «среднего поля»). Учет же сильной неоднородности среды может привести к существенным изменениям характера предсказываемых режимов переноса (см. [15; 19; 27]). На наш взгляд, основной интерес могут представлять два типа сред с резким контрастом свойств. К первому типу относятся регулярно-неоднородные среды, состоящие из канала с высокой проницаемостью, окруженного слабопроницаемой матрицей. Второй тип составляют среды с фрактальными свойствами. Ниже данные типы сред будут рассмотрены по отдельности (разделы 3.1 и 3.2).

3.1. Коллоидный перенос в регулярно-неоднородной резкоконтрастной среде [28]

3.1.1. Постановка задачи

Мы рассматриваем перенос примеси в регулярно-неоднородной среде, состоящей из двух областей с сильно различающимися транспортными свойствами, являющейся частным случаем двупористой среды [3; 4]. Область 1 представляет собой канал, вытянутый вдоль осей Ox и Oy . Толщина канала вдоль координаты z равна a . Канал заполнен водой, текущей с постоянной скоростью \vec{v} в направлении Ox . Растворенная в воде примесь переносится течением со скоростью \vec{v} , и испытывает диффузию с коэффициентом D . Также в канале присутствуют коллоидные частицы, которые могут адсорбировать и, соответственно, переносить растворенную примесь. Схематически данные процессы изображены на рис. 3.

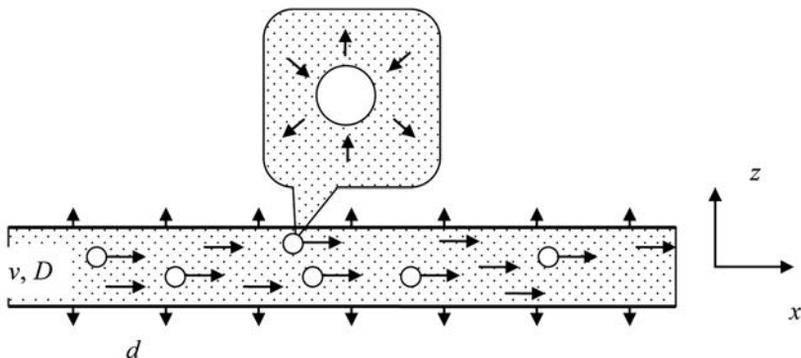


Рис. 3. Иллюстрация к постановке задачи о переносе примеси в регулярно-неоднородной среде при наличии коллоидов

Канал окружен пористой матрицей (область 2). Растворенная примесь может уходить в матрицу. Обычно диффузия примеси в матрице происходит также по жидкой фазе, заполняющей поры. Вследствие извилистости поровых каналов соответствующий коэффициент диффузии d , как правило, меньше (иногда значительно меньше) коэффициента D .

Мы рассматриваем случай, когда коллоиды движутся в канале с той же скоростью \bar{v} , что и жидкость. Размеры коллоидных частиц существенно больше размеров пор матрицы, поэтому они не уходят из канала в матрицу. Также ввиду больших по сравнению с молекулярными размерами коллоидных частиц их диффузией в канале можно пренебречь. Коллоиды распределены в канале однородно с концентрацией \mathfrak{K} .

Поскольку влияние коллоидов на перенос примеси, которое мы хотим исследовать, имеет место в направлении Ox , то ниже мы ограничимся двумерной постановкой, подразумевая под c концентрацию примеси в растворе, проинтегрированную по y от $-\infty$ до $+\infty$.

Концентрация растворенной примеси c в канале описывается уравнением

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D\Delta c = -Q, \quad (75)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, а Q описывает уход примеси из раствора вследствие ее сорбции на коллоидах. В нашем приближении c — концентрация, усредненная по микрообъему, содержащему большое число коллоидных частиц, v — среднее по толщине канала значение скорости.

Для оценки скорости обмена примеси между раствором и адсорбирующими коллоидами воспользуемся газовым приближением (см., например, [31]). Именно, если среднее расстояние между коллоидами $\mathfrak{K}^{-1/3}$ много больше их характерных размеров ρ ($\mathfrak{K}^{-1/3} \gg \rho$), диффузионный поток примеси на сферическую коллоидную частицу с характерным радиусом ρ можно оценить из стационарного решения уравнения для микроскопической неусредненной концентрации \tilde{c} с использованием граничных условий $\tilde{c}(r = \mathfrak{K}^{-1/3}) = c$ и $\tilde{c}(r = \rho) = c_b$. Здесь c_b — концентрация растворенной примеси вблизи поверхности коллоидной частицы, определяемая равновесием с адсорбированной компонентой; начало координат выбрано в центре частицы, и $r = |\vec{r}|$. В итоге выражение для плотности потока на единицу поверхности частицы таково: $j = D(c - c_b)/\rho$. Умножая это выражение на площадь одной коллоидной частицы и на их концентрацию, для объемной плотности стока примеси получаем выражение

$$Q = (c - c_b)/\tau, \quad (76)$$

где τ определяется так:

$$\tau \approx (4\pi D \rho \mathfrak{K})^{-1}. \quad (77)$$

Отметим также, что если скорость адсорбции определяется граничной кинетикой на поверхности коллоидных частиц, вид выражения (76) остается прежним, меняется только выражение для τ .

Концентрация примеси n в области 2 (в матрице) также описывается уравнением диффузии:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - d\Delta n = 0. \quad (78)$$

Нетрудно учесть сорбцию примеси на стенках каналов в среде 2. Отметим, что время установления равновесия между примесью, адсорбированной на стенке, и примесью в объеме канала \tilde{t}_1 порядка $\tilde{t}_1 \sim b^2/4D$, где b — характерная толщина каналов в среде 2. И поскольку b много меньше всех остальных размеров задачи (заведомо можно утверждать, что $a/b \geq 10^3$), то на интересующих нас временах можно считать данное равновесие установившимся. Отсюда следует, что сорбция в матрице приводит лишь к перенормировке коэффициента диффузии в матрице:

$$d \rightarrow d' = d/R. \quad (79)$$

Далее при вычислениях будем использовать обозначение d , имея в виду, что при наличии сорбции в матрице замена (79) уже учтена.

Связь между величинами c и n определяется граничными условиями, которые заключаются в непрерывности концентрации и нормальной компоненты плотности потока частиц.

Концентрация части примеси m , адсорбированной на коллоидах, определяется скоростью адсорбции и движением коллоидов, так что уравнение для m имеет вид

$$\frac{\partial m}{\partial t} + v \frac{\partial m}{\partial x} = Q. \quad (80)$$

Рассмотрим случай, когда концентрация примеси c_{ad} , адсорбированной на поверхности коллоидных частиц, много меньше концентрации насыщения. В этом случае можно считать, что концентрация примеси в растворе вблизи адсорбирующей поверхности линейно зависит от c_{ad} [32]:

$$c_b = \xi c_{ad}. \quad (81)$$

Тогда, учитывая соотношение между поверхностной концентрацией адсорбированных частиц c_{ad} и m

$$m \cong 4\pi r^2 n_{ad} \aleph, \quad (82)$$

нетрудно получить связь между концентрацией примеси в растворе вблизи поверхности коллоидов c_b и средней концентрации примеси, сорбированной на поверхности коллоидов:

$$c_b = \sigma m, \quad (83)$$

где

$$\sigma \approx \frac{\xi}{4\pi r^2 \aleph}. \quad (84)$$

Если средняя концентрация в растворе c равна c_b , т. е. примесь во всем объеме раствора находится в равновесии с адсорбированной примесью, то соотношение

$$c = \sigma m \quad (85)$$

есть не что иное, как линейная изотерма [1], и σ связано с коэффициентом распределения K_{dc} очевидным образом:

$$\sigma = (\rho_c K_{dc})^{-1}. \quad (86)$$

Если равновесие во всем объеме отсутствует, подстановка (83) в (76) приводит к окончательному выражению для стока:

$$Q = (c - \sigma m) / \tau. \quad (87)$$

Таким образом, из (77) и (84) следует, что как время установления равновесия τ , так и константа равновесия σ зависят и от концентрации, и от размеров коллоидных частиц. Поэтому одной массовой плотности коллоидов недостаточно для того, чтобы характеризовать свойства системы. Формулы (77) и (84) дают приближенное описание параметров τ и σ и в случае, если распределение коллоидов по размерам достаточно узкое вблизи среднего размера r . Следует, однако, отметить, что сама система уравнений (75), (80) и (87) не зависит от конкретного вида выражений для τ и σ .

Будем решать задачу с начальным условием, которое задано выражением

$$c(x, z) \Big|_{t=0} = N_0 \delta(x) \delta(z). \quad (88)$$

Значения параметров, характеризующих задачу, могут лежать в широком диапазоне, и в зависимости от соотношений между ними реализуются различные режимы переноса.

Далее будем рассматривать поведение примеси на временах $t \gg t_0$ ($t_0 = a^2 / 4D$), когда распределение частиц в канале практически однородно по координате z .

Помимо времени t_0 существуют еще два времени, характеризующих поведение примеси в растворе безотносительно коллоидной подсистемы. Это характерное время проникновения примеси в матрицу на глубину порядка толщины канала $\sim a$

$$t_1 = \frac{a^2}{4d}, \quad (89)$$

и время t_v , когда снос частиц примеси в результате адвекции вдоль трещины начинает превосходить их смещение в результате диффузии,

$$t_v = \frac{4D}{v^2}. \quad (90)$$

В настоящей работе рассмотрим случай сильной адвекции $t_v \ll t_1$ и проанализируем случаи различных соотношений между τ и t_1 и значений σ .

3.1.2. Вывод основных соотношений

Проинтегрировав уравнение (75) по координате z внутри канала и выполнив преобразование Фурье по координате x , а также преобразование Лапласа по времени, приходим к алгебраическому уравнению

$$\left(p + ikv + Dk^2 + \tau^{-1}\right)c_{pk} + \frac{q_{pk}}{a} = \frac{N_0}{a} + \tau^{-1}\sigma m_{pk}. \quad (91)$$

Здесь

$$c_{pk} = \int_0^{\infty} dt \int dx \exp(-pt - ikx) c(x, t), \quad (92)$$

где $c(x, t)$ — концентрация, усредненная по z . Аналогичным способом определяется m_{pk} . Величина q_{pk} — Фурье-Лаплас-образ плотности потока примеси через границу, отнесенной к единице ее площади; N_0 — полное число частиц примеси. При выводе (91) полагалось, что начало координат находится внутри объема первоначальной локализации примеси.

Аналогично (91) уравнение (80) для частиц, адсорбированных на коллоидах, в представлении Фурье — Лапласа принимает вид

$$\left(p + ikv + \sigma/\tau\right)m_{pk} = c_{pk}/\tau. \quad (93)$$

Решение уравнения (78) с учетом равенства концентраций n и c на границе канала приводит к следующему выражению для Фурье-Лаплас-компоненты концентрации частиц в матрице при $t \gg t_0$:

$$n_{pk}(z) = c_{pk} \exp\left\{-z\sqrt{\frac{p + dk^2}{d}}\right\}, \quad z > 0. \quad (94)$$

Поток частиц на границе канал — матрица вычисляется из (94) согласно

$$q_{pk} = -2d \left. \frac{\partial n_{pk}}{\partial z} \right|_{z=0}. \quad (95)$$

Подставляя получающееся отсюда выражение для q_{pk} в (91) и разрешая систему (91) и (93), получаем для m_{pk} следующее выражение:

$$m_{pk} = \frac{N_0}{a\tau} \left[\left(p + ikv + Dk^2 + \tau^{-1} + \sqrt{\frac{p + dk^2}{t_1}} \right) (p + ikv + \sigma/\tau) - \sigma/\tau^2 \right]^{-1}. \quad (96)$$

В дальнейшем нас будет интересовать поведение примеси, адсорбированной на коллоидах $m(x, t)$, поскольку именно эта фракция приводит к быстрому переносу примеси на большие расстояния и в том числе определяет на этих расстояниях и концентрацию растворенной компоненты. Непосредственный же перенос растворенной компоненты по жидкой фазе существенно замедляется вследствие ухода примеси в матрицу. Для концентрации $m(x, t)$ получаем следующее выражение:

$$m(t, x) = \frac{N_0}{a\tau} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \times \\ \times \frac{\exp(pt + ikx)}{(p + ikv + \sigma/\tau) \left(p + ikv + Dk^2 + \sqrt{\frac{p + dk^2}{t_1}} \right) + (p + ikv)/\tau}, \operatorname{Re} b > 0. \quad (97)$$

Выводы о перераспределении частиц примеси в системе можно сделать уже из анализа зависимости от времени полного числа частиц, адсорбированных на коллоидах.

3.1.3. Полное число частиц, адсорбированных коллоидами, и неравновесные режимы переноса

Проанализируем изменение полного числа частиц примеси, адсорбированной на коллоидах, для различных интервалов времени, выражение для которого получается интегрированием соотношения (97) по координате x :

$$M(t) = a \int_{-\infty}^{+\infty} m(t, x) dx = \frac{N_0}{\tau} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{\exp(pt)}{(p + \sigma/\tau) \left(p + \sqrt{\frac{p}{t_1}} \right) + p/\tau}, \operatorname{Re} b > 0. \quad (98)$$

Как уже указывалось, перенос примеси зависит от соотношения между временами τ и t_1 и параметра σ . Рассмотрим отдельно диапазоны изменения параметра σ : $\sigma < 1$ и $\sigma > 1$. С точки зрения ускорения переноса более интересна ситуация $\sigma < 1$. Для нее мы проанализируем три случая:

- $t_1 \ll \tau$, $\sigma t_1 \ll \tau$ — сравнительно медленная, но очень сильная сорбция;

- $t_1 \ll \tau$, $t_1 \ll \sigma\tau$ — умеренно сильная сорбция;
- $\tau \ll t_1$ — процесс сорбции происходит очень быстро.

Перенос примеси наряду с τ и t_1 определяется также следующими характерными временами

$$\tau_1 = \tau \frac{\tau}{t_1}, \quad \tau_2 = \frac{\tau}{\sigma}, \quad \tau_3 = \frac{t_1}{\sigma^2}. \quad (99)$$

С учетом этого обстоятельства рассмотрим указанные выше случаи по порядку.

1. $t_1 \ll \tau$, $\sigma\tau \ll t_1$. Здесь характерные времена в порядке возрастания располагаются следующим образом:

$$t_1 \ll \tau \ll \tau_1 \ll \tau_2 \ll \tau_3.$$

Для каждого из возникающих интервалов вычислим интеграл (98) в главном порядке.

1а. $t_0 \ll t \ll t_1$: $M(t) \approx N_0 \frac{t}{\tau}$. (100)

В этом интервале практически вся примесь содержится в растворе. В матрице ее очень мало в силу $t \ll t_1$. На коллоидах ее также мало в силу $t \ll \tau$, так что выражение (100) для $M(t)$ является первым членом разложения

зависимости $M \approx N_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right)$, описывающей стандартный процесс

сорбции примеси на коллоидах. Так как почти вся примесь находится в растворе, то ее перенос определяется либо диффузией (при $t < t_v$), либо дрейфом ($t > t_v$).

1б. $t_1 \ll t \ll \tau_1$: $M(t) \approx N_0 \sqrt{\frac{4t}{\pi\tau_1}}$. (101)

На этих временах в матрице находится уже значительная часть примеси. В

растворе, протекающем в трещине, остается лишь доля примеси $\sim N_0 \sqrt{\frac{t_1}{t}}$,

которая продолжает осаждаться на коллоидах со скоростью, определяемой выражением (100), так что в итоге для количества осажденной примеси получаем (101). Отметим, что из выражения (101) следует, что эффек-

тивным временем сорбции примеси на коллоидах является время τ_1 , причем $\tau_1 \gg \tau$. В силу условия $t \ll \tau_1$ доля примеси, осажденная на коллоидах, по-прежнему мала, и перенос в трещине определяется растворенной примесью, т. е. происходит в режиме квазидиффузии, который характерен для обобщенной модели Дыхне [9] при $t \gg t_1$.

$$1в. \tau_1 \ll t \ll \tau_2 : M(t) \approx N_0 \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_1}{\pi t}} \right). \quad (102)$$

При $t \sim \tau_1$ раствор уже существенно обедняется примесью. Осажденная на коллоидах примесь переносится вниз по течению, а сзади остается область обедненного раствора, в результате чего возникает обратный поток примеси из матрицы в раствор. Перекачка примеси в коллоиды становится доминирующим процессом, так что при $t \gg \tau_1$ практически вся примесь оказывается сосредоточенной на коллоидах.

$$1г. \tau_2 \ll t \ll \tau_3 : M(t) \approx N_0 \left(1 - \sqrt{\frac{4t}{\pi \tau_3}} \right). \quad (103)$$

В начале этого интервала почти вся примесь (в силу $\sigma \ll 1$) сосредоточена на коллоидах, и имеется приближенное равновесие между растворенной и адсорбированной компонентами $c(t) \cong \sigma m(t)$. По мере распространения примеси вниз по течению, в области, где в матрице примесь отсутствует, начинается обратная перекачка ее из коллоидной фракции в матрицу. Разница между полным количеством примеси и ее долей, локализованной на коллоидах $N_0 - M(t)$, определяется примесью, сосредоточенной в матрице, количество которой растет по диффузионному закону $\sim n(t) \sqrt{t/t_1}$, чем и объясняется вид выражения (103).

Учитывая, что во всем диапазоне времени $\tau_1 \ll t \ll \tau_3$ практически вся примесь адсорбирована коллоидами, можно ожидать (что подтвердится вычислениями ниже), что перенос примеси будет происходить в баллистическом режиме, т. е. с постоянной скоростью.

$$1д. t \gg \tau_3 : M(t) \approx N_0 \sqrt{\frac{\tau_3}{\pi t}}. \quad (104)$$

В этом интервале по-прежнему поддерживается равновесие между растворенной и адсорбированной компонентами. Скорость совместного процесса десорбции примеси и ее ухода в матрицу лимитируется последним,

поэтому перенос в трещине будет происходить в квазидиффузионном режиме, аналогично переносу в обобщенной модели Дыхне.

2. $t_1 \ll \tau$, $t_1 \ll \sigma\tau$. В этом случае расположение характерных времен в порядке возрастания меняется:

$$t_1 \ll \tau \ll \tau_3 \ll \tau_2 \ll \tau_1.$$

Соответственно меняется очередность во времени режимов переноса. Ограничиваясь вычислениями в главном порядке, получаем:

2а. $t_0 \ll t \ll t_1$: $M(t)$ определяется формулой (100). (105)

2б. $t_1 \ll t \ll \tau_2$: $M(t)$ определяется формулой (101). (106)

В интервале 2б основная часть примеси находится уже в матрице, и смысл соответствующего выражения объясняется теми же соображениями, что и в случае 1б.

К моменту τ_2 , когда устанавливается равновесие между раствором и адсорбированной компонентой $c(t) \equiv \sigma m(t)$, на коллоидах содержится

лишь $M(\tau_2) \approx N_0 \sqrt{\frac{t_1}{\tau\sigma}}$, после чего начинается перекачка примеси с коллоидов в матрицу:

2в. $t \gg \tau_2$: $M(t) \approx N_0 \sqrt{\frac{\tau_3}{\pi t}}$. (107)

Таким образом, в данном случае максимальное количество примеси, адсорбированное на коллоидах, оказывается существенно меньше полного

количества примеси: $M_{\max} \approx M(\tau_2) \approx N_0 \sqrt{\frac{t_1}{\tau\sigma}}$.

3. $\tau \ll t_1$, $\sigma < 1$. В этом случае границы интервалов, на которых происходит смена режимов, определяются временами τ и τ_3 , так что

$$\tau \ll \tau_3.$$

Вычисления дают:

$$t_0 \ll t \ll \tau: M(t) \approx N_0 \frac{t}{\tau}, \quad (108)$$

$$\tau \ll t \ll \tau_3: M(t) \approx N_0, \quad (109)$$

$$\tau_3 \ll t: M(t) \approx N_0 \sqrt{\frac{\tau_3}{\pi t}}. \quad (110)$$

В этом случае можно считать, что примесь переносится коллоидами до тех пор, пока ее количество в матрице $\sim \frac{N_0}{\sigma} \sqrt{\frac{t_*}{t_1}}$ не будет по порядку величины равно ее количеству на коллоидах $\sim N_0$, откуда и следует, что $t_* \approx \tau_3$. Если σ не сильно отличается от единицы, то в выражениях (108)—(110) надо учесть поправочный множитель $(1 + \sigma)^{-1}$.

Для полноты картины рассмотрим случай $\sigma > 1$. Здесь при условии $t_1 \ll \tau$ характерные времена располагаются в следующем порядке:

$$\tau_3 \ll t_1 \ll \tau_2 \ll \tau \ll \tau_1.$$

В интервале $t_0 \ll t \ll t_1$ справедлив режим (100), при $t_1 \ll t \ll \tau_2$ — режим (101), а при $t \gg \tau_2$ наступает режим (104). И опять, как и в случае 2, максимум концентрации на коллоидах достигается на временах порядка τ_2 и оказывается равным $\sim \frac{N_0}{\sigma} \sqrt{\frac{t_1}{\tau_2}}$, что существенно меньше максимально возможной концентрации при заданном начальном количестве примеси.

3.1.4. Пространственное распределение концентрации примеси

Пространственное распределение примеси, адсорбированной коллоидами, определяется выражением (97). В общем случае вычисления довольно громоздки, но поскольку нас интересует случай малых времен t_v , на большей части пространственного интервала $0 < x < vt$ можно пренебречь диффузией и положить в знаменателе $D = 0$. В итоге знаменатель оказывается квадратичным по волновому вектору, и интеграл по k определяется полюсами в точках $k_1 \approx i \left(\frac{p}{v} + \frac{\sqrt{p/\tau_3}}{1 + \sqrt{p\tau_1}} \right)$ и $k_2 \approx i \left(\frac{p}{v} + \frac{1}{\tau} + \sqrt{\frac{p}{\tau_1}} \right)$.

Второй полюс в комплексной плоскости волнового вектора лежит существенно выше первого, так что определяемый им вклад в концентрацию быстро затухает с расстоянием, и мы им пренебрегаем. Интегрируя оставшееся выражение по переменной Лапласа, получаем при $t \gg \tau_2$ для основного облака и области ближнего хвоста

$$m(t, x) \approx \frac{N_0}{2av} \frac{x}{\sqrt{4\pi D_3 \tilde{t}^3}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_3 \tilde{t}}\right), \quad (111)$$

где $D_3 = v^2 \tau_3$, а $\tilde{t} = t - x/v$. Форма облака примеси такова, что концентрация плавно нарастает в диапазоне до некоторого значения x^* , после чего довольно резко убывает. Значение x^* приблизительно определяется равенством единице выражения, стоящего в показателе экспоненты. Вычисления дают, что

$$\text{при } t \ll \tau_3 \quad x^* \approx vt, \quad (112)$$

$$\text{при } t \gg \tau_3 \quad x^* \approx \sqrt{4D_3 t}. \quad (113)$$

Выражение (112) означает, что на временах, когда на коллоидах сосредоточено основное количество примеси, расширение облака примеси происходит почти с постоянной скоростью, т. е. в баллистическом режиме.

На больших временах, которые, как следует из выражения для τ_3 , определяется как временем t_1 , так и константой сорбции σ , рост размеров облака оказывается пропорциональным корню из времени (113). Отметим, что, несмотря на классическую диффузионную зависимость положения фронта от времени, данный режим переноса следует считать аномальным. Во-первых, как следует из выражений, полученных в подразделе 3.1.2, полное количество примеси, адсорбированной на коллоидах, не сохраняется (уменьшается со временем). Во-вторых, распределение примеси вдоль координаты является резко анизотропным.

3.2. Коллоидный перенос примеси во фрактальных средах [30]

3.2.1. Постановка задачи

Как уже указывалось, одним из ключевых факторов, определяющих течение влаги и перенос примеси в геологических средах, является геометрия сетки трещин. В настоящем разделе рассмотрен случай, когда система трещин может быть классифицирована как перколяционная среда, основные свойства которой (структура перколяционного кластера, а также характеристики течения) были описаны в разделе 2.

Если в системе присутствуют коллоиды, то их перенос на большие расстояния определяется тем же полем скоростей, что и перенос растворенной компоненты. С другой стороны, в силу больших размеров коллоидных частиц вероятность их ухода в ловушки (мертвые концы перколяционного

кластера) существенно подавлена, вследствие чего их перенос эффектив-но ускоряется. Соответственно ускоряется и перенос адсорбированной на коллоидах компоненты примеси. В настоящей модели мы ограничиваемся случаем, когда отсутствует взаимодействие коллоидов со стенками каналов. Мы также полагаем, что концентрация коллоидов постоянна. Обмен примесью между раствором и коллоидными частицами описывается с учетом кинетики.

Таким образом, основой настоящей модели коллоидного переноса приме-си в перколяционной среде являются следующие три фактора: корреляци-онные свойства поля скоростей адвекции, наличие присущих перколяци-онной среде ловушек и взаимодействие с конечной скоростью примеси с коллоидами.

В основе модели лежат следующие уравнения для переноса растворенной n_s и адсорбированной на коллоидах n_c компонент примеси:

$$\partial_t n_s + \partial_t \hat{\pi} n_s + \vec{\nabla} (\bar{v} n_s) = -\tau^{-1} (n_s - \sigma n_c), \quad (114)$$

$$\partial_t n_c + \vec{\nabla} (\bar{v} n_c) = \tau^{-1} (n_s - \sigma n_c). \quad (115)$$

Свойства поля скоростей $\bar{v}(\vec{r})$ и ловушек (с учетом переобозначения $\partial_t \hat{\pi} n_s = \Phi$) описаны в разделе 2.

Правые части уравнений (114) и (115), описывающий сорбцию и десорб-цию примеси на коллоидных частицах, представлены в линейном прибли-жении, что подразумевает, что система находится вдали от насыщения (см. раздел 3.1). Аналогично параметры τ и σ описывают характерное время сорбции и коэффициент распределения соответственно.

Мы рассматриваем задачу с начальными условиями:

$$n_s(\vec{r}, t = 0) = n_{s0}(\vec{r}), \quad (116)$$

$$n_c(\vec{r}, t = 0) = 0. \quad (117)$$

Уравнения для полного числа частиц в растворе N_s и частиц, адсорбиро-ванных на коллоидах N_c ,

$$N_k(t) = \int d^3 m_k(\vec{r}, t), \quad k = s, c \quad (118)$$

получаются интегрированием системы (114)—(115) по всему пространству:

$$\partial_t (1 + \hat{\pi}) N_s = -\tau^{-1} (N_s - \sigma N_c), \quad (119)$$

$$\partial_t N_c = \tau^{-1} (N_s - \sigma N_c). \quad (120)$$

Начальные условия для данной системы имеют вид

$$N_s(0) = N_0 = \int d^3 m_{s0}(\vec{r}), \quad (121)$$

$$N_c(0) = 0. \quad (122)$$

Здесь N_0 — полное количество частиц примеси.

3.2.2. Поведение концентрации

Поведение системы определяется величинами τ , t_1 и σ , которые, в свою очередь, определяют следующие характерные времена:

$$\tau_1 = \tau \left(\frac{\tau}{t_1} \right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}, \quad \tau_2 = \frac{\tau}{\sigma}, \quad \tau_3 = \frac{t_1}{\sigma^{1/\alpha}}. \quad (123)$$

смысл которых выяснен ниже.

Рассмотрим четыре случая различающихся с точки зрения режимов переноса:

- сильная и сравнительно медленная сорбция, $\sigma \ll 1$, $\tau \sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \ll t_1 \ll \tau$;
- медленная и умеренно сильная сорбция, $t_1 \ll \tau$, $\sigma < 1$, $t_1 \ll \tau \sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}$;
- быстрая и умеренно сильная сорбция, $\tau \ll t_1$, $\sigma < 1$, $\tau < t_1 \sigma$;
- слабая и медленная сорбция, $\sigma > 1$, $\tau \ll t_1$, $\tau > \sigma t_1$.

Обоснование возможности реализаций каждого случая даны ниже.

А. Сильная и сравнительно медленная сорбция, $\sigma \ll 1$, $\tau \sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \ll t_1 \ll \tau$.

Характерные времена (123) соотносятся следующим образом:

$$t_1 \ll \tau_1 \ll \tau_2 \ll \tau_3.$$

На малых временах,

$$t \ll t_1,$$

уход примеси в ловушки несуществен, и, учитывая начальные условия (121) и (122), получаем из (119) и (120):

$$N_s \cong N_0, \quad (124)$$

$$N_c \cong N_0 \frac{t}{\tau}. \quad (125)$$

Пренебрегая в уравнении (114) уходом примеси в ловушки и обменом между раствором и коллоидами, получаем уравнение для концентрации растворенной компоненты примеси:

$$\partial_t n_s + \vec{\nabla}(\vec{v}n_s) = 0. \quad (126)$$

Решение этого уравнения при условии, что поле скоростей адвекции обладает масштабными свойствами (57), дается функцией Грина (60), рассмотренной в разделе 2.2. На временах, когда размер облака примеси значительно превышает его начальный размер, имеем

$$\bar{n}_s(\vec{r}, t) \cong N_0 G_\gamma(\vec{r}, t). \quad (127)$$

Здесь начало координат выбрано внутри области начальной локализации примеси.

Из (115) имеем

$$\partial_t n_c + \vec{\nabla}(\vec{v}n_c) = \tau^{-1} n_s, \quad (128)$$

откуда следует следующее выражение для средней концентрации примеси, адсорбированной на коллоидах $\bar{n}_c = \langle n_c \rangle$

$$\bar{n}_c(\vec{r}, t) \cong \frac{t}{\tau} \bar{n}_s(\vec{r}, t) = N_0 \frac{t}{\tau} G_\gamma(\vec{r}, t). \quad (129)$$

В интервале

$$t_1 \ll t \ll \tau_1$$

уход растворенной примеси в ловушки становится существенным, но вклад обменного члена в баланс растворенной концентрации все еще пренебрежимо мал. Поэтому вместо (119) имеем

$$\partial_t (1 + \hat{\pi}) N_s = 0, \quad (130)$$

откуда получаем выражение для полного количества примеси в растворе:

$$N_s \cong \frac{N_0}{\Gamma(1-\alpha)} \left(\frac{t_1}{t} \right)^\alpha. \quad (131)$$

Воспользовавшись (120) и (131), приходим к соотношению

$$N_c \cong \frac{N_0}{\Gamma(2-\alpha)} \left(\frac{t}{\tau_1} \right)^{1-\alpha}, \quad (132)$$

которое показывает, что по сравнению с предыдущим интервалом времени рост количества адсорбированной примеси замедляется.

Из (132) также видно, что в случае, когда существенно действие ловушек, величина τ_1 характеризует время адсорбции примеси на коллоидах.

Теперь с учетом действия ловушек уравнение (114) для концентрации в растворе принимает вид

$$\partial_t \hat{n}_s + \vec{\nabla}(\vec{v} \hat{n}_s) = 0. \quad (133)$$

Из (133) следует выражение для пространственного распределения концентрации в растворе

$$\bar{n}_s(\vec{r}, t) \cong N_0 G_\beta(\vec{r}, t), \quad (134)$$

где функция Грина описывается выражением (65).

Для адсорбированной компоненты справедливо (128). Принимая во внимание, что теперь размер облака растворенной примеси много меньше размера облака адсорбированной примеси (72) ($R_\beta(t) \ll R_\gamma(t)$ при $t \gg t_1$), можно рассматривать источник в правой части (128) как точечный, и для распределения концентрации \bar{n}_c справедливо выражение

$$\bar{n}_c = \frac{1}{\tau_0} \int_0^t dt' G_\gamma(\vec{r}, t-t') N_s(t'), \quad (135)$$

где $N_s(t)$ определяется из (131). Выражение (135) описывает супердиффузионный режим переноса с источником, зависящим от времени.

Перейдем к интервалу

$$\tau_1 \ll t \ll \tau_2.$$

Из (132) следует, что при $t \approx \tau_1$ имеем

$$N_c \cong N_0. \quad (136)$$

Следовательно, количество примеси в растворе существенно меньше N_0 , но больше σN_c , так как равновесие между адсорбированной и растворенной фазами еще не установилось:

$$\sigma N_0 < N_s \ll N_0. \quad (137)$$

Отсюда следует, что можно пренебречь первым слагаемым в правой части (115). С другой стороны, согласно условию $t \ll \tau/\sigma$ можно пренебречь вторым слагаемым в правой части (115) по сравнению с $\partial_t n_c$. В итоге перенос адсорбированной компоненты описывается уравнением

$$\partial_t n_c + \bar{\nabla}(\bar{v}n_c) = 0 \quad (138)$$

с начальным размером облака $R(\tau_1) \ll R(t)$ и полным количеством примеси приблизительно равным N_0 . Это позволяет считать начальное распределение концентрации для уравнения (138) точечным, и, следовательно, справедливо следующее выражение для концентрации адсорбированной компоненты:

$$\bar{n}_c(\bar{r}, t) \cong N_0 G_\gamma(\bar{r}, t). \quad (139)$$

Для растворенной фракции оценка главных членов в (114) дает

$$(\partial_t \hat{\pi} + \tau^{-1})n_s + \bar{\nabla}(\bar{v}n_s) = 0, \quad (140)$$

откуда следует приближенное распределение концентрации

$$\bar{n}_s(\bar{r}, t) \cong \frac{N_s}{R_\gamma^3(\tau)} \Omega(\zeta_\tau), \quad (141)$$

где функция $\Phi(\zeta)$ введена в (60); $\zeta_\tau = r/R_\gamma(\tau)$.

На временах $t \gg \tau_2$ растворенная и адсорбированная компоненты находятся практически в равновесии, что и определяет смысл времени τ_2 . Справедливы приближенные равенства

$$N_s \cong \sigma N_c, \quad (142)$$

$$n_s \cong \sigma n_c. \quad (143)$$

Складывая (114), (115) и воспользовавшись (143), получаем выражение для концентрации адсорбированной компоненты:

$$\partial_t (1 + \hat{\pi})n_c + \bar{\nabla}(\bar{v}n_c) = 0, \quad (144)$$

где оператор $\hat{\pi}$ получается из $\hat{\pi}$ заменой t_1 на τ_3 (время τ_3 определено в (123)):

$$\hat{\pi} = \sigma \hat{\pi} = \hat{\pi}|_{t_1 \rightarrow \tau_3}. \quad (145)$$

В интервале

$$\tau_2 \ll t \ll \tau_3$$

вклад производной по времени ∂_t больше, чем вклад обменного оператора $\partial_t \hat{\pi}$, и уравнение для поглощенной компоненты концентрации принимает вид (138). Таким образом, режим переноса описывается соотношениями (139) и (143), а полное количество компонент примеси — формулами (136) и (142).

На очень больших временах,

$$t \gg \tau_3,$$

уравнение (144) принимает вид

$$\partial_t (\hat{\pi} n_C) + \bar{\nabla} (\bar{v} n_C) = 0, \quad (146)$$

так что распределение адсорбированной компоненты описывается равенством

$$\bar{n}_C(\vec{r}, t) = N_0 \tilde{G}_\beta(\vec{r}, t), \quad (147)$$

где функция Грина \tilde{G}_β равна G_β , в которой t_1 заменено на τ_3 :

$$\tilde{G}_\beta = G_\beta \Big|_{t_1 \rightarrow \tau_3}. \quad (148)$$

Отсюда следует, что τ_3 определяет диапазон времени, на котором становится существенным окончательный уход примеси с коллоидов в ловушки, что и определяет режим переноса.

Облако примеси растет согласно соотношению

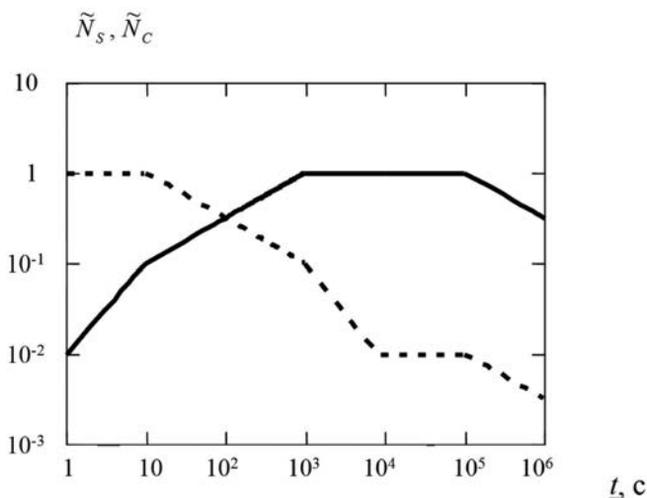
$$R(t) = \tilde{R}_\beta(t) = R_\beta(t) \left(\frac{\tau_3}{t_1} \right)^{\frac{\alpha}{1+h}}. \quad (149)$$

Выражение для концентрации растворенной компоненты следует из (143). Полное количество примеси на этих временах определяется выражением

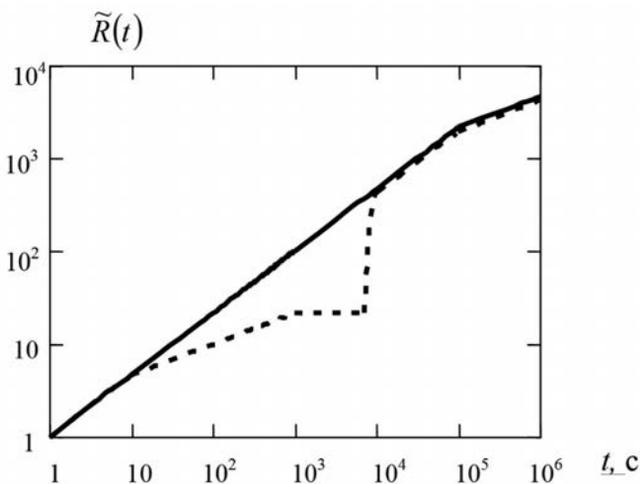
$$N_C = \frac{N_0}{\Gamma(1-\alpha)} \left(\frac{\tau_3}{t} \right)^\alpha \quad (150)$$

и равенством (142).

Зависимости полного количества примеси и размера облака примеси от времени приведены на рис. 4.



a



б

Рис. 4. Зависимости от времени полного числа частиц (а) и размера облака примеси (б) для сильной и сравнительно медленной сорбции,

$$\sigma \ll 1, \tau \sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \ll t_1 \ll \tau$$

Б. Медленная и умеренно сильная сорбция, $t_1 \ll \tau$, $\sigma < 1$, $t_1 \ll \tau \sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}$.

Характерные времена располагаются в следующем порядке:

$$t_1 \ll \tau, \tau_3 \ll \tau_2 \ll \tau_1.$$

На малых временах

$$t \ll t_1$$

действие ловушек пренебрежимо мало и практически вся примесь остается в растворе, так что полное число частиц определяется выражениями (124) и (125). Распределения концентрации (127) и (129) определяются супердиффузионной функцией Грина (60).

В следующем интервале,

$$t_1 \ll t \ll \tau_2,$$

действие ловушек приводит к уменьшению количества примеси в растворе — см. (131) — и замедлению роста количества адсорбированной примеси — см. (132).

Распределение концентрации примеси в растворе описывается функцией Грина, соответствующей случайной адвекции с ловушками (134), а распределение концентрации адсорбированной компоненты — случайной адвекцией с эффективным стоком, зависящим от времени (135).

На временах

$$\tau_2 \ll t \ll \tau_1$$

устанавливается равновесие между растворенной и адсорбированной компонентами (142), где количество адсорбированной на коллоидах примеси много меньше N_0 (150).

Поведение концентрации в растворе описывается формулой (134), а выражение для адсорбированной компоненты принимает вид

$$\bar{n}_c \cong \frac{N_c(t)}{R_\gamma^3(\tau/\sigma)} \Omega(\zeta_{\tau/\sigma}), \quad (151)$$

где $N_c(t)$ определяется из (132) и $\zeta_{\tau/\sigma} = r/R_\gamma(\tau/\sigma)$.

На больших временах,

$$t \gg \tau_1,$$

главным механизмом, определяющим перенос, является случайная адвекция, десорбция примеси с поверхности коллоидных частиц и их оконча-

тельный уход в ловушки. Для полного количества справедливы выражения (142) и (150). Распределение концентрации определяется формулами (143) и (147). На рис. 5 схематически показано поведение числа частиц и размер облака примеси для данного случая.

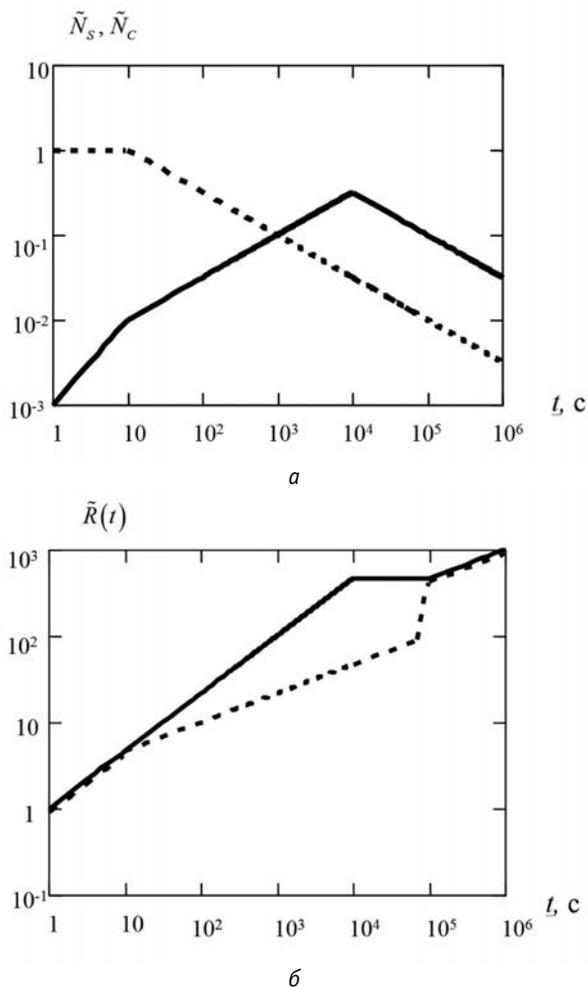


Рис. 5. Зависимости от времени полного числа частиц (а) и размера облака примеси (б) для медленной и умеренно сильной сорбции,

$$t_1 \ll \tau, \sigma < 1, t_1 \ll \tau \sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}$$

В. Быстрая и умеренно сильная сорбция, $\tau \ll t_1$, $\sigma < 1$, $\tau < t_1 \sigma$.

Характерные времена, определяющие перенос, располагаются в следующем порядке:

$$\tau \ll \tau_3.$$

На временах

$$t \ll \tau$$

количество растворенной примеси остается практически неизменным во времени $N_s \cong N_0$, и ее перенос происходит в режиме случайной адвекции, так что концентрация описывается выражением (127). Количество адсорбированной примеси растет линейно со временем согласно (125) и поведение концентрации этой компоненты определяется формулой (129).

На временах

$$t \gg \tau$$

имеет место равновесие между растворенной и адсорбированной компонентами, (142), где $N_C \cong N_0$ остается справедливым вплоть до времен порядка τ_3 , после чего, при $t \gg \tau_3$, полное число частиц убывает согласно (150).

Распределение концентрации при

$$\tau \ll t \ll \tau_3$$

(включая интервал $t_1 \ll t \ll \tau_3$) описывается супердиффузионной функцией Грина (139), (143).

И только на временах

$$t \gg \tau_3$$

растворение и окончательный уход примеси в ловушки становится существенным, так что справедливы соотношения (147) и (143).

Поведение примеси в случае В показано на рис. 6.

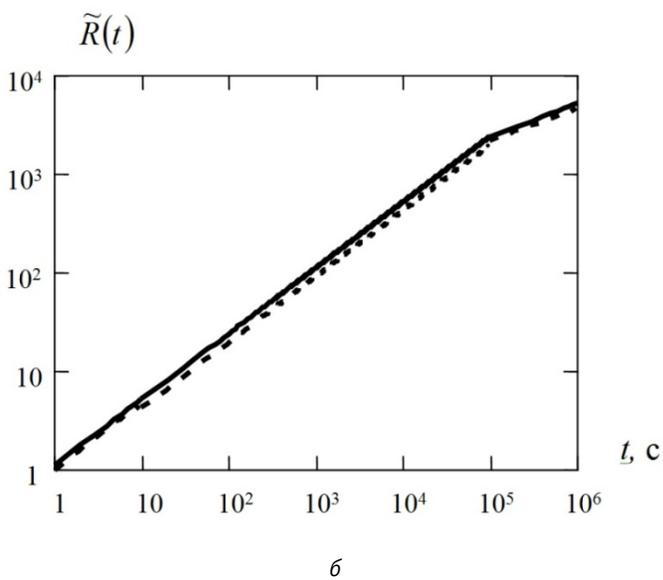
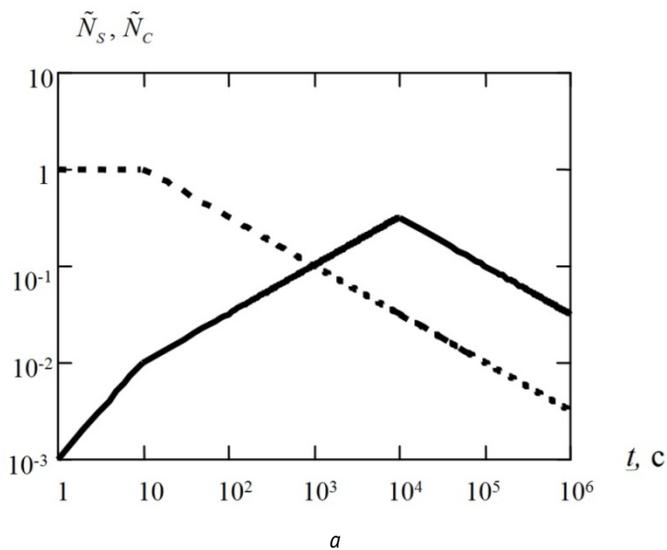


Рис. б. Зависимости от времени полного числа частиц (а)
и размера облака примеси (б) для быстрой и умеренно сильной сорбции,
 $\tau \ll t_1, \sigma < 1, \tau < t_1 \sigma$

Г. Слабая и медленная сорбция $\sigma > 1$, $\tau \gg t_1$, $\tau > \sigma t_1$.

Порядок расположения характерных времен имеет следующий вид:

$$\tau_3 \ll t_1 \ll \tau_2 \ll \tau \ll \tau_1.$$

На малых временах,

$$t \ll t_1,$$

примесь остается преимущественно в растворе $N_s \cong N_0$, и только малая часть ее адсорбирована на коллоидах (125). Перенос определяется случайной адвекцией и происходит в режиме супердиффузии, выражения (127) и (129).

В интервале

$$t_1 \ll t \ll \tau_2$$

количество растворенной примеси начинает уменьшаться в основном за счет ухода в ловушки (131), а рост количества адсорбированной примеси соответственно замедляется (132).

Режим переноса растворенной компоненты определяется одновременно случайной адвекцией и уходом в стоки (134), а перенос адсорбированной компоненты происходит в режиме супердиффузии с зависящим от времен источником (135). Здесь возникает еще одно характерное время —

$$\tau_4 = \frac{\tau_1}{\sigma^{\frac{1}{1-\alpha}}}, \quad (152)$$

так что $\tau_2 < \tau_4 < \tau_1$. В интервале

$$\tau_2 < t < \tau_4$$

количество примеси как в растворе, так и на коллоидах уменьшается согласно (131), причем $N_c \cong N_s/\sigma$. Режим переноса в растворе остается тем же, что и в предыдущем временном интервале (134). Для переноса адсорбированной компоненты справедливо выражение (151).

Окончательный режим формируется на временах

$$t > \tau_4.$$

На этих временах устанавливается равновесие между компонентами: $N_c \cong N_s/\sigma$, $\bar{n}_c \cong \bar{n}_s/\sigma$. Режим переноса определяется выражением (134), соответствующим супер- либо субдиффузии. Таким образом, в этом случае перенос полностью определяется поведением примеси в растворе.

