

УДК 533.6.011

МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДОЗВУКОВЫХ ТЕЧЕНИЙ С ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ПЕРЕМЕШАНЫМ ТУРБУЛЕНТНЫМ ГОРЕНИЕМ В КАНАЛАХ

© 2024 В. В. Власенко^{1,2,*}, Р. А. Балабанов^{1,2}, Вэньчао Лю²,С. С. Молев¹, В. А. Сабельников¹¹ФАУ ЦАГИ, Жуковский, Россия²МФТИ, Долгопрудный, Россия

*e-mail: vlasenko.vv@yandex.ru

Поступила в редакцию 08.08.2024 г.

После доработки 20.10.2024 г.

Принята к публикации 30.10.2024 г.

Дан обзор работ по численному моделированию турбулентного горения. Обсуждаются три класса моделей, необходимых для замыкания математической модели течения (модели турбулентности, модели химической кинетики и модели взаимодействия турбулентности с горением). Описан математический подход к моделированию дозвуковых течений с предварительно перемешанным турбулентным горением в каналах в рамках уравнений Рейнольдса, замкнутых моделями турбулентности класса $k - \omega$. Рассмотрены модели влияния турбулентности на средние скорости реакций класса PaSR (Partially Stirred Reactor – модели реактора частичного перемешивания) – квазистационарные модели PaSR и PFR, а также модель с учетом предистории EPaSR. Предлагается новая модель для учета влияния горения на интенсивность турбулентного переноса – переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта, совместимая с моделью турбулентности класса $k - \omega$ и с моделями класса PaSR. В Приложении описана дифференциальная модель для турбулентного потока скаляра, откалиброванная априорно с использованием базы данных DNS турбулентного течения Рэля–Тейлора.

Ключевые слова: предварительно перемешанное турбулентное горение; численное моделирование; взаимодействие турбулентности и горения.

DOI: 10.31857/S0032823524060108 EDN: IGLUTY

1. Введение. Исследование турбулентного горения – одна из сложнейших проблем механики жидкости и газа. Эксперименты с горением в потоке газа в каналах очень дороги и обычно не обеспечивают достаточной точности из-за наличия большого числа разных физических эффектов. Поэтому существенную роль в исследовании должно играть численное моделирование, которое должно дать предварительные оценки течения в канале, позволить оптимизировать геометрию, подобрать режим течения, обеспечивающий лучшие характеристики, и тем самым уменьшить затраты на проведение эксперимента. Расчет также дополняет данные эксперимента и позволяет получить физическую интерпретацию экспериментальных данных.

Турбулентное горение – многомасштабное явление; характерные масштабы протекающих физических процессов могут отличаться на несколько порядков величины. Это создает существенные трудности при численном моделировании: требует

использования очень подробных расчетных сеток, приводит к большим затратам компьютерной памяти и большим временам счета.

В отличие от турбулентных течений без горения, метод крупных вихрей (LES) не гарантирует улучшение предсказания турбулентного горения по сравнению с расчетами на базе уравнений Рейнольдса (RANS) (см., напр., [1]). Дело в том, что в турбулентном горении существенную роль играет молекулярное смешение топлива с окислителем и молекулярная диффузия тепла, которые происходят на масштабах мельчайших турбулентных вихрей. Поскольку LES не позволяет опуститься до столь мелких масштабов, то даже в LES приходится использовать приближенные (полуэмпирические) модели микросмешения и горения, что в значительной степени понижает превосходство LES-расчета над RANS-расчетами, приводит к падению точности результатов и необходимости настройки эмпирических констант подсеточной модели. Правда, сохраняется важное преимущество LES-расчета перед RANS-расчетом — намного более высокая точность определения локальных условий горения, что связано с использованием гораздо более подробных расчетных сеток. Данная статья ограничивается моделями, предназначенными к применению в рамках подхода RANS.