Максимальное количество примеси на коллоидах достигается на временах

$$t_{\max} \sim \tau_2 \text{ и приблизительно составляет } N_C \approx N_0 \left(\frac{\tau_3}{\tau_2} \right)^\alpha \ll N_0.$$

На рис. 7 проиллюстрировано поведение системы в этом случае.

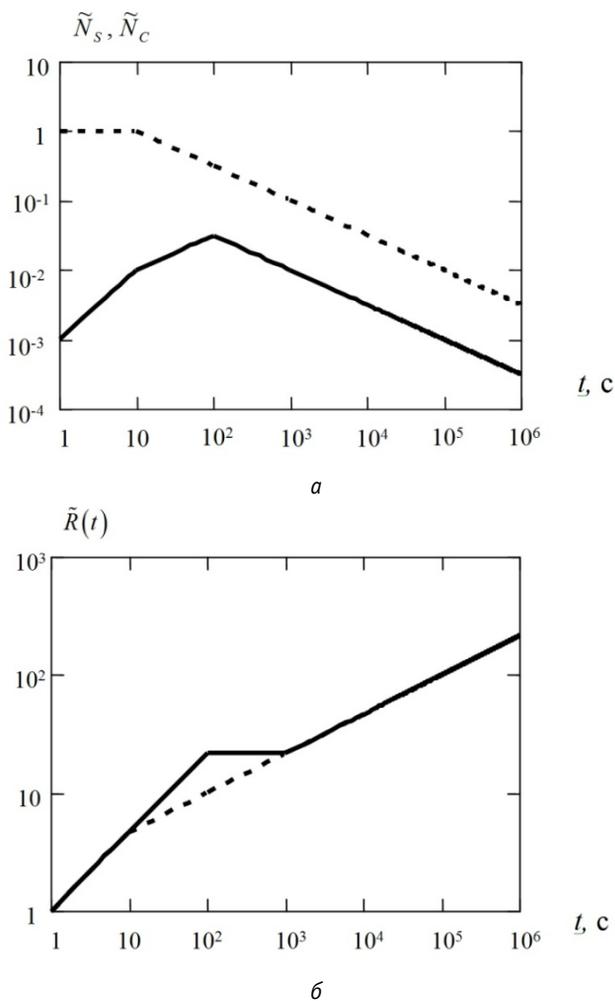


Рис. 7. Зависимости от времени полного числа частиц (а) и размера облака примеси (б) для слабой и медленной сорбции, $\sigma > 1$, $\tau \gg t_1$, $\tau > \sigma t_1$

3.2.3. Поведение концентрации на асимптотически больших расстояниях

Асимптотическое поведение концентрации на расстояниях, много больших основного облака примеси, можно описать с точностью до предэкспоненциального множителя (см., например, [18])

$$\bar{n}(r, t) \propto \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(-\Pi(p; r, t)), \quad (153)$$

где

$$\Pi(p; r, t) = \frac{r}{R(1/p)} - pt, \quad (154)$$

и, как обычно, функция $R(t)$ обозначает размер облака примеси, зависящий от времени $R(t) \propto t^\varepsilon$, где ε зависит от временного интервала и компоненты примеси — см. (62) и (73).

Интеграл в (153) вычисляется методом перевала, так что перевальная точка есть

$$p_* = \frac{1}{t} \left(\varepsilon \frac{r}{R(t)} \right)^{\frac{1}{1-\varepsilon}}. \quad (155)$$

Это приводит к асимптотике концентрации в виде

$$\bar{n}(r, t) \propto \exp(-\Pi), \quad (156)$$

где

$$\Pi \equiv \Pi(p_*, r, t) = (1-\varepsilon) \left(\varepsilon \frac{r}{R(t)} \right)^{\frac{1}{1-\varepsilon}}. \quad (157)$$

Как видно из (155), по мере увеличения расстояния r растет значение перевальной точки. Поэтому с учетом (155) мы приходим к выводу, что чем более далекие расстояния рассматриваются при фиксированном времени, тем более ранний режим определяет асимптотику. Причиной этого является то, что только часть примеси, не взаимодействовавшей с ловушками, может достичь больших расстояний. Это в равной степени относится к примеси в растворе и на коллоидах. Поэтому структура хвостов будет многоступенчатой, если имеет место смена режимов переноса во времени.

То есть с увеличением расстояния асимптотика концентраций воспроизводит режимы переноса в обратном порядке.

В качестве примера рассмотрим распределение концентрации в растворе на асимптотически больших расстояниях для случая А на временах $t \gg \tau_3$.

В пространственном интервале

$$\tilde{R}_p(t) \ll r \ll R_\gamma(t) \cdot \left(\frac{t}{\tau_3}\right)^{\frac{h}{1+h}}$$

асимптотика концентрации растворенной примеси соответствует текущему временному интервалу и определяется выражением

$$\bar{n}_s(r, t) \propto \exp\left(-A\zeta^{1/(1-\beta)}\right), \quad (158)$$

где константа A порядка единицы и $R(t) = \tilde{R}_p(t)$.

На расстояниях

$$R_\gamma(t) \cdot \left(\frac{t}{\tau_3}\right)^{\frac{h}{1+h}} \ll r \ll R_\gamma(t) \cdot \left(\frac{t}{\tau_2}\right)^{\frac{h}{1+h}}$$

асимптотика концентрации описывается формулой

$$\bar{n}_s(\bar{r}, t) \propto \exp\left(-A'\zeta^{\frac{1}{1-\gamma}}\right), \quad (159)$$

где константа A' также порядка единицы и $R(t) = R_\gamma(t)$.

В следующем пространственном интервале

$$R_\gamma(t) \cdot \left(\frac{t}{\tau_2}\right)^{\frac{h}{1+h}} \ll r \ll R_\gamma(t) \cdot \left(\frac{t}{\tau_1}\right)^{\frac{h}{1+h}} \left(\frac{t_1}{\tau}\right)^{\frac{\alpha}{(1-\alpha)(1+h)}}$$

для распределения концентрации справедливо

$$\bar{n}_s \propto \exp\left(-\frac{r}{R_\gamma(\tau)}\right),$$

где N_s лежит в диапазоне (137).

На расстояниях

$$R_{\gamma}(t) \cdot \left(\frac{t}{\tau_1}\right)^{\frac{h}{1+h}} \left(\frac{t_1}{\tau}\right)^{\frac{\alpha}{(1-\alpha)(1+h)}} \ll r \ll R_{\gamma}(t) \cdot \left(\frac{t}{t_1}\right)^{\frac{h}{1+h}}$$

участок концентрационного хвоста описывается выражением (158) с
 $R(t) = R_{\beta}(t)$

На самых больших расстояниях

$$r \gg R_{\gamma}(t) \cdot \left(\frac{t}{t_1}\right)^{\frac{h}{1+h}}$$

асимптотика концентрации описывается формулой (159).

3.4. Выводы

Присутствие коллоидов приводит к возникновению новых, ускоренных режимов переноса радионуклидов в резко контрастных геологических средах.

Ключевыми параметрами, определяющими динамику процессов переноса в присутствии коллоидов, являются следующие величины:

- t_1 — характерное время ухода примеси в матрицу,
- τ — время осаждения частицы примеси на коллоиде,
- σ — коэффициент равновесного распределения примеси между раствором и коллоидами.

Для переноса в регулярно неоднородной резко контрастной среде при сравнительно медленной сорбции на коллоидах ($t_1 \ll \tau$) эффективная скорость сорбции определяется характерным временем $\tau_1 = \tau^2/t_1$.

В случае очень сильной сорбции ($\sigma \ll 1$) — такой, что $\tau\sigma \ll t_1$, в интервале $\tau_1 \ll t \ll \tau_3 = t_1/\sigma^2$ практически вся примесь оказывается сосредоточена на коллоидах и переносится вместе с ними в баллистическом режиме (дрейфа с постоянной скоростью).

На больших временах $t \gg \tau_3$ десорбция и окончательный уход примеси в матрицу замедляют перенос, что приводит к режиму квазидиффузии.

Практически такое же поведение характеризует систему и при быстрой сорбции $t_1 \gg \tau$.

При медленной ($t_1 \ll \tau$), но не очень сильной сорбции ($\sigma < 1$, $\tau\sigma > t_1$), наступление режима квазидиффузии определяется временем $\tau_2 = \tau/\sigma$. При этом максимальное количество примеси, адсорбируемое на коллоидах, оказывается гораздо меньше полного числа ее частиц N_0 , $M_{\max} \sim N_0 \sqrt{\frac{t_1}{\sigma\tau}}$, однако конечный режим (квазидиффузия) остается тем же.

Основными факторами, приводящими к аномальным режимам переноса при усиленной коллоидами адвекции в перколяционной среде, являются фрактальные свойства системы каналов (трещин), наличие ловушек (мертвых концов перколяционного кластера, а также слабопроницаемой матрицы) и конечная скорость процессов адсорбции/десорбции примеси на коллоидах. Динамику переноса наряду с указанными для регулярно-неоднородных сред t_1 , τ и σ теперь также определяют h — масштабный индекс скорости, описывающий скорость убывания корреляционной функции скорости, и α ($0 < \alpha < 1$) — показатель, характеризующий действие ловушек.

Проведенный анализ показал, что влияние коллоидов наиболее важно в случае сильной сорбции, так что справедливы неравенства $\sigma < 1$ и $\tau\sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \ll t_1$. Последнее условие автоматически выполняется при быстрой сорбции $\tau \ll t_1$, но также возможно и при медленной $t_1 \ll \tau$, но очень сильной сорбции $\sigma \ll 1$.

Для указанных выше значений параметров в интервале $\tau_1 \ll t \ll \tau_3$ ($\tau_1 = \tau(\tau/t_1)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}}$ и $\tau_3 = t_1/\sigma^{1/\alpha}$) практически вся примесь находится в адсорбированном коллоидами состоянии, и их перенос происходит в режиме супердиффузии, так что размер облака примеси определяется выражением $R(t) \propto t^{1/h}$, где $h < 1$. Уход примеси в ловушки происходит через растворенную компоненту. В силу условия $N_s \ll N_0$ этот процесс сильно подавлен.

На временах $t \gg \tau_3$ десорбция примеси с коллоидов и их окончательный уход в ловушки приводит к уменьшению общего числа переносимой примеси и замедлению их режима переноса. В результате зависимость от времени размера облака примеси приобретает вид $R \propto t^{\frac{1-\alpha}{1+h}}$ и при различных соотношениях между индексами h и α может происходить в режиме как супер-, так и субдиффузии.

Для сильной сорбции $\sigma < 1$, но при условии $\tau\sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \gg t_1$ перенос, усиленный коллоидами, в значительной степени подавлен. Максимальное количество примеси адсорбированное коллоидами достигается на временах τ_1

и оказывается порядка $(N_c)_{\max} \approx N_0 \left(\frac{t_1}{\tau\sigma^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}} \right)^{\frac{1}{1-\alpha}} \ll N_0$. На временах $t > \tau_1$

количество переносимой по механизму адвекции примеси уменьшается, и перенос происходит в режиме суб- или супердиффузии, так что размер облака примеси определяется зависимостью $R(t) = \tilde{R}_p(t)$.

Для слабой сорбции $\sigma > 1$ перенос примеси контролируется поведением растворенной части, и влияние коллоидов незначительно.

Присутствие коллоидов приводит к возрастанию скорости переноса примеси в конечном по времени режиме независимо от того, является среда регулярно-неоднородной или фрактальной.

В условиях, когда контраст в распределении проницаемости среды является достаточно высоким, ускоренные режимы, обусловленные коллоидным механизмом, могут стать определяющими в оценках надежности захоронений радиоактивных отходов в геологических средах.

4. Заключение

Целью настоящей работы являлось исследование влияния сорбции на процесс переноса примеси в неоднородных геологических средах. В качестве сорбирующих элементов рассматривались как неподвижная матрица, так и коллоидные частицы. Показано, что конечная скорость сорбции примеси в сочетании с особенностями переноса в сильноконтрастных средах приводят к тому, что на протяжении больших интервалов времени отсутствует равновесие между примесью в растворенной и адсорбированной фазах. В результате перенос определяется неклассическими режимами. Разработанные модели описывают данные режимы и связывают возможность их реализации с параметрами среды.

Основные результаты работы состоят в следующем.

1. Для статистически однородных трещиновато-пористых сред учет сорбции в неподвижной матрице приводит к возникновению в общей сложности семи различных режимов переноса: классической диффузии, адвекции-диффузии, адвекции со степенным шлейфом, квазидиффузии, субдиффузии и двум типам медленной адвекции-диффузии. Совокупность реализующихся режимов и их последовательности определяются соотно-

шением между тремя параметрами: t_u — временем, когда перенос примеси со средней скоростью начинает доминировать над диффузионными процессами, t_a — временем, когда становятся существенными эффекты сорбции в пористой матрице, и t_b — временем установления равновесия между растворенной и адсорбированной фазами. Последнее время определяется размерами ловушек, так что в средах с двойной пористостью оно значительно превосходит остальные характерные времена. Существенно, что при определенных соотношениях между характерными параметрами t_u , t_a и t_b даже на асимптотически больших временах, когда имеет место равновесие между растворенной и адсорбированной фазами, поведение системы может отличаться от результатов общепринятой равновесной модели.

2. Для сред с фрактальной геометрией трещин с бесконечным радиусом корреляции равновесие между растворенной и адсорбированной примесью вообще не наступает. В итоге на малых временах перенос примеси определяется режимом супердиффузии, а на больших временах перенос может быть как супер-, так и субдиффузионного типа. Последний определяется конкуренцией двух процессов — случайной адвекции в поле скоростей инфильтрации и сорбции в ловушках, образованных мертвыми концами перколяционного кластера.

3. В модели коллоидного переноса примеси в неоднородных резкоконтрастных средах основными параметрами, определяющими режимы переноса, являются: t_1 — характерное время ухода примеси в матрицу, τ — время осаждения примеси на коллоидных частицах и σ — коэффициент равновесного распределения примеси между раствором и коллоидами. Для регулярно-неоднородной среды (моделирующей перенос по трещине в пористой матрице) показано, что время, в течение которого действие коллоидов значительно ускоряет перенос, определяется величиной $\tau_3 = t_1/\sigma^2$ (для сильной сорбции) либо $\tau_2 = \tau/\sigma$ (для слабой сорбции). Примесь при этом переносится с постоянной скоростью. На более поздних временах имеет место десорбция примеси с коллоидов и ее окончательный уход в окружающую неподвижную матрицу. Перенос на этой последней стадии описывается режимом квазидиффузии.

4. В средах с фрактальными свойствами последовательность режимов переноса определяется соотношением между параметрами, указанными в предыдущем пункте, а также характеристиками скорости адвекции и ловушек (индексами h и α). На умеренных временах перенос происходит в режиме супердиффузии, на заключительной стадии — в режиме супер-/субдиффузии (в зависимости от соотношения между параметрами h и α). Сорбция примеси на коллоидных частицах приводит к существен-

ному увеличению времени, в течение которого действует наиболее «быстрый» (супердиффузионный) механизм переноса.

Литература

1. *Большов Л. А., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.* Аномальный перенос примеси в сильнонеоднородных средах применительно к проблеме захоронения радиоактивных отходов // *Фундаментальные проблемы моделирования турбулентных и двухфазных течений: В 2 т. — Т. 1: Теория и эксперимент / Под ред. акад. РАН А. А. Саркисова, Г. А. Филиппова.* — М.: Наука, 2010. — С. 56—122.
2. *Румынин В. Г.* Геомиграционные модели в гидрогеологии. — СПб.: Наука, 2011.
3. *Ентов В. М.* Теория фильтрации // *Соросовский образоват. журн.* — 1998. — № 2. — С. 121—128.
4. *Gerke H. H., van Genuchten M. Th.* A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media // *Water Resour. Res.* — 1993. — 29. — P. 305—319.
5. *Bonnet E., Bour O., Odling N. E.* et al. Scaling of fracture systems in geological media // *Rev. of Geophys.* — 2001. — 39. — P. 347.
6. *Sahimi M.* Flow phenomena in rocks: From continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing // *Rev. Mod. Phys.* — 1993. — Vol. 65. — P. 1393—1534.
7. *Freid J. J., Combarous M. A.* Dispersion in porous media // *Adv. Hydrosoci.* — 1971. — 7. — P. 169—282.
8. *Dvoretzskaya O. A., Kondratenko P. S.* Anomalous transport regimes and asymptotic concentration distributions in the presence of advection and diffusion on a comb structure // *Phys. Rev. E.* — 2009. — 79, № 041128.
9. *Дворецкая О. А., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.* Аномальная диффузия в обобщенной модели Дыхне // *ЖЭТФ.* — 2010. — Т. 137, вып. 1. — С. 67—76.
10. *Чукбар К. В.* Квазидиффузия пассивного скаляра // *ЖЭТФ.* — 1996. — Т. 109, № 4. — С. 1335—1348.
11. *Архинчеев В. Е., Баскин Е. М.* Аномальная диффузия и дрейф в гребешковой модели перколяционных кластеров // *ЖЭТФ.* — 1991. — Т. 100, вып. 1. — С. 292.
12. *Дыхне А. М., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.* Перенос примеси в перколяционных средах // *Письма в ЖЭТФ.* — 2004. — Т. 80, вып. 6. — С. 464—467.

13. Чукбар К. В., Романов А. С., Попов П. В., Забурдаев В. Ю. Стохастический транспорт в сложных гребешковых структурах // ЖЭТФ. — 2008. — Т. 133, вып. 5. — С. 1140.
14. Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Асимптотические режимы и структура «хвостов» концентрации в модели Дыхне // ЖЭТФ. — 2007. — Т. 131. — С. 494.
15. Bolshov L., Kondratenko P., Matveev L., Pruess K. Elements of Fractal Generalization of Dual-Porosity Model for Solute Transport in Unsaturated Fractured Rocks // Vadose Zone J. — 2008. — Vol. 7, № 4. — P. 1198—1206.
16. Kondratenko P., Matveev L. Random advection in fractal medium with finite correlation length // Phys. Review E. — 2007. — Vol. 75, № 051102.
17. Ма III. Современная теория критических явлений. — М.: Мир, 1980.
18. Dykhne A. M., Dranikov I. L., Kondratenko P. S., Matveev L. V. Anomalous diffusion in a self-similar random advection field // Phys. Review E. — 2005. — Vol. 72, № 061104.
19. Dykhne A. M., Dranikov I. L., Kondratenko P. S., Matveev L. V. Transport Regimes and Concentration Tails for Classical Diffusion in Heterogeneous Media with Sharply Contrasting Properties // Vadose Zone J. — 2008. — Vol. 7, № 4. — P. 1191—1197.
20. Magee B. R., Lion L. W., Lambley A. T. Transport of dissolved organic macromolecules and their effect on the transport of phenantrene in porous media // Environ. Sci. Technol. — 1991. — 25. — P. 323—331.
21. Enfield C. G., Bengtsson G. Macromolecular transport of hydrophobic contaminants in aqueous environments // Ground Water. — 1988. — 26. — P. 64—70.
22. Mills W. B., Liu S., Fong F. K. Literature-review and model (Comet) for colloid metals transport in porous media // Ground Water. — 1991. — 29. — P. 199—208.
23. Abdel-Salam A., Chrysikopoulos C. V. Analysis of a model for contaminant transport in fractured media in the presence of colloids // J. Hydrol. — 1995. — 165. — P. 261—281.
24. Smith P. A., Degueudre C. Colloid-facilitated transport of radionuclides through fractured media // J. Contam. Hydrol. — 1993. — 13. — P. 143—166.
25. Corapcioglu Y., Jiang S. Colloid-facilitated groundwater contaminant transport // Water Resources Res. — 1993. — 29. — P. 2215—2226.

26. *Saiers J. E., Hornberger G. M.* The role of colloidal kaolinite in the transport of cesium through laboratory sand columns // *Water Resources Res.* — 1996. — 32. — P. 33—41.
27. *Bolshov L., Kondratenko P., Pruess K., Semenov V.* Nonclassical Transport Processes in Geologic Media: Review of Field and Laboratory Observations and Basic Physical Concepts // *Vadose Zone J.* — 2008. — 7, № 4. — P. 1135—1144.
28. *Матвеев Л. В.* Перенос примеси в модели двупористой регулярно-неоднородной среды при наличии коллоидов // *ЖЭТФ.* — 2009. — Т. 135, вып. 6. — С. 1200—1206.
29. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography, and transport in random media // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64. — P. 961.
30. *Bolshov L., Kondratenko P., Matveev L., Matveev L.* Colloid-facilitated contaminant transport in fractal media // *Phys. Rev. E.* — 2011. — 84, № 041140.
31. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.
32. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. — Т. 5: Статистическая физика. — Ч. 1. — М.: Наука, 1995.

Разработка численных методов моделирования двухфазных течений с явным выделением межфазной границы

А. А. Леонов, В. В. Чуданов, А. Е. Аксенова

1. Введение

Со сложными потоками с фазовыми превращениями (например, жидкость — пар) часто сталкиваются в промышленных приложениях, таких как теплообменники, ядерные реакторы, котлы и т. д. Для их лучшего понимания требуются как экспериментальные исследования, так и развитие аналитических моделей. Прямое численное моделирование может помочь интерпретировать экспериментальные данные и понять локальные физические явления, которые, в свою очередь, могут использоваться для развития аналитических моделей. Для этих целей использование прямого численного моделирования является уже довольно обычным делом, особенно применительно к задачам однофазной динамики жидкости. Однако в двухфазных потоках с фазовыми превращениями оно еще не получило широкого распространения, поскольку численные проблемы, с которыми сталкиваются при моделировании таких потоков, гораздо более сложны, чем в однофазной динамике жидкости. *Первая такая проблема — это прослеживание поверхности раздела на фиксированной вычислительной сетке.* Некоторые методы показали свою эффективность при решении упомянутой проблемы: VOF [1], front-tracking [2] и level-set [3]. Однако они главным образом имеют дело с несмешивающимися жидкими системами. Действительно, в таких течениях скорость смещения интерфейсной границы равняется скорости жидкостей (газа и жидкости) на интерфейсной границе. Поэтому, зная поле скоростей, довольно просто интерполировать его на интерфейсную границу и переместить последнюю соответствующим образом. Когда имеют место фазовые превращения, проблема усложняется, поскольку в этом случае на интерфейсе существуют сразу три различных скорости: скорости жидкой и паровой фаз и скорость смещения интерфейсной границы. Интерполяционная процедура в этом случае не является тривиальной. Однако Juric [4; 5] показал, что в таком случае возможно определить скорость смещения интерфейса, используя итерационную процедуру, удовлетворяющую отношению Клапейрона на интерфейсе. Эту процедуру он применил к front-tracking-методу. Ранее этот же подход применялся к VOF-методу [6].

Во всех упомянутых выше методах с фиксированной сеткой, по которой перемещаются интерфейсные границы системы, используется концепция непрерывного поверхностного натяжения (CSF) ([7]). Поскольку уравнения движения двухфазной системы решаются на фиксированной сетке и поскольку интерфейсная граница не пересекает узлы сетки, поверхностное натяжение должно быть преобразовано в объемную силу. С точки зрения численного моделирования интерфейс (поверхность раздела фаз) распространяется по фиксированной сетке, и уравнения движения в этом случае решаются для переменных, которые изменяются непрерывно через трехмерные интерфейсные зоны.

Эффекты фазовых превращений жидкость — пар были решены в пределах одножидкостной формулировки разными исследователями: Вех с коллегами [8] использовали LS-метод, Jamet [9] применял так называемую теорию второго градиента или уравнения Cahn—Hilliard.

К совсем недавним 2D-вычислениям кипящих потоков относятся работы Juric и Tryggvason [10], использовавших расширение FT-метод, Welch и Wilson [6], использовавших VOF-метод, и Son и Dhir [12], применявших LS-подход. 3D-вычисления с использованием FT-метода для моделирования пленочного кипения представлены Esmaeeli и Tryggvason [13]. Qian и др. [14] впоследствии развили 2D-FT-метод для задачи движения пламени предварительно перемешанной смеси, основанный на идеях Juric и Tryggvason [10] для кипящих потоков. Helenbrook и др. [15] и Nguyen и др. [16] выполнили вычисления пламени предварительно перемешанной смеси, используя LS-метод для несжимаемого невязкого потока, который допускает разрывы в свойствах жидкости.

Значительное число современных методов моделирования многофазных и многокомпонентных газодинамических течений основывается на численном решении уравнений Эйлера или Навье — Стокса, которые обычно дополняются одним или несколькими уравнениями, выражающими законы сохранения специфических для данной задачи физических величин (концентрации газовых пузырьков), необходимых для определения интерфейсных значений параметров многофазной системы. Применение таких численных методов приводит к возникновению искусственной диффузии через контактные разрывы и к искусственному смешиванию веществ на границе раздела. В такой искусственной смеси значения всех термодинамических параметров вычисляются с ошибкой. При сильно различающихся параметрах веществ такой подход приводит к отрицательным значениям давления уже на втором шаге по времени. В одной из работ Abgral и Saurel [17] предложили двухфазную модель, позволяющую определять термодинамические и кинетические переменные каждого компонента смеси. При этом в любом месте расчетной сетки одним и тем же численным методом решались одинаковые уравнения как для случая двух не-

смешивающихся компонентов, разделенных поверхностью раздела, так и для случая присутствия физического смешивания различных веществ. Однако в работе была использована довольно сложная вычислительная методика, позволяющая решать газодинамические задачи, в которых присутствуют резкие разрывы профилей термодинамических величин и контактные разрывы.

Нами же для моделирования двухфазных течений с помощью двухфазной модели была адаптирована методика кусочно-параболической аппроксимации, позволяющая решать газодинамические задачи, в которых присутствуют резкие разрывы профилей термодинамических величин и контактные разрывы.

Адаптированная методика была протестирована на следующих тестовых одномерных задачах о распаде разрыва в ударной трубе и о водяном крапе. Во всех случаях наблюдалось хорошее совпадение расчетных данных и точного решения. Полученные результаты демонстрируют более точную картину процесса, чем методика, предложенная в [17]. Предлагаемый нами подход может быть легко обобщен на многомерный случай при помощи метода расщепления по направлениям. Для этого решение многомерной задачи сводится к последовательному решению одномерных задач вдоль соответствующих направлений. При этом решение одномерной задачи для одного направления используется в качестве начального условия при решении одномерной задачи для другого направления.

Адаптированная методика кусочно-параболической аппроксимации была использована также для моделирования переходных явлений в пористых материалах, подобных переходу от возгорания к взрыву. Для указанных явлений была использована модель двухфазной среды с учетом микроинерции, предложенная в [18]. Типичным примером среды с микроинерцией является жидкость, содержащая пузырьки с газом. Существуют по крайней мере два различных метода получения основных уравнений для двухфазной среды: один основывается на локальном усреднении законов сохранения, другой — на использовании принципа наименьшего действия Гамильтона. Преимущество второго подхода, называемого еще вариационным, заключается в том, что основные уравнения можно получить на основе одной известной скалярной функции средних величин переменных или лагранжиана системы. Модель была получена в результате использования вариационного подхода для случая двухфазной среды, в которой каждый компонент является сжимаемым и имеет собственную температуру.

Адаптированная методика кусочно-параболической аппроксимации (Piecewise Parabolic Method — PPM) для моделирования переходных явлений в пористых материалах тестировалась на двух известных тестовых задачах. Первая связана с описанием поведения газовых пузырьков в трубке с жидкостью. Вторая задача связана с моделированием распро-

странения ударной волны в жидкой среде с пузырьками газа. Из сравнения с результатами [18] можно сделать вывод о применимости модифицированной методики РРМ для расчета двухфазных потоков. Обобщение на двумерный и трехмерный случаи может быть проведено с использованием метода расщепления по направлениям.

Адаптированная методика кусочно-параболической аппроксимации была использована для класса проблем, связанных с проходом ударных волн через области с разрывным профилем объемной фракции. Одна из математических моделей для описания эволюции двухфазных сжимаемых смесей была предложена в [17] для следующих приложений: поверхности раздела между сжимаемыми материалами, ударные волны в многофазных смесях, эволюция гомогенных двухфазных потоков, кавитация в жидкостях. Основные трудности этой модели были связаны с дискретизацией неконсервативных членов уравнения. В результате класс проблем, связанных с проходом ударных волн через области с разрывным профилем объемной фракции, не был описан посредством указанной модели. Класс схем, способных сходиться к правильному решению для таких проблем, был получен Saurel и Abgral позднее, в 2003 г. [19] в результате более глубокого анализа двухфазной модели. Предлагаемая методика была реализована на эйлеровой сетке через схему Годунова.

Нами же был выполнен дополнительный анализ двухфазной модели с учетом микроструктуры топологии смеси в лагранжевых массовых координатах. В результате были получены уравнения, усредненные по набору всех возможных реализаций для двухфазной смеси. Численное решение было выполнено с использованием РРМ-метода [20] в два этапа: на первом были решены уравнения, усредненные по массовой переменной, на втором решение, найденное на предыдущем шаге, отображалось на фиксированную эйлерову сетку. Такой подход позволяет распространить предложенную методику на двумерный (трехмерный) случай. Как и в лагранжевых переменных, эйлерова система уравнений расщепляется на две (три) идентичные подсистемы, каждая из которых описывает эволюцию рассматриваемой среды в заданном направлении. Точность и ошибкоустойчивость описанной процедуры были продемонстрированы на последовательности численных проблем: ударная труба с двумя смесями и однородной объемной фракцией, ударная труба с хорошо перемешанными материалами, ударная труба с поверхностью раздела, отделяющей почти чистые материалы. Во всех случаях получено хорошее совпадение с известными результатами [19].

В данной работе мы сначала дадим обзор наиболее часто используемых методов для прослеживания границы раздела: метода второго градиента (раздел 2.1) и front tracking (раздел 2.2). Отметим их основные преимущ-

ществ и недостатки, а затем перейдем к изложению предлагаемого нами подхода.

Раздел 3 посвящен методу дискретных уравнений, развитому в одномерной постановке Abgral и обобщенному нами на многомерный случай. В разделе 4 представлены некоторые результаты моделирования взрывного испарения, а также выводы и перспективы этой работы по использованию обобщенного метода дискретных уравнений.

2. Обзор наиболее используемых подходов

С XIX в. известно (по крайней мере для равновесного состояния), что интерфейсная граница жидкость — пар может быть описана как трехмерная непрерывная среда с использованием так называемой теории Ван дер Вальса, Cahn — Hilliard, или теории второго градиента, которая кратко представлена в разделе 2.1. Эта теория, в которой принимается, что внутренняя энергия жидкости зависит не только от ее энтропии и плотности, но и от градиента плотности, что гарантирует полную термодинамическую согласованность уравнений, описывающих движение жидкости в пределах интерфейсной зоны жидкость — пар. Подобная теория в настоящее время применяется для моделирования проблем затвердевания и поднимает престиж так называемой модели фазового поля. Эти методы уже применялись для изучения многих задач: дендритов [21], бинарных сплавов [22] и анизотропных интерфейсных границ [23]. Одна из главных ссылок по этим методам [24], в которой заявлено, что для температуры и энергии, которые могут быть независимыми переменными, соответствующий термодинамический потенциал должен в меньшей степени зависеть от свободной энергии, а в большей степени от энтропии. Согласно [24] энтропия зависит не только от «порядка параметра C — меры фаз», но также и от градиента. Показано, что для системы пар — жидкость полная система уравнений баланса, согласующихся со вторым законом термодинамики, может быть получена путем замены свободной энергии не энтропией, как в моделях фазовых полей, а внутренней энергией. Параметром порядка в этом случае будет плотность жидкости, которая имеет ясный физический смысл. Нам неизвестны попытки в моделировании системы жидкость — пар рассмотреть в качестве параметра порядка энтропию, которая имела бы ясный физический смысл, и термодинамическим потенциалом в этом случае была бы внутренняя энергия. Теория второго градиента априори посвящена описанию физики интерфейсов жидкость — пар и поэтому, вообще говоря, используется, чтобы изучить физические системы, близкие к критической точке, где толщина интерфейса относительно велика. Обзор этих видов приложений можно найти в [25]. Однако для более общих прило-

жений температура системы далека от критической температуры жидкости и интерфейсные границы жидкость — пар поэтому очень тонкие, т. е. порядка нескольких ангстрем. Если эту теорию использовать непосредственно, как она есть, то шаг по сетке тоже должен иметь порядок нескольких ангстрем, что означает, что около сотни миллионов регулярно разнесенных узлов было бы необходимо для решения одномерной задачи, которая имеет протяженность порядка одного сантиметра. Поэтому теория должна быть приспособлена так, чтобы поддержать термодинамическую согласованность уравнений движения жидкости в пределах интерфейсных зон, в то время как интерфейсная толщина будет искусственно увеличена, чтобы стандартная сетка могла это фиксировать. Показано, что такая адаптация возможна, но влечет за собой изменение термодинамического поведения жидкости внутри интерфейсной зоны или, более точно, внутри биноидальной области. Следует заметить, что этот подход уже успешно использовался для несмешивающихся жидкостей [26], но очевидно, что фазовые превращения жидкость-пар делают проблему более сложной. Поскольку термодинамическое поведение жидкости будет изменено в целях численного моделирования, должно быть гарантировано, чтобы важные макроскопические свойства не будут модифицированы слишком сильно. В частности, показано, что значения радиуса включений (пузырьков или капель) и интерфейсных потоков массы, также как и интерфейсных потоков тепла, могут быть корректно промоделированы в ограниченном числе случаев. Эти ограничения связаны с использованием термодинамических последовательных моделей, и поэтому трудноустраняемы. Эти ограничения хорошо известны.

2.1. Основные особенности теории второго градиента

Классически, в макроскопическом масштабе, интерфейс между жидкостью и ее паром (и, в более общем виде, между двумя жидкостями) моделируется как разрывная поверхность, наделенная свойствами, наиболее важным из которых является поверхностное натяжение [27]. Однако в микроскопическом масштабе интерфейс — это объемная зона перехода, через которую молекулярная плотность изменяется непрерывно. Поэтому было бы хорошо описать систему жидкость — пар включая интерфейсные границы общими уравнениями механики жидкости.

Самый простой способ определять такие уравнения состоит в том, чтобы рассматривать внутреннюю энергию жидкости как зависящую не только от ее энтропии и плотности, но и от ее градиента плотности. Впервые Ван дер Ваальс [28] показал, что при моделировании интерфейсной границы как трехмерной непрерывной среды энергия жидкой частицы должна зависеть не только от ее плотности (если это принимается, то жидкость находится в тепловом равновесии), но также и от градиента плотности,

$$F = F^0(\rho) + \lambda \frac{(\nabla \rho)^2}{2}, \quad (2.1)$$

где F — объемная свободная энергия жидкости; F^0 — классическая часть; λ — коэффициент капиллярности, обычно равный константе.

Эта зависимость от градиента плотности объясняет существование конечной толщины межфазной границы, также как и существование поверхностного натяжения.

Korteweg [29] позже показал, что общее ограничение в пределах интерфейсной зоны жидкость — пар также зависит от градиента плотности. Cahn и Hilliard изучали при равновесном состоянии интерфейсные границы, разделяющие жидкости различной природы [30], используя ту же самую концепцию зависимости энергии от общей функции индикатора фаз.

Rocard [31] показал, что форма свободной энергии, определяемой с помощью уравнения (2.1), может быть объяснена в молекулярном масштабе с использованием теории среднего поля. В пределах интерфейсной зоны жидкость — пар плотность частиц, окружающих тестовую частицу, не имеет сферической симметрии. Поэтому разложение в ряд Тейлора по порядку одной из этих плотностей частиц в направлении, нормальном к интерфейсу, показывает, что к «классической» энергии взаимодействия, зависящей только от плотности, должна быть добавлена энергия, пропорциональная квадрату градиента плотности как постулируется в уравнении (2.1). О такой жидкости говорят, что она обладает внутренней капиллярностью. Очевидно, что введение зависимости энергии жидкости от ее градиента плотности соответствует более высокому порядку моделирования (как это сделано в расширении газовой динамики Chapman — Enskog, см., например, [32]).

Равновесное состояние жидкости, снабженной внутренней капиллярностью, таково, что ее свободная энергия минимальна. Для одномерной проблемы в декартовой системе координат тогда имеем

$$\delta \int_{z^-}^{z^+} \left(F^0(\rho) + \lambda \left(\frac{d\rho}{dz} \right)^2 + L_1 \rho \right) dz = 0, \quad (2.2)$$

где L_1 — лагранжевый множитель, обеспечивающий замкнутость системы, т. е. сохранение массы.

Поэтому профиль плотности $\rho(z)$ в условиях равновесия удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\lambda \frac{d^2 \rho}{dz^2} = \mu(\rho) - L_1, \quad (2.3)$$

где μ — химический потенциал. Тогда L_1 интерпретируется как химический потенциал при насыщении.

Используя этот профиль плотности в условиях равновесия, можно показать, что энергия, сконцентрированная на интерфейсной границе (иногда называемой энергией избытка), которая есть поверхностное натяжение, определяется выражением

$$\sigma = \int_{z^-}^{z^+} \lambda \left(\frac{d\rho}{dz} \right)^2 dz. \quad (2.4)$$

Термодинамическая теория, описанная выше для изотермических систем, может быть обобщена для неизотермических систем, для которых предполагается, что внутренняя энергия жидкости зависит не только от ее плотности и энтропии, но и от градиента плотности:

$$u = u\left(s, \rho, (\nabla\rho)^2\right). \quad (2.5)$$

Обращаем внимание, что эта модель может быть расширена путем учета зависимости внутренней энергии от градиента энтропии. Однако последствия введения другой зависимости для моделирования физических явлений, которые являются темой данного исследования, не очевидны.

Для получения уравнений движения жидкости в рассматриваемой задаче существуют несколько подходов, рассмотренные в [33]. Детали могут быть найдены для подхода Гамильтона [34] и для подхода, использующего принцип виртуальной работы [35]. Таким образом, уравнения в частных производных, которые управляют движением жидкости с внутренней капиллярностью, имеют вид

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla(\rho V) = 0, \quad (2.6)$$

$$\rho \frac{dV}{dt} = F - \nabla p - \nabla(\lambda \nabla\rho \otimes \nabla\rho) + \nabla\tau^D, \quad (2.7)$$

$$\rho \frac{de}{dt} = FV - \nabla\left((-pI - \lambda \nabla\rho \otimes \nabla\rho + \tau^D)V\right) + \nabla\left(\lambda \nabla\rho \frac{d\rho}{dt}\right) - \nabla q. \quad (2.8)$$

Здесь p — давление, определяемое из (2.9); λ — коэффициент капиллярности, определяемый из (2.10); τ^D — диссипативная часть тензора напряжений; e — удельная общая энергия; q — тепловой поток.

$$p = \rho^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \rho} \right)_{s, (\nabla \rho)^2} - \rho \nabla (\lambda \nabla \rho), \quad (2.9)$$

$$p = \rho^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \rho} \right)_{s, (\nabla \rho)^2} - \rho \nabla (\lambda \nabla \rho), \quad (2.9)$$

Приведенная система уравнений будет замкнута, если известны выражение для внутренней энергии $u = u(s, \rho, (\nabla \rho)^2)$ (поскольку p и λ зависят от u), диссипативного тензора τ^D и теплового потока q .

Выражения для удельной внутренней энергии и последствия их применения представлены ниже. Используя термодинамику необратимых процессов, Serrecher [36] получил общее выражение для τ^D и q . В результате появились пять новых коэффициентов в выражении для τ^D . Их физическая значимость еще не установлена, поэтому для τ^D выбрали выражение Ньютона (обычно выбираемое предположение, дающее хорошую интерпретацию макроскопических явлений, например, [33]). В свою очередь, для теплового потока использовался классический закон Фурье. Отсюда

$$\tau^D = \text{vtr}(D) + 2\mu D, \quad (2.11)$$

где $D \triangleq (\nabla V + \nabla^T V) / 2$ и

$$q = -k \nabla T. \quad (2.12)$$

Тот факт, что теория Cahn—Hilliard объясняет поверхностное натяжение как объемное свойство, уже приводился выше, где поверхностное натяжение интерпретировалось как энергия на единицу площади. Учитывая балансное уравнение движения (2.7), анализ усилия, прикладываемого к элементарному объему, помещенному в пределах интерфейсной зоны, показывает (см., например, [37]), что в условиях равновесия давление в тангенциальном направлении интерфейсной границы гораздо слабее давления в нормальном направлении. Таким образом, натяжение прикладывается в тангенциальном направлении интерфейсной границы, а интегрирование натяжения интерпретируется как поверхностное натяжение. И, следовательно, найденное выражение для определения поверхностного натяжения, есть (2.4).

Система уравнений (2.6)—(2.8) был записана для интерфейсной зоны, где градиент плотности дает значительный вклад в энергию. Однако в пределах каждой фазы этим вкладом можно пренебречь и показать, что в этом

случае уравнения (2.6)—(2.8) сводятся к классическим уравнениям движения однофазной жидкости.

Это означает, что решение только этих трех непрерывных уравнений в частных производных будет определять весь двухфазный поток жидкость — пар с движением интерфейсных границ, включая разрывы и слияния, являющиеся только частью решения. Поэтому фактически никакой специальной обработки интерфейсных границ не потребуются, что означает, что главная трудность, с которой сталкиваются в численных методах, посвященных прямому численному моделированию двухфазных течений, может быть преодолена.

Простой анализ порядков величин (например, [38]) показывает, что уместный масштаб длины, связанный с уравнением движения жидкости, обеспеченной внутренней капиллярностью, составляет около 10^{-10} м. Поскольку поверхностное натяжение появляется как интегральное свойство, интерфейсная зона должна быть разрешена численно, и поэтому, чтобы представить интерфейсную границу, должно быть использовано несколько узлов дискретизации. Следовательно, чтобы решить одномерную проблему с характерным масштабом длины 1 мм, необходимо около 10 млн узлов дискретизации равномерно пространственной сетки, что абсолютно неприемлемо.

Далее необходимо проанализировать, возможно ли искусственное увеличение межфазной зоны жидкость — пар без потери согласования термодинамических свойств. Для применения метода второго градиента характерна окрестность критической точки. Рассмотрим равновесную систему жидкость — пар при температуре чуть ниже критической температуры жидкости T_c . При этих условиях толщина межфазной границы системы жидкость — пар обычно составляет порядка 1 мкм. Это означает, что вблизи критической точки использование трехмерной модели для описания интерфейсной границы жидкость — пар полностью оправданно, что является причиной ее применения для изучения критических явлений (например, [39]).

Кроме того, около критической точки может быть записано упрощенное уравнение состояния жидкости [40]. Например, можно показать, что зависимость от энергии W , определяемая как

$$W(\rho) = F(\rho) - \left(F(\rho_v^{\text{sat}}) + \mu^{\text{sat}} (\rho - \rho_v^{\text{sat}}) \right), \quad (2.13)$$

где μ^{sat} — химический потенциал при насыщении; ρ_v^{sat} и ρ_l^{sat} — плотности паровой и жидкой фаз при насыщении соответственно; A — константа (все свойства являются функциями температуры), приобретает следующую особенно простую форму:

$$W(\rho) = A(\rho - \rho_v^{\text{sat}})^2 (\rho - \rho_l^{\text{sat}})^2. \quad (2.14)$$

Рассмотрим плоскую межфазную границу при условии равновесия вблизи критической точки. Если положить коэффициент капиллярности равным константе, балансовое уравнение движения можно проинтегрировать аналитически и найти, что профиль плотности через плоскую межфазную границу в состоянии равновесия определяется из выражения

$$\rho(z) = \frac{\rho_l^{\text{sat}} + \rho_v^{\text{sat}}}{2} + \frac{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}}{2} \tanh\left(z \frac{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}}{\sqrt{2\lambda/A}}\right). \quad (2.15)$$

При этих условиях толщина межфазной границы и сила поверхностного натяжения определяются следующим образом:

$$h = \frac{4}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}} \sqrt{\frac{\lambda}{2A}}, \quad (2.16)$$

$$\sigma = \frac{(\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}})^3}{6} \sqrt{2\lambda A}. \quad (2.17)$$

Уравнения (2.16) и (2.17) показывают, что теория второго градиента в окрестности критической точки предсказывает, что толщина межфазной

границы в равновесном состоянии пропорциональна $h \approx \sqrt{\frac{\lambda}{A}}$, а поверхностное натяжение — пропорционально $\sigma \approx \sqrt{\lambda A}$.

Это замечание важно для понимания способа, которым интерфейсная граница может быть искусственно увеличена. Цель заключается в искусственном увеличении толщины межфазной границы до величины, которая может быть разрешена на допустимой расчетной сетке, а толщина межфазной границы рассматривается как параметр, величина которого определяется размерами исследуемой системы, мощностью компьютера и т. д. Изучение границы раздела в равновесии вблизи критической точки показывает, что толщина межфазной границы пропорциональна $\sqrt{\lambda}$. Следовательно, искусственное увеличение границы может быть достигнуто путем увеличения $\sqrt{\lambda}$. Однако сила поверхностного натяжения также пропорциональна $\sqrt{\lambda}$, поэтому увеличение коэффициента капиллярности будет увеличивать величину поверхностного натяжения жидкости. Это неприемлемо, поскольку наша цель — выполнить прямое численное моделирование, для которого поверхностное натяжение является важным физическим свойством.

Данную проблему можно преодолеть путем уменьшения коэффициента A с той же скоростью, с которой увеличивается величина λ — см. (2.16) и (2.17). Отсюда следует, что толщина интерфейса может быть увеличена без изменения величины поверхностного натяжения.

Рассуждения показывают, что возможно искусственное увеличение интерфейса без изменения термодинамической согласованности модели второго градиента при условии, что термодинамическое поведение жидкости изменено внутри интерфейсной зоны (или, более точно, если зависимость от плотности термодинамических функций изменена только для значений плотности между значениями плотностей при насыщении, т. е. внутри биноидальной области).

Тогда возникает другая проблема. Действительно, изменение значения A влечет за собой изменение термодинамического поведения жидкости для всех значений плотности, как следует из (2.14). В частности, производная $dP/d\rho$ будет изменена при плотностях в условиях насыщения, что означает, что скорость звука жидкой и паровой фаз будет модифицирована. Это неприемлемо в случае прямого численного моделирования.

Проблема в том, чтобы модифицировать уравнение состояния жидкости так, чтобы интерфейсная граница могла быть искусственно расширена, но поддержать некоторую регулярность около биноидальной кривой, т. е. для величин ρ , близких к ρ_v^{sat} и ρ_l^{sat} . Возможное решение этой проблемы изложено ниже.

Следует подчеркнуть, что этот последний пункт делает проблему использования метода диффузионного интерфейса для моделирования явлений фазового превращения более трудным, чем моделирование несмешивающихся двухфазных течений. Действительно, Jасqтiп [26; 41] развивал ту же идею, но для несмешивающихся жидкостей, для которых использовалась теория Сапн — Hilliard. Вопросы о выполнении уравнения состояния объемных фаз в этом случае не существует, поскольку фазы предполагаются несжимаемыми.

Лучший способ нахождения термодинамического поведения жидкости, удовлетворяющей всем предварительно сформулированным условиям, — работать непосредственно на «классической» свободной энергии жидкости и на ее капиллярном коэффициенте, предполагаемом постоянным (или в виде функции, зависящей только от температуры). Причина в том, что как только термодинамическое поведение задано, все интерфейсные свойства являются только следствиями этого задания.

Перечислим условия, которые должны быть удовлетворены:

- величина толщины межфазной границы при равновесии h^{sat} может быть выбрана произвольным образом (from numerical arguments);

- величина поверхностного натяжения для равновесной системы σ^{sat} может быть выбрана произвольно из эксперимента или модели;
- термодинамические свойства пузырьковой фазы могут быть выбраны произвольно из эксперимента или модели;
- давление как функция плотности непрерывно дифференцируема (непрерывная скорость звука).

Предлагается искать модифицированную термодинамическую функцию $W^{\text{mod}}(\rho)$, используя выражение вида

$$W^{\text{mod}}(\rho) = \frac{\sigma^{\text{sat}}}{h^{\text{sat}}} (\varphi(r))^2, \quad (2.18)$$

где φ — безразмерная функция безразмерной переменной $r \triangleq \frac{\rho - \rho_v^{\text{sat}}}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}}$.

Определим функцию

$$\psi(r) \triangleq \frac{\varphi(r)}{\max \varphi}. \quad (2.19)$$

Jamet [35] показал, что форма функции $\psi(r)$ должна быть такой, как показано на рис. 2.1.

Одно из главных требований, которое должно быть удовлетворено, — при увеличении интерфейсной границы должно уменьшиться значение A в окрестности критической точки, или, в более общем виде, должен уменьшиться максимум функции $W(\rho)$. Если бы это было единственным требованием, то функция $\psi(r)$ все еще имела бы параболический профиль. Кроме этого, требуется, чтобы функция $(dP/d\rho)(\rho)$ сохраняла свое значение и была непрерывна при $\rho = \rho_v^{\text{sat}}$ и $\rho = \rho_l^{\text{sat}}$. Прямо показано, что эта производная связана с производной $\sqrt{W}(\rho)$.

Поэтому производная $\sqrt{W}(\rho)$ должна сохраняться постоянной, и ее максимум должен быть уменьшен. Если это уменьшение огромно (типично порядка 10 000 в условиях рис. 2.1), то первоначально параболическая форма $\sqrt{W}(\rho)$ будет сильно сокращаться только в средней части, и ее тангенсы при $\rho = \rho_v^{\text{sat}}$ и $\rho = \rho_l^{\text{sat}}$ сохранятся постоянными, так чтобы безразмерная форма $\psi(r)$ была такой как показано на рис. 2.1.

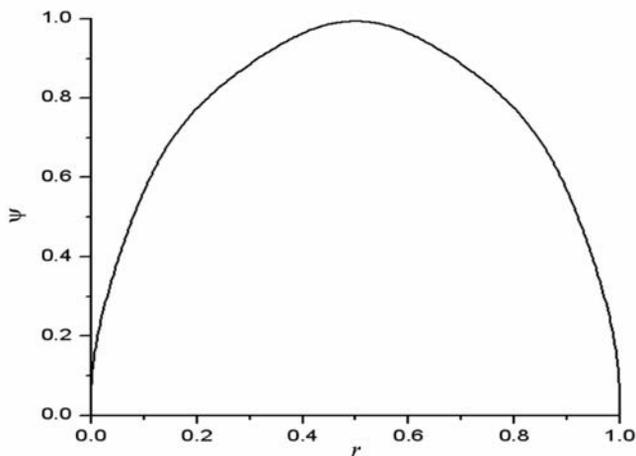


Рис. 2.1. Форма функции $\psi(r)$ для воды при температуре на 1 К ниже критической точки и искусственной толщине интерфейса при равновесии, равном 1 мм

При задании функции $\psi(r)$ все термодинамические свойства жидкости (типа давления) могут быть выведены путем дифференцирования. Например, можно показать, что

$$P^{\text{mod}}(\rho) - P^{\text{sat}} = \frac{2\sigma^{\text{sat}}}{h^{\text{sat}}} \varphi \left(\frac{\rho}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}} \frac{d\varphi}{dr} - \frac{1}{2} \varphi \right). \quad (2.20)$$

В [11] показано модифицированное уравнение состояния для воды при температуре на 1 К ниже критической точки, для которого искусственная толщина межфазной границы равна 1 мм. Для простоты принималось, что уравнение состояния Ван дер Ваальса справедливо в объеме фаз и образует график внутри биноидальной области, подобный справочному уравнению состояния. Можно показать, что модифицированное уравнение состояния сильно изменяется внутри бинодального интервала. Причина состоит в том, что для рассматриваемого случая искусственное увеличение толщины межфазной границы в 10 000 раз соответствует уменьшению максимума dP/dr (который достигается в середине бинодального интер-

вала) приблизительно в 10 000 раз — см. уравнение (16) и (17), для которых A грубо пропорционально $\max(dP/d\rho)$.

Описанная процедура нахождения модифицированного термодинамического поведения жидкости справедлива, если система изотермическая: функция $\psi(r)$ и затем модифицированная объемная свободная энергия $F^{\text{mod}}(\rho)$ могут быть найдены для любой заданной температуры. Однако Jamet [35] показал, что работа непосредственно со свободной энергией при поиске модифицированной термодинамики сохраняет всю термодинамическую согласованность модели и что термодинамические отношения Максвелла выполнены.

Следует подчеркнуть, что представленная выше модифицированная термодинамика не изменяет значения плотностей при насыщении. Это означает, что бинодальная кривая не изменяется. Поэтому любая термодинамическая функция не изменяется при насыщении, в том числе удельная энтальпия i . И скрытая теплота парообразования L , определяемая выражением

$$L = i_v^{\text{sat}} - i_l^{\text{sat}}, \quad (2.21)$$

остаётся неизменной при модификации представленной здесь термодинамики.

Далее необходимо проанализировать, каковы последствия при модификации уравнения состояния для искусственного увеличения межфазной границы. Согласно теории капиллярности Лапласа давление фаз, окружающих включение радиуса R в условиях равновесия, определяется (см., например, [42]) уравнениями вида

$$P_v(\rho) - P^{\text{sat}} = \eta \frac{\rho_v^{\text{sat}}}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}} \frac{2\sigma}{R}, \quad (2.22)$$

$$P_l(\rho) - P^{\text{sat}} = \eta \frac{\rho_l^{\text{sat}}}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}} \frac{2\sigma}{R}, \quad (2.23)$$

где

$$\eta = \begin{cases} +1 & \text{для капель,} \\ -1 & \text{для пузырьков.} \end{cases} \quad (2.24)$$

Как показано в [11], эти давления таковы, что одна из фаз находится в метастабильном состоянии, т. е. попадает в бинодальный интервал, где уравнение состояния модифицировано. Поэтому соотношения (2.22) и (2.23) не могут быть проверены, и соотношения Лапласа нарушаются для модифицированного уравнения состояния.

Равновесное состояние сферических включений, описываемых в соответствии с теорией второго градиента, имеет вид [43]

$$P_l(\rho) - P_v(\rho) = 2 \int_0^{\infty} \lambda \frac{(dp/dr)^2}{r} dr. \quad (2.25)$$

Это соотношение является общим и, если радиус включения больше толщины межфазной границы, удовлетворяет соотношению Лапласа. Таким образом, соотношение Лапласа не нарушается путем введения модифицированного уравнения состояния.

Кроме того, поскольку рассматриваемая модифицированная термодинамика такова, что функция $\frac{dP}{d\rho}(\rho)$ непрерывна на биноидальной кривой,

анализ, основанный на разложении в ряд Тейлора первого порядка по величине $\left(\frac{2\sigma}{R}\right)$, показывает, что уравнения (2.22) и (2.23) удовлетворяют любой модифицированной термодинамике. Влияние модификации уравнения состояния проявляется, только если разложение в ряд Тейлора выполнено вплоть до третьего порядка:

$$P_{l,v}^{\text{mod}}(\rho) - P_{l,v}(\rho) = \xi^{\text{sat}} \left(\frac{2\sigma}{R}\right)^3, \quad (2.26)$$

где

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi^{\text{sat}} \triangleq \eta \frac{\rho_l^{\text{sat}} \rho_v^{\text{sat}}}{6 \rho_p^{\text{sat}} (\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}})^4} \frac{\frac{d^2 \mu^{\text{mod}}}{d\rho^2}(\rho_p^{\text{sat}}) - \frac{d^2 \mu}{d\rho^2}(\rho_p^{\text{sat}})}{\left(\frac{d^2 \mu}{d\rho^2}(\rho_p^{\text{sat}})\right)^3}, \\ \rho_p^{\text{sat}} \triangleq \frac{(\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}) - \eta(\rho_l^{\text{sat}} + \rho_v^{\text{sat}})}{2}. \end{array} \right.$$

Здесь $P_{l,v}$ — давление либо жидкой, либо парообразной фазы при немодифицированной термодинамике; $P_{l,v}^{\text{mod}}$ — давление для модифицированного уравнения состояния.

Предположим, что в любом случае приемлемо делать ошибку $\varepsilon \leq \varepsilon_{\text{lim}}$ по абсолютному уровню давления, где

$$\varepsilon = \left| \frac{P_{l,v}^{\text{mod}}(\rho) - P_{l,v}(\rho)}{2\sigma / R} \right|. \quad (2.28)$$

Уравнения (2.26) и (2.28) показывают, что включения, радиусы которых больше, чем предельный радиус R_{lim} , определяемый соотношением (2.29), вносят ошибку ε меньше, чем ε_{lim} .

$$R_{\text{lim}} = 2\sigma \sqrt{|\xi^{\text{sat}}|} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\text{lim}}}}. \quad (2.29)$$

Характерные величины $2\sigma \sqrt{|\xi^{\text{sat}}|}$ для воды представлены [11] для разных значений температуры и искусственной толщины межфазной зоны в условиях равновесия. Показано что если $\varepsilon_{\text{lim}} = 10^{-4}$ и искусственная толщина межфазной границы $h = 0,1$ мм при температуре на 1 К ниже критической точки, то радиус включений, которые будут удовлетворять критерию (т. е. $\varepsilon < 10^{-4}$), должен быть больше 1 мм. Для радиуса меньше 1 мм уровень давления, окружающий интерфейсную границу, не будет удовлетворять критерию по ε , даже если соотношение Лапласа будет всегда выполняться.

Далее необходимо проанализировать влияние изменения термодинамических свойств на скорость перемещения интерфейсной зоны в процессе межфазных превращений.

Рассмотрим стационарную одномерную изотермическую задачу: внизу расчетной области — неподвижная стенка, вверху — поршень, снизу под поршнем находится пар, к фиксированной стенке примыкает жидкость. Поверхность раздела пар — жидкость расположена примерно посередине высоты расчетной области. Заметим, что фазовые переходы существуют даже в изотермических системах. Фазовые изменения в этом случае обусловлены вакуумом. Когда поршень движется назад, давление пара уменьшается, и жидкая и газообразная фазы перестают находиться в состоянии термодинамического равновесия.

Для возврата к состоянию термодинамического равновесия некоторое количество жидкости должно испариться. При испарении потребляется энергия, которая передается к интерфейсной границе через кондуктивные тепловые потоки. Эти тепловые потоки требуют ненулевых температурных градиентов. В данном разделе предполагается, что теплопроводность велика, а фазовые переходы медленные, и фазы можно рассматривать как изотермические. Подробные условия, при которых это предположение справедливо, можно найти в [35].

Если скорости поршня и стенок постоянны, то постоянна и скорость перемещения межфазной границы, определяемая уравнением сохранения масс

$$V^i = \frac{\rho_l V_l - \rho_v V_v}{\rho_l - \rho_v}. \quad (2.30)$$

Объемные плотности ρ_l и ρ_v таковы, что [12]

$$\begin{cases} P(\rho_v) = P^{\text{sat}} - \frac{\dot{m}_c^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_v^{\text{sat}}} - \frac{1}{\rho_l^{\text{sat}}} \right), \\ P(\rho_l) = P^{\text{sat}} + \frac{\dot{m}_c^2}{2} \left(\frac{1}{\rho_v^{\text{sat}}} - \frac{1}{\rho_l^{\text{sat}}} \right), \end{cases} \quad (2.31)$$

где

$$\dot{m}_c \hat{=} \rho_l (V_l - V^i) = \rho_v (V_v - V^i). \quad (2.32)$$

Уравнения (2.31) показывают, что жидкость переохлаждена, а пар перегрет, поэтому характеристические точки фаз расположены вне биноидальной кривой.

Эта одномерная изотермическая стационарная проблема может быть изучена с помощью модели второго градиента, и может быть найдено, что давления фаз определяются соотношениями

$$\begin{cases} P(v_l) - [P(v_v) - \dot{m}^2 (v_l - v_v)] = 0, \\ \int_{v_l}^{v_v} \{P(v) - [P(v_v) - \dot{m}^2 (v - v_v)]\} dv = 0, \end{cases} \quad (2.33)$$

где $v = \frac{1}{\rho}$ — удельный объем; $\dot{m} \hat{=} \rho V = \text{const}$.

Уравнение (2.33) — обобщение правила Максвелла [44] в присутствии переноса массы через межфазную границу [38]. Подчеркнем, что эти соотношения удовлетворяют любому уравнению состояния $P(v)$.

Уравнение (2.33) может быть разложено в ряд Тейлора первого порядка по \dot{m}^2 , что приведет точно к (2.31) (в котором \dot{m}_c заменяется на \dot{m}). Поскольку эти соотношения подразумевают, что фазы не являются метастабильными, *любое искусственное увеличение межфазной границы не изменяет объемных фазовых плотностей*.

Поскольку скорости поршня и стенки V_l и V_v являются параметрами проблемы, скорость смещения интерфейсной границы, определяемой соотношением (30), не изменяется посредством ее искусственного расширения.

Метод второго градиента предсказывает изменение коэффициента поверхностного натяжения, связанное с переносом потока массы через межфазную границу согласно [38]. Поэтому необходимо знать, как увеличение толщины межфазной границы изменяет коэффициент поверхностного натяжения.

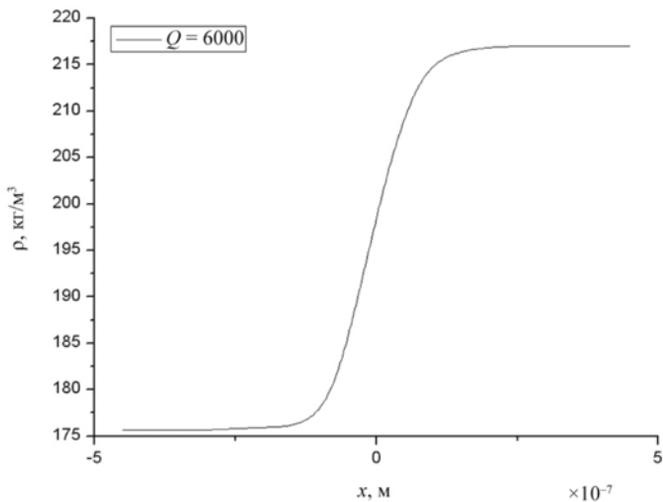
На рис. 2.2 показаны профили интерфейсной плотности при температуре на 1 К ниже критической точки для различных потоков массы, пересекающих межфазную границу: для уравнения состояния Ван дер Ваальса и для модифицированного уравнения состояния. Эти рисунки показывают, что в случае модифицированного уравнения состояния межфазная толщина более чувствительна к межфазному переносу массы, чем в случае вандерваальсова уравнения состояния. Эта повышенная чувствительность имеет два недостатка: во-первых, если массовый поток слишком велик, то межфазная толщина не сможет быть зафиксирована, во-вторых, внесенное изменение поверхностного натяжения может исказить физическую достоверность моделируемого явления.

Разложение в ряд Тейлора с первым порядком по \dot{m}^2 для профиля плотности показывает, что межфазная толщина и поверхностное натяжения могут быть аппроксимированы следующим образом:

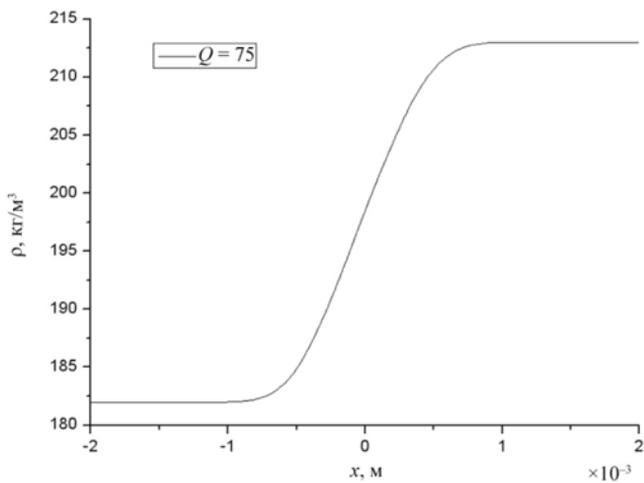
$$\frac{h-h^{\text{sat}}}{h^{\text{sat}}} = -\dot{m}^2 h^{\text{sat}} \frac{(\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}})^2}{4\sigma^{\text{sat}} \rho_l^{\text{sat}} \rho_v^{\text{sat}} (\rho_l^{\text{sat}} + \rho_v^{\text{sat}})}, \quad (2.34)$$

$$\frac{\sigma - \sigma^{\text{sat}}}{\sigma^{\text{sat}}} = \dot{m}^2 h^{\text{sat}} \frac{(\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}})^2}{4\sigma^{\text{sat}} \rho_l^{\text{sat}} \rho_v^{\text{sat}} (\rho_l^{\text{sat}} + \rho_v^{\text{sat}})}. \quad (2.35)$$

Линейное изменение межфазной толщины объясняет разницу между профилями на рис. 2.2а и 2.2б.



а



б

Рис. 2.2. Эволюция профиля плотности с интерфейсным потоком массы в $\text{кг} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ при температуре на 1 К ниже критической точки: а — вандерваальсова термодинамика (обращаем внимание на симметричный эффект влияния давления на плотности фаз), б — измененная термодинамика такова, что искусственная толщина поверхности раздела в равновесии равна 1 мм

Уравнения (2.34) и (2.35) должны помочь ответить на вопрос, уместен ли предложенный метод для численного моделирования. Предположим, что относительная ошибка в значении поверхностного натяжения равна 1%. При температуре на 1 К ниже критической точки это означает, что интерфейсный поток массы должен быть ниже, чем $7 \text{ кг} \cdot \text{м}^2 \text{с}^{-1}$, что соответствует скорости поршня, равной примерно 5,4 мм/с. Если эта величина слишком мала для физических параметров, используемых при численном моделировании, единственное решение состоит в том, чтобы изменить размер сетки так, чтобы искусственная толщина интерфейса могла быть уменьшена.

Когда межфазная граница жидкость — пар моделируется как разрывная поверхность, обычно предполагается, что температура на границе равна температуре насыщения. В теории второго градиента температура в межфазной зоне определяется путем решения уравнений (2.6)—(2.8) и, следовательно, нужно знать, насколько температура в межфазной зоне близка к температуре насыщения.

Рассмотрим одномерную систему жидкость — пар при механическом равновесии, при котором парообразная фаза перегрета на ΔT , а жидкая фаза переохлаждена на ту же температуру ΔT (рис. 2.3). Профиль плотности должен тогда быть таким, чтобы интерфейсная зона автоматически располагалась там, где достигается температура насыщения.

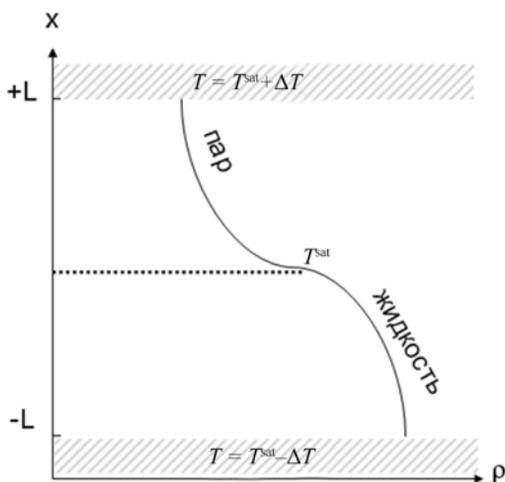


Рис. 2.3. Схема одномерного теплопереноса через интерфейсную зону жидкость — пар при механическом равновесии

Эта проблема требует решения уравнения баланса движения и энергии — см. (2.7) и (2.8).

$$\frac{dP}{dz} = \lambda \rho \frac{d^3 P}{dz^3}, \quad (2.36)$$

$$\frac{d}{dz} \left(k \frac{dT}{dz} \right) = 0, \quad (2.37)$$

где коэффициент капиллярности λ предполагается постоянным, а коэффициент теплопроводности k априори есть функция плотности.

Связь между уравнениями (2.36) и (2.37) обычно устанавливается через зависимость давления от температуры, т. е. через уравнение состояния жидкости.

Типичные профили плотности и температуры для уравнения состояния Ван дер Ваальса, а также для модифицированного уравнения состояния представлены на рис. 2.4. В обоих случаях можно видеть, что температура насыщения достигается внутри межфазной зоны.

Однако когда тепловой поток увеличивается через увеличение температурной разности ΔT (рис. 2.5), межфазная толщина варьируется, что приводит также к вариациям поверхностного натяжения.

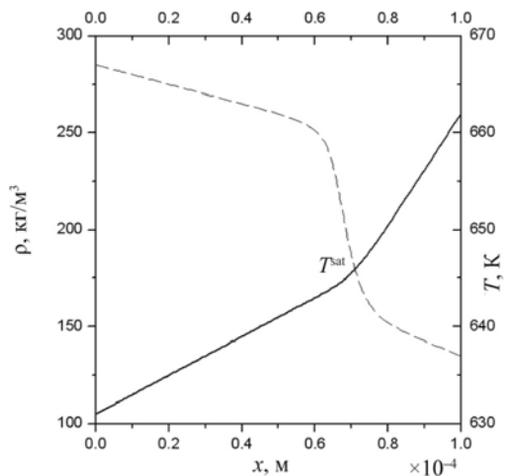
Первая попытка объяснять это изменение может быть найдена в [35], где предполагается, что температурный градиент постоянен (т. е. $k = \text{const}$). Эта попытка основана на разложении в ряд Тейлора с первым порядком по ΔT и ведет к следующей аппроксимации:

$$\frac{h - h^{\text{sat}}}{h^{\text{sat}}} = -\nabla T (h^{\text{sat}})^2 \frac{(\rho_l^{\text{sat}} + \rho_v^{\text{sat}})}{2} \frac{\rho_v^{\text{sat}} \Lambda}{2T^{\text{sat}} \rho_l^{\text{sat}} (\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}) \sigma_v^{\text{sat}}} \xi(T^{\text{sat}}), \quad (2.38)$$

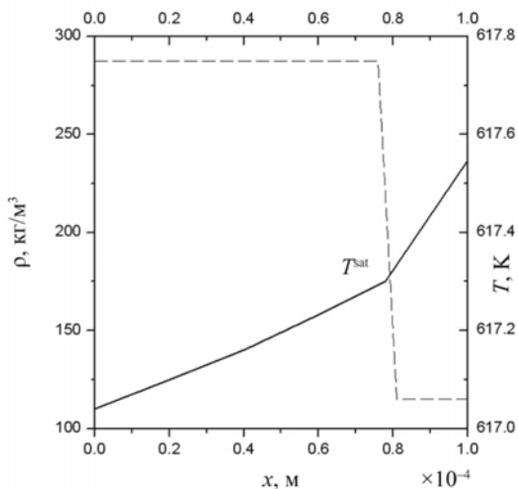
$$\frac{\sigma - \sigma^{\text{sat}}}{\sigma^{\text{sat}}} = \nabla T (h^{\text{sat}})^2 \frac{(\rho_l^{\text{sat}} + \rho_v^{\text{sat}})}{2} \frac{\rho_v^{\text{sat}} \Lambda}{2T^{\text{sat}} \rho_l^{\text{sat}} (\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}) \sigma_v^{\text{sat}}} \xi(T^{\text{sat}}), \quad (2.39)$$

где

$$\xi(T) = \frac{2\rho_l^{\text{sat}}}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}} \ln \left(\frac{2\rho_l^{\text{sat}}}{\rho_l^{\text{sat}} - \rho_v^{\text{sat}}} \right) - 1. \quad (2.40)$$



а



б

Рис. 2.4. Профили плотности и температуры поперек поверхности раздела жидкость — пар при механическом равновесии пересеклись постоянным тепловым потоком: а — уравнение состояния Ван дер Ваальса, б — модифицированное уравнение состояния, для которого толщина поверхности раздела в равновесии равняется 10^{-4} м

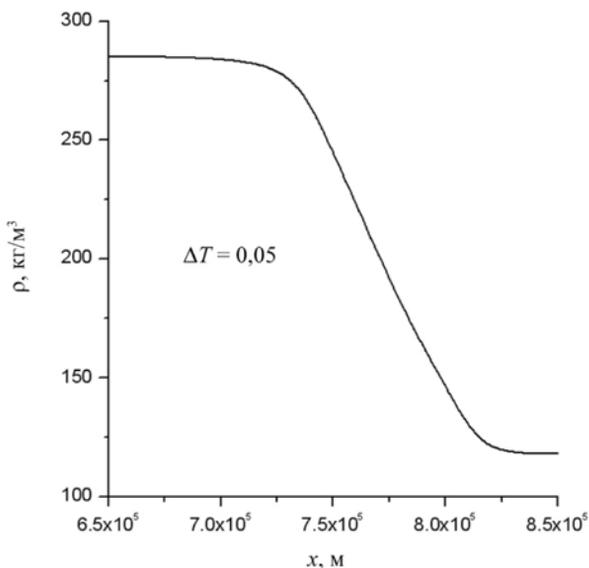


Рис. 2.5. Профили плотности через искусственно расширенный интерфейс жидкость — пар ($h^{\text{sat}} = 10^{-5}$ м) при механическом равновесии

Уравнения (2.38) и (2.39) показывают, что относительные изменения межфазной толщины и поверхностного натяжения линейно зависят от градиента температуры в пределах межфазной зоны и имеют квадратичную зависимость от толщины межфазной границы при равновесии. Эти изменения поэтому более чувствительны к толщине межфазной границы в условиях равновесия, по сравнению с изменениями, вызванными потоком массы. Jamet [35] показал, что уравнения (2.38) и (2.39) верно определяют зависимости от ∇T и h^{sat} , но множитель пропорциональности недооценен с коэффициентом из диапазона от 2 до 3 для воды.

В качестве иллюстративного примера предположим, что по любой причине приемлемо делать относительную ошибку 1% по величине поверхностного натяжения. Для задачи из рис. 2.3 при температуре на 1 К ниже критической точки температурный градиент около интерфейса должен быть ниже, чем 0,65 К/м, что соответствовало бы максимальной величине кондуктивного теплового потока сквозь перегретый пар и переохлажденную жидкость, равной приблизительно 0,2 Вт/м² и искусственной толщине интерфейса 10^{-5} м. Если рассмотренная здесь величина много меньше, чем физические параметры численной задачи, то необходимо увеличить

сеточное разрешение, чтобы уменьшить искусственную толщину межфазной границы.

Эта особенность может иногда быть ограничена. Например, при моделировании, рассматриваемом в [6, р. 673], существующий метод мог использоваться с толщиной интерфейса по крайней мере равной 0,25 мм, если относительная ошибка по поверхностному натяжению была меньше 1%. Метод второго градиента требовал бы сеточного шага, приблизительно в 10 раз меньшего, чем использованный в [6] с наиболее подробным разрешением, который препятствовал бы локальному сеточному сгущению.

Подводя итог сказанному выше о методе второго градиента, можно обобщить, что толщина межфазной границы, так же как и поверхностное натяжение, являются функциями потока масс и температурного градиента через интерфейс. Вариации этих величин растут с толщиной интерфейса, что означает, что ограничения тепло- и массообмена через интерфейс могут быть промоделированы с помощью этого метода.

Вопреки этим ограничениям данный метод может успешно использоваться как в одном, так и в двух измерениях. Основные его преимущества состоят в том, что он имеет ясное и сильное теоретическое объяснение и что топологические изменения и перемещение контактных линий обрабатываются очень легко. Кроме того, переход от двух измерений к трем непосредственно сравнен с другими методами.

Однако еще следует провести работу, чтобы удостовериться, что этот метод может применяться в широком диапазоне приложений. Кроме того, будут требовать ответа другие более фундаментальные вопросы, такие как влияние расширения интерфейса на движение линии контакта и зависимость результатов от численной разрешающей способности и толщины интерфейса.

2.2. Основные особенности front-tracking-метода

Метод основан на конечно-разностной аппроксимации уравнений Навье—Стокса и уравнения энергии на неподвижной структурированной сетке и явном прослеживании фазовой границы на подвижной неструктурированной сетке.

Используется один набор уравнений переноса, справедливый как в жидкости, так и в паре. Такая формулировка учитывает влияние поверхности раздела через термины «источника», которые действуют только на границе раздела фаз.

Сначала определяются свойства материалов во всей области. Для этого вводится индикаторная функция $I(x, t)$, величина которой равна 1 в паре и 0 в жидкости. Свойства материалов считаются постоянными, но не рав-

ными для каждой фазы. Значение свойств материалов b (плотности ρ , удельного объема $\hat{v} = 1/\nu$, вязкости μ , удельной теплоемкости c и теплопроводности k) определяются с использованием индикаторной функций согласно выражению

$$b(x, t) = b_L + (b_G - b_L)I(x, t), \quad (2.41)$$

где G и L относятся к пару и жидкости соответственно.

Для нахождения индикаторной функции решается уравнение Пуассона с правой частью в виде функции, зависящей от положения интерфейса в момент времени t .

$$\nabla^2 I = \nabla \int_{\Gamma(t)} n \delta(x - x_s) ds, \quad (2.42)$$

где n — единичная нормаль к интерфейсу, направленная в паровую фазу; $x_s = x(s, t)$ — параметрическое задание интерфейсной границы $\Gamma(t)$; $\delta(x - x_s)$ — трехмерная дельта-функция, отличная от нуля только на интерфейсе.

Перенос интерфейсной границы лагранжевым способом определяется путем интегрирования выражения

$$\frac{dx_s}{dt} n = V_n, \quad (2.43)$$

где $V_n = Vn$, V — вектор скорости интерфейса.

Только нормальная компонента интерфейсного движения определена физически. Касательное движение отсутствует, и предполагается, что интерфейс и жидкость на интерфейсе имеют одинаковые тангенциальные компоненты скорости.

Уравнение неразрывности (консервативность массы) имеет вид

$$\nabla w = \int_{\Gamma(t)} (\rho_G - \rho_L) V_n \delta(x - x) ds, \quad (2.44)$$

где $w = \rho u$ — поток массы.

Уравнение движения записывается во всей области, и силы поверхностного натяжения учтены в нем только на интерфейсе:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla(wu) = -\nabla P - \rho g + \nabla \tau + \int_{\Gamma(t)} \gamma \kappa n \delta(x - x_s) ds, \quad (2.45)$$

где P — давление; g — вектор силы тяжести; γ — коэффициент поверхностного натяжения; K — дважды осредненная интерфейсная кривизна, которая положительна, когда центр кривой лежит в паровой фазе; τ — тензор deviatory напряжений для ньютоновской жидкости $\tau = \mu(\nabla u + \nabla u^T)$.

Интеграл в (2.45) учитывает поверхностное натяжение на интерфейсе. Предполагается, что коэффициент поверхностного натяжения постоянен, и его тангенциальные вариации на интерфейсе игнорируются.

Уравнение энергии с источником для учета высвобождения или накопления скрытой теплоты имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) + \nabla(wc T) = -\nabla q + \tau : \nabla u - \int_{\Gamma(t)} \dot{m} [L + (c_L - c_G)T_{sat}] \delta(x - x_s) ds, \quad (2.46)$$

где $q = -k\nabla T$ во всей области; второе слагаемое в правой части уравнения (вязкие диссипации) в расчетах не использовалось; T — температура; L — скрытая теплота, измеренная при температуре равновесного насыщения $T_{sat}(P_\infty)$; \dot{m} — интерфейсный поток массы, определяемый согласно выражению

$$\dot{m} = \rho_L(u_L - V)n = \rho_G(u_G - V)n. \quad (2.47)$$

Интегрирование (2.44), (2.45) и (2.46) дает соотношения:

$$P_G - P_L = -\dot{m}^2 \left(\frac{1}{\rho_G} - \frac{1}{\rho_L} \right) + (\tau_G n)n - (\tau_L n)n + \gamma \kappa, \quad (2.48)$$

$$(\tau_G n)t = (\tau_L n)t, \quad (2.49)$$

$$(q_G - q_L)n = -\dot{m} [L + (c_G - c_L)(T_s - T_{sat})] - \frac{\dot{m}^3}{2} \left(\frac{1}{\rho_G^2} - \frac{1}{\rho_L^2} \right) + \dot{m} \left(\frac{(\tau_G n)n}{\rho_G} - \frac{(\tau_L n)n}{\rho_L} \right) \quad (2.50)$$

для нормального и тангенциального движения и энергии.

Для выбора граничных условий для температуры на интерфейсе существуют разные подходы. Например, в [10] для системы уравнений (2.41)—(2.46) предлагается использовать соотношение вида

$$T_s - T_{\text{sat}} - \frac{T_{\text{sat}}}{L} \left(\frac{1}{\rho_G} - \frac{1}{\rho_L} \right) (P_s - P_\infty) + \quad (2.51)$$

$$\frac{(c_G - c_L)}{L} (T_s - T_{\text{sat}})^2 - \frac{\gamma T_{\text{sat}} K}{2L} \left(\frac{1}{\rho_G} + \frac{1}{\rho_L} \right) + \frac{\dot{m}}{\phi} = 0.$$

Здесь ϕ — кинетическая мобильность, описывающая отношение силы молекулярного прикрепления к поверхности (сопротивление массопереносу через интерфейс), определяемая выражением

$$\phi = \frac{2\alpha}{(2 - \alpha)} \frac{L}{\sqrt{2\pi R T_{\text{sat}}}} \frac{1}{(\hat{v}_G - \hat{v}_L) T_{\text{sat}}}, \quad (2.52)$$

где R — газовая постоянная; α — доля молекул, которые покинули интерфейс в ходе испарения.

Измерения этой величины очень сложны и примерный диапазон ее изменения от 0,04 до 1 зависит от жидкости. В [10] использованы параметры $\alpha = 1$ и $\dot{m} = -q_w / L$.

Последнее выражение справедливо для ситуации объемного пленочного кипения, где поток тепла q_w , приложенный к стенке, равен потоку в пар q_G , а поток в жидкость мал.

Диапазон изменения q_w / L — от 0,1 для минимального пленочного кипения до 3 при очень высоком пленочном кипении. В [10] q_w / L выбрано равным 1.

Интерфейсная граница представляет собой отдельные нестационарные вычислительные точки, связанные формой одномерного фронта, который лежит в пределах двумерной стационарной сетки.

Кривизна в каждой интерфейсной точке находится с помощью полинома четвертого порядка, построенного по трем точкам (1 плюс два соседа по бокам).

Фронт переносится по нормали к себе в лагранжевом представлении с помощью дискретной формы записи выражения (2.43)

$$(x_s^{n+1} - x_s^n) n^{n+1} = \Delta t V_n, \quad (2.53)$$

Движение фронта используется для переноса разрывных свойств материалов (2.41) путем решения уравнения Пуассона (2.42) для индикатор-

ной функции $I(x, t)$ на x_s^{n+1} , где x_s — параметрическая форма задания интерфейсной границы $\Gamma(t)$.

При моделировании происходит сильная деформация интерфейса, поэтому необходимо добавлять и удалять интерфейсные точки в ходе вычислений, чтобы дистанция между соседними точками r была порядка стационарного сеточного пространства. В работе используется условие $0,4 < 2r / (h_x + h_y) < 1,6$, где h_x и h_y — горизонтальный и вертикальный размеры ячейки сетки.

Условием слияния поверхностей раздела является сближение двух точек на расстояние менее размера ячейки сетки.

На каждом временном шаге должна осуществляться передача информации между подвижным лагранжевым интерфейсом и стационарной эйлеровой сеткой. В работе для этого используется метод поглощения границ Пескина, согласно которому бесконечно тонкий интерфейс приближается гладкой функцией распределения, которая используется для распределения источников на интерфейсе через сеточные узлы вблизи интерфейса.

В [10] фронту задается постоянная толщина порядка размера ячейки сетки, чтобы обеспечить стабильность и гладкость.

Переписав интегралы из (2.42), (2.44)—(2.46) в виде

$$\Phi = \int_{\Gamma(t)} \varphi \delta(x - x_s) ds, \quad (2.54)$$

дискретные интерфейсные источники φ_p можно распределить по сетке, и дискретные переменные поля R_{ij} (подразумевается w, p или T) могут быть интерполированы к поверхности раздела путем суммирования:

$$\Phi_{ij} = \sum_p \varphi_p D_{ij}(x_p) \Delta_l, \quad (2.55)$$

$$R_p = \sum_{ij} h_x h_y R_{ij} D_{ij}(x_p), \quad (2.56)$$

где Δ_l — среднее число сегментов, соединяющих точку p с левым и правым соседями.

(2.55) есть дискретная форма (2.54), где функция Дирака аппроксимирована функцией распределения D_{ij} .

Для $x_p = (x_p, y_p)$ используется функция распределения в виде

$$D_{ij}(x_p) = \frac{d(x_p/h_x - i)d(y_p/h_y - j)}{h_x h_y}, \quad (2.57)$$

$$\text{где } d(r) = \begin{cases} d_1(r) & \text{при } |r| \leq 1, \\ 1/2 - d_1(2 - |r|) & \text{при } 1 < |r| < 2, \\ 0 & \text{при } |r| \geq 2; \end{cases}$$

$$d_1(r) = \frac{3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2}}{8}.$$

Для вычисления свойств материалов находится индикаторная функция с помощью быстрого солвера для решения уравнения Пуассона:

$$\nabla_h^2 I^{n+1} = \nabla_h G^{n+1}, \quad (2.58)$$

где G — поверхностный интеграл из (2.42), вычисленный с помощью (2.55).

Вычисленная таким образом индикаторная функция постоянна в пределах каждой материальной области, но имеется конечной толщины зона перемещения вокруг поверхности раздела. В этой зоне индикаторная функция и материальные свойства изменяются гладко от значения на одной стороне поверхности раздела до значения на другой стороне. Толщина переходной зоны — только функция размера ячейки и постоянна в течение вычислений.

Затем вычисляются переменные u , P и T методом проекции фазовых превращений.

Для интегрирования по времени на эйлеровой сетке используются первого порядка прямые направленные разности. Дискретные формы (2) и (5) в этом случае имеют вид

$$\nabla_h w^{n+1} = M^{n+1}, \quad (2.59)$$

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = A^n + F^{n+1} - \nabla_h P, \quad (2.60)$$

где адвекция, диффузия и гравитация из (2.45) сосредоточены в A , поверхностные интегралы из (2.44) и (2.45) обозначены M и F соответственно.

Уравнение движения расщепляется следующим образом:

$$\frac{\tilde{w} - w^n}{\Delta t} = A^n + F^{n+1}, \quad (2.61)$$

$$\frac{w^{n+1} - \tilde{w}^n}{\Delta t} = -\nabla_h P, \quad (2.62)$$

где \tilde{w} — новый поток жидкой массы, если влияние давления игнорируется. На первом шаге находится этот поток массы с использованием (2.61):

$$\tilde{w} = w^n + \Delta t (A^n + F^{n+1}). \quad (2.63)$$

Затем находится давление путем взятия дивергенции от (2.62) с использованием (2.59), что дает уравнение Пуассона для давления

$$\nabla_h^2 P = \frac{\nabla_h \tilde{w} - M^{n+1}}{\Delta t}, \quad (2.64)$$

которое решается быстрым солвером для решения уравнения Пуассона.

Затем находится обновленный поток массы с использованием (2.62):

$$w^{n+1} = \tilde{w} - \Delta t \nabla P. \quad (2.65)$$

Тогда обновленная скорость $u^{n+1} = w^{n+1} / \rho^{n+1}$.

Когда становится известна скорость, решение дискретного уравнения энергии (2.46) дает поле температур:

$$T^{n+1} = \frac{\rho^n c^n T^n + \Delta t (B^n + Q^{n+1})}{\rho^{n+1} c^{n+1}}, \quad (2.66)$$

где адвекция и диффузия включены в B , а интеграл по поверхности обозначен через Q .

Интегрирование по времени осуществляется явно, но источники G , M и Q , оценены в (2.55) неявно на новом моменте времени $n + 1$.

Для пространственной дискретизации используется разнесенная сетка. Давление, температура и индикаторная функция расположены в центрах ячеек, x -я компонента скорости — на вертикальных гранях ячеек, y -е компоненты скорости — на горизонтальных гранях ячеек. Пространственные производные аппроксимированы со вторым порядком центральными разностями.

Вычисление напряжений, входящих в слагаемое A , требует специального подхода из-за конечной численной толщины переходной зоны около поверхности раздела. Вследствие фазовых превращений дивергенция поля

скоростей отлична от нуля в конечной зоне вокруг интерфейсной границы, и это в искусственных нормальных вязких напряжениях может вызывать локальные пики давления. Чтобы избежать этой трудности, в работе вычитают напряжения из-за этой ненулевой дивергенции из вязких напряжений. Таким образом, A имеет вид

$$A = -\nabla_h(wu) + \rho g + \nabla_h \mu \left[\nabla_h u + \nabla_h u^T - 2(\nabla_h u)I \right], \quad (2.67)$$

где I — единичный тензор. Если бы учитывались и вязкие диссипации, аналогичная коррекция была бы необходима и для них.

Учитывая начальную форму поверхности раздела фаз, индикаторную функцию и материальные свойства вычисляют из (2.58) и (2.41).

С соответствующими начальными условиями для скорости и температуры алгоритм решения продолжается итерационно и включает следующие шаги:

1. V^n рассчитывается из (2.66). A^n вычисляется для (2.60) с использованием (2.67).
2. Используя оценку нормальной скорости поверхности раздела V_n , поверхность раздела переносят к новому положению посредством (2.53).
3. В этом новом положении поверхности раздела источники G^{n+1} , M^{n+1} , F^{n+1} и Q^{n+1} вычисляются с использованием (2.55).
4. Плотность ρ^{n+1} и удельная теплота c^{n+1} в новом положении поверхности раздела находятся из решения (2.58) и (2.41).
5. С соответствующими граничными условиями на стенке и A^n и B^n , вычисленными на шаге 1, выражения (2.59), (2.60) и (2.66) решаются для скорости, давления и температуры на момент времени $n+1$ с использованием метода проекции фазовых изменений, описанного выше.
6. Вычисляется условие для температуры на поверхности раздела (2.51): температура, давление и поток массы на момент времени $n+1$ интерполируются посредством (16), чтобы найти температуру T_s , давление P_s и интерфейсный поток массы \dot{m} в каждой точке на поверхности раздела, найденной на шаге 2.
7. Если условие для температуры поверхности раздела выполнено, тогда вязкость и теплопроводность обновляются к новому положению поверхности раздела, найденному на шаге 2, посредством (2.58) и (2.41), и вычисление продолжается для следующего шага по времени. Если нет, то новая оценка для обновленной нормальной скорости V_n находится в каж-

дой точке поверхности раздела с использованием (2.68) (см.ниже), и процедура возвращается к шагу 2.

В матричной форме итерация Ньютона обновляет неизвестные скорости в каждой точке с помощью уравнения

$$V_n^{l+1} = V_n^l - [J]^{-1} E^l(V_n^l), \quad (2.68)$$

где l — индекс итерации; V_n и E — векторы-столбцы размерности $(N \times 1)$ нормальных интерфейсных скоростей и ошибок в каждой точке; N — число точек на интерфейсе.

Якобиан J является матрицей размера $(N \times N)$ частных производных ошибки относительно скоростей.

Так как эти производные трудно вычисляются, а следовательно, и последующая матричная инверсия в вычислительном отношении является слишком дорогой, авторы используют якобиан, имеющий простую форму,

$$J = a^{-1}I, \quad (2.69)$$

где I — единичная матрица; a — константа. Эта константа определяет скорость сходимости итераций.

При оптимальном значении a , которое является различным для разных физических параметров, итерации сходятся довольно быстро при допуске $\epsilon = 10^{-5}$ от 3 до 10 итераций.

Допуск рассчитывается по формуле

$$\epsilon = \max \left(\epsilon, \left| V_{n_p}^{l+1} - V_{n_p}^l \right| \right), \quad p=1, N. \quad (2.70)$$

Оптимальные значения для параметра a были определены в [10] из вычислительных экспериментов и принадлежат к диапазону от 1 до 10.

3. Метод дискретных уравнений для двумерного вычисления двухфазных сжимаемых смесей

В настоящее время имеются различные численные схемы решения гиперболических систем уравнений для двухфазной смеси.

Простой второго порядка точности и полностью эйлеров численный метод был развит Saurel и Abgrall [45] для моделирования многожидкостных сжимаемых течений, описываемый уравнениями состояния stiffened gas. Этот метод опирается на схему второго порядка типа Годунова с прибли-

женным римановским солвером для решения уравнений сохранения и набора неконсервативных уравнений. В этом подходе поверхность раздела рассматривается как зона численной диффузии, и контактные разрывы вычислены в сжимаемых однофазных потоках, но переменные, описывающие зону смеси, рассчитаны последовательно с плотностью, импульсом и энергией при использовании уравнений для эволюции параметров уравнения состояния. Такой метод можно распространить на многомерный случай с использованием процедуры расщепления.

Следующее поколение численной модели и метода решения сжимаемых двухфазных потоков было представлено в [17] и далее развито Andrianov, Saurel и Warnicke [46]. Модель включает шесть уравнений, полученных из принципов сохранения, применимых к каждой фазе, и замыкается седьмым уравнением для эволюции объемной фракции. Решается та же система в каждом узле сетки с тем же алгоритмом с использованием схемы типа Годунова и приближенного римановского солвера. Это позволяет моделировать поверхность раздела между чистыми жидкостями так же, как и между двухфазными смесями.

В [19] был предложен класс схем, способных сходиться к правильному решению, даже когда ударные волны взаимодействуют с разрывами объемной фракции. Такой анализ обеспечивает более точную оценку терминов замыкания и точный метод решения для консервативных потоков, также как и неконсервативных слагаемых даже в ситуациях с разрывными решениями. Определены также параметры релаксации, так что результирующая модель свободна от входных параметров.

Ниже мы представляем метод дискретных уравнений (DEM) [19] для вычисления двухфазных сжимаемых течений с использованием точного римановского солвера. Численная схема второго порядка точности была получена с использованием расширения обычного подхода MUSCL (Monotonic Upstream Schemes for Conservative Laws). Представлен обычный набор 2D численных испытаний, среди которых: двухфазная ударная волна в трубе с разрывом касательной скорости, адвекция квадратного газового пузыря в однородном жидком потоке, взаимодействия ударной волны с разрывами плотности.

Алгоритм следует за основными идеями [19], изначально предложенными для одномерных вычислений. Чтобы распространить этот подход на многомерный случай, были использованы процедура расщепления и принцип однородного (равномерного) давления и сохранения скорости [47]. Чтобы проиллюстрировать метод, были выбраны только самые простые компоненты консервативной схемы первого порядка типа Годунова. В следующем разделе это обобщено к схеме второго порядка точности. Уравнения, решаемые относительно каждой жидкости и поверхности раздела, — это эйлеровы уравнения, написанные в консервативной форме:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0, \quad (3.1)$$

где

$$U = (1, \rho, \rho u, \rho \vartheta, \rho E)^T,$$

$$F(U) = (0, \rho u, \rho u^2 + P, \rho u \vartheta, (\rho E + P)u)^T,$$

$$G(U) = (0, \rho \vartheta, \rho \vartheta u, \rho \vartheta^2 + P, (\rho E + P)\vartheta)^T.$$

Полная энергия определена соотношением:

$$E = e + 0,5 \times (u^2 + \vartheta^2),$$

где $e = e(\rho, P)$ — внутренняя энергия.

В (3.1) первая идентичность $\frac{\partial 1}{\partial t} + \frac{\partial 0}{\partial x} + \frac{\partial 0}{\partial y} = 0$ использована для представления уравнения характеристической функции. Характеристическая функция X_α фазы α ($X_\alpha(t, x, y) = 1$, если (x, y) принадлежит жидкости α в момент времени t , и 0 — в других случаях) удовлетворяет двумерному эволюционному уравнению

$$\frac{\partial X_\alpha}{\partial t} + \sigma_x \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial X_\alpha}{\partial y} = 0, \quad (3.2)$$

где σ_x и σ_y — компоненты скорости локальной поверхности раздела [48]. Умножая систему (3.1) на функцию X_α , получим, используя (3.2),

$$\frac{\partial X_\alpha U_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial X_\alpha F_\alpha}{\partial x} + \frac{\partial X_\alpha G_\alpha}{\partial y} = (F_\alpha - \sigma_x U_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} + (G_\alpha - \sigma_y U_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial y}. \quad (3.3)$$

Чтобы решить (3.3), может быть использована пространственная процедура расщепления. Для X -направления должна быть решена система

$$\begin{cases} \frac{\partial X_\alpha}{\partial t} + \sigma_x \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial X_\alpha W_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial X_\alpha F_\alpha}{\partial x} = (F_\alpha - \sigma_x W_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial x}, \end{cases} \quad (3.4)$$

где $W_\alpha = (\rho_\alpha, \rho_\alpha u_\alpha, \rho_\alpha \vartheta_\alpha, \rho_\alpha E_\alpha)^T$,
 $F_\alpha(W_\alpha) = (\rho_\alpha u_\alpha, \rho_\alpha u_\alpha^2 + P_\alpha, \rho_\alpha u_\alpha \vartheta_\alpha, (\rho_\alpha E_\alpha + P_\alpha) u_\alpha)^T$.

Аналогично для Y -направления должна быть решена система

$$\begin{cases} \frac{\partial X_\alpha}{\partial t} + \sigma_y \frac{\partial X_\alpha}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial X_\alpha W_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial X_\alpha G_\alpha}{\partial y} = (G_\alpha - \sigma_y W_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial y}, \end{cases} \quad (3.5)$$

где $G_\alpha(W_\alpha) = (\rho_\alpha \vartheta_\alpha, \rho_\alpha \vartheta_\alpha u_\alpha, \rho_\alpha \vartheta_\alpha^2 + P_\alpha, (\rho_\alpha E_\alpha + P_\alpha) \vartheta_\alpha)^T$.

Решение системы (3.4) используется в качестве входных параметров для уравнений (3.5) или наоборот. Для получения усреднения (3.4) и (3.5) осуществлено интегрирование по пространству и времени [49]. Для (3.4) получены следующие численные уравнения:

$$\begin{cases} \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n}{\Delta t} + \varepsilon \left(\sigma_x \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} \right)_{i,j} = 0, \\ \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} (W_\alpha)_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n (W_\alpha)_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{\varepsilon (X_\alpha F_\alpha)_{i+1/2,j} - \varepsilon (X_\alpha F_\alpha)_{i-1/2,j}}{\Delta x_i} = \\ = \varepsilon \left((F_\alpha - \sigma_x W_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} \right)_{i,j}, \end{cases} \quad (3.6)$$

где ε — процедуры осреднения, которые коммутируют с временной и пространственной производными; $\alpha_{i,j} = \varepsilon(X_\alpha)_{i,j}$ — объемная фракция для фазы α ;

$$(W_\alpha)_{i,j} = \left((\bar{\rho}_\alpha)_{i,j}, (\bar{\rho}_\alpha \bar{u}_\alpha)_{i,j}, (\bar{\rho}_\alpha \bar{\vartheta}_\alpha)_{i,j}, (\bar{\rho}_\alpha \bar{E}_\alpha)_{i,j} \right)^T;$$

$$(\bar{\rho}_\alpha)_{i,j} = \frac{\varepsilon(X_\alpha \rho_\alpha)_{i,j}}{\alpha_{i,j}};$$

$$(\bar{u}_\alpha)_{i,j} = \frac{\varepsilon(X_\alpha \rho_\alpha u_\alpha)_{i,j}}{\alpha_{i,j} (\rho_\alpha)_{i,j}};$$

$$(\bar{\vartheta}_\alpha)_{i,j} = \frac{\varepsilon (X_\alpha \rho_\alpha \vartheta_\alpha)_{i,j}}{\alpha_{i,j} (\rho_\alpha)_{i,j}};$$

$$(\bar{E}_\alpha)_{i,j} = \frac{\varepsilon (X_\alpha \rho_\alpha E_\alpha)_{i,j}}{\alpha_{i,j} (\rho_\alpha)_{i,j}}.$$

Средняя величина конвективного потока в (3.6) аппроксимируется [19]:

$$\begin{aligned} \varepsilon (X_\alpha F_\alpha)_{i+1/2,j} = & \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i+1,j}, 0) \times F_{RIM} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j} \right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ & + \min(\alpha_{i,j}, \alpha_{i+1,j}) \times F_{RIM} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\alpha)_{i+1,j} \right) + \\ & + \max(\alpha_{i+1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times F_{RIM} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i+1,j} \right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^-, \end{aligned} \quad (3.7)$$

где $(W_\gamma)_{i,j} = \left((\bar{\rho}_\gamma)_{i,j}, (\bar{\rho}_\gamma \bar{u}_\gamma)_{i,j}, (\bar{\rho}_\gamma \bar{\vartheta}_\gamma)_{i,j}, (\bar{\rho}_\gamma \bar{E}_\gamma)_{i,j} \right)^T$ — величина осредненных параметров для второй фазы; $F_{RIM} \left((W_L)_{i,j}, (W_R)_{i+1,j} \right)$ — конвективный поток на границе ячейки $(i+1/2, j)$ вычисленный с использованием точного римановского солвера [50] с параметрами начального левого состояния W_L и начального правого состояния W_R ;

$$(\beta_{i+1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^+ = \begin{cases} 1 & \text{если } \sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1} \right) \geq 0, \\ 0, & \text{если } \sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1} \right) < 0; \end{cases}$$

$$(\beta_{i+1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^- = \begin{cases} 0 & \text{если } \sigma \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j+1} \right) \geq 0, \\ 1 & \text{если } \sigma \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j+1} \right) < 0. \end{cases}$$

Усредненная величина лагранжева потока в (3.6) аппроксимируется так:

$$\varepsilon \left((F_\alpha - \sigma_x W_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} \right)_{i,j} =$$

$$\left(\begin{aligned} & -\max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i+1,j}, 0) \times F^{lag} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j} \right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^- + \\ & + \max(\alpha_{i+1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times F^{lag} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i+1,j} \right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^- - \\ & - \max(\alpha_{i-1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times F^{lag} \left((W_\alpha)_{i-1,j}, (W_\gamma)_{i,j} \right) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ & + \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i-1,j}, 0) \times F^{lag} \left((W_\gamma)_{i-1,j}, (W_\alpha)_{i,j} \right) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^+ + \\ & + \Lambda_{i,j} \times \left(F^{lag} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j} \right) - F^{lag} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j} \right) \right) \end{aligned} \right), \quad (3.8)$$

где $\Lambda_{i,j}^x = \frac{\varepsilon(N_{int})_{i,j}}{\Delta x_i}$ — усредненное число внутренних поверхностей раздела вдоль направления y в ячейке (i, j) ;

$$\begin{aligned} F^{lag} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j} \right) &= F_\alpha \left((W_\alpha)^* \right) - \sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j} \right) \times (W_\alpha)^* = \\ &= F_\gamma \left((W_\gamma)^* \right) - \sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j} \right) \times (W_\gamma)^* \end{aligned} \quad (3.9)$$

— лагранжев поток для данной реализации топологии смеси.

Величина лагранжева потока в (3.9) вычислена на поверхности раздела фаз $(W_\alpha)^*$ или $(W_\gamma)^*$ с использованием точного римановского солвера.

Для численного решения уравнения адвекции из (3.6) может быть использовано следующее выражение [19]:

$$\frac{\alpha_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} \times \left[\begin{aligned} & -\max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i+1,j}, 0) \times \sigma\left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j}\right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^- + \\ & \max(\alpha_{i,j+1} - \alpha_{i,j}, 0) \times \sigma\left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i+1,j}\right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^- - \\ & \max(\alpha_{i-1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times \sigma\left((W_\alpha)_{i-1,j}, (W_\gamma)_{i,j}\right) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ & \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i-1,j}, 0) \times \sigma\left((W_\gamma)_{i-1,j}, (W_\alpha)_{i,j}\right) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^+ \end{aligned} \right] + \Lambda_{i,j}^x \times \left(\sigma\left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j}\right) - \sigma\left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j}\right) \right) = 0. \quad (3.10)$$

Усредненное значение лагранжева потока из (3.8) может быть записано как сумма вкладов от внешней и внутренней поверхностей раздела фаз:

$$\varepsilon \left((F_\alpha - \sigma_x W_\alpha) \frac{\partial X_\alpha}{\partial x} \right)_{i,j} = \varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{bound}} + \varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{relax}}, \quad (3.11)$$

где

$$\varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{relax}} = \Lambda_{i,j}^x \times \left(\begin{aligned} & F^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j} \right) - \\ & - F^{\text{lag}} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j} \right) \end{aligned} \right); \quad (3.12)$$

$$\varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{bound}} = \left(\begin{aligned} & -\max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i+1,j}, 0) \times F^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j} \right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^- + \\ & + \max(\alpha_{i+1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times F^{\text{lag}} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i+1,j} \right) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^- - \\ & - \max(\alpha_{i-1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times F^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i-1,j}, (W_\gamma)_{i,j} \right) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ & + \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i-1,j}, 0) \times F^{\text{lag}} \left((W_\gamma)_{i-1,j}, (W_\alpha)_{i,j} \right) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^+ \end{aligned} \right). \quad (3.13)$$

Аналогично могут быть расщеплены вклады от внешних и внутренних поверхностей раздела фаз в уравнении адвекции. Таким образом, численное решение системы (3.6) запишется следующим образом:

первый шаг:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n}{\Delta t} + \\ + \frac{1}{\Delta x_i} \times \left[\begin{array}{l} -\max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i+1,j}, 0) \times \sigma((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i+1,j}) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^- + \\ + \max(\alpha_{i,j+1} - \alpha_{i,j}, 0) \times \sigma((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i+1,j}) \times (\beta_{i+1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^- - \\ - \max(\alpha_{i-1,j} - \alpha_{i,j}, 0) \times \sigma((W_\alpha)_{i-1,j}, (W_\gamma)_{i,j}) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ + \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i-1,j}, 0) \times \sigma((W_\gamma)_{i-1,j}, (W_\alpha)_{i,j}) \times (\beta_{i-1/2,j}^{(\gamma,\alpha)})^+ \end{array} \right] \\ \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} (W_\alpha)_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n (W_\alpha)_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{\varepsilon (X_\alpha F_\alpha)_{i+1/2,j} - \varepsilon (X_\alpha F_\alpha)_{i-1/2,j}}{\Delta x_i} = \\ = \varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{bound}} ; \end{array} \right. = 0, \quad (3.14)$$

второй шаг:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} \times \Lambda_{i,j}^x \times \left(\sigma((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j}) - \sigma((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j}) \right) = 0, \\ \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} (W_\alpha)_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n (W_\alpha)_{i,j}^n}{\Delta t} = \varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{relax}}, \end{array} \right. \quad (3.15)$$

где $\varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{bound}}$ и $\varepsilon \left(F^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j}^{\text{relax}}$ определены в (3.13) и (3.12) соответственно.

Решение системы (3.5) получено подобным же образом:

первый шаг:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n}{\Delta t} + \\ & + \frac{1}{\Delta y_j} \times \left[\begin{aligned} & -\max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j+1}, 0) \times \sigma((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1}) \times (\beta_{i,j+1/2}^{(\alpha,\gamma)})^- + \\ & + \max(\alpha_{i,j+1} - \alpha_{i,j}, 0) \times \sigma((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j+1}) \times (\beta_{i,j+1/2}^{(\gamma,\alpha)})^- - \\ & - \max(\alpha_{i,j-1} - \alpha_{i,j}, 0) \times \sigma((W_\alpha)_{i,j-1}, (W_\gamma)_{i,j}) \times (\beta_{i,j-1/2}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ & + \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j-1}, 0) \times \sigma((W_\gamma)_{i,j-1}, (W_\alpha)_{i,j}) \times (\beta_{i,j-1/2}^{(\gamma,\alpha)})^+ \end{aligned} \right] = 0, \\ & \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} (W_\alpha)_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n (W_\alpha)_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{\varepsilon (X_\alpha G_\alpha)_{i,j+1/2} - \varepsilon (X_\alpha G_\alpha)_{i,j-1/2}}{\Delta y_j} = \\ & = \varepsilon \left(G^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial y} \right)_{i,j}^{\text{bound}}, \end{aligned} \right. \quad (3.16)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon (X_\alpha G_\alpha)_{i+1/2,j} &= \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j+1}, 0) \times G_{\text{RIM}}((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1}) \times (\beta_{i,j+1/2}^{(\alpha,\gamma)})^+ + \\ & + \min(\alpha_{i,j}, \alpha_{i,j+1}) \times G_{\text{RIM}}((W_\alpha)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j+1}) + \\ & + \max(\alpha_{i,j+1} - \alpha_{i,j}, 0) \times G_{\text{RIM}}((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j+1}) \times (\beta_{i,j+1/2}^{(\gamma,\alpha)})^-; \end{aligned} \quad (3.17)$$

$G_{\text{RIM}}((W_L)_{i,j}, (W_R)_{i,j+1})$ — конвективный поток на границе ячейки $(i, j + 1/2)$, вычисленный с использованием точного римановского солвера [50] с параметрами начального левого состояния W_L и начального правого состояния W_R ;

$$\varepsilon \left(G^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial y} \right)_{i,j}^{\text{bound}} = \left[\begin{array}{l} -\max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j+1}, 0) \times G^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1} \right) \times (\beta_{i,j+1/2}^{\alpha,\gamma})^- + \\ + \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j+1}, 0) \times G^{\text{lag}} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j+1} \right) \times (\beta_{i,j+1/2}^{\gamma,\alpha})^- - \\ - \max(\alpha_{i,j-1} - \alpha_{i,j}, 0) G^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i,j-1}, (W_\gamma)_{i,j} \right) (\beta_{i,j-1/2}^{\alpha,\gamma})^+ + \\ + \max(\alpha_{i,j} - \alpha_{i,j-1}, 0) G^{\text{lag}} \left((W_\gamma)_{i,j-1}, (W_\alpha)_{i,j} \right) (\beta_{i,j-1/2}^{\gamma,\alpha})^+ \end{array} \right]; \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} G^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1} \right) &= G_\alpha \left((W_\alpha)^* \right) - \sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1} \right) \times (W_\alpha)^* = \\ &= G_\gamma \left((W_\gamma)^* \right) - \sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j+1} \right) \times (W_\gamma)^* \end{aligned} \quad (3.19)$$

— лагранжев поток для заданной реализации топологии смеси; величина лагранжева потока в (2.19) вычисляется на границе раздела фаз $(W_\alpha)^*$ или $(W_\gamma)^*$ с использованием точного римановского солвера;
второй шаг:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n}{\Delta t} + \\ + \frac{1}{\Delta y_j} \times \Lambda_{i,j}^y \times \left(\sigma \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j} \right) - \sigma \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j} \right) \right) = 0, \quad (3.20) \\ \frac{\alpha_{i,j}^{n+1} (W_\alpha)_{i,j}^{n+1} - \alpha_{i,j}^n (W_\alpha)_{i,j}^n}{\Delta t} = \varepsilon \left(G^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial y} \right)_{i,j}^{\text{relax}}, \end{array} \right.$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon \left(G^{\text{lag}} \frac{\partial X}{\partial y} \right)_{i,j}^{\text{relax}} &= \\ &= \Lambda_{i,j}^y \times \left(G^{\text{lag}} \left((W_\alpha)_{i,j}, (W_\gamma)_{i,j} \right) - G^{\text{lag}} \left((W_\gamma)_{i,j}, (W_\alpha)_{i,j} \right) \right); \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\Lambda_{i,j}^y = \frac{\varepsilon(N_{\text{int}})_{i,j}}{\Delta y_j} \text{ — усредненное число внутренних поверхностей раздела}$$

вдоль x направления в ячейке (i, j) .

Для решения (3.15) и (3.20) в случае большого числа $\Lambda_{i,j}^x$ и $\Lambda_{i,j}^y$ могут быть введены численные процедуры релаксации скорости и давления [51].

Таким образом, численная аппроксимация системы (3.3) задается с использованием метода расщепления (3.14), (3.16) и замыкается процедурами релаксации скорости и давления.

Тонкий момент возник при решении уравнений Эйлера в двумерном случае с использованием процедуры расщепления, как описано в [45]. Основная идея состоит в том, что любой физический контактный разрыв должен остаться контактным разрывом. Или, более точно, в любом потоке, где давление и скорость однородны, они должны оставаться однородными в любое время. Это правило вносит дополнительное избыточное отношение, которое реализовано отдельно для вычисления эволюции касательной кинетической энергии и использует новые величины для вычисления давления. После каждого шага процедуры расщепления эти величины уменьшаются [45].

3.1. Продолжение второго порядка

Продолжение реализовано с помощью следующего MUSCL метода. Переменные потока характеризуются средней величиной U_i^n и наклоном δU_i^n .

Наклоны вычисляются в естественных переменных $W = (\alpha, \rho, u, \vartheta, P)^T$.

Естественные переменные на границе ячейки $i+1/2$ задаются так:

$$W_{i+1/2,L}^n = W_i^n + \frac{1}{2} \delta W_i^n, \quad W_{i+1/2,R}^n = W_{i+1}^n - \frac{1}{2} \delta W_{i+1}^n. \quad (3.22)$$

На шаге предиктора системы (3.14) и (3.16) решаются для временного шага $\frac{1}{2} \Delta t$ с использованием (3.22) для вычисления потоковых величин в (3.7), (3.8), (3.17) и (3.18). Шаг предиктора MUSCL-процедуры заканчивается вычислением переменных границы ячейки на время $t_{n+1/2}$:

$$W_{i+1/2,L}^{n+1/2} = W_i^{n+1/2} + \frac{1}{2} \delta W_i^{n+1/2}, \quad W_{i+1/2,R}^{n+1/2} = W_{i+1}^{n+1/2} - \frac{1}{2} \delta W_{i+1}^{n+1/2}. \quad (3.23)$$

На шаге корректора системы (3.14) и (3.16) решены для временного шага Δt с использованием (3.23) для вычисления потоковых величин в (3.7), (3.8), (3.17) и (3.18).

3.2. Результаты применения метода дискретных уравнений

В вычислениях принимается, что материалы описываются уравнениями состояния stiffened gasа:

$$P = (\gamma - 1)\rho e - \gamma\pi,$$

где P — давление; ρ — плотность; e — внутренняя энергия; константы γ и π — параметры характеристик материала.

3.2.1. Двухфазная ударная труба

Труба заполнена в левой части жидкостью при высоком давлении и в правой половине газом при низком давлении. Начальные данные таковы:

Левая часть	Правая часть
$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$	$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$
$P_l = 10^9 \text{ Па}$	$P_l = 10^5 \text{ Па}$
$u_l = 0 \text{ м/с}$	$u_l = 0 \text{ м/с}$
$\vartheta_l = 1000 \text{ м/с}$	$\vartheta_l = -5000 \text{ м/с}$
$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$
$\pi_l = 6 \times 10^8 \text{ Па}$	$\pi_l = 6 \times 10^8 \text{ Па}$
$\rho_g = 50 \text{ кг/м}^3$	$\rho_g = 50 \text{ кг/м}^3$
$P_g = 10^9 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$
$u_g = 0 \text{ м/с}$	$u_g = 0 \text{ м/с}$
$\vartheta_g = 1000 \text{ м/с}$	$\vartheta_g = -5000 \text{ м/с}$
$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$
$\pi_g = 0 \text{ Па}$	$\pi_g = 0 \text{ Па}$
$\alpha_g = 10^{-6}$	$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$

Начальный разрыв расположен на $x=0,7$ м, и результаты представлены на $t=240$ мкс для методов первого и второго порядка. Одномерные вычисления были получены x -расщеплением 2D-системы (3.14), (3.16). Касательное уравнение импульса было решено. Изначально предполагалось условие разрывной касательной скорости. В левой камере задана положительная скорость скольжения 1000 м/с, в правой камере — отрицательная несимметричная скорость скольжения -5000 м/с. При этих условиях, если касательная кинетическая энергия вычислена из касательной компоненты скорости, метод быстро терпит неудачу.

Поэтому касательная кинетическая энергия должна быть вычислена из дополнительного избыточного отношения из-за однородного давления и принципа сохранения скорости.

Профили газовой объемной фракции, давления, нормальной и касательной скоростей показаны на рис. 3.1.

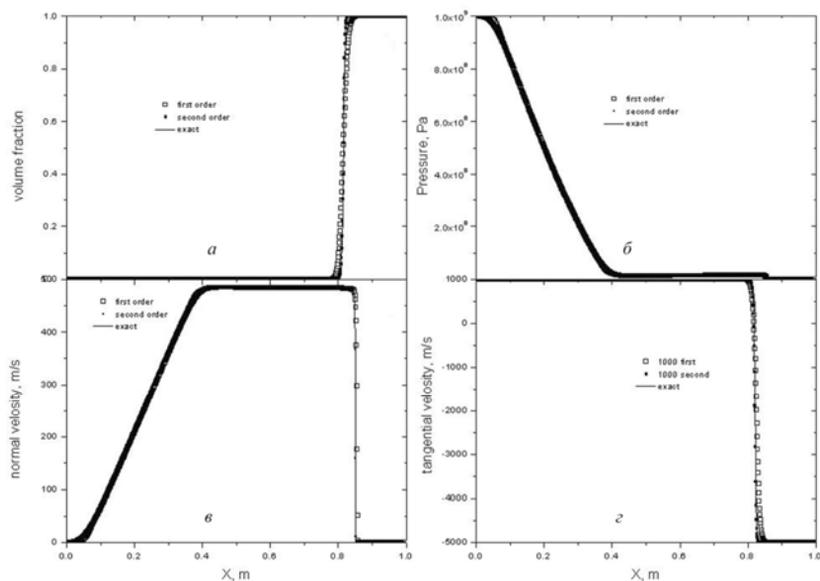


Рис. 3.1. Сравнение точного решения (тонкие линии) и численных результатов объемной фракции (а), давления (б), нормальной (в) и касательной (г) скоростей для схемы первого и второго порядка

Численное решение для метода первого порядка изображено в открытых квадратах и для методов второго порядка — в сплошных твердых квадра-

тах, точное решение изображено тонкими линиями. Здесь сетка содержит 1000 ячеек, равномерно распределенных, чтобы показать сеточную сходимость. Заметим, что этот метод позволяет вычислять разрывы, перемещающиеся вправо.

3.2.2. Ударная труба с тремя зонами

В этом подразделе рассматривается поведение метода при 1D-взаимодействии сильного разрежения с поверхностью раздела газ — жидкость.

Труба содержит три зоны со следующими начальными данными:

Зона с жидкой водой при атмосферных условиях	Зона с воздухом при атмосферном давлении	Зона с воздухом при низком давлении
$0 < X < 0,6$ м	$0,6 < X < 0,8$ м	$0,8 < X < 1$ м
$\rho_l = 1000$ кг/м ³	$\rho_l = 1000$ кг/м ³	$\rho_l = 1000$ кг/м ³
$P_l = 10^5$ Па	$P_l = 10^5$ Па	$P_l = 10^3$ Па
$u_l = 0$ м/с	$u_l = 0$ м/с	$u_l = 0$ м/с
$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$
$\pi_l = 6 \times 10^6$ Па	$\pi_l = 6 \times 10^6$ Па	$\pi_l = 6 \times 10^6$ Па
$\rho_g = 50$ кг/м ³	$\rho_g = 50$ кг/м ³	$\rho_g = 0,1$ кг/м ³
$P_g = 10^5$ Па	$P_g = 10^5$ Па	$P_g = 10^3$ Па
$u_g = 0$ м/с	$u_g = 0$ м/с	$u_g = 0$ м/с
$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$
$\pi_g = 0$ Па	$\pi_g = 0$ Па	$\pi_g = 0$ Па
$\alpha_g = 10^{-6}$	$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$	$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$

Эта конфигурация кончается слабой ударной волной, распространяющейся направо при малой плотности воздуха, и волне разреженности, распространяющейся налево и взаимодействующей с поверхностью раздела газ — жидкость. Вычисления были сделаны для метода второго порядка точности на сетке 100 ячеек. Соответствующие результаты показаны на рис. 3.2. Никакие осцилляции плотности не приводят к отрицательному давлению.

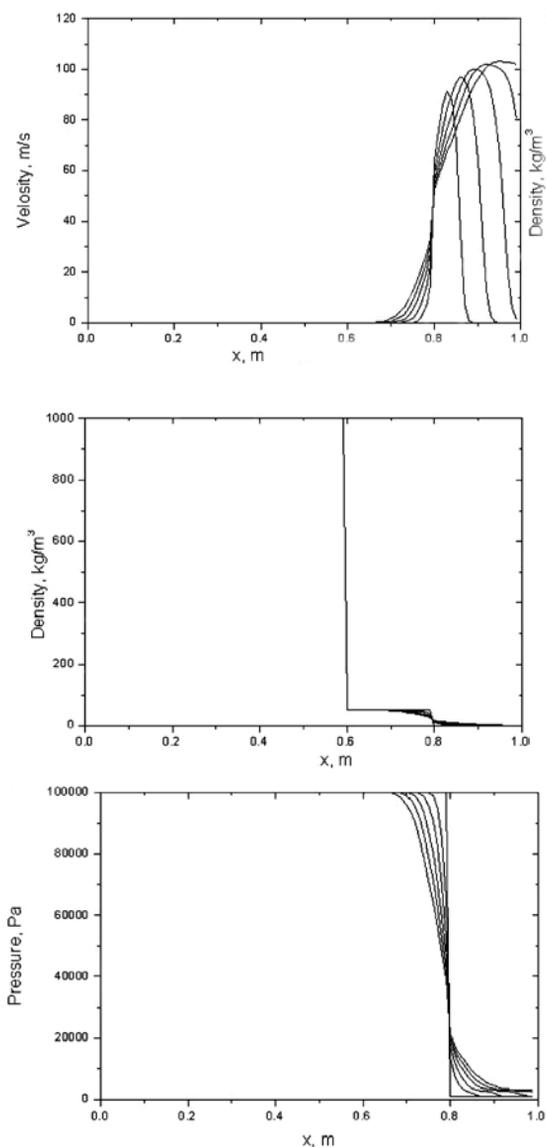


Рис. 3.2. Ударная труба с тремя зонами. Временная эволюция плотности, скорости и давления

3.2.3. Адвекция квадратного газового пузырька в однородном потоке жидкости

Этот очень простой 2D-тест состоит из адвекции квадратного газового пузырька в жидкости. Обе фазы имеют одни и те же давление и скорость, наблюдается только перевод газового пузырька.

Вычислительная область — однометровый квадрат с сеткой 150×150 и начальный квадратный пузырек, начальные измерения которого составляют $0,2 \times 0,2$ м (30×30 сеточных узлов), — расположена в левом основании. Его центр находится в точке $x=0,3$ м и $y=0,3$ м. Моделирование было выполнено с числом Куранта 0,8. Начальные данные для этой проблемы:

Внутри квадратного газового
пузыря

$$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$$

$$P_l = 10^5 \text{ Па}$$

$$u_l = 1000 \text{ м/с}$$

$$\vartheta_l = 1000 \text{ м/с}$$

$$\gamma_l = 4,4$$

$$\pi_l = 6 \times 10^8 \text{ Па}$$

$$\rho_g = 10 \text{ кг/м}^3$$

$$P_g = 10^5 \text{ Па}$$

$$u_g = 1000 \text{ м/с}$$

$$\vartheta_g = 1000 \text{ м/с}$$

$$\gamma_g = 1,4$$

$$\pi_g = 0 \text{ Па}$$

$$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$$

Вне квадратного газового
пузыря

$$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$$

$$P_l = 10^5 \text{ Па}$$

$$u_l = 1000 \text{ м/с}$$

$$\vartheta_l = 1000 \text{ м/с}$$

$$\gamma_l = 4,4$$

$$\pi_l = 6 \times 10^8 \text{ Па}$$

$$\rho_g = 10 \text{ кг/м}^3$$

$$P_g = 10^5 \text{ Па}$$

$$u_g = 1000 \text{ м/с}$$

$$\vartheta_g = 1000 \text{ м/с}$$

$$\gamma_g = 1,4$$

$$\pi_g = 0 \text{ Па}$$

$$\alpha_g = 10^{-6}$$

Результаты для метода второго порядка представлены на рис. 3.3 в начальное время и после 300 временных шагов в виде контуров для газовой частичной плотности ($\alpha_g \rho_g$). Ясно показана численная диффузия поверхности раздела, но можно заметить, что полная форма сохранена. Поперечные сечения скоростей, плотности смеси и газовой объемной фракции в последний момент показаны на рис. 3.4. Нет никаких изменений давления и скоростей.

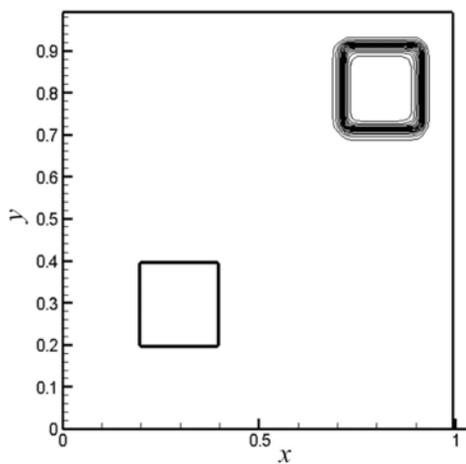
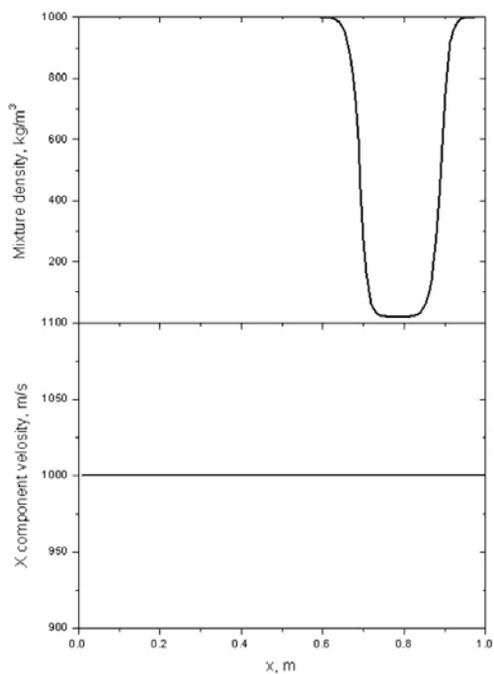


Рис. 3.3. Контуры газовой частичной плотности для адвекции квадратного пузырька



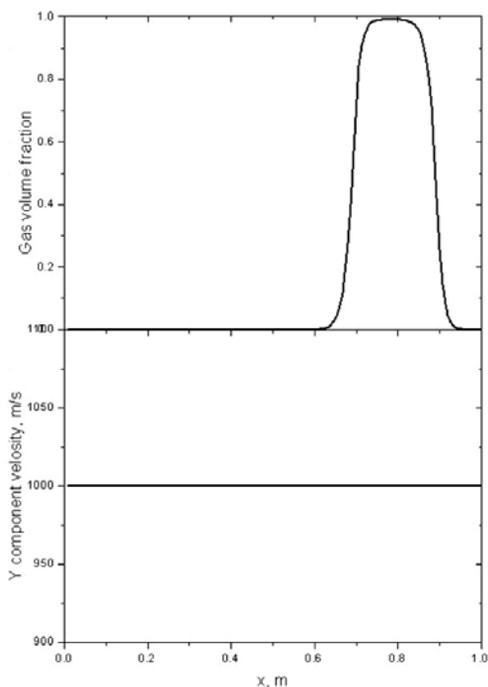


Рис. 3.4. Поперечные сечения при $x = 0,83$ м для проблемы адвекции квадратного пузырька

3.2.4. Взаимодействие ударной волны с разрывами плотности

Этот модельный тест проверяет способности метода для решения взаимодействия ударной волны, размножающейся в жидкости и взаимодействующей с газовым цилиндром. Вычислительная область длиной 2 м и высотой 1 м содержит жидкость в покое в атмосферных условиях. Газ — внутренний цилиндр радиусом 0,2 м, центр которого расположен в точке $x = 0,5$ м и $y = 0,5$ м. Поршень движется в левую сторону со скоростью 300 м/с. Это моделировалось путем введения дополнительной вычислительной области жидкости со скоростью 300 м/с. Верхняя и нижняя границы — твердые стенки. Левая и правая границы имеют условие нулевого градиента. Число Куранта для вычислений — 0,8.

Начальные данные для тестовой проблемы:

$-0,25 < X < 0$ м	Внутри газового цилиндра	Вне газового цилиндра
$\rho_l = 1000$ кг/м ³	$\rho_l = 1000$ кг/м ³	$\rho_l = 1000$ кг/м ³
$P_l = 10^5$ Па	$P_l = 10^5$ Па	$P_l = 10^5$ Па
$u_l = 300$ м/с	$u_l = 0$ м/с	$u_l = 0$ м/с
$\vartheta_l = 0$ м/с	$\vartheta_l = 0$ м/с	$\vartheta_l = 0$ м/с
$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$
$\pi_l = 1 \times 10^8$ Па	$\pi_l = 1 \times 10^8$ Па	$\pi_l = 1 \times 10^8$ Па
$\rho_g = 1$ кг/м ³	$\rho_g = 1$ кг/м ³	$\rho_g = 1$ кг/м ³
$P_g = 10^5$ Па	$P_g = 10^5$ Па	$P_g = 10^5$ Па
$u_g = 300$ м/с	$u_g = 0$ м/с	$u_g = 0$ м/с
$\vartheta_g = 0$ м/с	$\vartheta_g = 0$ м/с	$\vartheta_g = 0$ м/с
$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$
$\pi_g = 0$ Па	$\pi_g = 0$ Па	$\pi_g = 0$ Па
$\alpha_g = 10^{-6}$	$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$	$\alpha_g = 10^{-6}$

На рис. 3.5 представлены контуры газовой парциальной плотности. Имеется сильная деформация струи, которая инвертирует и преобразуется в пару вихрей.

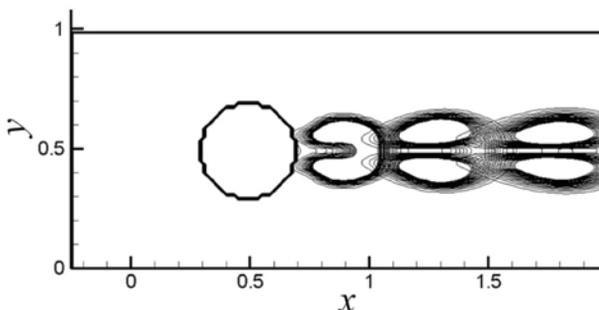


Рис. 3.5. Контурсы газовой парциальной плотности для взаимодействия ударной волны с цилиндром

3.2.5. Взаимодействие ударной волны с газовыми пузырьками

Это моделирование касается распространения ударной волны в жидкости с множеством газовых пузырьков. Вычислительная область длиной 4 м и высотой 2 м содержит жидкость, заполненную 28 газовыми пузырями радиусом 0,15 м в покое при атмосферных условиях. Поршень вдвигается в левую часть области вычисления при скорости 300 м/с. Число Куранта для вычислений — 0,8. На рис. 3.6 представлены контуры газовой частичной плотности в три момента времени. Это вычисление демонстрирует способность метода моделировать распространение ударной волны в двухфазной смеси с множественными разрывами плотности.

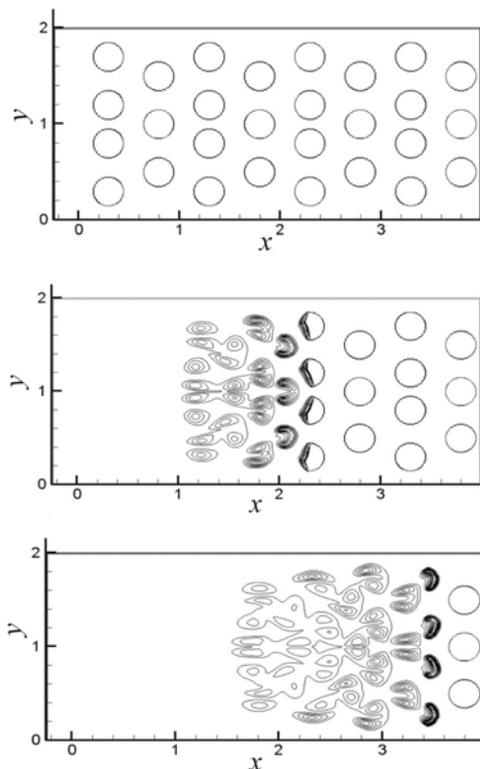


Рис. 3.6. Контуры газовой частичной плотности для проблемы взаимодействия ударной волны с множеством пузырьков. Показаны контуры для трех моментов

Начальные данные для тестовой проблемы:

$-0,25 < X < 0$ м	Внутри газового цилиндра	Вне газового цилиндра
$\rho_l = 1000$ кг/м ³	$\rho_l = 1000$ кг/м ³	$\rho_l = 1000$ кг/м ³
$P_l = 10^5$ Па	$P_l = 10^5$ Па	$P_l = 10^5$ Па
$u_l = 300$ м/с	$u_l = 0$ м/с	$u_l = 0$ м/с
$\vartheta_l = 0$ м/с	$\vartheta_l = 0$ м/с	$\vartheta_l = 0$ м/с
$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$	$\gamma_l = 4,4$
$\pi_l = 6 \times 10^6$ Па	$\pi_l = 6 \times 10^6$ Па	$\pi_l = 6 \times 10^6$ Па
$\rho_g = 50$ кг/м ³	$\rho_g = 50$ кг/м ³	$\rho_g = 50$ кг/м ³
$P_g = 10^5$ Па	$P_g = 10^5$ Па	$P_g = 10^5$ Па
$u_g = 300$ м/с	$u_g = 0$ м/с	$u_g = 0$ м/с
$\vartheta_g = 0$ м/с	$\vartheta_g = 0$ м/с	$\vartheta_g = 0$ м/с
$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$	$\gamma_g = 1,4$
$\pi_g = 0$ Па	$\pi_g = 0$ Па	$\pi_g = 0$ Па
$\alpha_g = 10^{-6}$	$\alpha_g = 1 - 10^{-6}$	$\alpha_g = 10^{-6}$

3.3. Выводы

Расширение метода дискретных уравнений [19] применялось, чтобы вычислить двухфазную трубу с ударной волной и тангенциальным разрывом скорости, адвекцию квадратного газового пузыря в однородном потоке жидкости, взаимодействие ударной волны с разрывами плотности. В этом методе использовался точный римановский солвер. Главные преимущества исходного метода были сохранены. Результаты демонстрируют хорошее совпадение. Метод может быть обобщен на случай трех измерений с использованием расщепления.

4. Моделирование взрывного испарения с применением реактивного римановского солвера

При распространении сильных волн разрежения через термодинамически равновесную жидкость эта жидкость может перейти в метастабильное состояние. При этом ее температура может превысить температуру насыщения в условиях уменьшенного при прохождении волны разрежения давления. Такая перегретая жидкость изменяет свое фазовое состояние очень быстро, взрывообразно. В результате может образовываться чистый пар или смесь жидкости и пара в термодинамическом равновесии с большой скоростью. Это явление часто называется кавитацией. Кавитация нередко происходит при обтекании сверхзвуковых снарядов и аэродинамических поверхностей или на внутренних соплах в инжекторных двигателях. Это явление приводит к сильным и резким возмущениям в гидродинамических системах. В большинстве случаев благодаря геометрическим эффектам кавитация является двумерным или трехмерным процессом, что сильно затрудняет ее экспериментальное и теоретическое изучение.

На рис. 4.1 показана упрощенная схема экспериментальной установки для изучения кавитации. Она представляет собой вертикальную трубу, заполненную жидкостью в термодинамическом равновесии при атмосферном или большем давлении. Эта труба соединяется с камерой очень низкого давления.

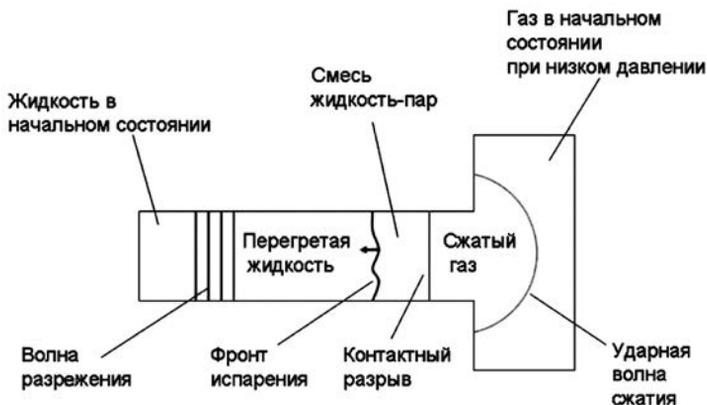


Рис. 4.1. Упрощенная схема экспериментальной установки для изучения кавитации [56] и распространения возникающих волн

После разрыва мембраны между трубой жидкости и камерой с вакуумом волны разрежения распространяются через жидкость, переводя ее в перегретое состояние. Затем в перегретой жидкости формируется дозвуковой фронт, который распространяется через перегретую жидкость, вызывая образование смеси жидкость — пар в термодинамическом равновесии. Эта смесь движется с высокой скоростью в сторону камеры с низким давлением. Скорость фронта испарения составляет около 1 м/с, а скорость образованной смеси — примерно 100 м/с.

Экспериментальное исследование фронта испарения [52] показывает, что он имеет возмущенную, ячеистую, разрывную структуру (рис. 4.2). Характерный размер фронта составляет примерно 1 мм — 1 мкм. Эта величина крайне мала по сравнению с размерами большинства промышленных систем. Толщина граничного теплового слоя с обеих сторон фронта также очень мала — примерно 1 мкм. Проведенные численные исследования структуры фронта испарения [53] позволяют при моделировании кавитации рассматривать фронт как разрыв без анализа его внутренней структуры.

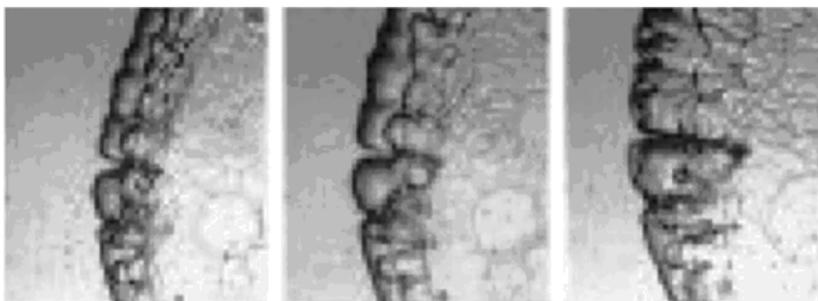


Рис. 4.2. Экспериментальные фотографии, показывающие структуру фронта испарения [57]

В таком предположении при моделировании должны быть решены следующие задачи:

- выбор подходящего уравнения состояния и термодинамическое замыкание модели;
- выбор кинетического соотношения на фронте испарения;
- построение реактивного римановского солвера;
- численное моделирование многомерного распространения фронта испарения.

При рассмотрении первой задачи подходящее уравнение состояния необходимо для замыкания законов сохранения с обеих сторон фронта испарения. Так как фронт разделяет жидкость и чистый пар в случае полного испарения или жидкость и смесь жидкость — пар в случае частичного

испарения, то в первом случае используются уравнения состояния чистой жидкости и чистого пара, а во втором — уравнение состояния чистой жидкости и гомогенное уравнение состояния смеси жидкость — пар в термодинамическом равновесии. Уравнения состояния чистого пара и жидкости сильно зависимы в термодинамическом равновесии. Комбинация этих уравнений совместно с условиями равенства давлений, температур и химического потенциала должна воспроизводить фазовую диаграмму или кривую давления насыщенного пара в зависимости от температуры $P = P_{SAT}(T)$.

Вторая и третья задачи связаны с моделированием самого процесса испарения. Как видно из рис. 4.1, акустическая волна всегда предшествует фронту испарения, который, в свою очередь, предшествует контактному разрыву и ударной волне (рис. 4.3). Такая конфигурация называется в литературе реактивным римановским солвером. Численные решения этой задачи были получены при расчетах детонации и дефлаграции (горения) для уравнений состояния идеального газа [54; 55]. В случае моделирования процесса испарения решение будет иметь более сложный вид.

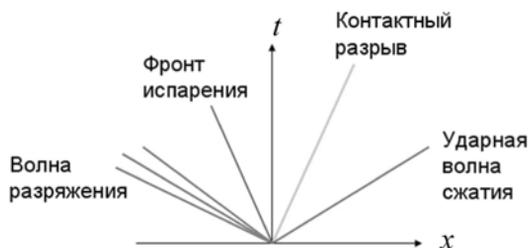


Рис. 4.3. Волновая структура для распада разрыва с образованием фронта испарения

Так как фронт испарения рассматривается как разрыв, а среды по обеим сторонам разрыва описываются уравнениями Эйлера, то для значений термодинамических параметров с обеих сторон фронта справедливы соотношения Рэнкина — Гюгонио, выражающие сохранение массы, импульса и энергии. Для разрешения неопределенности, которая возникает при прохождении первой акустической волны, требуется дополнительное кинетическое соотношение. Оно определяет скорость фронта испарения и обеспечивает единственность решения реактивного римановского солвера.

Процесс испарения сильно перегретой жидкости носит взрывообразный характер, поэтому в качестве дополнительного кинетического соотношения используется условие, связанное с максимально возможной скоростью перетекания массы через фронт испарения. Это условие называется точкой

дефлаграции Charman — Jouguet (CJ). Расчеты фронтов испарения и дефлаграции в данном подходе идентичны в смысле принадлежности обоих фронтов к одной и той же ветки кривой Круссарда. В [56] было произведено сравнение экспериментальных данных для додекана, полученных на установке, схема которой приведена на рис. 4.1, с результатами расчета с использованием соотношений Рэнкина — Гюгонно и замыкающего кинетического соотношения CJ. Хорошее согласие экспериментальных результатов с теоретическими кривыми также является основанием для выбора данного кинетического соотношения.

Многомерность при распространении фронта испарения учитывается в подходе, принятом в методологии Discrete Equation Method (DEM) [19]. В этом подходе осуществляется интегрирование интерфейсных задач Римана по двухфазному контрольному объему. Первоначально метод DEM был разработан для решения двухфазных интерфейсных задач. Для учета процессов взрывного испарения этот метод необходимо адаптировать — Reactive Discrete Equation Method (RDEM) [57].

4.1. Уравнения состояния фаз в двухфазной смеси

Образующийся в перегретой жидкости фронт испарения разделяет двухфазную смесь жидкости и газа в термодинамическом равновесии и чистую жидкую фазу. Уравнения состояния каждой фазы в двухфазной смеси при условии термодинамического равновесия должны воспроизводить фазовую диаграмму жидкость — пар. Поэтому различные параметры обоих уравнений состояния являются взаимозависимыми [58].

Для расчетов было выбрано уравнение состояния следующего вида [59]:

$$e(P, \rho) = \frac{P + \gamma\pi}{(\gamma - 1)\rho} C_v T + q, \quad (4.1)$$

или

$$\rho(P, \rho) = \frac{P + \pi}{(\gamma - 1)C_v T}, \quad (4.2)$$

где e — внутренняя энергия единицы массы; P — давление; ρ — плотность; T — температура; C_v — теплоемкость при постоянном объеме; γ и π — константы, характеризующие свойства вещества; q — энергия фазы в заданном состоянии.

Чтобы получить аналитический вид кривой насыщения, нужно сделать предположение о равенстве давлений, температур и функций Гиббса каж-

дой из фаз. Функция Гиббса для данной фазы с уравнением состояния (4.1) имеет вид

$$G(P, T) = (\gamma C_v - q')T - C_v T \times \ln \frac{T^\gamma}{(P + \pi)^{\gamma-1}} C_v T + q, \quad (4.3)$$

где q' — характеристическая константа.

Приравнявая функции Гиббса для каждой из фаз, можно получить зависимость давления насыщения двухфазной смеси от температуры $P_s(T)$:

$$\ln(P + \pi_g) = A + \frac{B}{T} + C \ln T + D \ln(P + \pi_l), \quad (4.4)$$

$$\text{где } A = \frac{\gamma_l \times (C_v)_l - \gamma_g \times (C_v)_g + q'_g - q'_l}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

$$B = \frac{q_l - q_g}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

$$C = \frac{\gamma_g \times (C_v)_g - \gamma_l \times (C_v)_l}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

$$D = \frac{(\gamma_l - 1) \times (C_v)_l}{(\gamma_g - 1) \times (C_v)_g};$$

индекс g обозначает параметры газовой фазы, индекс l — параметры жидкой фазы.

Используя зависимость (4.4) и экспериментальную кривую испарения, можно определить значения параметров для уравнения состояния (4.1) [58].

Для додекана рассчитанные таким образом параметры составляют [57]:

$$\begin{aligned} \gamma_l &= 2,19; \quad \pi_l = 4 \cdot 10^8 \text{ Па}; \quad q_l = -755 \cdot 10^3 \text{ Дж/кг}; \quad q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}; \\ (C_v)_l &= 1077 \text{ Дж/кг/К}; \quad \gamma_g = 1,025; \quad \pi_g = 0 \text{ Па}; \quad q_g = -237 \cdot 10^3 \text{ Дж/кг}; \\ q'_g &= -21\,926 \text{ Дж/кг/К}; \quad (C_v)_g = 1956 \text{ Дж/кг/К}. \end{aligned}$$

4.2. Реактивный римановский солвер

При решении задачи Римана с учетом образования фронта испарения необходимо использовать уравнение состояния для двухфазной смеси, так как фронт испарения разделяет чистую жидкую фазу и смесь жидкости и газа в термодинамическом равновесии. Уравнение состояния перегретой жидкости до фронта испарения имеет вид

$$e_0(P_0, \rho_0) = \frac{P_0 + \gamma_l \pi_l}{(\gamma_l - 1)\rho_0} + q_l. \quad (4.5)$$

Уравнения состояния каждой из фаз смеси жидкость — газ в термодинамическом равновесии записываются в виде

$$e_g(P, \rho_g) = \frac{P + \gamma_g \pi_g}{(\gamma_g - 1)\rho_g} + q_g, \quad (4.6)$$

$$e_l(P, \rho_l) = \frac{P + \gamma_l \pi_l}{(\gamma_l - 1)\rho_l} + q_l. \quad (4.7)$$

Уравнения (4.6) и (4.7) дополняются соотношением (4.4), выражающим зависимость $T(P)$ для кривой насыщения.

Газодинамические параметры двухфазной смеси и чистой жидкости по обеим сторонам фронта испарения связаны соотношениями Рэнкина — Гюгонио, выражающими сохранение массы, импульса и энергии:

$$\begin{aligned} u &= u_0 + m \times \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \\ P &= P_0 + m^2 \times \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \\ e &= e_0 + \frac{P + P_0}{2} \times \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \end{aligned} \quad (4.8)$$

где $m = \rho_0 \times (\sigma - u_0)$ — скорость потока массы через фронт испарения; σ — скорость фронта испарения; u_0 — скорость перегретой жидкости; u — скорость двухфазной смеси за фронтом испарения; $\rho = \alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l$ — плотность двухфазной смеси; α_g — объемная доля газа в двухфазной

смеси; α_l — объемная доля жидкости в двухфазной смеси, $\alpha_g + \alpha_l = 1$;
 e — внутренняя энергия двухфазной смеси; $\rho e = (\alpha \rho e)_g + (\alpha \rho e)_l$.

Выражения для плотности и внутренней энергии двухфазной смеси с учетом соотношения (4.4) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \rho &= \alpha_g \rho_g + (1 - \alpha_g) \rho_l = \rho_l + \alpha_g (\rho_g - \rho_l) = \rho(P, \alpha_g), \\ e &= \frac{1}{\rho} (\rho_l e_l + \alpha_g (\rho_g e_g - \rho_l e_l)) = e(\rho, P, \alpha_g). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Выражая объемную долю из первого соотношения (4.9), можно получить уравнение состояния двухфазной смеси

$$e(\rho, P) = \frac{1}{\rho} \left(\rho_l e_l + \frac{\rho - \rho_l}{\rho_g - \rho_l} (\rho_g e_g - \rho_l e_l) \right). \quad (4.10)$$

Объемная доля газа в двухфазной смеси определяется из комбинации соотношений (4.9) и третьего выражения (4.8):

$$\alpha_g(P) = \frac{e_0 - e_l + \frac{P + P_0}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right)}{e_0 - e_l + \frac{P + P_0}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) - \frac{\rho_g}{\rho_l} \left(e_0 - e_g + \frac{P + P_0}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_g} \right) \right)}. \quad (4.11)$$

Кривая зависимости плотности двухфазной смеси от давления

$$\rho = \rho_l + \alpha_g(P) (\rho_g - \rho_l) \quad (4.12)$$

соответствует кривой Круссарда для двухфазной смеси (рис. 4.4). Эта кривая описывает зависимость давления от плотности двухфазной смеси только в области насыщения. Часть кривой при низком давлении ($P < P_0^*$) называется кривой дефлаграции, другая часть — кривой детонации.

На кривой Круссарда существуют две особые точки, в которых эта кривая имеет общие касательные с линией Рэлея — см. второе соотношение (4.8). Тангенциальная точка при более высокой величине давления называется СД точкой детонации, при более низкой величине давления ($P < P_0^*$) — СД точкой дефлаграции. Процесс испарения связан с дефлаграцией, т. е. понижением давления. В этом случае СД точка дефлаграции соответствует максимальному потоку массы через фронт испарения.



Рис. 4.4. Кривая насыщения и линия Рэлея для перегретой жидкости с начальным состоянием (P_0^*, v_0^*)

Для нахождения величины давления в CJ точке дефлаграции используется условие [57]

$$\frac{dm^2}{dP} = 0. \quad (4.13)$$

Из второго соотношения в (4.8) следует, что

$$m^2(P) = \frac{P - P_0^*}{\frac{1}{\rho_0^*} - \frac{1}{\rho(P)}}, \quad (4.14)$$

где $\rho(P)$ определяется из (4.12).

Дифференцируя (4.14), можно получить

$$\frac{dm^2}{dP} = 0 \Leftrightarrow \frac{\rho_0^*}{\rho(P)} \frac{d\rho(P)}{dP} - \frac{\rho(P) - \rho_0^*}{P - P_0^*} = 0. \quad (4.15)$$

Уравнение (4.15) используется для определения величины давления двухфазной смеси в CJ точке дефлаграции. При вычислении производной

$\frac{d\rho(P)}{dP}$ последовательно находятся производные от переменных $e_g(P)$, $e_l(P)$, $\rho_g(P)$, $\rho_l(P)$ в соотношениях (4.11) и (4.12).

Волновая структура, которая реализуется при решении задачи Римана, в случае образования фронта испарения имеет вид, показанный на рис. 4.5. Критерием образования фронта испарения является условие «перегретости» жидкой фазы. Сначала определяется величина давления P^* при решении стандартной или «инертной» задачи Римана, из уравнения состояния вычисляется температура жидкой фазы T^* . Затем из соотношения (4.4) находится значение давления насыщения $P_{\text{НАС}}(T^*)$. Если $P^* > P_{\text{НАС}}(T^*)$, то жидкость не является перегретой и фронт испарения не образуется. В этом случае решение задачи Римана определяется с использованием стандартного или «инертного» римановского солвера [50]. Если $P^* < P_{\text{НАС}}(T^*)$, то жидкость перегрета, и нужно решать задачу Римана с учетом образования фронта испарения.

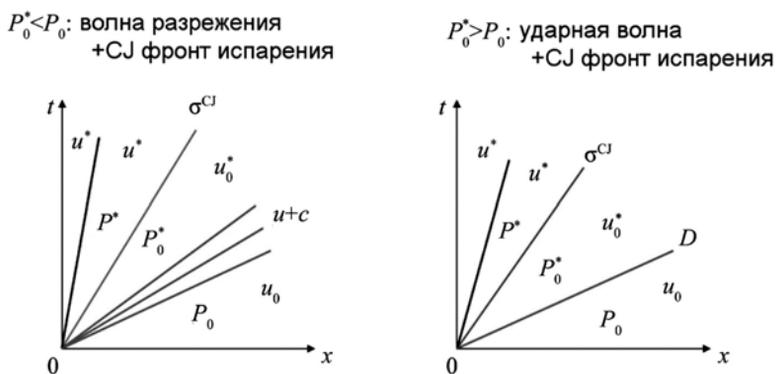


Рис. 4.5. Волновая структура римановского солвера

Фронт испарения, разделяющий область с перегретой жидкостью (0^*) и область с двухфазной смесью (*), имеет дозвуковую скорость. Поэтому сначала через область перегретой жидкости всегда проходит волна-предвестник, разделяющая перегретую жидкость (0^*) и жидкость в начальном состоянии (0). Если $P_0^* \geq P_0$, то предвестник — ударная волна, если $P_0^* < P_0$, то предвестник — волна разрежения.

Как и в случае стандартного римановского солвера, величина давления P^* находится с использованием итерационной процедуры. Слева и справа от контактного разрыва, движущегося со скоростью u^* , определяются однопараметрические функции $\Phi_L(P^*)$ и $\Phi_R(P^*)$. Далее итерационным методом решается уравнение

$$F(P^*) = u_R - u_L + \Phi_R(P^*) + \Phi_L(P^*) = 0, \quad (4.16)$$

где u_R, u_L — начальные скорости справа и слева от разрыва.

В случае, изображенном на рис. 4.5, однопараметрическая функция давления будет иметь вид

$$\Phi_0(P^*) = u_0^* - u_0 + \frac{P^* - P_0^*}{m_{\text{СД}}(P^*)}, \quad (4.17)$$

где $m_{\text{СД}}(P^*)$ — скорость потока массы через фронт испарения, разделяющий область с перегретой жидкостью и область с двухфазной смесью, в СД точке дефлаграции. То есть параметры перегретой жидкости (P_0^*, ρ_0^*) в процессе итераций должны обеспечивать сходимость давления P^* к давлению двухфазной смеси в СД точке дефлаграции.

При каждом фиксированном значении P^* величина давления P_0^* определяется следующим итерационным способом. Для каждого значения P_0^* в процессе итерации находится плотность перегретой жидкости ρ_0^* :

$$\rho_0^* = \begin{cases} \rho_0 \times \frac{(\gamma_0 + 1) \frac{P_0^* + \pi_0}{P_0 + \pi_0} + \gamma_0 - 1}{(\gamma_0 - 1) \frac{P_0^* + \pi_0}{P_0 + \pi_0} + \gamma_0 + 1}, & \text{если } P_0^* \geq P_0, \\ \rho_0 \times \left(\frac{P_0^* + \pi_0}{P_0 + \pi_0} \right)^{\frac{1}{\gamma_0}} & \text{в других случаях.} \end{cases} \quad (4.18)$$

Далее для найденных значений (P_0^*, ρ_0^*) определяется величина давления двухфазной смеси $P_{\text{СД}}^*$ в СД точке дефлаграции из условия (15). Затем находится новое значение P_0^* :

$$P_0^* = P^* - m_{\text{СД}}^2(P_{\text{СД}}^2) \times \left(\frac{1}{\rho_0^*} - \frac{1}{\rho^*} \right) = P^* - P_{\text{СД}}^* + P_0^*. \quad (4.19)$$

Процесс повторяется, и сходимость величины P_0^* достигается через четыре-пять итераций. На следующем шаге вычисляется однопараметрическая функция (4.17) для правой от контактного разрыва области из рис. 4.5. Аналогично или с использованием инертного римановского солвера вычисляется однопараметрическая функция для левой от контактного раз-

рыва области, и выполняется итерация (4.16) для нахождения нового значения P^* . По известной величине давления P^* можно определить все остальные газодинамические параметры в каждой области волновой конфигурации из рис. 4.5.

4.3. Адаптация метода DEM для использования реактивного римановского солвера

Для вывода системы дифференциальных уравнений, описывающих поведение двухфазной или двухкомпонентной смеси, обычно применяются процедуры математического усреднения [48] или принцип Гамильтона [18]. В обоих случаях возникает необходимость численной аппроксимации средних интерфейсных значений неконсервативных членов уравнения. Выбор того или иного способа численной аппроксимации неконсервативных членов не является однозначным.

В методе DEM каждая фаза в смеси описывается собственными уравнениями, и локальные интерфейсные величины определяются для каждой возможной топологической реализации с использованием обычного римановского солвера. Средние интерфейсные величины находятся при помощи усреднения по всем топологическим реализациям. Усредненные таким образом интерфейсные величины представляют собой дискретные выражения, которые в составе уравнений для каждого из компонентов смеси формируют численную схему. В полученной схеме нет свободных параметров, связанных с аппроксимацией интерфейсных членов.

В присутствии сильного испарения в двухфазной среде для сохранения преимуществ метода DEM в численную схему необходимо интегрировать реактивный римановский солвер, описывающий возникающую волновую структуру включая фронт испарения. Это приведет к появлению новых членов в уравнениях (реактивных потоков) и к модификации уже имеющих членов (потоков Эйлера и Лагранжа). Далее для простоты рассматривается одномерный случай. Для двумерных расчетов можно использовать пространственное расщепление и применять разработанный одномерный метод.

Каждая фаза в смеси удовлетворяет следующей системе уравнений:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad (4.20)$$

где

$$U = [1, \rho, \rho u, \rho E]^T; \quad (4.21)$$

$$F = [0, \rho u, \rho u^2 + P, (\rho E + P)u]^T. \quad (4.22)$$

Вводя фазовую функцию

$$\chi_k(M, t) = \begin{cases} 1, & \text{если точка } M \text{ расположена в фазе } k, \quad k = g, l, \\ 0 & \text{в других случаях,} \end{cases}$$

удовлетворяющую уравнению переноса

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \sigma_{\text{contact}} \frac{\partial \chi}{\partial x} + \sigma_{\text{react}} \frac{\partial \chi}{\partial x} = 0, \quad (4.23)$$

где σ_{contact} — локальная интерфейсная скорость контактного разрыва; σ_{react} — локальная интерфейсная скорость фронта испарения (см. рис. 4.5), можно получить:

$$\frac{\partial \chi_k U}{\partial t} + \frac{\partial \chi_k F}{\partial x} = F^{\text{lag}} \frac{\partial \chi_k}{\partial x} + F^{\text{react}} \frac{\partial \chi_k}{\partial x}, \quad (4.24)$$

где поток Лагранжа

$$F^{\text{lag}} = F - \sigma_{\text{contact}} U = [-u, 0, P, Pu]^T \quad (\sigma_{\text{contact}} = u), \quad (4.25)$$

реактивный поток

$$F^{\text{react}} = F - \sigma_{\text{react}} U = [-\sigma_{\text{react}}, \rho \times (u - \sigma_{\text{react}}), \rho \times (u - \sigma_{\text{react}}) \times u + P, \rho \times (u - \sigma_{\text{react}}) \times E + Pu]^T. \quad (4.26)$$

Усреднение уравнений (4.24) по всем возможным топологическим реализациям осуществляется при помощи интегрирования по времени Δt и пространству Δx_i в каждой ячейке расчетной сетки. Усредняя полученный

результат умножением на $\frac{1}{\Delta x_i \Delta t}$, окончательно получаем следующее соотношение [57]:

$$\frac{(\alpha_k U_k)_i^{n+1} - (\alpha_k U_k)_i^n}{\Delta t} + \frac{(\overline{\chi_k F})_{i+1/2} - (\overline{\chi_k F})_{i-1/2}}{\Delta x_i} =$$

$$= \frac{(F^{\text{lag}}[\chi_k])_{i-1/2} + (F^{\text{lag}}[\chi_k])_{i+1/2}}{\Delta x_i} + \frac{(F^{\text{react}}[\chi_k])_{i-1/2} + (F^{\text{react}}[\chi_k])_{i+1/2}}{\Delta x_i} \quad (4.27)$$

($k = 1, 2$),

где $(\alpha_k)_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \chi_k dx$ — объемная доля фазы k в i -й ячейке;

$(U_k)_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} U_k dx$ — вектор средних значений консервативных переменных фазы k в i -й ячейке;

$$(\overline{\chi_l F})_{i\pm 1/2} = \min((\alpha_l)_{i-1}, (\alpha_l)_i) \times (\chi_l^* F^*)_{i\pm 1/2}^{l,j} + \max(0, (\alpha_l)_{i-1} -$$

$$- (\alpha_l)_i) \times (\chi_l^* F^*)_{i\pm 1/2}^{g,j} + \max(0, (\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}) \times (\chi_l^* F^*)_{i\pm 1/2}^{l,g}$$

— средний поток Эйлера на границах i -й ячейки для жидкой фазы;

F^* — поток Эйлера (4.22) на границе i -й ячейки для данной топологической реализации, который определяется из решения задачи Римана;

χ_l^* — фазовый коэффициент для потока Эйлера жидкой фазы, величина которого зависит от условия образования фронта испарения и от топологии реализации (табл. 4.1);

$$(\overline{\chi_g F})_{i\pm 1/2} = \min((\alpha_g)_{i-1}, (\alpha_g)_i) \times (F^*)_{i\pm 1/2}^{g,g} + \max(0, (\alpha_l)_{i-1} -$$

$$- (\alpha_l)_i) \times (\chi_g^* F^*)_{i\pm 1/2}^{g,j} + \max(0, (\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}) \times (\chi_g^* F^*)_{i\pm 1/2}^{l,g}$$

— средний поток Эйлера на границах i -й ячейки для газовой фазы;

χ_g^* — фазовый коэффициент для потока Эйлера газовой фазы;

$$(\overline{F^{\text{lag}}[\chi_l]})_{i\pm 1/2} = \min((\alpha_l)_{i-1}, (\alpha_l)_i) \times (\chi_l^{\text{lag}} F^{\text{lag}})_{i\pm 1/2}^{l,j} + \max(0, (\alpha_l)_{i-1} -$$

$$- (\alpha_l)_i) \times (\chi_l^{\text{lag}} F^{\text{lag}})_{i\pm 1/2}^{g,j} + \max(0, (\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}) \times (\chi_l^{\text{lag}} F^{\text{lag}})_{i\pm 1/2}^{l,g}$$

- средний поток Лагранжа на границах i -й ячейки для жидкой фазы;
 F^{lag} — поток Лагранжа (25) на границе i -й ячейки для данной топологической реализации, который определяется из решения задачи Римана;
 χ_l^{lag} — фазовый коэффициент для потока Лагранжа жидкой фазы, величина которого зависит от условия образования фронта испарения и от топологии реализации (табл. 4.2);

$$\begin{aligned} \left(\overline{F^{\text{lag}} [\chi_g]} \right)_{i\pm 1/2} &= \min((\alpha_l)_{i-1}, (\alpha_l)_i) \times (\chi_g^{\text{lag}} F^{\text{lag}})_{i\pm 1/2}^{l,l} \\ &+ \max(0, (\alpha_l)_{i-1} - (\alpha_l)_i) \times (\chi_g^{\text{lag}} F^{\text{lag}})_{i\pm 1/2}^{g,l} + \\ &+ \max(0, (\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}) \times (\chi_g^{\text{lag}} F^{\text{lag}})_{i\pm 1/2}^{l,g} \end{aligned}$$

- средний поток Лагранжа на границах i -й ячейки для газовой фазы;
 χ_g^{lag} — фазовый коэффициент для потока Лагранжа газовой фазы;

$$\begin{aligned} \left(\overline{F^{\text{react}} [\chi_l]} \right)_{i\pm 1/2} &= \min((\alpha_l)_{i-1}, (\alpha_l)_i) \times (\chi_l^{\text{react}} F^{\text{react}})_{i\pm 1/2}^{l,l} + \\ &+ \max(0, (\alpha_l)_{i-1} - (\alpha_l)_i) \times (\chi_l^{\text{react}} F^{\text{react}})_{i\pm 1/2}^{g,l} + \\ &+ \max(0, (\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}) \times (\chi_l^{\text{react}} F^{\text{react}})_{i\pm 1/2}^{l,g} \end{aligned}$$

- средний реактивный поток на границах i -й ячейки для жидкой фазы;
 F^{react} — реактивный поток (26) на границе i -й ячейки для данной топологической реализации, который определяется из решения задачи Римана;
 χ_l^{react} — фазовый коэффициент для реактивного потока жидкой фазы, величина которого зависит от условия образования фронта испарения и от топологии реализации (табл. 4.3);

$$\begin{aligned} \left(\overline{F^{\text{react}} [\chi_g]} \right)_{i\pm 1/2} &= \min((\alpha_l)_{i-1}, (\alpha_l)_i) \times (\chi_g^{\text{react}} F^{\text{react}})_{i\pm 1/2}^{l,l} + \\ &+ \max(0, (\alpha_l)_{i-1} - (\alpha_l)_i) \times (\chi_g^{\text{react}} F^{\text{react}})_{i\pm 1/2}^{g,l} + \\ &+ \max(0, (\alpha_l)_i - (\alpha_l)_{i-1}) \times (\chi_g^{\text{react}} F^{\text{react}})_{i\pm 1/2}^{l,g} \end{aligned}$$

- средний реактивный поток на границах i -й ячейки для газовой фазы;
 χ_g^{react} — фазовый коэффициент для реактивного потока газовой фазы.

Таблица 4.1. Фазовый коэффициент для жидкой фазы при вычислении потока Эйлера

Топологическая реализация	Образование фронта испарения	Фазовый коэффициент χ_l^*
Жидкость — жидкость (l, l)	Слева от контактного разрыва	$\begin{cases} \alpha_l^*, & \text{если } \sigma < 0 < u^*, \\ 1 & \text{в других случаях;} \end{cases}$ α_l^* — объемная доля жидкой фазы за фронтом испарения; σ — скорость фронта испарения; u^* — скорость контактного разрыва.
	Справа от контактного разрыва	$\begin{cases} \alpha_l^*, & \text{если } u^* < 0 < \sigma, \\ 1 & \text{в других случаях} \end{cases}$
	Справа и слева от контактного разрыва	$\begin{cases} (\alpha_l^*)_{\text{right}}, & \text{если } u^* < 0 < \sigma_{\text{right}}, \\ (\alpha_l^*)_{\text{left}}, & \text{если } \sigma_{\text{left}} < 0 < u^*, \\ 1 & \text{в других случаях;} \end{cases}$ $(\alpha_l^*)_{\text{right}}$ — объемная доля жидкой фазы за правым фронтом испарения; $(\alpha_l^*)_{\text{left}}$ — объемная доля жидкой фазы за левым фронтом испарения; σ_{right} — скорость правого фронта испарения; σ_{left} — скорость левого фронта испарения
	Нет фронта испарения	1
Газ — жидкость (g, l)	Есть фронт испарения	$\begin{cases} \alpha_l^*, & \text{если } u^* < 0 < \sigma, \\ 0, & \text{если } u^* \geq 0, \\ 1 & \text{в других случаях} \end{cases}$
	Нет фронта испарения	$\begin{cases} 1, & \text{если } u^* < 0, \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases}$

Окончание табл. 4.1.

Топологическая реализация	Образование фронта испарения	Фазовый коэффициент χ_l^*
Жидкость — газ (l, g)	Есть фронт испарения	$\begin{cases} \alpha_l^*, & \text{если } \sigma < 0 < u^*, \\ 0, & \text{если } u^* < 0, \\ 1 & \text{в других случаях} \end{cases}$
	Нет фронта испарения	$\begin{cases} 1, & \text{если } u^* > 0, \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases}$

Таблица 4.2. Фазовый коэффициент для жидкой фазы при вычислении потока Лагранжа

Топологическая реализация	Образование фронта испарения	Фазовый коэффициент χ_l^{lag}
Жидкость — жидкость (l, l)	Слева от контактного разрыва	$\begin{cases} (1 - \alpha_l^*), & \text{если } u^* > 0, \\ 0 & \text{в других случаях;} \end{cases}$ $\alpha_l^* \text{ — объемная доля жидкой фазы за фронтом испарения;} \\ u^* \text{ — скорость контактного разрыва}$
	Справа от контактного разрыва	$\begin{cases} -(1 - \alpha_l^*), & \text{если } u^* > 0, \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases}$
	Справа и слева от контактного разрыва	$\begin{cases} \text{sign} \left((\alpha_l^*)_{\text{right}} - (\alpha_l^*)_{\text{left}} \right), & \text{если } u^* > 0 \\ 0 & \text{в других случаях;} \end{cases}$ $(\alpha_l^*)_{\text{right}} \text{ — объемная доля жидкой фазы за правым фронтом испарения;} \\ (\alpha_l^*)_{\text{left}} \text{ — объемная доля жидкой фазы за левым фронтом испарения}$
	Нет фронта испарения	0
Газ — жидкость (g, l)	Есть фронт испарения	$\begin{cases} \alpha_l^*, & \text{если } u^* > 0, \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases}$

Окончание табл. 4.2.

Топологическая реализация	Образование фронта испарения	Фазовый коэффициент χ_i^*
	Нет фронта испарения	$\begin{cases} 1, \text{ если } u^* < 0, \\ 0 \text{ в других случаях} \end{cases}$
Жидкость — газ (l, g)	Есть фронт испарения	$\begin{cases} \alpha_i^*, \text{ если } \sigma < 0 < u^*, \\ 0, \text{ если } u^* < 0, \\ 1 \text{ в других случаях} \end{cases}$
	Нет фронта испарения	$\begin{cases} 1, \text{ если } u^* > 0, \\ 0 \text{ в других случаях} \end{cases}$

Таблица 4.3. Фазовый коэффициент для жидкой фазы при вычислении реактивного потока

Топологическая реализация	Образование фронта испарения	Фазовый коэффициент χ_i^{lag}
Жидкость — жидкость (l, l)	Слева от контактного разрыва	$\begin{cases} -(1 - \alpha_i^*), \text{ если } \sigma > 0, \\ 0 \text{ в других случаях;} \end{cases}$ α_i^* — объемная доля жидкой фазы за фронтом испарения; σ — скорость фронта испарения
	Справа от контактного разрыва	$\begin{cases} (1 - \alpha_i^*), \text{ если } \sigma > 0, \\ 0 \text{ в других случаях} \end{cases}$
	Нет фронта испарения	0
Газ — жидкость (g, l)	Есть фронт испарения	$\begin{cases} (1 - \alpha_i^*), \text{ если } \sigma > 0, \\ 0 \text{ в других случаях} \end{cases}$
	Нет фронта испарения	0
Жидкость — газ (l, g)	Есть фронт испарения	$\begin{cases} -(1 - \alpha_i^*), \text{ если } \sigma > 0, \\ 0 \text{ в других случаях} \end{cases}$
	Нет фронта испарения	0

4.4. Результаты

В данной части описываются одномерные расчеты, выполненные с использованием метода RDEM. Задача о кавитации в жидком додекане с образованием фронта частичного испарения моделируется следующим образом. Вся расчетная область $[0; 1]$ заполнена жидким додеканом с плотностью 700 кг/м^3 при атмосферном давлении. Жидкость в левой части $[0; 0,5]$ приводится в движение со скоростью -100 м/с , а в правой части $[0,5; 1]$ — со скоростью 100 м/с .

Математическая модель RDEM предполагает наличие двух фаз, поэтому при проведении вычислений в расчетную область вводится газовая фаза с плотностью 10^{-4} кг/м^3 и объемной долей 10^{-8} . Начальные данные представлены в табл. 4.4.

Таблица 4.4. Начальные данные для расчета кавитации в жидком додекане

Левая сторона	Правая сторона
$\rho_l = 600 \text{ кг/м}^3$	$\rho_l = 600 \text{ кг/м}^3$
$P_l = 10^5 \text{ Па}$	$P_l = 10^5 \text{ Па}$
$u_l = -100 \text{ м/с}$	$u_l = 100 \text{ м/с}$
$\gamma_l = 2,19$	$\gamma_l = 2,19$
$\pi_l = 4 \times 10^8 \text{ Па}$	$\pi_l = 4 \times 10^8 \text{ Па}$
$q_l = -755 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$	$q_l = -755 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$
$q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}$	$q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}$
$C_{v,l} = 1077 \text{ Дж/кг/К}$	$C_{v,l} = 1077 \text{ Дж/кг/К}$
$\rho_g = 10^{-4} \text{ кг/м}^3$	$\rho_g = 10^{-4} \text{ кг/м}^3$
$P_g = 10^5 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$
$u_g = -100 \text{ м/с}$	$u_g = 100 \text{ м/с}$
$\gamma_g = 1,025$	$\gamma_g = 1,025$
$\pi_g = 0 \text{ Па}$	$\pi_g = 0 \text{ Па}$
$q_g = -237 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$	$q_g = -237 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$
$q'_g = -24 \times 10^3 \text{ Дж/кг/К}$	$q'_g = -24 \times 10^3 \text{ Дж/кг/К}$
$C_{v,g} = 1956 \text{ Дж/кг/К}$	$C_{v,g} = 1956 \text{ Дж/кг/К}$
$\alpha_g = 10^{-8}$	$\alpha_g = 10^{-8}$
$M_g = 0,17 \text{ кг/моль}$	$M_l = 0,17 \text{ кг/моль}$

Задача о кавитации в воде с образованием фронта частичного испарения моделируется следующим образом. Вся расчетная область $[0; 1]$ заполнена водой с плотностью 1000 кг/м^3 при атмосферном давлении.

Жидкость в левой части $[0; 0,5]$ приводится в движение со скоростью -170 м/с , а в правой части $[0,5; 1]$ — со скоростью 170 м/с .

Математическая модель RDEM предполагает наличие двух фаз, поэтому при проведении вычислений в расчетную область вводится газовая фаза с плотностью 10^{-4} кг/м^3 и объемной долей 10^{-1} . Начальные данные представлены в табл. 4.5.

Таблица 4.5. Начальные данные для расчета кавитации в воде

Левая сторона	Правая сторона
$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$	$\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$
$P_l = 10^5 \text{ Па}$	$P_l = 10^5 \text{ Па}$
$u_l = -170 \text{ м/с}$	$u_l = 170 \text{ м/с}$
$\gamma_l = 2,35$	$\gamma_l = 2,35$
$\pi_l = 1 \times 10^9 \text{ Па}$	$\pi_l = 1 \times 10^9 \text{ Па}$
$q_l = -1167 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$	$q_l = -1167 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$
$q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}$	$q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}$
$C_{v,l} = 1816 \text{ Дж/кг/К}$	$C_{v,l} = 1816 \text{ Дж/кг/К}$
$\rho_g = 10^{-4} \text{ кг/м}^3$	$\rho_g = 10^{-4} \text{ кг/м}^3$
$P_g = 10^5 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$
$u_g = -170 \text{ м/с}$	$u_g = 170 \text{ м/с}$
$\gamma_g = 1,43$	$\gamma_g = 1,43$
$\pi_g = 0 \text{ Па}$	$\pi_g = 0 \text{ Па}$
$q_g = 2030 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$	$q_g = 2030 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$
$q'_g = -23396 \times 10^3 \text{ Дж/кг/К}$	$q'_g = -23396 \times 10^3 \text{ Дж/кг/К}$
$C_{v,g} = 1040 \text{ Дж/кг/К}$	$C_{v,g} = 1040 \text{ Дж/кг/К}$
$\alpha_g = 10^{-1}$	$\alpha_g = 10^{-1}$
$M_g = 0,018 \text{ кг/моль}$	$M_l = 0,018 \text{ кг/моль}$

Графики итерационной функции $F(P^*)$ из (16) в случае топологической реализации «жидкость — жидкость» с образованием двух фронтов испарения для параметров воды и додекана из табл. 4.5 и 4.4 с разными начальными скоростями разлета представлены на рис. 4.6.

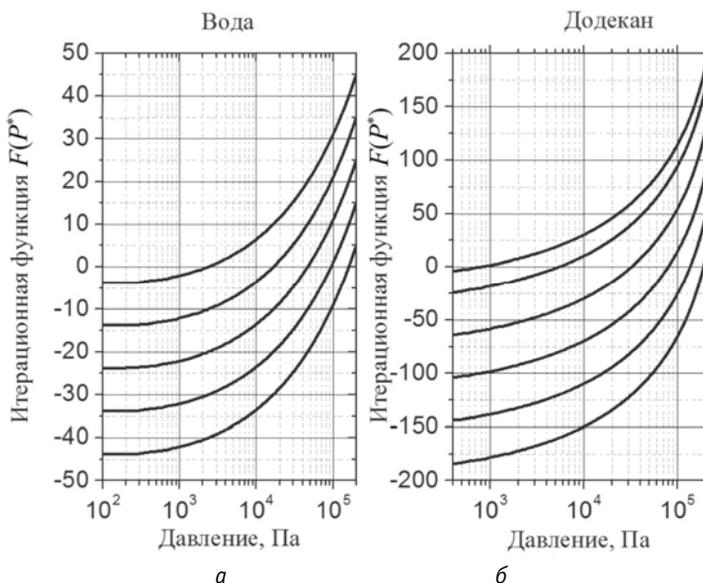


Рис. 4.6. Итерационная функция $F(P^*)$ из (16) в случае топологической реализации «жидкость-жидкость» с образованием двух фронтов испарения для параметров воды (а) с начальными скоростями разлета (сверху вниз): 170, 165, 160, 155 и 150 м/с и додекана (б) с начальными скоростями разлета (сверху вниз): 130, 120, 100, 80, 60 и 40 м/с

Задача о распаде разрыва в додекане с образованием фронта частичного испарения моделируется следующим образом. Правая часть расчетной области $[0, 5; 1]$ заполнена жидким додеканом с плотностью 600 кг/м^3 при атмосферном давлении. В левой части расчетной области $[0; 0, 5]$ содержится газообразный додекан с плотностью 10^{-4} кг/м^3 при низком давлении 100 Па. Скорость обеих сред в начальный момент равна нулю. Начальные данные представлены в табл. 4.6.

**Таблица 4.6. Начальные данные для расчета распада разрыва
в додекане**

Левая сторона	Правая сторона
$\rho_l = 600 \text{ кг/м}^3$	$\rho_l = 600 \text{ кг/м}^3$
$P_l = 10^2 \text{ Па}$	$P_l = 10^5 \text{ Па}$
$u_l = 0 \text{ м/с}$	$u_l = 0 \text{ м/с}$
$\gamma_l = 2,19$	$\gamma_l = 2,19$
$\pi_l = 4 \times 10^8 \text{ Па}$	$\pi_l = 4 \times 10^8 \text{ Па}$
$q_l = -755 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$	$q_l = -755 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$
$q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}$	$q'_l = 0 \text{ Дж/кг/К}$
$C_{v,l} = 1077 \text{ Дж/кг/К}$	$C_{v,l} = 1077 \text{ Дж/кг/К}$
$\rho_g = 10^{-4} \text{ кг/м}^3$	$\rho_g = 10^{-4} \text{ кг/м}^3$
$P_g = 10^2 \text{ Па}$	$P_g = 10^5 \text{ Па}$
$u_g = 0 \text{ м/с}$	$u_g = 0 \text{ м/с}$
$\gamma_g = 1,025$	$\gamma_g = 1,025$
$\pi_g = 0 \text{ Па}$	$\pi_g = 0 \text{ Па}$
$q_g = -237 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$	$q_g = -237 \times 10^3 \text{ Дж/кг}$
$q'_g = -24 \times 10^3 \text{ Дж/кг/К}$	$q'_g = -24 \times 10^3 \text{ Дж/кг/К}$
$C_{v,g} = 1956 \text{ Дж/кг/К}$	$C_{v,g} = 1956 \text{ Дж/кг/К}$
$\alpha_g = 1 - 10^{-8}$	$\alpha_g = 10^{-8}$
$M_g = 0,17 \text{ кг/моль}$	$M_l = 0,17 \text{ кг/моль}$

Результаты расчета с числом Куранта 0,8 на сетке 100 в момент времени 300 мкс представлены на рис. 4.7 (для додекана) и 4.8 (для воды). Показаны профили давления двухфазной смеси (а), объемной доли газа (б), плотности двухфазной смеси (в), а также профиль массовой доли образовавшегося газа (г). Решение состоит из двух симметричных волн разрежения, распространяющихся в жидкости справа и слева от первоначального разрыва в профиле скорости. При заданных начальных условиях амплитуда волн разрежения настолько велика, что кинетическое предельное СД

соотношение является наиболее подходящим. Однако в общем случае поток массы через фронт испарения может быть гораздо меньше максимального, как в случае медленных процессов под влиянием капиллярных эффектов. При выборе другого кинетического соотношения с использованием, например, капиллярной модели оно легко может быть интегрировано в реактивный римановский солвер вместо CJ-соотношения.

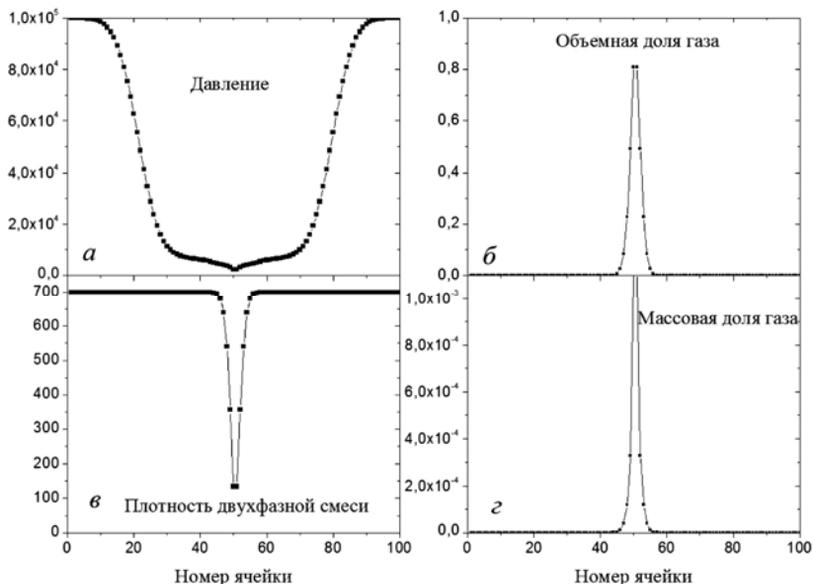


Рис. 4.7. Профили давления двухфазной смеси (а), объемной доли газа (б), плотности двухфазной смеси (в), а также профиль массовой доли образовавшегося газа (г) для задачи кавитации в жидком додекане

Результаты расчета с числом Куранта 0,8 на сетке 100 в момент времени 300 мкс представлены на рис. 4.9. Показаны профили скорости двухфазной смеси (а), плотности двухфазной смеси (б) и давления (в). Решение состоит из ударной волны, распространяющейся в область с низким давлением, и волны разрежения,двигающейся в область с жидкой фазой. Жидкая фаза становится перегретой и испаряется с образованием фронта испарения.

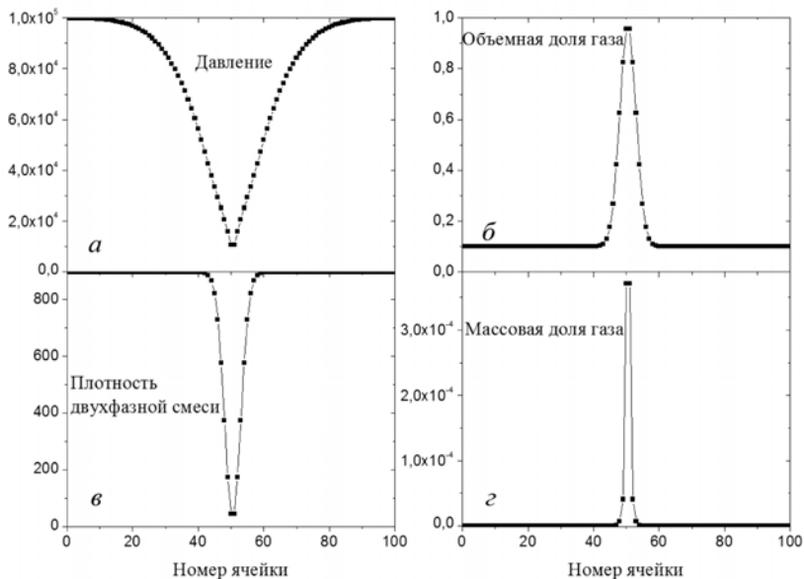


Рис. 4.8. Профили давления двухфазной смеси (а), объемной доли газа (б), плотности двухфазной смеси (в), а также профиль массовой доли образовавшегося газа (г) для задачи кавитации в воде

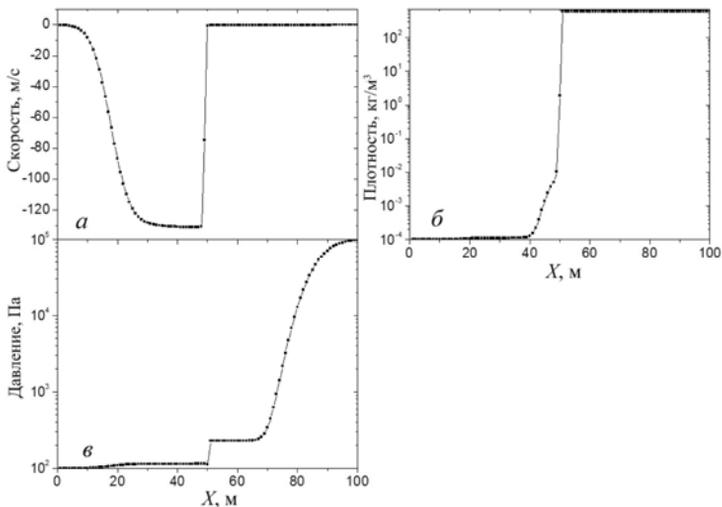


Рис. 4.9. Профили давления двухфазной смеси (а), объемной доли газа (б), плотности двухфазной смеси (в) для задачи кавитации в воде

4.5. Заключение

В работе приведена методика расчета двухфазных газодинамических течений, в которых могут происходить процессы испарения. Испарение моделируется как взрывной процесс, при котором формируется дозвуковая ударная волна, распространяющаяся по перегретой жидкости. За фронтом ударной волны образуется смесь жидкости и пара в термодинамическом равновесии. Газодинамические параметры с обеих сторон от ударной волны удовлетворяют уравнениям Эйлера и связаны между собой соотношениями Рэнкина — Гюгионо. Для вычисления параметров образующейся двухфазной смеси используется замыкающее кинетическое соотношение, которое соответствует максимально возможной скорости перетекания массы через фронт испарения. При вычислениях предполагается, что каждая фаза удовлетворяет уравнению состояния *stiffened*. Описанная модель была адаптирована для использования в методе DEM [19], в котором используется усреднение по всем возможным топологическим реализациям двухфазной смеси. Для этого был разработан реактивный римановский солвер, учитывающий возможность образования дозвуковых фронтов испарения.

С использованием описанной методики были проведены одномерные расчеты кавитации в додекане и воде, а также расчет распада разрыва в додекане. Необходимо отметить, что использование в качестве замыкающего кинетического выражения соотношения, соответствующего максимально возможной скорости перетекания массы через фронт испарения, применимо только в случае сильного испарения. При более медленном испарении необходимо использовать другое соотношение, хотя интеграция нового выражения в описанную методику не представляет проблем. Переход к двумерным расчетам легко реализуется с использованием метода расщепления по направлениям [60].

Литература

1. *Lafaurie B., Nardone C., Scardovelli R. et al. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER // J. Comput. Phys. — 1994. — 113. — P. 134.*
2. *Unverdi S. O., Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows // J. Comput. Phys. — 1992. — 100. — P. 25.*
3. *Sethian J. A. Level Set Methods. — Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 1996.*
4. *Juric D. Computations of Phase Change: Ph.D. thesis / Univ. of Michigan. — [S. l.], 1996.*

5. *Juric D., Tryggvason G.* A Front-Tracking Method for Dendritic Solidification // *J. of Computational Physics.* — 1996. — 123. — P. 127—148.
6. *Welch S. W. J., Wilson J.* A volume of fluid based method for fluid flows with phase change // *J. Comput. Phys.* — 2000. — 160. — P. 662.
7. *Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C.* A continuum method for modeling surface tension // *J. Comput. Phys.* — 1992. — 100. — P. 335.
8. *Beux F., Knowlton B., Banerjee S.* A three-dimensional level-set method for direct numerical simulation of two-phase flows in variable gravity environments // *Proceedings of the 4th Micro-gravity Fluid Physics and Transport Phenomena Conference, Cleveland.* — [S. l.], 1998.
9. *Jamet D., Lebaigue O., Coutris N., Delhaye J. M.* A numerical description of a liquid-vapor interface based on the second gradient theory // *Fluid Mech. Res.* — 1997. — 22 (1). — P. 1.
10. *Juric D., Tryggvason G.* Computations of boiling flows // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1998. — 24. — P. 387.
11. *Jamet D., Lebaigue O., Coutris N., Delhaye J. M.* The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change // *J. Comp. Phys.* — 2001. — 169. — P. 624—651.
12. *Son G., Dhir V. K., Ramanujapu N.* Dynamics and heat transfer associated with a single bubble during nucleate boiling on a horizontal surface // *J. Heat Transfer.* — 1999. — 121, 3. — P. 623.
13. *Tryggvason G., Bunner B., Esmaeeli A.* et al. A front tracking method for the computations of multiphase flow // *J. Comput. Phys.* — 2001. — 169. — P. 708. — doi:10.1006/jcph.2001.6726.
14. *Qian J., Tryggvason G., Law C. K.* A front tracking method for the motion of premixed flames // *J. Comput. Phys.* — 1998. — 144. — P. 52.
15. *Helenbrook B. T., Martinelli L., Law C. K.* A numerical method for solving incompressible flow problems with a surface of discontinuity // *J. Comput. Phys.* — 1999. — 148. — P. 366. — doi:10.1006/jcph.1998.6115.
16. *Nguyen D. Q., Fedkiw R. P., Kang M.* A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities // *J. Comput. Phys.* — 2001. — 172. — P. 71. — doi:10.1006/jcph.2001.6812.
17. *Saurel R., Abgrall R.* A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows // *J. Comp. Phys.* — 1999. — 150. — P. 425—467.

18. *Gavrilyuk S., Saurel R.* Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia // *J. Comp. Phys.* — 2002. — 175 (1). — P. 326—360.
19. *Saurel R., Abgrall R.* Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures // *J. Comp. Phys.* — 2003. — 186. — P. 361—396.
20. *Colella P., Woodward P. R.* Piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamic simulations // *J. Comp. Phys.* — 1984. — Apr. — 54 (1). — P. 174—201.
21. *Wheeler A. A., Murray B. T., Schaefer R. J.* Computation of dendrites using a phase field model // *Physica D.* — 1993. — 66. — P. 243.
22. *Bi Z., Sekerka R. F.* Phase-field model of solidification of a binary alloy // *Physica A.* — 1998. — 261. — P. 95.
23. *McFadden G. B., Wheeler A. A., Braun R. J., Coriell S. R.* Phase-field models for anisotropic interfaces // *Phys. Rev. E.* — 1993. — 48 (3). — P. 2016.
24. *Penrose O., Fife P. C.* Thermodynamically consistent models of phase-field type for kinetics of phase transitions // *Physica D.* — 43. — 1990. — P. 44.
25. *Anderson D. M., McFadden G. B., Wheeler A. A.* Diffuse-interface models in fluid mechanics // *Annu. Rev. Fluid Mech.* — 30. — 1998. — P. 139.
26. *Jacqmin D.* Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling // *J. Comput. Phys.* — 1999. — 155. — P. 1.
27. *Delhaye J. M.* Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1974. — 1. — P. 395.
28. *van der Waals J. D.* Thermodynamische Theorie der Kapillarität unter Voraussetzung stetiger Dichteänderung // *Z. Phys. Chem.* — 1894. — 13. — S. 657. — АНГЛ. пер.: *J. Stat. Phys.* — 1979. — 20. — P. 197.
29. *Korteweg D. J.* Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais continues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité // *Arch. Néerl. Sci. Exactes Nat.* — 1901. — 6. — P. 1.
30. *Cahn J. W., Hilliard J. E.* Free energy of a nonuniform system. — I: Interfacial free energy // *J. Chem. Phys.* — 1958. — 28 (2). — P. 258.
31. *Rocard Y.* Thermodynamique. — Paris: Masson, 1967.
32. *Reese J. M., Woods L. C., Thivet F. J. P., Candel S.* A second-order description of shock structure // *J. Comput. Phys.* — 1995. — 117. — P. 240.

33. *Seppacher P.* Moving contact line in the Cahn–Hilliard theory // *Int. J. Eng. Sci.* — 1996. — 34 (9). — P. 977.
34. *Casal P., Gouin H.* Relation entre l'équation de l'énergie et l'équation du mouvement en théorie de Korteweg de la capillarité // *C. R. Acad. Sci. Paris.* — 1985. — 300 (7). — P. 231.
35. *Jamet D.* Etude des potentialites de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase: Ph. D. thesis / Ecole Central Paris. — [S. 1.], 1998.
36. *Seppacher P.* Etude d'une modélisation des zones capillaires fluides: Interfaces et lignes de contact: Ph. D. thesis / Univ. Paris VI. — [S. 1.], 1987.
37. *Jamet D., Lebaigue O., Coutris N., Delhaye J. M.* A numerical description of a liquid-vapor interface based on the second gradient theory // *Fluid Mech. Res.* — 1997. — 22 (1). — P. 1.
38. *Casal P., Gouin H.* Sur les interfaces liquide-vapeur non isothermes // *J. de mécanique théorique et appliquée.* — 1988. — 7 (6). — P. 689.
39. *Gouin H., Delhaye J. M.* Materialwaves of a fluid in the vicinity of the critical point // *IUTAM Symposium on Waves in Liquid/Gas and Liquid/Vapour Two-Phase Systems* / Ed. by S. Morika and L. van Wijngaarden. — Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995. — P. 405.
40. *Rowlinson J. S., Widom B.* *Molecular Theory of Capillarity.* — New York: Oxford Univ. Press, 1982.
41. *Jacqmin D.* An energy approach to the continuum surface tension method // *Proceedings of the 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 1996. — AIAA 96-0858.
42. *Carey V. P.* *Liquid–Vapor Phase–Change Phenomena: An Introduction to the Thermophysics of Vaporisation and Condensation Processes in Heat Transfer Equipment.* — Washington, DC: Hemisphere Publishing, 1992.
43. *Dell'Isola F., Gouin H., Rotoli G.* Nucleation of spherical shell-like interfaces by second gradient theory: Numerical simulations // *Eur. J. Mech. B/Fluids.* — 1996. — 15 (4). — P. 545.
44. *Maxwell J. C.* On the dynamical evidence of the molecular constitution of bodies // *Nature.* — 1875. — 11. — P. 357.
45. *Saurel R., Abgrall R.* A simple method for compressible multifluid flows // *SIAM J. Sci. Comput.* — 1999. — Vol. 21, № 3. — P. 1115–1145.
46. *Adrianov N., Saurel R., Warnecke G.* A simple method for compressible multiphase mixtures and interfaces // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* — 2003. — Iss. 2, 41. — P. 109–131.

47. *Abgrall R.* How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach // *J. Comput. Phys.* — 1996. — 125. — P. 150—160.
48. *Drew D., Passman S.* Theory of Multicomponent Fluids. — [S. l.]: Springer, 1998.
49. *Saurel R., Gavriluk S., Renaud F.* A multiphase model with internal degrees of freedom: application to shock-bubble interaction // *J. Fluid Mech.* — 2003. — Vol. 495. — P. 283—321.
50. *Kylikovskiy A., Pogorelov N., Semenov A.* Mathematical aspects of numerical solution for hyperbolic equation systems. — Moscow: MAIK «Nauka/Interperiodica», 2001.
51. *Saurel R., LeMetayer O.* A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation // *J. Fluid Mech.* — 2001. — 431. — P. 239—271.
52. *Reinke P., Yadigaroglu G.* Explosive vaporization of superheated liquids by boiling fronts // *Int. J. Multiphase Flows.* — 2001. — 27. — P. 1487—1516.
53. *Jamet D., Lebaigue O., Courtis N., Delhaye J. M.* The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change // *J. Comp. Phys.* — 2001. — 169. — P. 624—651.
54. *Godlewski E., Raviart P.-A.* Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws // *Applied Mathematical Sciences.* — 1996. — Vol. 118.
55. *Teng Z.-H., Chorin A. J., Liu T.-P.* Riemann problems for reacting gas, with applications to transition // *SIAM J. Appl. Math.* — 1982. — 42 (5). — P. 964—981.
56. *Simoës-Moreira J. R., Shepherd J. E.* Evaporation waves in superheated dodecane // *J. Fluid Mech.* — 1999. — 382. — P. 63—86.
57. *Le Metayer O., Massoni J., Saurel R.* Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers // *J. Comp. Phys.* — 2005. — 205. — P. 576—610.
58. *Le Metayer O., Massoni J., Saurel R.* Elaboration des lois d'Etat d'un liquide et de sa vapeur pour les modeles d'écoulements diphasiques // *Int. J. Thermal Sci.* — 2003. — 43. — P. 265—276.
59. *Chorin A. J.* Random choice methods with applications to reacting gas flow // *J. Comp. Phys.* — 1977. — 25. — P. 253—272.
60. *Leonov A., Chudanov V.* A discrete equation method for two-dimensional calculations of two-phase compressible mixtures // *Proceedings of the 17th International Conference on Nuclear Engineering.* — № 75586.

Асимптотический анализ осаждения инерционных частиц из турбулентного потока с помощью модели переноса вторых моментов

Д. Ф. Сиковский

1. Введение

Изучению осаждения аэрозольных частиц и капель из турбулентного потока на стенки каналов и труб посвящено большое количество экспериментальных и численных исследований. Помимо фундаментального значения исследование процессов осаждения частиц из турбулентных потоков актуально для многих приложений в машиностроении, полупроводниковой промышленности, медицине, ядерной энергетике, химической технологии и экологии. Несмотря на более чем полувековую историю исследований и большое количество публикаций, даже упрощенная постановка задачи осаждения частиц с малой концентрацией дисперсной фазы и отсутствием обратного влияния частиц на турбулентность несущей фазы все еще представляет серьезные трудности для решения [1; 2]. Из существующих подходов (эйлерова и лагранжева) оптимальным для использования в инженерной практике с точки зрения трудоемкости в настоящее время является эйлеров подход, использующий осредненные уравнения переноса фаз, замкнутые с помощью той или иной гипотезы замыкания. В настоящее время в вычислительной практике инженерных расчетов наиболее широко применяются равновесные эйлеровы модели, в которых используются квазиравновесные соотношения пропорциональности напряжений Рейнольдса дисперсной фазы напряжениям Рейнольдса несущей фазы [1; 2]. Между тем при сопоставимых временах динамической релаксации частицы τ_p и лагранжева масштаба времени турбулентности влияние инерции частиц может приводить к заметным отличиям характера пространственных распределений напряжений Рейнольдса дисперсной и несущей фаз. Нелокальность связи между напряжениями Рейнольдса частиц и несущей фазы особенно заметно проявляется в пристенной области турбулентного потока у границы вязкого подслоя, где имеет место сильная пространственная неоднородность распределения интенсивности турбулентных пульсаций. Нелокальность турбулентного переноса в рамках эйлерова подхода может быть приближенно учтена как с помощью алгеб-

раических соотношений, учитывающих «эффект памяти» [3; 4], так и с помощью более точных нелокальных транспортных моделей переноса напряжений Рейнольдса частиц [2; 5; 6].

Нелокальность турбулентного переноса частиц влияет на характеристики аккумуляции инерционных частиц в пристенной области турбулентного потока, вызванной турбофорезом [7; 8] частиц из внешней области (ядра потока) с высокой интенсивностью турбулентности в вязкий подслои с малыми поперечными пульсациями скорости несущей фазы. Влияние конвекции и неравновесных «эффектов памяти» переноса частиц [4] приводит к уменьшению пристенного пика концентрации частиц и его постепенному выполаживанию с ростом параметра инерционности частиц $\tau_+ = v_\tau^2 \tau_p / \nu$, (v_τ — динамическая скорость, ν — кинематическая вязкость несущей фазы) при заметно более ранних значениях τ_+ , чем в равновесных эйлеровых моделях [1; 9]. Более точная модель [2; 10] учитывающая нелокальный перенос вторых моментов пульсаций скорости частиц, предсказывает новый качественный эффект — появление бифуркации решения при некотором значении $\tau_+ = \tau_{cr}$: согласно приближенному решению задачи в упрощенной постановке [2; 10], при $\tau_+ < \tau_{cr}$ интенсивность пульсаций частиц вблизи стенки равна нулю, а при $\tau_+ > \tau_{cr}$ отлична от нуля, демонстрируя наличие бифуркации закритического типа. Стоит отметить, что с помощью дающего более детальную информацию и активно используемого в последнее время метода лагранжева траекторного описания частиц на основе прямого численного моделирования (DNS) турбулентности несущей фазы [11] такую бифуркацию решения обнаружить довольно трудно, так как необходимый для этого перебор расчетных вариантов с параметром инерционности τ_+ в предполагаемой окрестности бифуркации потребовал бы много времени. Поэтому вопрос о том, имеет ли место в действительности бифуркация вторых моментов пульсаций скорости частиц, или же ее появление есть лишь «паразитный эффект» модели замыкания вторых моментов, использованной в [2; 10], остается открытым.

В настоящей работе для исследования задачи осаждения частиц из турбулентного потока применяются асимптотическая теория пристенного газодисперсного течения при больших числах Рейнольдса [12] и модель переноса напряжений Рейнольдса частиц [2], учитывающая важные физические эффекты динамики частиц в пристенной турбулентности: влияние эффекта инерционности на лагранжев интегральный временной масштаб взаимодействия частиц с турбулентными вихрями и малость турбулентного числа Рейнольдса вблизи стенки. Асимптотическое решение задачи в пределе больших числах Рейнольдса в главном приближении имеет гораздо

более простую структуру, чем задача в полной постановке, и характеризуется меньшим набором варьируемых параметров, что позволяет более детально проанализировать явление аккумуляции частиц в вязком подслое и его влияние на скорость осаждения. Для вычисления входящих в асимптотическое решение задачи универсальных функций используется дифференциальная модель переноса напряжений Рейнольдса [2]. Анализируется явление бифуркации решения при переходе от диффузионно-импактного режима к режиму инерционного замедления. Предлагаются простые аналитические аппроксимации для скорости осаждения частиц в плоском канале и круглой трубе. Полученное решение задачи в области логарифмического слоя использовано для вывода граничных условий типа пристеночных функций для концентрации частиц, позволяющих корректно моделировать задачу осаждения частиц в диффузионно-импактном режиме и частично в режиме инерционного замедления с помощью равновесных эйлеровых моделей.

2. Объект исследования

Рассматривается турбулентный поток газа в канале или круглой трубе на участке развитого течения со взвешенными монодисперсными частицами, плотность которых много больше плотности несущей фазы. Массовая концентрация частиц предполагается малой, что позволяет пренебречь обратным влиянием дисперсной фазы на турбулентное течение несущей фазы. Для описания движения частиц используется простая модель точечных частиц [2; 11]

$$\dot{\mathbf{v}} = [\mathbf{u}(\mathbf{x}_p, t) - \mathbf{v}] / \tau_p + \mathbf{F}_B, \quad (1)$$

где $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}_p$ — скорость частицы; $\mathbf{x}_p = \mathbf{x}_p(t)$ — ее координата; $\mathbf{u}(\mathbf{x}_p, t)$ — скорость несущей среды в точке местонахождения частицы; \mathbf{F}_B — случайные ускорения частицы под действием броуновского движения несущей среды, существенные для частиц малых размеров и определяемые коррелятором типа гауссова белого шума $\langle F_{iB}(t) F_{jB}(t') \rangle = 2\delta_{ij} D_B \tau_p^{-2} \delta(t-t')$, где D_B — коэффициент броуновской диффузии.

При этом влиянием гравитационного оседания, подъемной силы, сил Бассе и присоединенной массы, а также инерционных поправок к закону сопротивления Стокса при конечности числа Рейнольдса обтекания частицы в модели (1) считается возможным пренебречь. Диапазон применимости выбранной модели «точечных частиц без гравитации» для лабораторных

течений ($Re = 2U_m R/\nu \sim 10^4 \text{—} 10^5$, $R \sim 0,1$ м, где U_m — среднерасходная скорость; R — радиус трубы или полуширина канала) ограничен размерами частиц, существенно меньшими толщины вязкого подслоя [12]. Поскольку толщина вязкого подслоя в таких течениях имеет порядок нескольких сотен микрон, из практической важности течений, удовлетворяющих этим ограничениям, прежде всего следует упомянуть аэрозоли и подобные им газодисперсные течения. Для течений других геометрических масштабов границы применимости можно установить из оценок, приведенных в [12].

При столкновении со стенкой частицы претерпевают неупругое соударение и поглощаются без отскока. Коэффициент осаждения частиц, называемый также безразмерной скоростью осаждения, $V_d^+ = J_w/\nu_\tau \Phi_m$, где J_w — поток дисперсной фазы на стенку; Φ_m — среднемассовая объемная концентрация дисперсной фазы на стенке, обычно является малой величиной. Вследствие этого влиянием уменьшения концентрации частиц в продольном направлении из-за осаждения и связанных с этим продольных градиентов концентрации на турбулентный перенос дисперсной фазы можно пренебречь.

3. Теория подобия пристенных турбулентных газодисперсных течений

В ограниченном стенками развитом турбулентном течении с достаточно большим числом Рейнольдса, построенном по динамической скорости и радиусу канала $R_+ = \nu_\tau R/\nu \gg 10^2$, область течения делится на две характерных области — внешнюю, занимающую почти всю область течения, и прилегающую к стенке внутреннюю область, или вязкий подслон толщиной $l_v \sim 10\nu/\nu_\tau$. Согласно принципу подобия турбулентных течений по числу Рейнольдса [13] вязкость не должна оказывать влияния на турбулентный перенос во внешней области. С другой стороны, малость толщины вязкого подслоя по сравнению с остальными характерными геометрическими размерами потока позволяет надеяться, что величина ν/ν_τ является единственным масштабом длины для величин потока в области вязкого подслоя. Эти два предположения лежат в основе теории подобия пристенной турбулентности (см. [14—16] и цитируемую там литературу), с помощью которой в [12] была построена теория подобия газодисперсных течений. Согласно этой теории главные приближения (первые члены асимптотических разложений) концентрации дисперсной фазы и стати-

стических моментов пульсаций скорости частиц во внешней области и в области вязкого подслоя соответственно имеют вид:

$$\Phi_{c+} - \Phi_+ = F_p(\eta, St_0), \quad \langle \mathbf{v}'_{i_1} \dots \mathbf{v}'_{i_n} \rangle = \mathbf{v}'_{\tau} \sigma_{p i_1 \dots i_n}^+(\eta, St_0), \quad (2)$$

$$\Phi_+ = \varphi_+(y_+, \tau_+, Sc_B), \quad \langle \mathbf{v}'_{i_1} \dots \mathbf{v}'_{i_n} \rangle = \mathbf{v}'_{\tau} \sigma_{p i_1 \dots i_n}(y_+, \tau_+, Sc_B), \quad (3)$$

где $\Phi_+ = \mathbf{v}_{\tau} \Phi / J_w$; Φ_{c+} — безразмерная концентрация частиц на оси канала; $\eta = y/R$; $y_+ = \mathbf{v}_{\tau} y / \nu$ — растянутые координаты для внешней области и вязкого подслоя соответственно; F_p , Φ_+ , $\sigma_{p i_1 \dots i_n}^+$ — универсальные функции; $Sc_B = \nu / D_B$ — число Шмидта броуновской диффузии; $\tau_+ = \mathbf{v}_{\tau}^2 \tau_p / \nu$ — безразмерное время релаксации или параметр инерционности частицы в вязком подслое; $St_0 = \mathbf{v}_{\tau} \tau_p / R$ — параметр инерционности частицы во внешней области. Параметры инерционности представляют собой отношение времени релаксации частицы к характерному масштабу времени турбулентных пульсаций скорости несущей фазы в рассматриваемой области течения и характеризуют влияние инерционности частиц на динамику дисперсной фазы.

Поскольку $St_0 = \tau_+ / R_+ \ll 1$ при $R_+ \gg 1$, частицы во внешней области при достаточно больших числах Рейнольдса R_+ ведут себя как безынерционные (пассивная примесь). Как показано в [12], в диапазоне расстояний от стенки $\tau_+ \ll y_+ \ll R_+$ для концентрации частиц выполняется логарифмический закон, аналогичный логарифмическому закону для пассивной примеси

$$\varphi_+ = \frac{Pr_t}{\kappa} \ln y_+ + B_p(\tau_+, Sc_B), \quad \tau_+ \ll y_+ \ll R_+, \quad (4)$$

где $\kappa = 0,42$ — постоянная Кармана; $Pr_t = 0,85$ — турбулентное число Прандтля; $B_p(\tau_+, Sc_B)$ — аддитивный коэффициент логарифмического закона, являющийся универсальной функцией аргументов.

Согласно [15] логарифмический закон (4) является хорошим приближением для профиля концентрации не только в логарифмическом слое, но и во всей внешней области $\eta = O(1)$ как для круглых труб, так и для плоских каналов:

$$\Phi_{c+} - \Phi_+ = F_p(\eta, 0) \approx -\frac{Pr_t}{\kappa} \ln \eta. \quad (5)$$

Сращивание (4) и (5) позволяет найти концентрацию частиц на оси канала

$$\Phi_{c+} = \frac{\text{Pr}_r}{\kappa} \ln R_+ + B_p(\tau_+, \text{Sc}_B) \quad (6)$$

и закон осаждения (детали вывода см. в приложении)

$$V_d^+ = \left(B_p(\tau_+, \text{Sc}_B) + \frac{\text{Pr}_r}{\kappa} \ln R_+ - \beta_p + \beta_1 \sqrt{\frac{\lambda}{8}} \right)^{-1}. \quad (7)$$

Выражение (7) уточняет полученное ранее в [12] асимптотическое выражение для коэффициента осаждения.

Для окончательного вычисления коэффициента осаждения согласно (7) требуется определить функцию $B_p(\tau_+, \text{Sc}_B)$. В [12] получены асимптотики этой функции для больших и малых значений параметра инерционности τ_+

$$B_p(\tau_+, \text{Sc}_B) = \frac{\pi}{2\sqrt{2}(A_{22}T_+)^{1/4}} \text{Sc}_B^4 \frac{\tau_+}{T_+ + \tau_+} \left[1 + O(\tau_+/T_+) \right],$$

$$\tau_+ \ll T_+, \quad (8)$$

$$B_p(\tau_+, \text{Sc}_B) = -\frac{\text{Pr}_r}{\kappa} \ln \tau_+ + C_p + O(1), \quad \tau_+ \gg T_+, \quad (9)$$

где $T_+ = \mathbf{v}_\tau^2 T_L / \nu$; T_L — интегральный масштаб времени нормальной к стенке пульсационной скорости несущей фазы; C_p — универсальная постоянная; A_{22} — универсальная постоянная в асимптотическом разложении нормальных напряжений Рейнольдса несущей фазы вблизи стенки.

$$\sigma_+ = A_{22} y_+^4 + O(y_+^5), \quad y_+ \rightarrow 0, \quad (10)$$

где $\sigma_+ = \langle u_y^2 \rangle / \mathbf{v}_\tau^2$; $\langle u_y^2 \rangle$ — нормальные напряжения Рейнольдса несущей фазы.

Для вычисления функции B_p во всей области изменения параметра τ_+ необходимо провести обработку экспериментальных данных по профилям концентрации частиц с целью определения коэффициентов в логарифмическом законе (4), однако, к сожалению, такие данные в современной литературе отсутствуют. Альтернативой экспериментальным данным могут служить данные прямого численного моделирования течений в каналах с осаждающимися частицами [11; 17—19], однако эти данные получены для

малых чисел Рейнольдса $R_+ \sim 125—340$, при которых турбулентность потока не является достаточно развитой для надежного выполнения соотношений подобия (2) и (3). Кроме того, из-за трудоемкости метода DNS имеющиеся на сегодняшний день данные получены только для нескольких значений параметра инерционности τ_+ и числа Шмидта Sc_B , что не позволяет надежно определить по ним функцию двух аргументов $B_p(\tau_+, Sc_B)$.

Наиболее удобным выходом из этой ситуации является использование адекватных RANS-моделей динамики частиц в турбулентном потоке, учитывающих влияние пространственно-временной нелокальности турбулентного переноса дисперсных частиц, вызванной их инерционностью. В данной работе для нахождения функции $B_p(\tau_+, Sc_B)$ будет использована основанная на модели движения частиц (1) модель переноса напряжений Рейнольдса дисперсной фазы [2; 20], замыкающие соотношения которой построены с учетом влияния малости турбулентного числа Рейнольдса в вязком подслое на турбулентный перенос.

4. Уравнения модели переноса напряжений дисперсной фазы в вязком подслое

С учетом малости толщины вязкого подслоя по сравнению с диаметром канала и упомянутой в конце раздела 1 малости продольных градиентов концентрации дисперсной фазы задача о динамике частиц в вязком подслое в первом приближении сводится к одномерной, в которой все величины зависят только от y_+ [6; 10]. Далее в данном разделе все уравнения будут приведены в безразмерном виде с использованием единиц стенки (v_τ и v). Поток частиц через вязкий подслоя по нормали к стенке является сохраняющейся величиной

$$V_+ \Phi_+ = -1, \quad (11)$$

где $V_+ = V/v_\tau$, v — средняя скорость дисперсной фазы по нормали к стенке.

Уравнения переноса для средней скорости и нормальных напряжений Рейнольдса частиц [2] для вязкого подслоя принимают вид

$$V_+ \frac{dV_+}{dy_+} = -\frac{V_+}{\tau_+} - \frac{d\sigma_p^+}{dy_+} - \frac{D_p^+}{\tau_+} \frac{d \ln \Phi_+}{dy_+}, \quad (12)$$

$$V_+ \frac{d\sigma_p^+}{dy_+} = \frac{1}{\Phi_+} \frac{d}{dy_+} \left(\Phi_+ D_p^+ \frac{d\sigma_p^+}{dy_+} \right) + 2 \left[\frac{1}{Sc_B \tau_+^2} + \frac{f_u \sigma_+ - \sigma_p^+}{\tau_+} - \frac{D_p^+}{\tau_+} \frac{dV_+}{dy_+} \right], \quad (13)$$

где $\sigma_p^+ = \langle \mathbf{v}_p'^2 \rangle / \mathbf{v}_\tau^2$ — безразмерные нормальные напряжения Рейнольдса частиц. Коэффициент турбулентной диффузии частиц имеет вид

$$D_p^+ = \tau_+ (\sigma_p^+ - f_u \sigma_+) + \sigma_+ T_+, \quad (14)$$

где интегральный временной масштаб взаимодействия частиц с турбулентностью несущей фазы T_+ определяется из соотношения [2]

$$T_+ = \left\{ 1 + \left[\frac{3(1+m)^2}{3+2m} - 1 \right] f(St_E) \right\} T_{L+}, \quad St_E = \frac{3+2m}{3(1+m)^2} \frac{\tau_+}{T_{L+}}; \quad (15)$$

$m = 0,5$ — структурный параметр; T_{L+} — лагранжев интегральный масштаб времени нормальных к стенке пульсаций скорости несущей фазы, задаваемый аппроксимацией

$$T_{L+} = \left[T_{L0+}^4 + \left(\frac{\kappa y_+}{Pr_\tau a_{22}} \right)^4 \right]^{1/4}, \quad (16)$$

где $T_{L0+} = 5$ [12]; $a_{22} \approx 1,1$ равно пределу нормальных турбулентных напряжений несущей фазы σ_+ при $y_+ \rightarrow \infty$, или, более точно, в логарифмическом слое $1 \ll y_+ \ll R_+$ [15].

Выражение (16) хорошо аппроксимирует вычисленный с помощью результатов расчетов методом DNS турбулентного течения в плоском канале [21] лагранжев интегральный временной масштаб для наибольшего значения $R_+ = 643$ по рекомендуемому в [22] методу (отношение турбулентной вязкости к нормальным турбулентным напряжениям) и удовлетворяет предельному соотношению $a_{22} T_{L+} \rightarrow \kappa y_+ / Pr_\tau$ при $y_+ \rightarrow \infty$. Коэффициент увлечения f_u рассчитывается по выражению

$$f_u = \frac{2\Omega + z^2}{2\Omega + 2\Omega^2 + z}, \quad (17)$$

где $\Omega = \tau_+ / T_+$; $z = \tau_{T_+} / T_+$; тейлоров масштаб времени τ_{T_+} рассчитывается по выражению

$$\tau_{T_+} = \left(\frac{2(a_{02} + \text{Re}_\lambda) \text{Re}_\lambda}{\sqrt{15}(a_{01} + a_{0\infty} \text{Re}_\lambda) \varepsilon_+} \right)^{1/2}; \quad \text{Re}_\lambda \equiv (15\sigma_+^2 / \varepsilon_+)^{1/2}; \quad (18)$$

ε_+ — безразмерная удельная диссипация кинетической энергии турбулентности; $a_{01} = 11$, $a_{02} = 205$, $a_{0\infty} = 7$ [2].

Нормальные напряжения Рейнольдса и диссипация задаются с помощью выражений

$$\sigma_+^{1/2} = 1,05 \tanh \left\{ 0,039 y_+ \left[1 - \exp(-y_+ / 3,4) \right] \right\},$$

$$\varepsilon_+ = \left\{ 1 - 0,095 y_+ \exp \left[- \left(\frac{y_+}{8} \right)^{1,5} \right] \right\} \frac{1 - \exp \left[- \frac{y_+}{10,6} - \left(\frac{y_+}{20} \right)^2 \right]}{0,41 y_+}, \quad (19)$$

хорошо аппроксимирующих результаты расчетов методом DNS турбулентного течения в плоском канале [21] для $R_+ = 643$.

Аппроксимация (19) соответствует значениям коэффициентов в (10) и (16) $a_{22} = 1,1$, $A_{22} = 1,45 \cdot 10^{-4}$. Необходимо отметить, что выбранное в настоящей работе значение A_{22} , основанное на данных DNS, более чем в два раза превышает рассчитанное на основе экспериментальных данных [23] значение $A_{22} = 6 \cdot 10^{-5}$, использованное в предыдущей работе [12].

На внешней границе вязкого подслоя в качестве граничных условий для нормальных напряжений Рейнольдса дисперсной фазы ставится условие однородности

$$\frac{d\sigma_p^+}{dy_+} \rightarrow 0, \quad y_+ \rightarrow \infty. \quad (20)$$

Это условие вытекает из квазиравновесного соотношения $\sigma_p^+ \rightarrow f_u \sigma_+$, следующего из (13) при $y_+ \rightarrow \infty$.

В качестве граничных условий на стенке для скорости и нормальных турбулентных напряжений частиц в [2] рекомендуется использовать условия, полученные на основе гипотезы о бинормальном распределении плотно-

сти вероятностей скоростей частиц в окрестности полностью поглощающей частицы стенки:

$$V = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \langle \mathbf{v}_p^2 \rangle^{1/2}, \quad \langle \mathbf{v}_p^3 \rangle = -\sqrt{\frac{8}{\pi}} \langle \mathbf{v}_p^2 \rangle^{3/2}, \quad (21)$$

где угловые скобки обозначают статистические моменты скорости частиц (нецентрированные моменты). Соответствующие (21) соотношения для моментов пульсаций скорости частиц (центрированных моментов) имеют вид

$$V = -\sqrt{\frac{2}{\pi-2}} \langle \mathbf{v}_p'^2 \rangle^{1/2}, \quad \langle \mathbf{v}_p'^3 \rangle = -\frac{\sqrt{2}(4-\pi)}{(\pi-2)^{3/2}} \langle \mathbf{v}_p'^2 \rangle^{3/2}, \quad y=0. \quad (22)$$

Выражая третий момент пульсаций скорости частиц с помощью градиентной модели [2]

$$\langle \mathbf{v}_p'^3 \rangle = -\tau_p \langle \mathbf{v}_p'^2 \rangle \frac{\partial \langle \mathbf{v}_p'^2 \rangle}{\partial y}$$

и переходя к безразмерным переменным, из (22) можно получить следующие граничные условия:

$$V_+ = -\left(\frac{2\sigma_p^+}{\pi-2}\right)^{1/2}, \quad \tau_+ \frac{d\sigma_p^+}{dy_+} = -\frac{\sqrt{2}(4-\pi)}{(\pi-2)^{3/2}} (\sigma_p^+)^{1/2}, \quad y_+ = 0. \quad (23)$$

Уравнения (11)—(13) с учетом соотношений (14)—(19) и граничных условий (20) и (23) решались численно с помощью конечно-разностного метода второго порядка точности на подробной сетке (601 расчетный узел) со сгущением в пристенной области для лучшего разрешения. Уравнение (13) решалось методом установления (введением в левую часть производной по времени и решением полученных конечно-разностных уравнений маршевым методом с помощью неявной схемы) начиная с некоторого начального приближения для σ_p^+ и V_+ . На каждом шаге по времени полученное из уравнений (11) и (12) уравнение для концентрации решалось численным интегрированием. После достижения сходимости численного решения аддитивный коэффициент $B_p(\tau_+, Sc_B)$ вычислялся с помощью соотношения (4) по расчетной концентрации частиц в последней точке расчетной области.

5. Результаты и обсуждение

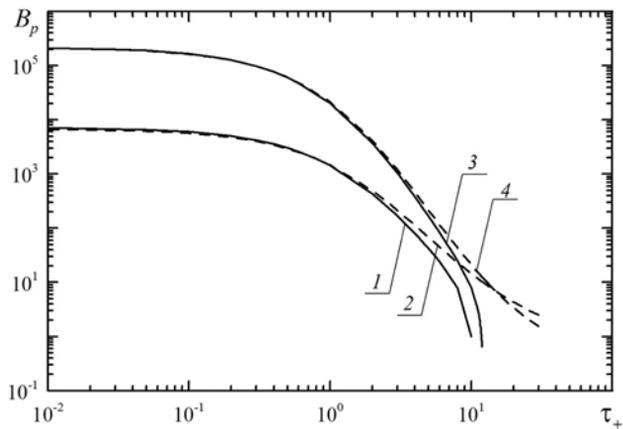
На рис. 1 представлены зависимости аддитивного коэффициента $B_p(\tau_+, Sc_B)$ от параметра инерционности τ_+ для двух чисел Шмидта — 10^4 и 10^6 . Как видно из рис. 1а, для малоинерционных частиц при $\tau_+ < 1$ величина $B_p(\tau_+, Sc_B)$ практически совпадает с асимптотическим выражением (8). При больших значениях параметра инерционности аддитивный коэффициент $B_p(\tau_+, Sc_B)$ хорошо описывается асимптотической зависимостью (9) для инерционных частиц, если взять $C_p \approx 1$ (рис. 1б). Заметное отклонение от асимптотической теории происходит в переходной области $1 < \tau_+ < 15$, причем переход от режима осаждения малоинерционных частиц к режиму осаждения инерционных частиц происходит скачкообразно. Наиболее интересным является обнаруженный гистерезис численного решения в интервале $\tau_{cr1} < \tau_+ < \tau_{cr2}$, где $\tau_{cr1} = 10,7$, $\tau_{cr2} = 11,65$ для частиц с $Sc_B = 10^4$ и $\tau_{cr1} = 10,7$, $\tau_{cr2} = 13,2$ для частиц с $Sc_B = 10^6$ (рис. 1б). В интервале $\tau_{cr1} < \tau_+ < \tau_{cr2}$ для одного значения τ_+ можно получить два устойчивых численных решения задачи (11)—(19), (20), (23), различающихся начальным приближением для нормального напряжения Рейнольдса частиц $\sigma_{p0}^+(y_+)$. При задании в качестве начального приближения для σ_{p0}^+ локально-равновесного распределения [2; 10]

$$\sigma_{p0}^+(y_+) = \sigma_{pe}^+(y_+) = f_u \sigma_+ + \frac{1}{Sc_B \tau_+} \quad (24)$$

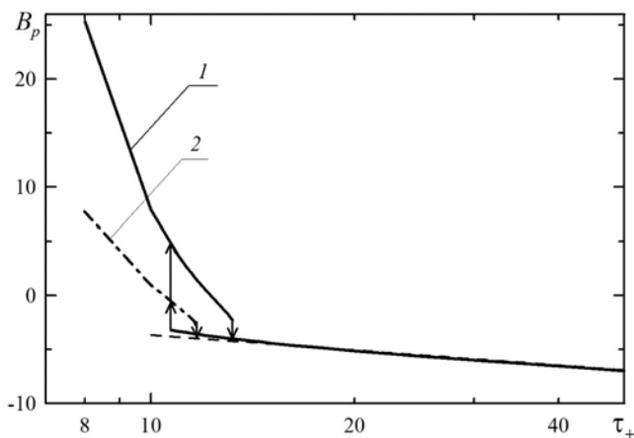
получается решение, соответствующее верхним кривым на рис. 1б. При задании начального приближения в виде

$$\sigma_{p0}^+(y) = (1 - \alpha) \sigma_{pe}^+(y) + \alpha \sigma_{pe}^+(\infty), \quad (25)$$

где $\alpha \sim 0,2$, получается решение, соответствующее нижней кривой на рис. 1б.



а



б

Рис. 1. Зависимость $B_p(\tau_+, Sc_B)$ от τ_+ для малоинерционных (а) и инерционных (б) частиц. а: 1, 2 — расчет и асимптотика (8) соответственно для $Sc_B = 10^4$, 3, 4 — для $Sc_B = 10^6$; б: 1, 2 — расчет для $Sc_B = 10^4$ и 10^6 соответственно, пунктирная линия — асимптотика (9)

Начальные приближения (24) и (25) отличаются друг от друга величиной нормального напряжения Рейнольдса частиц на стенке: для (24) она близка к нулю, а для (25) отличается от нуля. Возможно, именно это отличие является решающим для «выбора» одного из двух возможных численных решений, однако для окончательного подтверждения этого предположения требуется более глубокий анализ, выходящий за рамки данной работы. Характер кривых на рис. 1б позволяет предположить, что в задаче (11)—(19), (20), (23) имеет место бифуркация решения.

В пользу этого предположения также свидетельствует поведение расчетных распределений напряжений Рейнольдса дисперсной фазы, приведенные на рис. 2. Из рис. 2а видно, что при $\tau_+ < \tau_{cr2}$ распределение нормальных напряжений Рейнольдса частиц близко к равновесному (24). Вблизи стенки напряжение Рейнольдса в соответствии с (24) стремится к величине, определяемой броуновскими флуктуациями

$$\sigma_{pe}^+(0) = (Sc_B \tau_+)^{-1}. \quad (26)$$

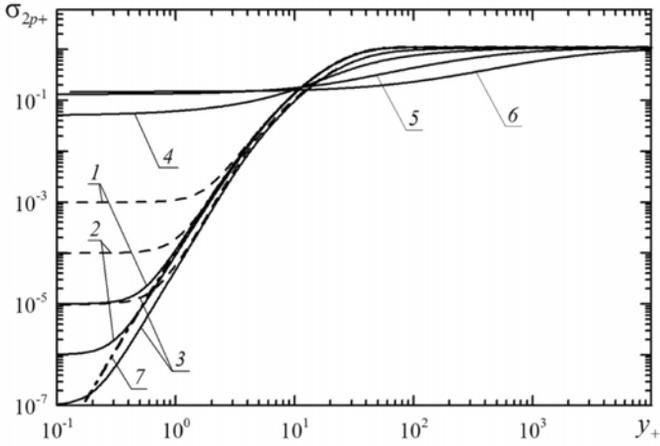
При значениях $\tau_+ > \tau_{cr2}$ и выше нормальные напряжения Рейнольдса частиц в глубине вязкого подслоя $y_+ < 1$ резко возрастают от весьма малых величин (26) до величин $\sim 0,1$, при этом их величина не зависит от числа Шмидта броуновской диффузии. На рис. 2б показано стремление распределения нормальных напряжений Рейнольдса частиц при росте параметра инерционности τ_+ к полученному в [12] закону подобия для распределения напряжений Рейнольдса инерционных частиц

$$\sigma_p^+ = T_{22}(y_p),$$

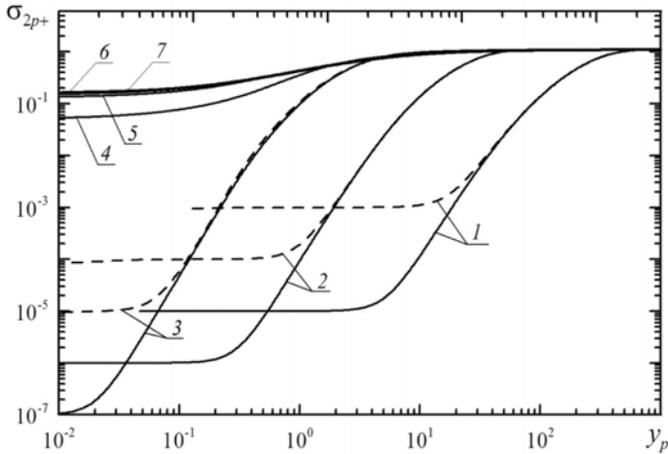
где $y_p = y_+/\tau_+$; T_{22} — универсальная функция, хорошо аппроксимируемая выражением

$$T_{22}(y_p) = \frac{0,16 + 0,46y_p + 0,022y_p^2}{1 + 0,48y_p + 0,02y_p^2}. \quad (27)$$

Бифуркационный характер зависимости величины нормальных напряжений Рейнольдса частиц на стенке $\sigma_{pw}^+ = \sigma_p^+(0, \tau_+, Sc_B)$ от параметра инерционности демонстрирует рис. 3. Кривые зависимости σ_{pw}^+ от τ_+ состоят из двух частей: нижней ветви $\tau_+ < \tau_{cr2}$, которая практически совпадает с квазиравновесным значением (26), и верхней ветви $\tau_+ > \tau_{cr1}$ (рис. 3а).

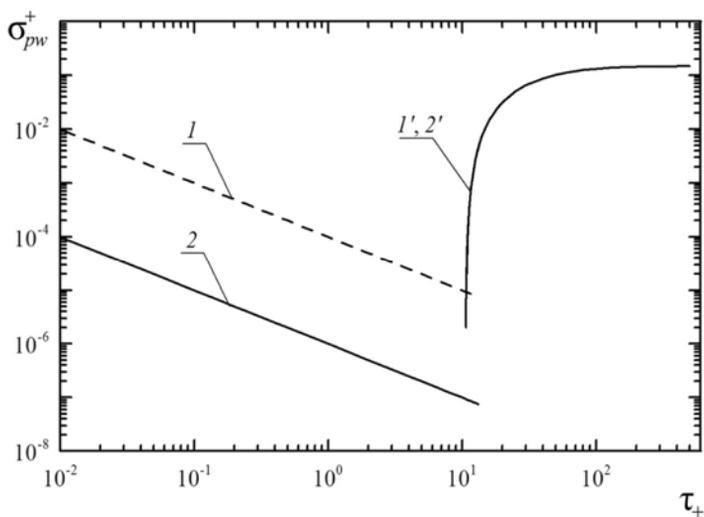


а

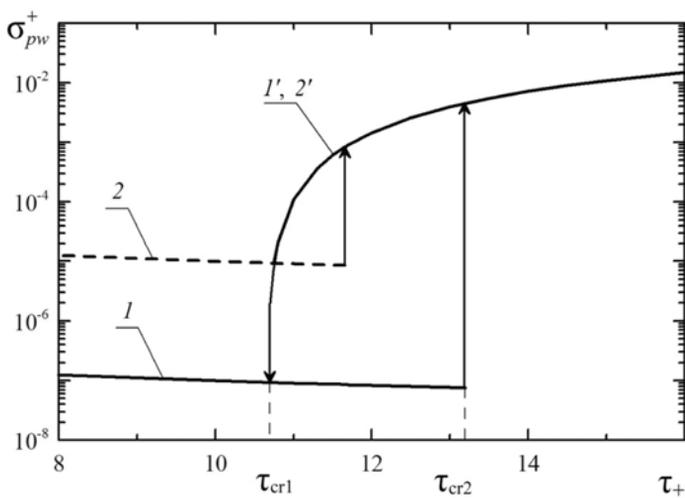


б

Рис. 2. Распределения нормальных напряжений Рейнольдса частиц, а, зависимость от y_+ : 1 — $\tau_+ = 0,1$, 2 — $\tau_+ = 1$, 3 — $\tau_+ = 10$, 4 — $\tau_+ = 25$, 5 — $\tau_+ = 100$, 6 — $\tau_+ = 500$, 7 — нормальные напряжения Рейнольдса несущей фазы; б, зависимость от y_p : 1 — $\tau_+ = 0,1$, 2 — $\tau_+ = 1$, 3 — $\tau_+ = 10$, 4 — $\tau_+ = 25$, 5 — $\tau_+ = 100$, 6 — $\tau_+ = 500$, 7 — асимптотика (27). Сплошная линия — $Sc_B = 10^6$, пунктирная линия — $Sc_B = 10^4$



a



б

Рис. 3. Зависимость нормального напряжения Рейнольдса частиц на стенке от параметра инерционности. Распределения нормальных напряжений Рейнольдса частиц: а — общий план, б — окрестность точки бифуркации. 1, 1' — $Sc_B = 10^4$, 2, 2' — $Sc_B = 10^6$

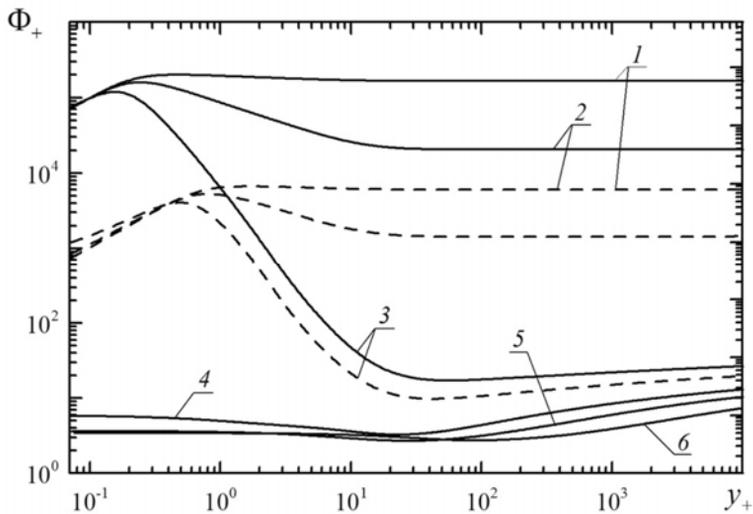
Характерной особенностью верхней ветви является независимость решения от коэффициента броуновской диффузии в соответствии с соображениями, приведенными в [12]. При больших значениях τ_+ в соответствии с (27) величина σ_{pw}^+ стремится к предельному значению, равному $T_{22}(0) \approx 0,16$. Более подробно окрестность точки бифуркации показана на рис. 3б. Нижняя ветвь кривых соответствует численному решению с начальными условиями (24), верхняя ветвь — с начальными условиями (25).

В окрестности точки бифуркации также наблюдается резкое изменение концентрации частиц в вязком подслое. На рис. 4а приведены профили концентрации, обезразмеренной в единицах стенки (3), для тех же значений параметра инерционности, что и на рис. 2. При $\tau_+ > 1$ отчетливо проявляется эффект аккумуляции частиц в вязком подслое, вызванный влиянием силы турбофореза. Согласно результатам [12] для малоинерционных частиц при $\tau_+ \ll 10$ максимум пристенного пика концентрации частиц должен располагаться в области $y_+ = O(\text{Sc}_B^{-1/4})$ и иметь величину

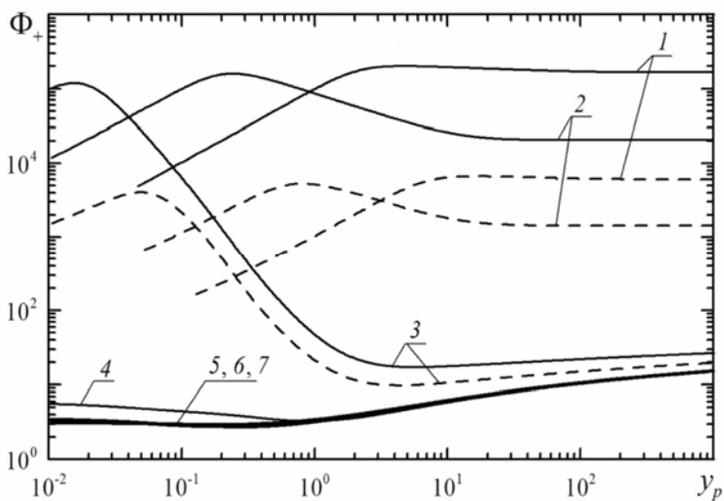
$\Phi_+ = O(\text{Sc}_B^{3/4})$. В соответствии с этим на рис. 4а величина пристенного максимума концентрации растет с увеличением числа Шмидта броуновской диффузии, а его местоположение сдвигается ближе к стенке.

Как показано в численных расчетах по аналогичной модели полной задачи динамики частиц в канале при отсутствии броуновской диффузии ($\text{Sc}_B = \infty$) [2; 20], профиль концентрации вблизи стенки становится сингулярным ($\Phi_+ \rightarrow \infty$), поэтому учет броуновской диффузии служит в данном случае полезным регуляризирующим фактором для численного решения. Как видно из рис. 4а, эффект аккумуляции наиболее сильно выражен при значении параметра инерционности $\tau_+ = 10$, ближайшем к точке бифуркации. На рис. 4б показано, что концентрация частиц при $\tau_+ \rightarrow \infty$ стремится к полученному в [12] закону подобия $\Phi_+ = \Phi_p(y_p)$, где Φ_p — универсальная функция, хорошо аппроксимируемая выражением

$$\Phi_+ = \Phi_p(y_p) = 2,02 \ln(2 + y_p) + 1,23 + 0,5 \exp(-7y_p). \quad (28)$$



a



б

Рис. 4. Распределения концентрации частиц. Обозначения те же, что и на рис. 2,
7 — асимптотика (28)

При $y_p > 7$, или $y_+ > 7\tau_+$, выражение (28) практически совпадает с асимптотикой (4) и (9), поэтому расстояние до стенки $y_+ = 7\tau_+$ можно считать границей, начиная с которой частицы ведут себя, как безынерционные.

Объяснить наблюдаемую в расчетах перестройку решения можно с помощью соображений, опирающихся на понятие пути торможения частицы в вязком подслое [12]. Путь торможения $l_p = \mathbf{v}_\tau \tau_p$ равен расстоянию, пройденному в неподвижной окружающей среде частицей с начальной скоростью \mathbf{v}_τ . Область вязкого подслоя характеризуется малостью поперечных пульсаций скорости несущей фазы, а скорость частиц, вовлеченных в турбулентное движение во внешней области, имеет порядок \mathbf{v}_τ , поэтому путь торможения представляет собой характерную глубину, на которую внедряются в вязкий подслои частицы из внешней области. Соотношение пути торможения и толщины вязкого подслоя играет важную роль для понимания динамики частиц в вязком подслое и, в частности, процессов аккумуляции частиц.

В единицах стенки путь торможения совпадает с параметром инерционности τ_+ , а толщина вязкого подслоя l_{v+} имеет порядок 10. Для малоинерционных частиц с $\tau_+ \ll 10$ путь торможения частиц много меньше как толщины вязкого подслоя, так и размеров турбулентных вихрей, и частицы в основном пассивно следуют за несущей фазой, слабо проникая в вязкий подслои из внешней области. При этом пульсации частиц в окрестности стенки малы и определяются броуновскими флуктуациями (26), а скорости осаждения невелики. Для инерционных частиц с $\tau_+ \gg 10$ путь торможения частиц намного превышает толщину вязкого подслоя и вовлеченные в турбулентное движение частицы проникают в вязкий подслои вплоть до стенки, благодаря чему пульсации скоростей частиц вблизи стенки и скорость осаждения заметно возрастают. Наиболее интересна ситуация в области промежуточных значений $\tau_+ \sim 10$, когда частицы имеют достаточную инерцию для того, чтобы проникнуть в вязкий подслои, но недостаточно длинный путь торможения для того, чтобы достичь стенки. В этом случае происходит накопление (аккумуляция) потерявших скорость частиц в вязком подслое, но перенос и осаждение частиц происходят в основном за счет броуновской диффузии и турбофореза.

Наблюдаемое в расчетах поведение решения и его перестройка в области $\tau_{cr1} < \tau_+ < \tau_{cr2}$ согласуются приведенными выше качественными соображениями, однако бифуркационный характер перестройки представляется достаточно необычным явлением для процессов переноса в развитом турбулентном течении. Тем не менее наличие бифуркации критического

типа (о докритических и закритических бифуркациях см. [24]) в решении уравнений модели переноса напряжений Рейнольдса частиц в вязком подслое было показано в [2; 10] с помощью приближенного аналитического решения задачи в упрощенной постановке со ступенчатым распределением напряжений Рейнольдса несущей фазы. Похожее явление закритической бифуркации для структурной функции — второго момента относительной скорости движения частиц — при некотором критическом значении параметра инерционности обнаружено в [25] при решении задачи об относительной дисперсии и кластеризации частиц в однородной изотропной турбулентности на основе модели замыкания второго порядка, аналогичной использованной в настоящей работе. Поведение нормальных напряжений Рейнольдса частиц на рис. 3б имеет сходство с бифуркацией докритического типа к конечно-амплитудному состоянию (точка $\tau_+ = \tau_{cr2}$), встречающейся во многих задачах устойчивости гидродинамических течений [24] и сопровождающейся гистерезисом решения. Можно предполагать, что возникновение вместо закритической бифуркации в численном решении задачи (11)—(19), (20), (23) бифуркации докритического типа и гистерезиса связано с нарушениями симметрии, вносимыми конечно-разностной дискретизацией, хотя необходимо отметить, что какой-либо существенной зависимости результатов от размера шага сетки в расчетах не наблюдалось. Исследование этого вопроса выходит за рамки данной работы, но представляет интерес для разработки математических моделей и численных алгоритмов моделирования турбулентных течений с инерционными частицами, способных избежать описанного выше нежелательного явления гистерезиса численного решения.

Необходимо отметить, что в ряде работ значение параметра инерционности $\tau_+ \sim 10$ упоминается в качестве границы диффузионно-импактного режима осаждения (diffusion-impaction regime) и режима инерционного замедления (inertia-moderated regime) [26]. Наличие бифуркации решения задачи (11)—(19), (20), (23) в районе $\tau_+ = \tau_{cr1}, \tau_{cr2}$ можно трактовать как наличие не плавной, а резкой границы между этими двумя режимами, если только, как уже упоминалось во введении, бифуркация решения не является лишь «паразитным эффектом» модели замыкания уравнения переноса вторых моментов (13).

Как упоминалось в разделе 2, в настоящее время отсутствуют экспериментальные данные по профилям концентраций и пульсаций скорости частиц в турбулентных дисперсных потоках в каналах. В качестве альтернативы физическому эксперименту в последнее время в теории турбулентных дисперсных течений активно предлагается численный эксперимент, основанный на методе DNS и лагранжевом траекторном описании дисперсной фазы [11]. Однако имеющиеся DNS-расчеты турбулентных

дисперсных течений с осаждающимися частицами обладают двумя недостатками. Первый связан с низкими числами Рейнольдса моделируемых течений $R_+ \sim 125\text{—}300$, при которых турбулентность несущей фазы еще нельзя назвать развитой для уверенного применения изложенной выше асимптотической теории. В частности, один из ключевых параметров задачи — распределение нормальных напряжений Рейнольдса несущей фазы при таких числах Рейнольдса на 15—20% ниже, чем предельное распределение (19) для $R_+ \rightarrow \infty$. Второй серьезный недостаток — во всех имеющихся DNS-расчетах не был достигнут статистически стационарный режим для концентрации частиц, особенно в области вязкого подслоя [17—19]. Поэтому сравнение с данными DNS-моделирования можно проводить лишь с целью подтвердить качественные тенденции той или иной модели, не надеясь на количественное соответствие.

На рис. 5 и 6 представлены сравнение рассчитанных профилей концентрации частиц с имеющимися в литературе данными прямого численного моделирования в плоском канале соответственно с $R_+ = \nu_\tau h/\nu = 125$ [17] и $R_+ = 150$ [19]. На этих рисунках расчетная концентрация отнесена к концентрации в центре канала Φ_{c+} , т. е. при $y_+ = R_+$, рассчитываемой по (6). В целом можно отметить качественное соответствие данных расчета с данными DNS при $\tau_+ < 10$. При низком числе Рейнольдса $R_+ \sim 150$ для частиц с $\tau_+ > 10$ влиянием инерции на частицы во внешней области течения пренебречь нельзя, поэтому расчет по асимптотической теории расходится с результатами DNS. Стоит отметить и расхождения результатов DNS-расчетов [17] и [19] между собой. В [17] соответствующий максимальному эффекту аккумуляции частиц наибольший пик концентрации частиц вблизи стенки наблюдался при $\tau_+ = 10$, что хорошо согласуется с результатами настоящей работы (см. рис. 4) и с результатами [2; 4; 20]. В DNS-расчетах [19] максимальный эффект аккумуляции частиц наблюдается при $\tau_+ = 25$. Кроме того, в [19] даже при $\tau_+ = 125$ величина нормальной к стенке компоненты пульсационной скорости частиц была равна нулю, что противоречит результатам других авторов [27—29]. Причины такого расхождения не очень понятны и, вероятно, связаны со слишком коротким временем расчета в [19] и отсутствием стационарной статистики концентрации частиц.

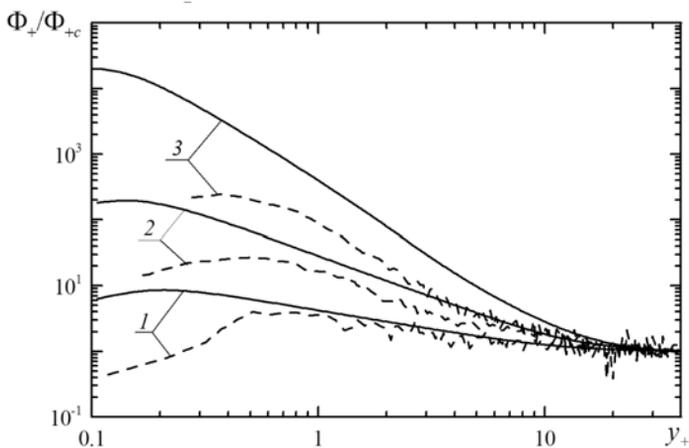
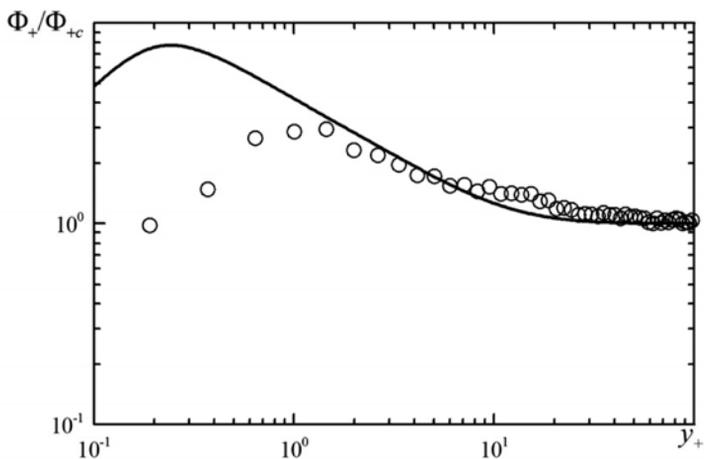
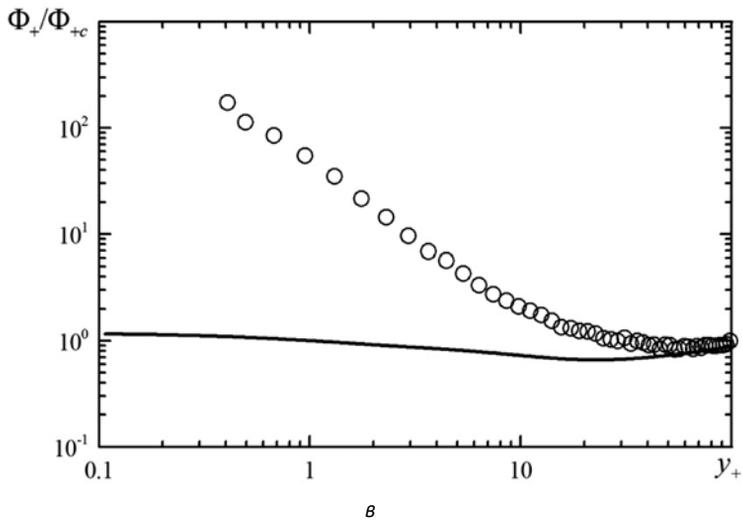
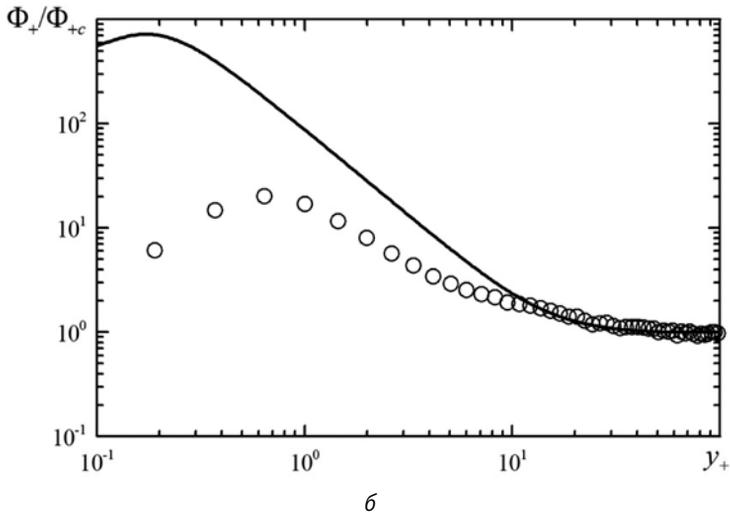
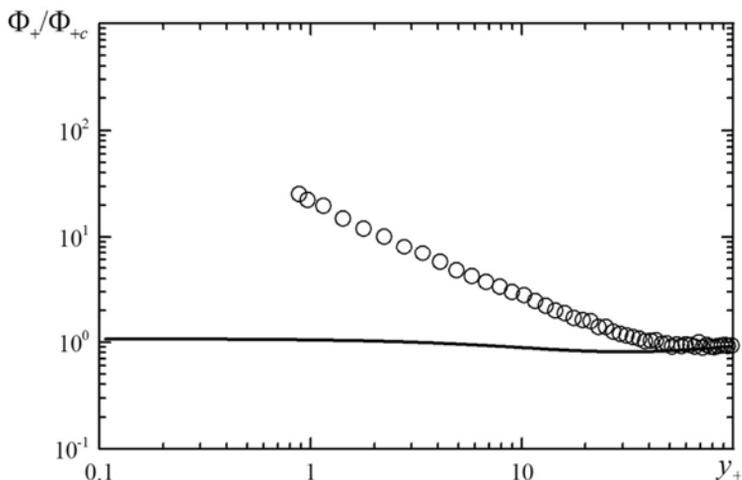


Рис. 5. Распределение концентрации частиц, отнесенной к концентрации на оси канала. Пунктирные линии — данные DNS [17], сплошные линии — расчет; 1 — $\tau_+ = 1$, $Sc_B = 1,84 \cdot 10^6$, 2 — $\tau_+ = 3$, $Sc_B = 3,30 \cdot 10^6$, 3 — $\tau_+ = 10$, $Sc_B = 6,15 \cdot 10^6$



a





2

Рис. 6. Распределения концентрации частиц, отнесенной к концентрации на оси канала. Кружки — данные DNS [19] ($Sc_B = \infty$), сплошные линии — расчет при $Sc_B = 10^6$; а — $\tau_+ = 1$, б — $\tau_+ = 5$, в — $\tau_+ = 25$, г — $\tau_+ = 125$

На рис. 7а приведена скорость осаждения, рассчитанная по (7) с использованием (П.8) и (П.9) для ряда возрастающих чисел Рейнольдса R_+ . Также как и для аддитивного коэффициента $B_p(\tau_+, Sc_B)$, в зависимости скорости осаждения от параметра инерционности τ_+ наблюдается гистерезис в диапазоне $\tau_{cr1} < \tau_+ < \tau_{cr2}$. Кривую осаждения можно разделить на две ветви: левую ($\tau_+ < \tau_{cr2}$), соответствующую малым, квазиравновесным значениям нормальных напряжений Рейнольдса частиц на стенке (кривые 1, 2 на рис. 3б), и правую ($\tau_{cr1} < \tau_+$), для которой нормальные напряжения Рейнольдса частиц на стенке заметно отличны от нуля (кривые 1', 2' на рис. 3б). При этом левая ветвь кривой осаждения при $\tau_+ < 10$ практически не зависит от R_+ и от геометрии течения (плоский канал или круглая труба) и определяется величиной числа Шмидта броуновской диффузии Sc_B .

Правая ветвь не зависит от Sc_B и более чувствительна к геометрии течения, хотя с ростом числа Рейнольдса зависит от нее слабее. Ниже показано, что граница применимости рассматриваемой асимптотической теории

соответствует значению $\tau_+ \sim 0,03R_+$, поэтому не все части представленных кривых являются физически значимыми. Так, для числа Рейнольдса $R_+ = 150$, характерного для большинства современных расчетов методом DNS [11; 17—19], использовать предложенную теорию можно лишь до значений $\tau_+ \sim 5$. Для сравнения на рис. 7а приведена эмпирическая корреляция [30]:

$$V_d^+ = 3,25 \cdot 10^{-4} \tau_+^2, \quad 0,2 < \tau_+ < 22,9,$$

$$V_d^+ = 0,17, \quad 22,9 < \tau_+ < 14827, \quad (29)$$

полученная в результате обобщения практически всех известных к тому времени экспериментальных данных.

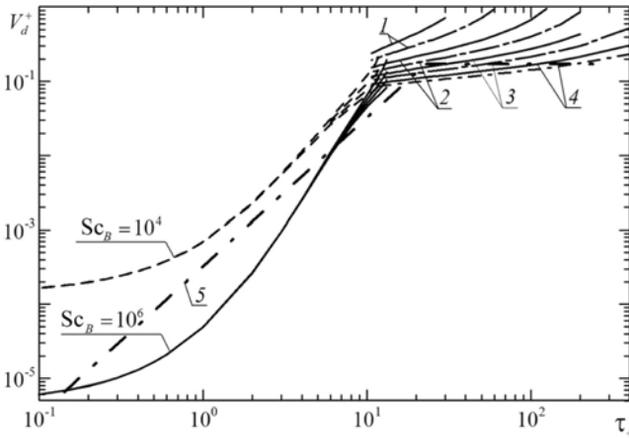


Рис. 7а. Зависимость скорости осаждения от параметра инерционности частиц, расчет: 1 — $R_+ = 150$, 2 — $R_+ = 500$, 3 — $R_+ = 1500$, 4 — $R_+ = 5000$, сплошная и пунктирная линии — круглая труба, штрих-пунктирная линия — плоский канал, 5 — эмпирическая корреляция (29)

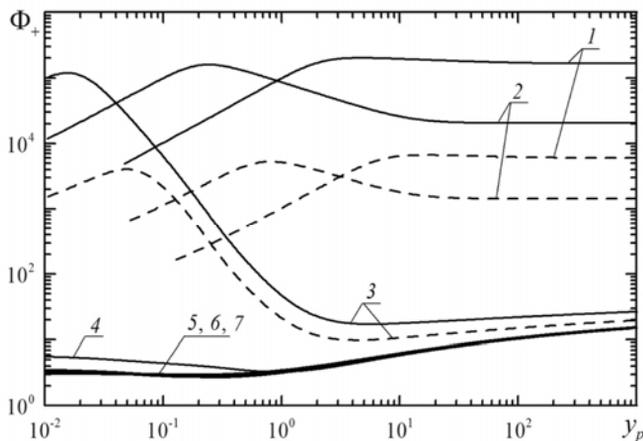


Рис. 7б. Зависимость скорости осаждения от параметра инерционности частиц, б, сравнение с DNS: сплошная линия: — расчет для круглой трубы $Sc_B = 10^6$, $R_+ = 1300$, пунктирная линия — расчет для плоского канала $Sc_B = 10^6$, $R_+ = 150$, штрих-пунктирная линия — эмпирическая корреляция (29), 1 — данные [32] ($Sc_B = 0,8—4 \cdot 10^6$, $R_+ = 1300$), 2 — данные [31] ($Sc_B = 1,3 \cdot 10^6$, $R_+ = 400—1300$), 3 — данные DNS [19] ($Sc_B = \infty$, $R_+ = 150$), 4 — данные DNS [17] ($Sc_B = 0,18—1,4 \cdot 10^7$, $R_+ = 125$), 5 — данные DNS [18] ($Sc_B = \infty$, $R_+ = 337$)

Как видно из рис. 7а, хотя результаты расчетов по асимптотической теории и корреляция (29) сравнительно близки друг к другу, они принципиально различаются в области диффузионно-импактного режима осаждения $0.1 < \tau_+ < 10$: согласно результатам [12] и настоящей работы скорость осаждения в диффузионно-импактном режиме зависит от коэффициента броуновской диффузии, что не отражено в (29). По-видимому, именно неучет броуновской диффузии наряду с сильным влиянием плохо контролируемой в эксперименте полидисперсности частиц [17] приводит к значительному разбросу экспериментальных данных по скорости осаждения частиц в диффузионно-импактном режиме, обработанных в координатах $V_d^+ = V_d^+(\tau_+)$ [30]. В связи с этим результаты расчетов в области диффузионно-импактного режима более удобно сравнивать с данными DNS-расчетов, свободных от влияния полидисперсности.

На рис. 7б результаты расчетов скорости осаждения для частиц с $Sc_B = 10^6$ сравниваются с данными DNS расчетов [17—19] и с экспериментальными данными [31; 32]. Предсказываемая моделью (7), (11)—(19), (20), (23) зависимость $V_d^+(\tau_+)$ удовлетворительно согласуется как с экспериментальными данными [32], полученными для достаточно большого числа Рейнольдса $R_+ = 1300$, так и с данными DNS. Однако в силу малости числа Рейнольдса ($R_+ = 125—337$) в DNS расчетах область значений $\tau_+ \sim 5—10$, как упоминалось выше, находится на границе применимости рассматриваемой теории, основанной на слабом влиянии инерции частиц во внешней области. При малых R_+ влияние инерции начинает замедлять пульсационное движение частиц во внешней области, что проявляется в наблюдаемом на рис. 7б занижении данных DNS по сравнению с расчетом по (7).

6. Закон осаждения и пристеночная функция для концентрации частиц

Полученные в результате решения задачи (11)—(19), (20), (23) зависимости для аддитивного коэффициента $B_p(\tau_+, Sc_B)$ в диапазоне чисел Шмидта броуновской диффузии $10^3 < Sc_B < 10^9$ хорошо аппроксимируются выражениями

$$B_p(\tau_+, Sc_B) = Sc_B^{0,75 - \tau_+ / (5 + \tau_+)} \Psi(\tau_+, \ln Sc_B), \quad \tau_+ < \tau_{cr2}, \quad (30)$$

$$B_p(\tau_+, Sc_B) = 1 - 2,024 \ln \tau_+, \quad \tau_+ > \tau_{cr1}, \quad (31)$$

где

$$\Psi(\tau_+, \ln Sc_B) = 6,8 \left[1 - (0,16 - 6,5 \cdot 10^{-3} \ln Sc_B) \tau_+ + 8 \cdot 10^{-3} \tau_+^2 - 7,5 \cdot 10^{-4} \tau_+^3 \right].$$

Выражения (7), (30) и (31) представляют собой аппроксимацию закона осаждения. Используя (П.8) и (П.9), а также основанную на законе Блазиуса аппроксимацию закона трения $\sqrt{\lambda}/8 = R_+^{-1/7}/7$ [33], можно записать аппроксимацию закона осаждения для диффузионно-импактного режима $\tau_+ < \tau_{cr2}$:

$$V_d^+ = \left[\frac{Sc_B^{0,75-\tau_+/(5+\tau_+)} \Psi(\tau_+, \ln Sc_B) +}{+2,024 \ln R_+ - 2,2 + 0,9R_+^{-1/7}} \right]^{-1} \quad (\text{плоский канал}), \quad (32)$$

$$V_d^+ = \left[\frac{Sc_B^{0,75-\tau_+/(5+\tau_+)} \Psi(\tau_+, \ln Sc_B) +}{+2,024 \ln R_+ - 3,3 + 1,1R_+^{-1/7}} \right]^{-1} \quad (\text{круглая труба}), \quad (32')$$

а также для инерционного режима $\tau_+ > \tau_{\text{crit}}$

$$V_d^+ = \left(2,024 \ln \frac{R_+}{\tau_+} - 1,2 + 0,9R_+^{-1/7} \right)^{-1} \quad (\text{плоский канал}), \quad (33)$$

$$V_d^+ = \left(2,024 \ln \frac{R_+}{\tau_+} - 2,3 + 1,1R_+^{-1/7} \right)^{-1} \quad (\text{круглая труба}). \quad (33')$$

Полученные результаты для концентрации частиц можно использовать для постановки граничных условий при численных расчетах турбулентных газодисперсных потоков с помощью метода пристеночных функций [34]. В этом методе, основанном на упомянутой выше теории подобия пристенной турбулентности, граничные условия для величин потока ставятся не на стенке, а в пределах логарифмического слоя $1 \ll y_+ \ll R_+$, или по более точным оценкам $30 < y_+ < 0,2R_+$. Область применимости логарифмического закона для концентрации частиц (4) внутри логарифмического подслоя, как было показано в разделе 4, находится при $y_+ > 7\tau_+$. Поэтому удобно располагать ближайший к стенке расчетный узел на расстоянии y_{1+} таким, что $\max\{7\tau_+, 30\} < y_{1+} < 0,2R_+$. В этом случае выражение (4) с учетом (30) и (31) можно использовать в качестве граничного условия для концентрации частиц. Область $\max\{7\tau_+, 30\} < y_{1+} < 0,2R_+$ существует только при условии $\tau_+ < 0,03R_+$. При $\tau_+ > 0,03R_+$ влияние инерции частиц проникает во внешнюю область течения, что приводит к уменьшению вовлечения частиц в турбулентное движение и вызванному с этим снижению скорости осаждения (с чем и связано название «режим инерционного замедления»).

В области $y > y_{1+}$ частицы ведут себя, как безинерционные [12] и для статистических моментов пульсаций скорости частиц с хорошей точностью можно использовать квазиравновесные соотношения [2; 5]. Для нахождения концентрации частиц в области $y > y_{1+}$ можно использовать равно-

весные эйлеровы модели для малоинерционных частиц, например, диффузионно-инерционную модель [34—37]. Таким образом, можно корректно моделировать течения, вообще говоря, инерционных частиц с параметром инерционности $\tau_+ < 0,03R_+$ с помощью равновесных эйлеровых моделей, используя граничное условие (4), в котором через аддитивный коэффициент $B_p(\tau_+, Sc_B)$ учтены эффекты инерционности частиц. Например, многие практически значимые газодисперсные потоки в каналах используются при числах Рейнольдса $Re = 20000—1000000$ ($R_+ = 600—20000$). Использовать равновесную эйлерову модель для расчета таких течений можно для частиц с $\tau_+ = 20—500$, т. е. практически вплоть до верхней границы применимости модели «точечных частиц без гравитации» (1) [10]. Приведенные соображения объясняют успешное применение диффузионно-инерционной модели с пристеночными функциями для расчетов распространения и осаждения частиц в различных турбулентных течениях [34—37].

7. Заключение

На основе теории подобия пристенных турбулентных газодисперсных течений [12] и дифференциальной модели переноса напряжений Рейнольдса частиц [2] рассмотрена задача осаждения частиц из турбулентного газодисперсного потока в каналах при значениях параметра инерционности $\tau_+ < 0,03R_+$. Поскольку влияние инерции частиц с такими параметрами инерционности не выходит за пределы пристенной области (вязкий подслои + логарифмический слой), во внешней области потока скорость частиц практически совпадает со скоростью несущей фазы, а напряжения Рейнольдса дисперсной фазы во внешней области в первом приближении совпадают с напряжениями Рейнольдса несущей фазы. Для концентрации частиц во внешней области справедливы известные законы подобия для профилей концентрации и температуры в пристенных турбулентных течениях [14; 15]. Задача нахождения скорости осаждения частиц сводится к нахождению аддитивного коэффициента в логарифмическом законе (4), который находится из решения одномерной задачи динамики частиц в вязком подслое.

Численное решение задачи показало наличие резкой границы между двумя режимами осаждения: диффузионно-импактным и режимом инерционного замедления. Диффузионно-импактный режим наблюдается при значениях параметра инерционности τ_+ , меньших критического значения τ_{cr2} , величина которого зависит от числа Шмидта броуновской диффузии ($\tau_{cr2} = 11,65$ для $Sc_B = 10^4$ и $\tau_{cr2} = 13,2$ для $Sc_B = 10^6$), и характеризуется

определяемыми броуновской диффузией малыми квазиравновесными величинами нормальных напряжений Рейнольдса частиц на стенке и малыми скоростями осаждения. Режим инерционного замедления наблюдается при значениях параметра инерционности, больших критического значения τ_{cr1} , величина которого $\tau_{cr1} = 10,7$ в настоящих расчетах оказалась не зависящей от Sc_B , и отличается заметными величинами нормальных напряжений Рейнольдса частиц на стенке (примерно 0,1 от их значения в ядре потока) и заметно большими скоростями осаждения. Перестройка решения от одного режима к другому имеет характер бифуркации, существование которой было показано ранее в [2; 10]. Однако в отличие от обнаруженной в [2; 10] закритической бифуркации при одном критическом значении параметра инерционности в численном решении, полученном в настоящей работе, имеет место докритическая бифуркация, сопровождаемая гистерезисом решения в сравнительно небольшом диапазоне $\tau_{cr1} < \tau_+ < \tau_{cr2}$. Докритическая бифуркация наблюдается также и в зависимости скорости осаждения частиц от параметра инерционности. Появление докритической бифуркации вместо закритической может быть связано как с особенностями используемой модели переноса напряжений Рейнольдса частиц, так и с эффектами конечно-разностной дискретизации задачи, и требует более подробного исследования. В частности, представляло бы большой интерес подтверждение или опровержение наличия бифуркации вторых моментов дисперсной фазы в численном моделировании методом DNS задачи осаждения частиц с помощью лагранжева подхода. При этом необходимо учитывать, что в отличие от рассмотренного выше решения, справедливого в пределе больших чисел Рейнольдса, критическое значение параметра инерционности в точке бифуркации для задачи с характерным для DNS-расчетов невысоким числом Рейнольдса может, вообще говоря, зависеть от числа Рейнольдса.

Показано что в диффузионно-импактном режиме при приближении к точке бифуркации наблюдается наиболее сильный эффект аккумуляции частиц в вязком подслое. С помощью аппроксимации численного решения получены корреляции для скорости осаждения частиц в диффузионно-импактном режиме и режиме инерционного замедления для газодисперсных течений в плоском канале и круглой трубе, хорошо согласующиеся с имеющимися экспериментальными данными и данными DNS-расчетов. Получены выражения для граничных условий типа пристеночных функций, связывающих концентрацию частиц и поток осаждающихся на стенку частиц, позволяющие использовать равновесные эйлеровы модели турбулентного переноса малоинерционных частиц для расчета частиц с параметром инерционности $\tau_+ < 0,03R_+$, что при достаточно больших числах Рейнольдса может достигать значения нескольких сотен.

Автор благодарит Л. И. Зайчика за внимание к данной работе и полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Программы фундамен-

тальных исследований № 11 Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН.

Приложение

Для вычисления коэффициента осаждения необходимо определить среднemasовую концентрацию частиц, определяемую соотношением

$$\Phi_m = \frac{(k+1)}{R^{k+1}U_m} \int_0^R (R-y)^k U(y) \Phi(y) dy, \quad (\text{П.1})$$

где $k=0,1$ для плоского канала и трубы соответственно; U — продольная скорость несущей фазы; U_m — среднерасходная скорость, вычисляемая по формуле

$$U_m = \frac{(k+1)}{R^{k+1}} \int_0^R (R-y)^k U(y) dy. \quad (\text{П.2})$$

Как показано в [15], основной вклад в интегралы (П.1) и (П.2) дает внешняя область, а вкладом тонкого вязкого подслоя можно пренебречь. Поэтому для вычисления (П.1) и (П.2) можно использовать выражение (5) и закон дефекта скорости Кармана [15]

$$U_+ = U_{c+} - F(\eta), \quad (\text{П.3})$$

где U_{c+} — скорость на оси канала в единицах стенки.

Из (П.2) и (П.3) следует, что

$$U_{m+} = U_{c+} - \beta, \quad \beta = (k+1) \int_0^1 (1-\eta)^k F(\eta) d\eta, \quad (\text{П.4})$$

$$\Phi_{m+} = \Phi_{c+} - \beta_p + \beta_1 U_{m+}^{-1} = \Phi_{c+} - \beta_p + \beta_1 \sqrt{\frac{\lambda}{8}},$$

$$\beta_p = (k+1) \int_0^1 (1-\eta)^k F_p(\eta, 0) d\eta,$$

$$\beta_1 = (k+1) \int_0^1 (1-\eta)^k F(\eta) F_p(\eta, 0) d\eta - \beta \beta_p, \quad (\text{П.5})$$

где $\lambda = 8(\mathbf{v}_\tau / U_m)^2$ — коэффициент сопротивления.

Для вычисления постоянных β , β_p , β_1 можно воспользоваться либо экспериментальными данными, либо подходящей обобщающей их эмпирической формулой. В качестве последних можно выбрать рекомендованные в [15] выражения:

$$F(\eta) = -2,44 \ln \eta + 0,68 - 4,48\eta^2 + 3,8\eta^3 \text{ для плоского канала, (П.6)}$$

$$F(\eta) = -2,5 \ln \eta + 0,8 - 4,9\eta^2 + 4,1\eta^3 \text{ для круглой трубы. (П.7)}$$

Подставляя (5), (П.6), (П.7) в (П.4) и (П.5), получим:

$$\beta = 2,6, \beta_p = 2,2, \beta_1 = 6 \text{ для плоского канала, (П.8)}$$

$$\beta = 4,1, \beta_p = 3,3, \beta_1 = 7,6 \text{ для круглой трубы. (П.9)}$$

С учетом связи безразмерной концентрации на оси и коэффициента осаждения $V_d^+ = \Phi_{m^+}^{-1}$ из (6) и (П.4) следует закон осаждения (7).

Литература

1. *Guha A.* Transport and deposition of particles in turbulent and laminar flows // *Ann. Rev. Fluid Mechanics.* — 2008. — Vol. 40. — P. 311—341.
2. *Зайчик Л. И., Алипченков В. М.* Статистические модели движения частиц в турбулентной жидкости. — М.: Физматлит, 2007. — 308 с.
3. *Shin M., Lee J. W.* Memory effect in the Eulerian particle deposition in a fully developed turbulent channel flow // *J. Aerosol Sci.* — 2001. — Vol. 32. — P. 675—693.
4. *Shin M., Kim D. S., Lee J. W.* Deposition of inertia-dominated particles inside a turbulent boundary layer // *Int. J. Multiphase Flow.* 2003. — Vol. 29. — P. 893—926.
5. *Derevich I. V.* Statistical modelling of mass transfer in turbulent two-phase dispersed flows. — 1: Model development // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* — 2000. — Vol. 43, № 19. — P. 3709—3723.
6. *Derevich I. V.* Statistical modelling of mass transfer in turbulent two-phase dispersed flows. — 2: Calculation results // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* 2000. — Vol. 43, № 19. — P. 3725—3734.
7. *Caporaloni M., Tampieri F., Trombetti F., Vittori O.* Transfer of particles in nonisotropic air turbulence // *J. Atmos. Sci.* — 1975. — Vol. 32. — P. 565—568.
8. *Reeks M. W.* The transport of discrete particles in inhomogeneous turbulence // *J. Aerosol Sci.* — 1983. — Vol. 14. — № 6. — P. 729—739.

9. Young J. B., Leeming A. D. A Theory of particle deposition in turbulent pipe flow // J. Fluid Mech. — 1997. — Vol. 340. — P. 129—159.
10. Гусев И. Н., Зайчик Л. И. Моделирование динамики частиц в пристеночной области газодисперсного турбулентного потока // Изв. АН СССР. МЖГ. — 1991. — № 1. — С. 50—60.
11. Soldati A., Marchioli S. Physics and modelling of turbulent particle deposition and entrainment: Review of a systematic study // Int. J. Multiphase Flow. — 2009. — Vol. 35, № 9. — P. 827—839.
12. Сиковский Д. Ф. Закономерности осаждения частиц из турбулентного газодисперсного потока в каналах // Изв. РАН. МЖГ. — 2010. — № 1. — С. 84—95.
13. Townsend A. A. The Structure of Turbulent Shear Flow. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1956. — 315 p.
14. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. Механика турбулентности. — Ч. 1. — М.: Наука, 1965. — 639 с.
15. Кадер Б. А., Яглом А. М. Законы подобия для пристенных турбулентных течений // Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и газа. — Т. 15. — С. 81—155.
16. Lundgren T. S. Asymptotic analysis of the constant pressure turbulent boundary layer // Phys. Fluids. — 2007. — Vol. 19, № 5. — P. 055105.
17. Chen M., McLaughlin J. B. A new correlation for the aerosol deposition rate in vertical ducts // J. Colloid and Interface Sci. — 1995. — Vol. 169. — P. 437—455.
18. Marchioli C., Giusti M., Salvetti M. V., Soldati A. Direct numerical simulation of particle wall transfer and deposition in upward turbulent pipe flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29, № 6. — P. 1017—1038.
19. Marchioli C., Picciotto M., Soldati A. Influence of gravity and lift on particle velocity statistics and transfer rates in turbulent vertical channel flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 2007. — Vol. 33, № 3. — P. 227—251.
20. Алипченков В. М., Зайчик Л. И. Моделирование турбулентного движения частиц в вертикальном канале // Изв. РАН. МЖГ. — 2006. — № 4. — С. 50—65.
21. Iwamoto K. Database of Fully Developed Channel Flow: THTLab Internal Report ILR-0201 / Department of Mechanical Engineering, University of Tokyo. — [S. l.], June 2002.
22. Oesterlé B., Zaichik L. I. On Lagrangian time scales and particle dispersion modeling in equilibrium turbulent shear flows // Phys. Fluids. — 2004. — Vol. 16, № 9. — P. 3374—3384.
23. Son J. S., Hanratty T. J. Limiting relation for the eddy diffusivity close to a wall // AIChE J. — 1967. — Vol. 13, № 4. — P. 689—696.
24. Schmid P. J., Henningson D. S. Stability and transition in shear flows: 3rd ed. — N.Y.: Springer, 2001. — 558 p.

25. *Zaichik L. I., Alipchenkov V. M.* Refinement of the probability density function model for preferential concentration of aerosol particles in isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2007. — Vol. 19, № 11. — P. 113308.
26. *Sippola M. R., Nazaroff W. W.* Particle deposition from turbulent flow: review of published research and its applicability to ventilation ducts in commercial buildings: Lawrence Berkeley National Laboratory Report LBNL-51432. — [S. l.], June 2002.
27. *Wang Q., Squires K. D.* Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow // *Phys. Fluids*. — 1996. — Vol. 8, № 5. — P. 1207—1223.
28. *Rouson D. W. I., Eaton J. K.* Direct numerical simulation of particles interacting with a turbulent channel flow // *Proc. 7th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. Erlangen, Germany, 1994.
29. *Fukagata K., Zahrarai S., Bark F. H.* Force balance in a turbulent particulate channel flow // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1998. — Vol. 24, № 6. — P. 867—887.
30. *McCoy D. D., Hanratty T. J.* Rate of deposition of droplets in annular two-phase flow // *Intern. J. Multiphase Flow*. — 1977. — Vol. 3, № 4. — P. 319—331.
31. *Wells A. C., Chamberlain A. C.* Transport of small particles to vertical surfaces // *Brit. J. Appl. Phys.* — 1967. — Vol. 18, № 12. — P. 1793—1799.
32. *Liu B. Y. H., Agarwal J. K.* Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow // *J. Aerosol Sci.* — 1974. — Vol. 5, № 2. — P. 145—155.
33. *Шлихтинг Г.* Теория пограничного слоя. — М.: Наука, 1974. — 712 с.
34. *Волков Э. П., Зайчик Л. И., Перцуков В. А.* Моделирование горения твердого топлива. — М.: Наука, 1994. — 320 с.
35. *Nerisson P., Ricciardi L., Simonin O., Fazileabasse J.* Modelling aerosol transport and deposition in a ventilated room // 6th Int. Conf. Multiphase Flow, ICMF 2007. Leipzig, Germany, 2007. — Paper PS3-5.
36. *Дробышевский Н. И., Зайчик Л. И., Мукин Р. В.* и др. Развитие и применение диффузионно-инерционной модели для расчета газодисперсных турбулентных течений // *Теплофизика и аэромеханика*. — 2009. — Т. 16, № 4. — С. 553—572.
37. *Demenkov A. G., Ilyushin B. B., Sikovsky D. Ph.* et al. Development of diffusion-inertia model for particle deposition in turbulent flows // *J. of Engineering Thermophysics*. — 2009. — Vol. 18, № 1. — P. 39—48.

Экспериментальное исследование кавитационного обтекания двумерных гидропрофилей

С. В. Алексеенко, А. Ю. Кравцова, Д. М. Маркович, К. С. Первунин, М. В. Тимошевский

1. Введение

Важнейшими условиями безопасной и эффективной работы как вновь создаваемых, так и уже эксплуатирующихся гидроэнергетических систем являются надежность и долговечность используемого оборудования. Как правило, работа реальных энергетических агрегатов, таких как гидротурбины, и гидротехнических сооружений, например, подводящих трактов и отсасывающих труб гидроэлектростанций, сопровождается наличием нестационарного турбулентного течения сложной геометрии, зачастую являющегося двухфазным. Повышение ресурса работы, увеличение КПД гидромашин, а главное — степени их безопасности, невозможно без изучения физических механизмов гидродинамических процессов, наиболее существенную роль среди которых играют крупномасштабные вихревые структуры (КВС) и кавитация. Взаимодействие КВС с парогазовой дисперсной фазой является сложным нелинейным процессом, оказывающим существенное влияние на кавитационную эрозию элементов гидроагрегатов и на пульсационные характеристики течения вследствие взаимного влияния непрерывной фазы и частиц дисперсной фазы. На траектории частиц влияет локальная неравновесная турбулентность жидкости (турбулентная дисперсия), при этом движение пузырей оказывает существенное влияние на турбулентную структуру потока (модуляция турбулентности). Как известно, возникновение резонансных эффектов может приводить к чрезмерным вибрационным нагрузкам и, как следствие, выходу из строя гидроагрегатов, а в худшем случае даже к авариям и катастрофам. Кавитационная эрозия, в свою очередь, является одним из механизмов интенсивного износа рабочих колес гидротурбин и насосного оборудования, что существенно снижает их ресурс работы и увеличивает затраты на производство и потребление энергии. Как правило, кавитационной эрозии подвергаются определенные участки тыльных сторон лопаток, втулок и ободов рабочих колес, при этом остальная поверхность остается неповрежденной. Это обуславливается определяющей ролью пространственной

структуры двухфазного течения на процесс кавитационной эрозии. Следует также отметить, что разрабатываемые методы уменьшения негативного влияния кавитации должны удовлетворять требованию минимизации потерь энергии, чего можно достичь только при наличии глубоких знаний о гидродинамических процессах, происходящих на элементах гидромашин. Таким образом, очевидно, что одновременное исследование динамики кавитационных каверн и КВС, развивающихся в сдвиговых слоях в жидкости, изучение взаимодействия КВС с парогазовой дисперсной фазой в нестационарных турбулентных течениях, а также измерение распределений турбулентных характеристик — крайне актуальные задачи как с фундаментальной точки зрения, так и в аспекте совершенствования конструкций современного гидротехнического оборудования.

Верификация и оптимизация современных математических моделей, описывающих возникновение и развитие кавитации и кавитационной эрозии, как правило, осуществляются на экспериментальных данных по обтеканию канонических объектов, таких как сопла Вентури, модельные гидропрофили, например, крылья серий НАСА, и т. п. Ввиду сложности гидродинамической структуры кавитирующих течений в настоящее время корректное их моделирование возможно лишь с использованием подходов, предполагающих осреднение характеристик (по пространству, по ансамблю и т. д.). Однако для систем осредненных уравнений необходимо привлечение моделей замыкания, формулировка и валидация которых требует достоверной комплексной экспериментальной информации. Поэтому распределения турбулентных характеристик, смешанных корреляций пульсаций скорости и локального газосодержания в пузырьковых потоках, а также концентрации дисперсной фазы представляют огромный интерес. Измерение таких величин с высокой точностью крайне затруднено вследствие ограниченных возможностей современных экспериментальных методов. В связи с этим получение систематической экспериментальной информации на различных кавитационных режимах обтекания модельных объектов является важной задачей.

Сегодня в мировой литературе можно найти большое количество экспериментальных работ, посвященных исследованию кавитационного обтекания двумерных гидрокрыльев, из анализа которых известно, что все типы кавитационных каверн делятся на два основных класса: неполные или частичные каверны (*partial cavities*) и суперкаверны (*supercavities*). Неполные каверны имеют меньшую по сравнению с хордой гидрокрыла длину, а также характеризуются тем, что их область замыкания находится вблизи поверхности обтекаемого тела, тогда как длина суперкаверны превосходит размер гидропрофиля, а область ее замыкания расположена в следе за кавитирующим объектом. Неполные каверны имеют дальнейшую классификацию в зависимости от условий эксперимента (форма гидрокрыла,

распределения скорости и давления в потоке и др.), среди них выделяют пленочные и облачные типы каверн (подробное их описание можно найти в [13]), а также пузырьковую (см., например, [4]), вихревую [1] и другие виды кавитации. Уже общепризнан тот факт, что облачный тип кавитации возникает при достижении пленочной каверной некоторого критического размера, когда начинаются периодические пульсации ее размера, причем этот процесс сопровождается отрывом самой каверны в форме крупномасштабного облака. Работ, направленных на экспериментальное исследование облачной кавитации, также достаточно много. Так, в [12] показано, что облачная каверна состоит из крупномасштабного вихря, в центре которого находится кластер из большого количества кавитационных пузырей, заполненных парогазовой смесью. В других экспериментах (см., например, [10]) было обнаружено, что значения числа Струхала, соответствующего колебаниям кавитационных каверн при облачной кавитации, близки. Дальнейшие исследования доказали наличие корреляции между отрывом кавитационных каверн и формированием возвратного течения в области замыкания каверны вследствие действия неблагоприятного градиента давления (см. [3; 11]).

Кроме того, имеется ряд работ, направленных на измерение локального газосодержания в каверне и в следе за гидрокрылом [6], изучение температурного эффекта на условия зарождения и развития различных типов кавитационных каверн и неустойчивостей [4], исследование влияния шероховатости поверхности на динамику нестационарных кавитационных каверн [5] и многие другие. Однако результаты этих работ весьма ограничены: как правило, они представляют собой данные визуальных наблюдений, построенные режимные карты с качественным описанием реализующихся различных кавитационных режимов, а также точечные измерения локального давления и (существенно реже) распределения скорости течения около модельных тел обтекания. Причем результаты, полученные разными авторами, зачастую существенно расходятся. Таким образом, несмотря на большое количество экспериментальных работ по исследованию кавитирующих течений, до сих пор детальная количественная информация, необходимая для анализа и описания кавитационных явлений, крайне ограничена даже для упрощенных условий. Это обусловлено сложностью, а зачастую и невозможностью проведения экспериментов в натуральных условиях, а также их высокой стоимостью на дорогих лабораторных стендах.

Вместе с тем сегодня ощущается существенный недостаток исследований кавитационного обтекания систем гидрокрыльев. Большинство известных работ посвящено численному моделированию таких течений, а экспериментальные работы, направленные на измерение турбулентных характеристик течений в подобных конфигурациях, фактически отсутствуют.

Здесь стоит упомянуть несколько исследований. [7] — одна из немногих экспериментальных работ, в которой подробно изучена неустойчивость, присущая кавитирующему пропеллеру. С помощью визуальных наблюдений и измерений локального давления было показано, что амплитуда пульсаций давления, возникающих в результате появления автоколебаний кавитирующего пропеллера, весьма высока. Разработанная модель, учитывающая динамику кавитационной каверны и отклик гидродинамической трубы на водоизмещение в рабочем канале, показала, что потенциально неустойчивый режим работы будет наблюдаться для двух различных частотных диапазонов при вращении крыльчатки, один из которых и вызывает данный тип неустойчивости.

В [8] с использованием двумерной математической модели было численно исследовано кавитационное обтекание четырехлопастного индуктора. Показано, что нестационарное обтекание пленочных каверн, присоединенных к поверхности лопастей, где достигается минимум давления, зависит от скорости потока и числа кавитации, а также определено, что существуют два различных типа нестационарного кавитационного обтекания.

В случае реализации первого из этих сценариев объемный расход через каналы между лопастями непрерывно пульсирует таким образом, что в смежных каналах пульсации расхода находятся в противофазе: если в одном из каналов достигается максимум расхода, то в смежных с ним — минимум. Механизм этого типа нестационарного обтекания заключается в следующем. В результате падения локального давления кавитационные каверны увеличиваются, в определенный момент времени из-за неравномерности поля давления вблизи некоторых лопастей они становятся настолько большими, что приводят к существенному отклонению потока, а это, в свою очередь, вызывает перераспределение расхода между межлопастными каналами. При дальнейшем увеличении паросодержания данный процесс усиливается.

Второй тип нестационарного обтекания каскада лопастей характеризуется различными размерами кавитационной каверны в межлопастных каналах. При этом установить какую-либо корреляцию длин каверн для различных каналов не удастся. Как и в предыдущем случае, этот процесс является периодическим, однако его механизм более сложен. Причиной его возникновения является изменение расхода во всех межлопастных каналах, причем частота вариации расхода больше, чем частота вращения крыльчатки импеллера, — сверхсинхронный режим.

Работа [15] — логическое продолжение предыдущей. В ней на основе другого метода вычислений (но той же физической модели) зарегистрировано пять различных сценариев кавитационного обтекания четырехлопастного каскада: симметричный и устойчивый (для $\sigma < 0,65$ или $\sigma > 0,8$), характеризующийся одинаковыми присоединенными кавитационными кавер-

нами, устойчивый, но чередующийся (для $\sigma \sim 0,75$), сверхсинхронный (также для $\sigma \sim 0,75$ по перемежаемости), неустойчивый и чередующийся (для $\sigma \sim 0,7$) и субсинхронный (для $\sigma \sim 0,65$).

В [14] результаты численного моделирования и экспериментальные измерения локального давления показали, что помимо типичных автоколебаний, свойственных облачной кавитации, между кавернами в межлопастных каналах происходит сильное взаимодействие. Причем как в эксперименте, так и в расчете было обнаружено, что в потоке существует две выделенных частоты. Меньшая из частот (около 30—40 Гц) не зависит от числа кавитации. Ее появление обусловлено перераспределением расхода между каналами, которое происходит в результате взаимодействия генерируемых при облачной кавитации вихрей и основного потока вблизи задней кромки верхнего профиля. Вторая выделенная частота соответствует естественным пульсациям каверны при облачной кавитации (характерное число Струхала близко к 0,3).

В целом из анализа мировой литературы можно заключить, что на сегодня изучение кавитационного обтекания каскадов гидрокрыльев сводится в основном к численному моделированию данных течений. Число экспериментальных работ, направленных на исследование этого типа течений, крайне ограничено, причем измеряются лишь значения локального давления и проводится визуализация кавитационных каверн. Валидация математических моделей, используемых при численном моделировании, зачастую осуществляется на экспериментальных данных по обтеканию одиночного гидропрофиля, после чего эти модели экстраполируются на каскады гидрокрыльев путем наложения условий периодичности на граничные условия.

Хотя численные результаты и позволяют сделать некоторые значимые выводы о механизмах возникающих неустойчивостей, присущих кавитирующим течениям, тем не менее разрабатываемые математические модели требуют наличия комплексных экспериментальных данных, необходимых для их совершенствования и верификации. В частности, сейчас ощущается существенный недостаток экспериментальных данных по турбулентной структуре кавитирующих течений при обтекании систем гидрокрыльев.

Настоящая работа посвящена экспериментальному изучению пространственной структуры и динамики кавитационных каверн, возникающих на поверхности одиночных двумерных гидрокрыльев и каскада при различных числах кавитации, а также сравнению распределений турбулентных характеристик вблизи поверхности тел обтекания и в следе за ними.

2. Экспериментальная установка

Эксперименты проводились на кавитационном гидродинамическом стенде Института теплофизики Сибирского отделения РАН, представляющем собой замкнутый гидродинамический контур. Стенд оснащен двумя центробежными насосами, ультразвуковым расходомером, а также датчиками давления и температуры (рис. 1).

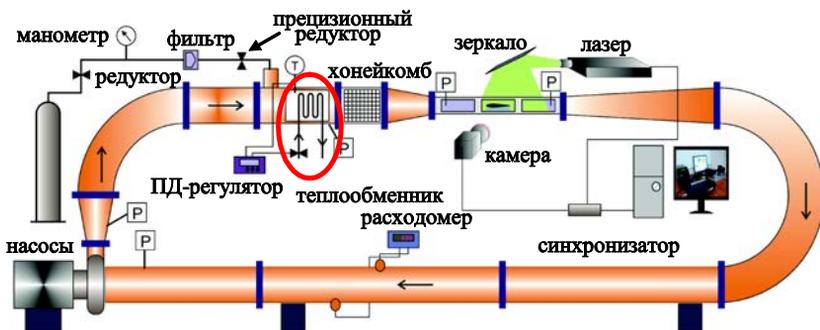


Рис. 1. Схема гидродинамического кавитационного стенда Института теплофизики Сибирского отделения РАН. P — датчик давления, T — датчик температуры. Стрелками показано направление течения жидкости

Экспериментальная установка имеет следующие размеры: длина — 8,4 м, высота — 2,2 м и ширина — 1,1 м. Рабочий участок установки состоит из теплообменника, хонейкомба, конфузора, рабочего канала и диффузора. Температура рабочей жидкости поддерживается постоянной с помощью системы терморегулирования, состоящей из датчика температуры и электромагнитного клапана, приводимого в действие ПИД-регулятором. Хонейкомб имеет ячейки размером 25×25 мм длиной 500 мм. Конфузор длиной 790 мм выполнен по профилю полинома четвертого порядка; степень поджатия потока составляет 16. Рабочий канал имеет прямоугольное поперечное сечение 80×250 мм, его длина составляет 1,3 м. Боковые стенки оборудованы прозрачными окнами для визуальных наблюдений. Угол раскрытия диффузора составляет 3,5° на большую сторону. Для регулирования статического давления в контуре трубы над теплообменником расположена специальная шахта. Обратный канал установки включает в себя поворотное колено на 180° радиусом 750 мм сечением 250×250 мм, прямой трубопровод диаметром 300 мм, расходомерный участок и трубопровод, обеспечивающий подвод рабочей жидкости к насосной группе.

Максимальный расход жидкости достигает $1100 \text{ м}^3/\text{ч}$, что соответствует максимальной скорости течения в пустом канале (без тела обтекания) $15,3 \text{ м/с}$.

3. Условия эксперимента и методика измерений

В качестве модельных гидропрофилей выступали пластина с закругленной носовой частью (радиус закругления равен полутолщине пластины), гидрокрыло НАСА0015 и каскад из трех одинаковых гидрокрыльев НАСА0015. Длины хорд всех тел были одинаковыми и равны 100 мм , толщина пластины составляла 15 мм . Гидрокрылья были изготовлены из латуни и имели сравнительно высокий уровень шероховатости поверхности — около $2,5 \text{ мкм}$. В случае каскада профили были расположены таким образом, что их геометрические центры находились на одной линии, перпендикулярной направлению течения, на расстоянии 60 мм друг от друга. Чтобы иметь оптический доступ до среднего профиля, расположенного по центру рабочего канала, который является наиболее репрезентативным в данном случае с точки зрения моделирования, одно из крайних крыльев было изготовлено из оргстекла. Таким образом, при проведении PIV измерений лазерный «нож» проходил через прозрачный профиль и засвечивал поток с трассерами в окрестности среднего профиля.

В экспериментах угол атаки тел α был фиксирован — 3° . Такой угол атаки был выбран как наиболее демонстративный для описания характерных особенностей кавитирующих течений. Это обусловлено тем обстоятельством, что уже при умеренных $\alpha > 6^\circ$ кавитация происходит на одном из крайних профилей каскада, передняя кромка которого расположена ближе к стенке рабочего канала, вплоть до появления облачного типа кавитационной каверны, в то время как на среднем профиле кавитация не наблюдается вовсе. Углы атаки, близкие к 0° , не представляют особого интереса с точки зрения выбранной геометрии. Рабочей жидкостью служила дистиллированная вода. Деаэрация воды с целью уменьшения количества растворенного воздуха не проводилась. Количество растворенного воздуха оценивалось по закону Генри при нормальных условиях и составляло приблизительно $0,023 \text{ г}$ воздуха на 1 кг воды. Температура воды поддерживалась постоянной на уровне 30°C . Избыточное давление в контуре установки было фиксировано на уровне 59 кПа . В ходе экспериментов для достижения различных условий вблизи тел и, следовательно, различных типов кавитационного обтекания варьировалось число кавитации $\sigma = (P_{\text{вх}} - P_{\text{нб}}) / (\rho U_0^2 / 2)$, определяемое разницей между статическим давлением на входе в рабочий канал и давлением насыщенных паров воды, отнесенной к напору потока, в пределах от $0,6$ до 6 за счет изменения

среднерасходной скорости потока U_0 . Погрешность определения числа кавитации составляет 5%. При данных условиях $P_{\text{нв}} = 0,044$ бар. Начальный уровень турбулентных пульсаций скорости течения u_{rms}/U_0 был менее 1%. Число Рейнольдса, рассчитанное по среднерасходной скорости течения в рабочем канале U_0 и хорде тел обтекания L , находилось в пределах $1-2 \cdot 10^6$. Неточность вычисления числа Рейнольдса равна 3%. Число Струхала $Sh = fC/U_0$, определяемое как отношение произведения максимальной длины каверны C и характерной частоты отрыва кавитационных облаков f для данного режима обтекания к среднерасходной скорости течения U_0 , лежало в диапазоне $0-0,4$. Погрешность определения числа Струхала — 4%.

Для анализа пространственной структуры и динамики кавитационных каверн была проведена высокоскоростная визуализация течений камерой PHOTRON FASTCAM SA5 (разрядность 12 бит, частота дискретизации 7,5 кГц при разрешении матрицы 1024×1024 пикселей) на частоте 20 кГц из двух положений перпендикулярно направлению потока — горизонтального и вертикального.

Мгновенная скорость течения измерялась с помощью измерительного комплекса «ПОЛИС», состоящего из двойного импульсного Nd-АИГ-лазера «Quantel Big Sky EVG00200» (длина волны излучения 532 нм, частота повторения импульсов 15 Гц, длительность импульса 10 нс, энергия в импульсе 200 мДж), ПЗС-камеры (разрядность 10 бит, разрешение матрицы 2048×2048 пикселей), снабженной объективом «AF Nikkor 28 mm f/2.8D» и оптическим низкочастотным фильтром (край полосы пропускания на 570 нм), а также синхронизатора. Управление измерительным комплексом ПОЛИС осуществлялось через компьютер посредством программного пакета «ActualFlow». Толщина лазерного «ножа», сформированного цилиндрической линзой, в методе Particle Image Velocimetry (PIV) составляла примерно 0,8 мм в измерительной плоскости, которая в экспериментах совпала с серединным продольным сечением рабочего канала. Расстояние между камерой и лазерным «ножом» составляло около 610 мм. Размер измерительной области составлял приблизительно 285×250 мм. Для корректного измерения полей мгновенной скорости методом PIV в кавитирующих потоках в рабочую жидкость добавлялись флуоресцентные трассеры (средний размер 10 мкм, диапазон длин волн излучения 550—700 нм), что позволило регистрировать их на длине волны, отличной от длины волны излучения лазера. Следует отметить, что в данном случае свет лазера, отраженный от пузырей в камеру, оказывает негативное действие на качество изображений частиц. С применением жестких критериев отсева (указаны ниже) удается избавиться от неверных векторов, положение которых в большинстве случаев соответствует положению занятых пузырями

областей. Таким образом, удается выделить сигнал от непрерывной фазы. Однако скорость пузырей остается неопределенной.

Поля мгновенной скорости рассчитывались с помощью итерационного кросс-корреляционного алгоритма с непрерывным смещением и деформацией элементарных расчетных ячеек и 50%-ным перекрытием расчетных областей (см. [16]). Подпиксельная интерполяция кросс-корреляционного пика осуществлялась по трем точкам с использованием одномерной аппроксимации функцией Гаусса. Чтобы иметь относительно большой динамический диапазон, начальный размер элементарной расчетной области составлял 64×64 пикселей. Размер конечной расчетной области — 16×16 пикселей для обеспечения относительно низкого уровня шума. Погрешность определения смещения не превышала 0,1 пикселя, так что ошибки измерения скорости составляли 1% и 4% при смещении трассеров на 8 и 2 пикселя соответственно. Полученные векторные поля мгновенной скорости подвергались последовательно двум процедурам валидации: по соотношению сигнал/шум с коэффициентом 2 и адаптивному медианному фильтру по области 7×7 пикселей.

4. Результаты

4.1. Визуализация

На рис. 2—4 представлены характерные типы кавитационных каверн, возникающих со стороны разрежения на поверхности гидрокрыльев. При кавитационном обтекании пластины каверна начинает зарождаться при числе кавитации σ около 2,56. На данном режиме каверна является пленочной (см. рис. 2а.1 и 3а.2), ее длина $C/L = 0,07$. Как можно видеть, каверна является квазидвумерной и имеет ярко выраженную стриковую структуру. Подобная структура была ранее зарегистрирована и описана в [2]. Характерное расстояние между стриками составляет $0,015L$.

В отличие от других публикаций (например, [9]), в данной работе в области замыкания пленочной каверны происходил отрыв небольших пузырьковых кластеров. Это, вероятно, связано как с относительно большой шероховатостью поверхности профилей, так и с высоким содержанием растворенного в воде воздуха. При уменьшении числа кавитации до 1,92 тип каверны меняется на переходный, который характеризуется отрывами относительно больших облаков (обведены пунктирными линиями на рис. 2а.2) в различных зонах области замыкания каверны. В данном случае пространственная структура каверны становится в существенной степени трехмерной. На данном режиме обтекания длина каверны увеличивается до 0,23. Вниз по потоку с увеличением локального давления пузыри схлопываются, и концентрация паровой фазы уменьшается.

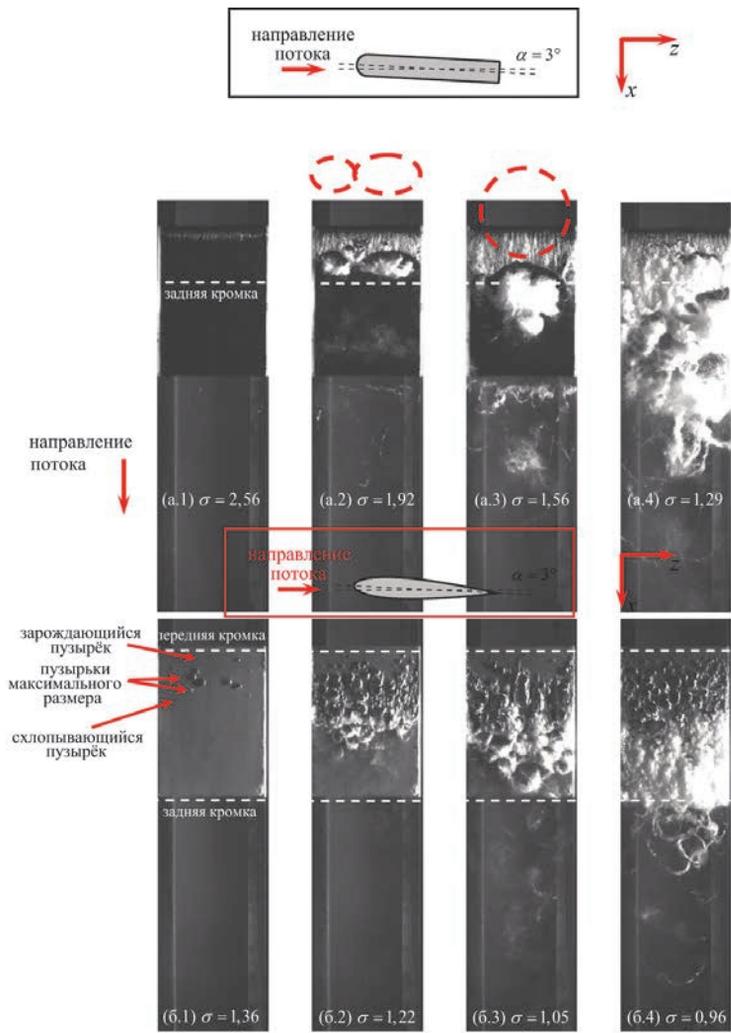


Рис. 2. Мгновенные фотографии кавитационных каверн (вид сверху), возникающих при обтекании (а) пластины с закругленной носовой частью при (1) $\sigma = 2,56$, $C/L=0,07$; (2) $\sigma = 1,92$, $C/L=0,23$; (3) $\sigma = 1,56$, $C/L=0,5$, $Sh=0,32$; (4) $\sigma = 1,29$, $C/L=1,1$, $Sh=0,47$ и (б) гидрокрыла NACA0015 при (1) $\sigma = 1,36$, $C/L=0,22$; (2) $\sigma = 1,22$, $C/L=0,5$; (3) $\sigma = 1,05$, $C/L=1$; (4) $\sigma = 0,96$, $C/L=1,1$, $Sh=0,18$

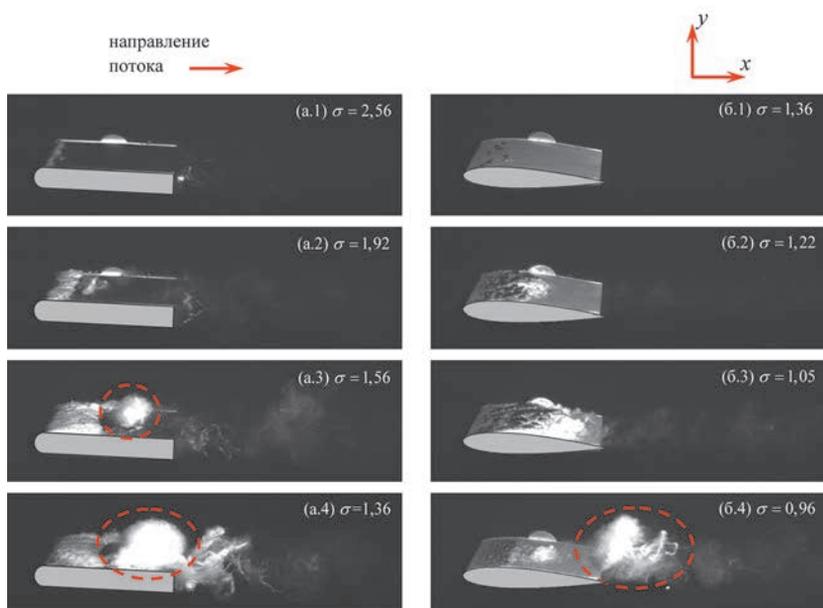


Рис. 3. Мгновенные фотографии кавитационных каверн (вид под углом 25°), возникающих при обтекании (а) пластины при (1) $C/L=0,07$; (2) $C/L=0,23$; (3) $C/L=0,5$, $Sh=0,32$; (4) $C/L=1,1$, $Sh=0,47$ и (б) гидрокрыла NACA0015 при (1) $C/L=0,22$; (2) $C/L=0,5$; (3) $C/L=1,1$; (4) $C/L=1,1$, $Sh=0,18$

Дальнейшее уменьшение числа кавитации приводит к переходу к облачному типу кавитационного обтекания, отличительной особенностью которого является отрыв практически всей каверны в виде одного крупномасштабного облака, поперечный размер которого сопоставим с шириной рабочего канала (см. рис. 2а.3 и 2а.4). Как известно, отрыв облака от поверхности гидрокрыла сопровождается появлением циркуляции жидкости, что в результате приводит к образованию крупномасштабного вихря вокруг оторвавшегося облака. При $\sigma=1,29$ размер каверны возрастает до 1,1. Соответственно увеличивается и размер отрывающихся облаков. При этом на малых углах атаки пространственная структура этих облаков не является однородной. На рис. 2а.4 можно наблюдать разрывы в пространственной структуре кавитационного облака. Кроме того, на всех представленных на рис. 2а и 3а режимах можно наблюдать кавитацию в ядре поперечного вихревого жгута в следе за задней кромкой пластины. С уменьшением числа кавитации вихревая кавитация становится более

выраженной. Также в следе за пластиной, но ниже по течению стохастически появляются продольные стрйки (вихревые жгуты в продольном направлении, в центрах которых происходит кавитация).

В случае гидрокрыла НАСА0015 картина обтекания существенно преобразуется. Сначала при $\sigma = 1,36$ вблизи передней кромки гидрокрыла на расстоянии около $C/L = 0,02$ образуются отдельные микроскопические пузыри, заполненные газопаровой смесью (см. рис. 26.1). Эти пузыри постепенно перемещаются вниз по течению со скоростью 15,6 м/с, что очень близко к скорости потока в данной области, причем их размер также постепенно увеличивается. Скорость роста пузырей составляет примерно 4,5 м/с. Подобная динамика роста и перемещения пузырей наблюдается до тех пор, пока они не пересекают некоторую пороговую линию на расстоянии приблизительно $C/L = 0,27$ от передней кромки гидрокрыла, после чего происходит их схлопывание (см. рис. 26.1 и 36.1).

Таким образом, можно предполагать, что вдоль этой пороговой линии давление локально достигает критического значения, которое является достаточным для коллапса кавитационных пузырей. Данный тип кавитационно-обтекания можно рассматривать как присоединенную пузырьковую кавитацию.

В данном случае каверна еще не является сформированной. При меньших числах кавитации (см. рис. 26.2, 26.3, 36.2 и 36.3) можно наблюдать переходный тип обтекания. В данном случае каверна уже сформировалась. Как и на предыдущем режиме, можно видеть, что от передней кромки каверны до ее середины также образуются микроскопические пузыри, которые смещаются и растут вниз по потоку.

Здесь стоит отметить, что поскольку каверна фактически состоит из отдельных газопаровых пузырей различных размеров (от практически нулевых размеров до радиуса $r/L = 0,07$), передняя кромка каверны изогнута в отличие от случая с пластиной (ср., например, рис. 2а.2 и 26.2). В области замыкания каверны можно наблюдать разрушение этих пузырей, заполняющих каверну, и несколько ниже по потоку отрыв подковообразных облаков, которые, судя по всему, находятся в центрах вихревых структур и повторяют их форму. При достижении режима $\sigma = 0,96$ тип обтекания становится облачным: отрыв каверны происходит квазипериодически. Однако, как и при переходном режиме, можно видеть отрывы подковообразных облаков одновременно с отрывом крупномасштабного облака. Причем значения числа Струхала в случае гидрокрыла в два-три раза ниже, чем в случае пластины.

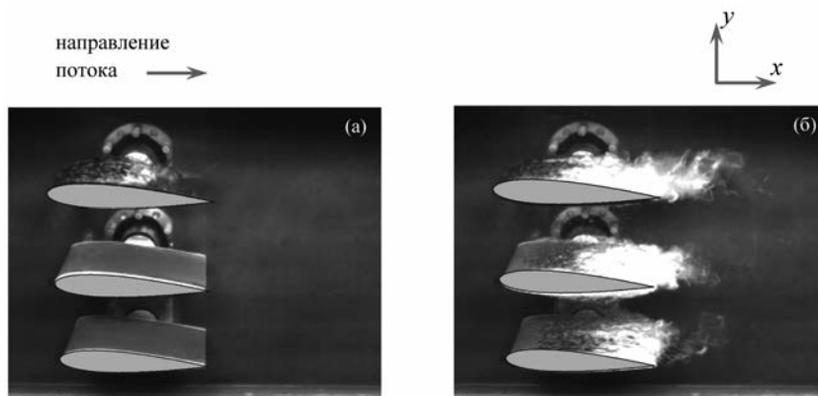


Рис. 4. Мгновенные фотографии кавитационных каверн, возникающих на каскаде гидрокрыльев при (а) $\sigma = 1,54$ ($\xi = 1,13$), (б) $\sigma = 1,3$ ($\xi = 0,94$), $C/L = 0,92$, $Sh = 0,12$. Угол обзора камеры относительно горизонта составляет 25°

При обтекании каскада (см. рис. 4) каверна сначала возникает на верхнем профиле при $\sigma = 1,54$, передняя кромка которого расположена наиболее близко к стенке рабочего канала. Режим кавитации при этом является переходным. Длина каверны составляет около $0,5—0,7L$. На среднем гидрокрыле возникают отдельные зоны локализации пузырьковой кавитации, на нижнем профиле кавитация отсутствует. При уменьшении σ до $1,39$ тип кавитации на верхнем профиле изменяется на облачный, а максимальная длина каверны достигает уже $0,9—1,0L$. На данном режиме также присутствует каверна переходного типа на среднем профиле, ее длина составляет примерно $0,6L$, на нижнем профиле — пленочная каверна длиной $0,2L$. Необходимо заметить, что пульсации длины каверны на верхнем гидрокрыле приводят к появлению пульсаций каверн на двух других гидрокрыльях из-за изменения поля давления в области каскада. Вместе с тем каверны пленочного и переходного типов устойчивы сами по себе, о чем можно судить по обтеканию одиночного гидрокрыла. При дальнейшем уменьшении числа кавитации до $\sigma = 1,3$ на всех профилях наблюдается кавитация облачного типа. Длина каверны на верхнем профиле составляет примерно $0,96L$, а на среднем — $0,92L$, на нижнем — $0,9L$. Причем в этом и предыдущем случаях пульсации каверн происходят не синхронно, а с запаздыванием примерно на 10 мс, а число Струхала для каверны на среднем профиле составляет около $0,12$.

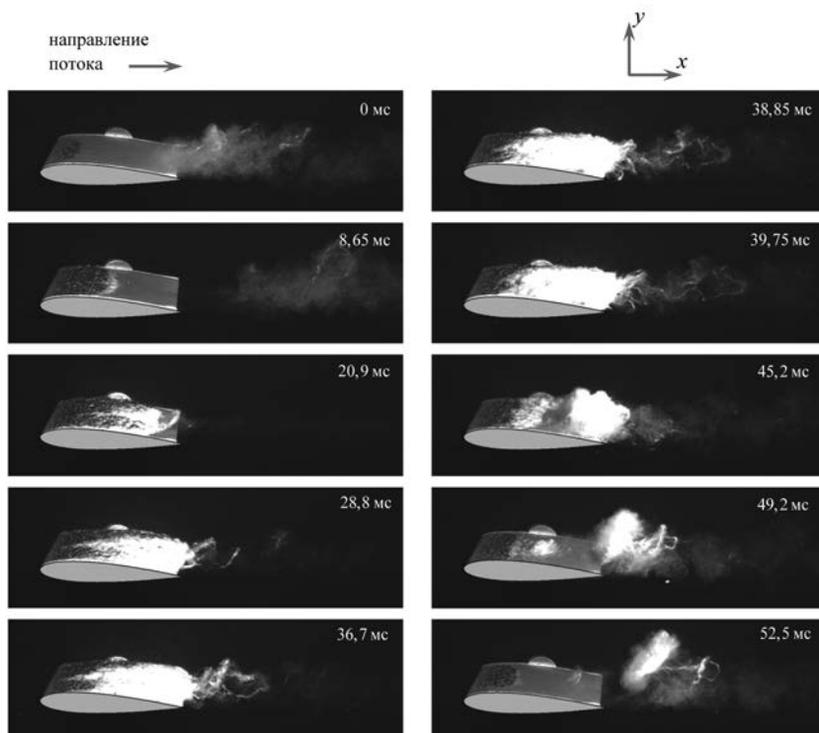


Рис. 5. Эволюция газопаровой каверны вниз по течению (вид под углом 25°) при облачном типе кавитационного обтекания гидрокрыла NASA0015 в течение одного периода отрыва каверны: $\sigma = 0,96$, $C/L=1,1$, $Sh = 0,18$. Продолжительность периода — $53,75$ мс

На рис. 5 показана временная развертка в течение одного периода отрыва каверны на облачном режиме кавитационного обтекания. В нулевой момент времени каверна имеет минимальную длину $C/L=0,21$. С этого момента времени каверна начинает расти. При $t = 8,65$ мс начинаются отрывы мелких кавитационных облаков в области замыкания каверны. При $t = 20,9$ мс становится отчетливо видно возвратное течение под каверной. При $t = 28,8$ мс задняя кромка каверны достигает задней кромки гидрокрыла. При $t = 36,7$ мс каверна достигает максимального размера $C/L=1,1$. Далее при $t = 38,85$ мс происходит отрыв каверны от поверхности гидрокрыла в результате разрушения межфазной границы воз-

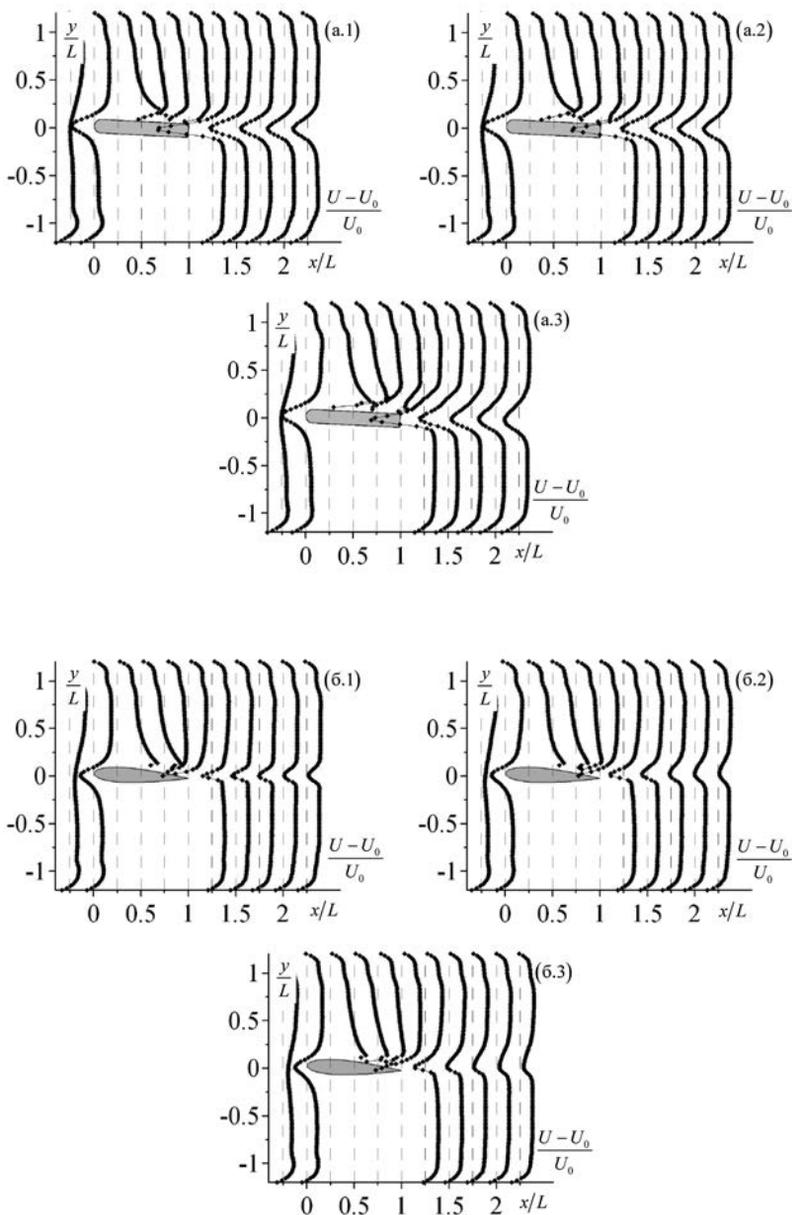
вратным течением вблизи передней кромки каверны. В дальнейшем наблюдается унос оторвавшегося крупномасштабного облака вниз по потоку.

4.2. Поля скорости

Ниже представлены результаты PIV-измерений для некоторых из рассмотренных в предыдущем разделе режимов обтекания одиночных тел, а также сравнение с каскадом. На всех графиках точка начала координат совпадает с передней кромкой гидрокрыла (в случае каскада с передней кромкой центрального гидропрофиля) в измерительной плоскости при $\alpha = 0^\circ$. В результате измерений полей мгновенной скорости, а также набора статистики в 5000 двухкадровых изображений были рассчитаны двумерные распределения средней скорости, кинетической энергии турбулентности и статистических моментов турбулентных пульсаций скорости жидкости третьего порядка. Поскольку в экспериментах лазерный «нож» распространялся вертикально сверху вниз (в случае каскада через прозрачный профиль) вдоль плоскости симметрии канала, параллельной его боковой стенке, область течения под профилем (в случае каскада под средним и нижним профилями) была затенена и поэтому на рисунках замаскирована серым цветом. Направление течения — слева направо.

Как видно из рис. 6, во всех трех случаях после торможения потока вблизи передней кромки гидрокрыльев средняя скорость течения локально становится больше U_0 в области течения между гидропрофилем и верхней стенкой рабочего канала, а также между профилями каскада. В зависимости от режима максимальные значения средней скорости изменяются. С уменьшением σ растут значения U_{\max} до тех пор, пока режим обтекания не становится облачным. После этого наблюдается обратный процесс. Данный факт объясняется следующим образом. Как известно, при переходе к облачному типу кавитационного обтекания возникают интенсивные пульсации паровой каверны и, как следствие, скорости потока в области каверны, что приводит к уменьшению там значений средней скорости. Однако при этом, очевидно, также происходит рост амплитуды турбулентных пульсаций скорости в области каверны (рис. 7).

Анализ распределений пульсационной составляющей скорости (см. рис. 7) показывает, что с уменьшением числа кавитации амплитуда пульсаций скорости возрастает. В случае каскада рост происходит с разной скоростью для различных гидрокрыльев: для верхнего профиля быстрее, для нижнего медленнее. Для среднего профиля при переходе к режиму с $\sigma = 1,3$ амплитуда турбулентных пульсаций возрастает примерно в три раза, также как и для одиночного профиля. Рост амплитуды пульсаций скорости связан с генерацией КВС.



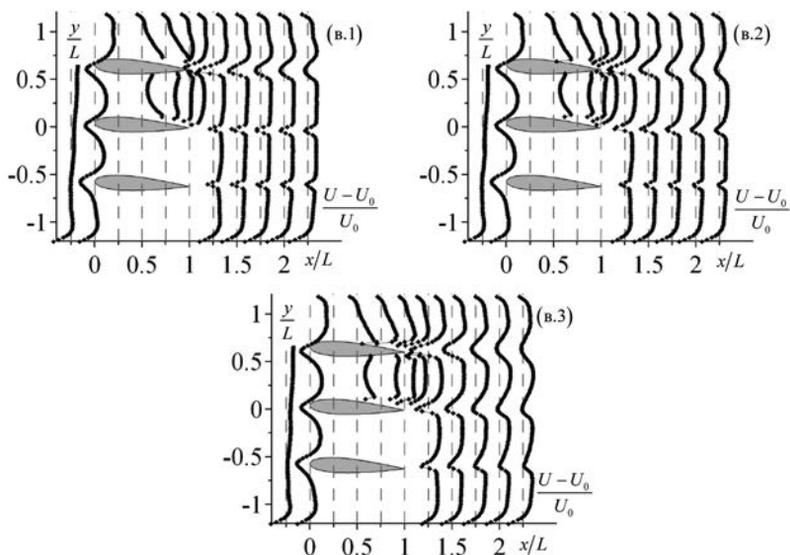
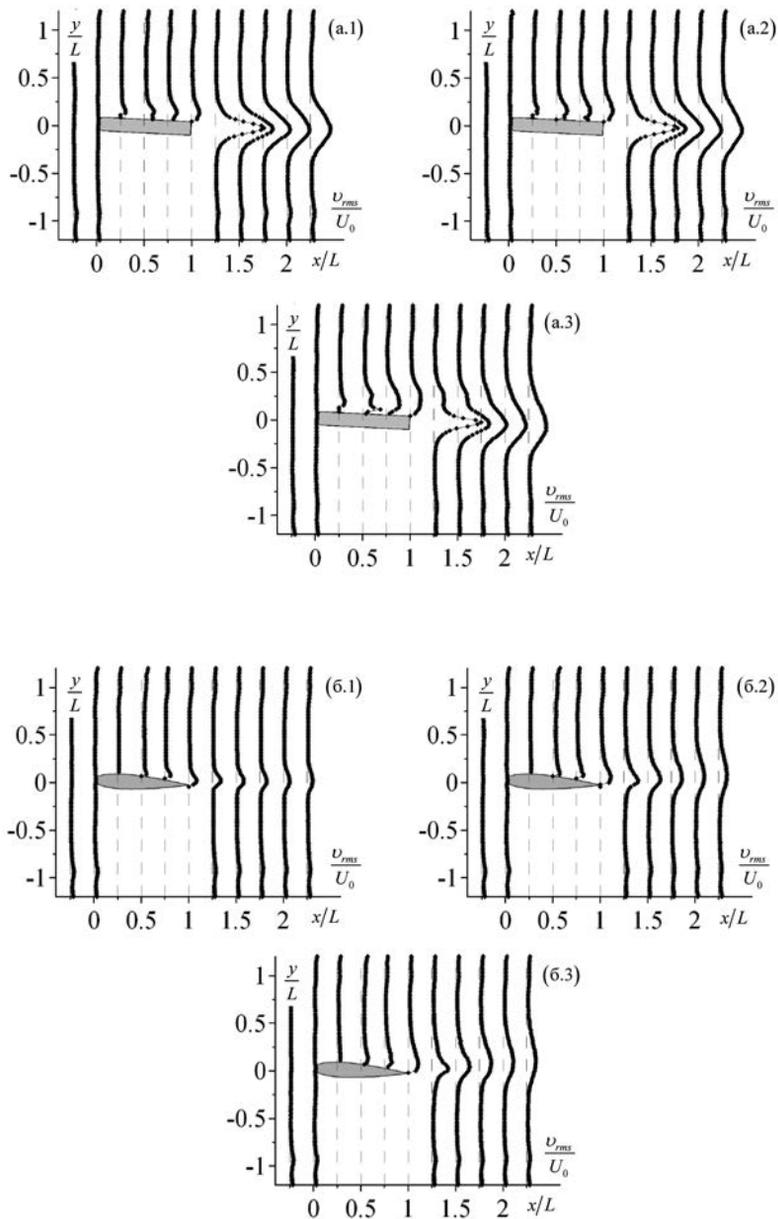


Рис. 6. Эволюция продольной компоненты средней скорости вниз по течению в сравнении с U_0 при обтекании (а) пластины при (1) $\sigma = 1,92$, $C/L=0,23$, (2) $\sigma = 1,76$, $C/L=0,3$, (3) $\sigma = 1,56$, $C/L=0,5$, $Sh=0,32$, (б) одиночного гидрокрыла NACA0015 при (1) $\sigma = 1,22$, $C/L=0,5$, (2) $\sigma = 1,05$, $C/L=1$, (3) $\sigma = 0,96$, $C/L=1,1$, $Sh=0,18$ и (в) каскада при (1) $\sigma = 1,54$ ($\xi = 1,13$), (2) $\sigma = 1,4$ ($\xi = 1,01$), (3) $\sigma = 1,3$ ($\xi = 0,94$)

На рис. 6 можно видеть, что в целом средние картины течений для одиночного гидрокрыла NACA0015 и каскада подобны, однако имеются и достаточно существенные отличия (ср. рис. 6б и 6в). Так, область течения, где достигаются максимальные значения скорости, для одиночного профиля существенно меньше, значения скорости также меньше.

Кроме того, среднерасходная скорость течения для каскада ниже, чем для одиночного профиля. Из сравнения пространственных распределений поперечных составляющих КЭТ для каскада и одиночного крыла (ср. рис. 7б и 7в), можно видеть, что переход к облачному типу кавитационного обтекания для обоих случаев приводит к существенному росту турбулентных пульсаций.



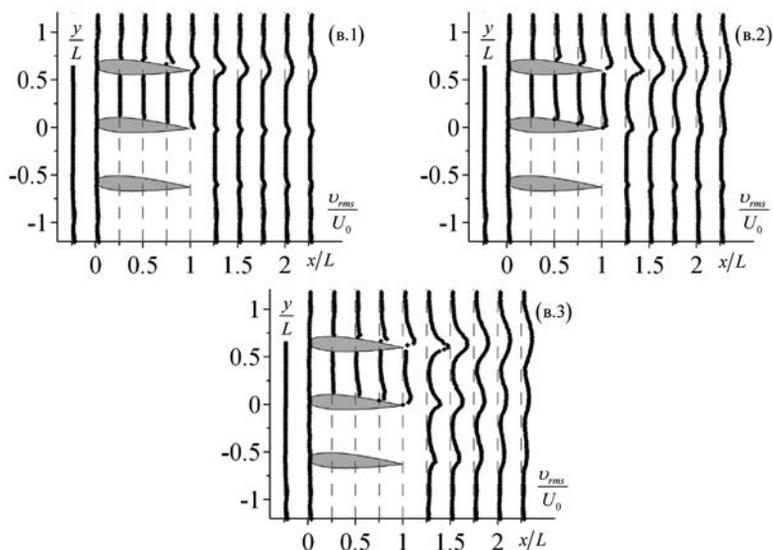


Рис. 7. Эволюция пульсационной составляющей поперечной компоненты скорости (среднеквадратичные значения) вниз по течению при обтекании (а) пластины при (1) $\sigma = 1,92$, $C/L=0,23$, (2) $\sigma = 1,76$, $C/L=0,3$, (3) $\sigma = 1,56$, $C/L=0,5$, $Sh = 0,32$, (б) одиночного гидрокрыла NACA0015 при (1) $\sigma = 1,22$, $C/L=0,5$, (2) $\sigma = 1,05$, $C/L = 1$, (3) $\sigma = 0,96$, $C/L=1,1$, $Sh=0,18$ и (в) каскада при (1) $\sigma = 1,54$ ($\xi = 1,13$), (2) $\sigma = 1,4$ ($\xi = 1,01$), (3) $\sigma = 1,3$ ($\xi = 0,94$)

Таким образом, сравнение кавитационного обтекания одиночного профиля и каскада позволяет констатировать, что числа кавитации сильно отличаются для относительно близких (по типу кавитационного обтекания и длине каверны) режимов, в результате чего прямое сравнение обтекания для этих двух случаев крайне затруднено. Судя по всему, число кавитации в общепринятом определении не совсем корректно отражает условия возникновения кавитации для каскада профилей. Поэтому чтобы иметь возможность сравнить эти два течения, для случая обтекания каскада гидрокрыльев можно ввести новый кавитационный параметр (локальное число кавитации), который учитывает локальные условия вблизи гидропрофиля, т. е. $\xi = (P - P_{\text{ив}}) / (\rho U^2 / 2)$, где P и U — локальные значения среднего статического давления и продольной компоненты средней ско-

рости, которые оцениваются, например, посередине межлопастного канала в сечении, проходящем через передние кромки гидрокрыльев. Необходимо заметить, что в данной работе локальное значение статического давления не измерялось, а было оценено по закону Бернулли, который может быть применен к той области течения, где пульсации скорости невелики. При таком определении числа ξ его значения составляют 1,13 при $\sigma = 1,54$ и 0,94 при $\sigma = 1,3$, что в принципе достаточно близко к значениям числа кавитации в случае обтекания одиночного профиля: $\sigma = 1,22$ и $\sigma = 0,96$ соответственно.

5. Заключение

На основе полученных визуальных данных подробно описаны типы кавитационного обтекания одиночной пластины с закругленной передней частью, гидрокрыла NASA0015 и каскада гидрокрыльев. Показано, что типы обтекания пластины и гидрокрыла существенно отличаются. Развитие каверны до облачной кавитации в случае гидрокрыла происходит существенно быстрее, а размер каверны становится значительно больше, что соответственно ведет к формированию более крупных парогазовых облаков при отрыве каверны. Обнаружено, что пульсации каверны при облачном типе кавитационного обтекания каскада на одном из крайних гидрокрыльев вызывают пульсации каверн на двух других профилях каскада с той же частотой вследствие изменения поля давления.

Показано, что при переходе к режиму облачной кавитации гидродинамическая структура всего течения претерпевает существенные изменения. При переходе к облачному типу кавитационного обтекания интенсивность турбулентных пульсаций в турбулентном следе возрастает примерно в три раза вследствие генерации крупномасштабных вихревых структур, а его формирование начинается выше по потоку. При этом наблюдается значительное увеличение поперечных размеров следа. За пластиной формируется более выраженный турбулентный след по сравнению с гидрокрылом NASA0015, поскольку пластина плохо обтекаема.

С введением нового параметра — локального числа кавитации, учитывающего локальные условия вблизи гидропрофиля в случае обтекания каскада гидрокрыльев, удастся провести прямое сопоставление кавитационного обтекания каскада и одиночного профиля. Сравнение этих двух случаев показывает сходство распределений турбулентных характеристик. Однако количественные значения как средних, так и пульсационных величин существенно отличаются, главным образом за счет различий в распределениях среднего давления, а также взаимного влияния кавитационных облаков. Так, при уменьшении числа кавитации увеличение амплитуды

пульсаций скорости происходит неравномерно для разных гидрокрыльев. Кроме того, инкремент роста пульсаций при понижении числа кавитации для одиночного профиля выше.

Работа поддержана Программой фундаментальных исследований ОЭМПУ РАН № 11 «Фундаментальные процессы в многофазных и турбулентных потоках» (координаторы — академики А. А. Саркисов и Г. А. Филиппов) на 2009—2011 гг., а также Программой фундаментальных исследований ОЭМПУ РАН № 10 «Экспериментальное, теоретическое и численное исследование фундаментальных процессов тепло- и массообмена в многофазных турбулентных потоках» (координаторы — академики А. А. Саркисов и Г. А. Филиппов) на 2012—2014 гг.

Обозначения и сокращения

- α — угол атаки, град.
- x, y, z — координаты вдоль продольной (по направлению течения), поперечной (поперек течения в измерительной плоскости) и нормальной (перпендикулярно измерительной плоскости) осей, м
- L — размер главной хорды гидрокрыла, м
- C — максимальная длина кавитационной каверны для данного режима, м
- U_0 — среднерасходная скорость потока, м/с;
- U, V — продольная и поперечная компоненты средней скорости жидкости, м/с
- u, v — продольная и поперечная компоненты пульсационной составляющей мгновенной скорости, м/с
- $u_{\text{rms}} = \left(\langle u^2 \rangle \right)^{1/2}, u_{\text{rms}} = \left(\langle v^2 \rangle \right)^{1/2}$ — среднеквадратичные значения пульсационной составляющей скорости жидкости в продольном и поперечном направлениях, м/с
- f — частота отрыва кавитационных облаков (для облачного типа кавитационного обтекания), с^{-1}
- P — локальное среднее статическое давление, Па
- $P_{\text{вх}}$ — статическое давление на входе в рабочем канале, Па
- $P_{\text{пв}}$ — давление паров воды, Па
- ν — кинематическая вязкость жидкости, $\text{м}^2/\text{с}$
- ρ — плотность жидкости, $\text{кг}/\text{м}^3$

$Re = LU_0 / \nu$ — число Рейнольдса

$\sigma = 2(P_{вх} - P_{пв}) / (\rho U_0^2)$ — число кавитации

$\xi = 2(P - P_{пв}) / (\rho U^2)$ — локальное число кавитации

$Sh = fC / U_0$ — число Струхала

КЭТ — кинетическая энергия турбулентности

КВС — крупномасштабные вихревые структуры

Литература

1. *Ausoni Ph., Farhat M., Escaler X.* et al. Cavitation influence on von Kármán vortex shedding and induced hydrofoil vibrations // J. Fluids Eng. — 2007. — 129. — P. 966—973.
2. *Brandner P. A., Walker G. J., Niekamp P. N., Anderson B.* An experimental investigation of cloud cavitation about a sphere // J. Fluid Mech. — 2010. — 656. — P. 147—176.
3. *Callenaere M., Franc J.-P., Michel J.-M. Riondet M.* The cavitation instability induced by the development of a re-entrant jet // J. Fluid Mech. — 2001. — 444. — P. 223—256.
4. *Cervone A., Bramanti C., Rapposelli E., d'Agostino L.* Thermal cavitation experiments on a NACA 0015 hydrofoil // J. Fluids Eng. — 2006. — 128. — P. 326—331.
5. *Coutier-Delgosha O., Devillers J.-F., Leriche M., Pichon T.* Effect of wall roughness on the dynamics of unsteady cavitation // J. Fluids Eng. — 2005. — 127. — P. 726—733.
6. *Coutier-Delgosha O., Devillers J.-F., Pichon T.* Internal structure and dynamics of sheet cavitation // Phys. Fluids. — 2006. — 18. — P. (017103)-12.
7. *Duttweiler M. E., Brennen C. E.* Surge instability on a cavitating propeller // J. Fluid Mech. — 2002. — 458. — P. 133—152.
8. *Fortes-Patella R., Coutier-Delgosha O., Perrin J., Reboud J. L.* Numerical model to predict unsteady cavitating flow behavior in inducer blade cascades // J. Fluids Eng. — 2007. — 129. — P. 128—135.
9. *Franc J.-P., Michel J.-M.* Attached cavitation and the boundary layer: experimental investigation and numerical treatment // J. Fluid Mech. — 1985. — 154. — P. 63—90.

10. *George D. L., Iyer C. O., Ceccio S. L.* Measurement of the bubbly flow beneath partial attached cavities using electrical impedance probes // *J. Fluids Eng.* — 2000. — 122. — P. 151—155.
11. *Kawanami Y., Kato H., Yamaguchi H.* et al. Mechanism and control of cloud cavitation // *J. Fluids Eng.* — 1997. — 119. — P. 788—795.
12. *Kubota A., Kato H., Yamaguchi H., Maeda M.* Unsteady structure measurement of cloud cavitation on a foil section using conditional sampling technique // *J. Fluids Eng.* — 1989. — 111. — P. 204—210.
13. *Laberteaux K. R., Ceccio S. L.* Partial cavity flows. — Pt. 1: Cavities forming on models without spanwise variation // *J. Fluid Mech.* — 2001. — 431. — P. 1—41.
14. *Lohrberg H., Stoffel B., Fortes-Patella R.* et al. Numerical and experimental investigations on the cavitating flow in a cascade of hydrofoils // *Exp. Fluids.* — 2002. — 33. — P. 578—586.
15. *Pouffary B., Patella R. F., Reboud J. L., Lambert P.-A.* Numerical analysis of cavitation instabilities in inducer blade cascade // *J. Fluids Eng.* — 2008. — 130. — P. (041302)-8.
16. *Токарев М. П., Маркович Д. М., Бильский А. В.* Адаптивные алгоритмы обработки изображений частиц для расчета мгновенных полей скорости // *Вычисл. технологии.* — 2007. — 2. — С. 1—23.

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУРБУЛЕНТНЫХ
И ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ**

Том 3

*Утверждено к печати Ученым советом
Института проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук*

Редактор *А. И. Иоффе*

Оригинал-макет подготовлен ООО «Комтехпринт»
Иллюстрации приведены в авторской редакции

Формат 60×90 ¹/₁₆. Бумага офсетная 80 г/м²
Печать офсетная. Гарнитура «Оффицина»
Уч.-изд. л. 29,4. Заказ 25231

Заказное

Отпечатано с готовых диапозитивов типографией ООО «Инфолио-Принт»