Для замыкания системы уравнений RANS или LES необходимы три модели: модель турбулентности (в случае LES — модель подсеточной турбулентности), модель взаимодействия турбулентности и горения (Turbulence–Combustion Interaction, TCI) и модель химической кинетики. К сожалению, физико-математические модели, описывающие корректно многомасштабные физические процессы, протекающие в турбулентном пламени (смешение компонентов, диффузию тепла, воспламенение, стабилизацию и срыв горения), до сих пор не созданы. Качество моделирования явления в значительной степени зависит от правильного выбора перечисленных трех моделей.

В настоящей работе основное внимание будет уделяться проблемам моделирования TCI и выбора подходящей модели химической кинетики. В качестве модели турбулентности будут использоваться двухпараметрические дифференциальные модели класса $k - \omega$, использующие специальную функцию для плавного перехода от пристеночной (низкорейнольдсовой) версии модели к модели, рассчитанной на описание свободной турбулентности. Это естественный выбор при описании течений в каналах, где есть области и пристеночной, и свободной турбулентности. Дополнительными полезными свойствами моделей класса $k - \omega$ являются их хорошие свойства в окрестности твердых стенок (модели этого класса имеют хорошую асимптотику у стенок без использования пристеночных коррекций [2]), а также то, что они позволяют оценить локальное значение характерного интегрального временного масштаба турбулентных пульсаций скорости $\tau = 1 / \omega$. Отметим, что первая дифференциальная модель этого класса (и вообще первая в истории дифференциальная модель турбулентности) была сформулирована еще А.Н. Колмогоровым [3].

Наибольшие трудности возникают с описанием взаимодействия турбулентности и горения (TCI). Детальное обсуждение проблем турбулентного горения можно найти в книгах [4–8].

Существует два основных канала TCI. 1-й канал TCI связан с влиянием турбулентности на средние скорости химических реакций, 2-й — с влиянием горения на турбулентные потоки тепла и массы компонент реагирующей смеси. Существуют и другие пути взаимодействия турбулентности и горения [9], но они имеют косвенный характер (т.е. представляют собой цепочки взаимодействий различных факторов, которые приводят, в конечном счете, к влиянию турбулентности на горение или обратно).

К настоящему моменту наибольшее внимание исследователей было привлечено к 1-му каналу TCI, т.к. он в значительной степени связан с эффектами молекуляр-

ного смещения, проявляющимися в основном на уровне мелкомасштабной турбулентности. Это принципиально отличает моделирование 1-го канала ТСІ от классических моделей турбулентности, которые описывают в основном эффекты, главный вклад в которые дает крупномасштабная турбулентность.

В практических расчетах 1-й канал ТСІ часто не учитывается, и используется т.н. *квазиламинарное приближение*, при котором средние скорости реакций вычисляются по обычным формулам, в которые подставляются средние параметры течения. Однако квазиламинарное приближение часто приводит к большим ошибкам, поскольку при турбулентном горении пульсации параметров могут быть сопоставимы со средними величинами и даже превосходить их на порядок величины. Поэтому к настоящему времени предложено много способов описания 1-го канала ТСІ. Среди этих способов стоит выделить следующие классы:

1) статистические методы (метод моментов, метод функции плотности вероятности – ФПВ) – наиболее формальный подход, учитывающий статистические характеристики турбулентного течения с горением, но не опирающийся на физические представления о структуре турбулентного пламени [10–14];

2) модели микроламинарных пламен (флеймлетов) как для неперемешанного, так и для предварительно перемешанного горения – подход, применимый в случае, когда характерное время тепловыделения мало по сравнению с характерным временем молекулярного смещения на уровне мельчайших турбулентных вихрей [15–18]; существуют расширения этого подхода на другие случаи, связанные с введением переменной прогресса реакции (например, [19]), но они опираются на много сильных допущений и менее надежны;

3) модели реактора частичного перемешивания (PaSR – Partially Stirred Reactor) [20–23]. В этих моделях предполагается, что при высоких числах Рейнольдса горение протекает в основном в т.н. “тонких структурах”, связанных с мелкомасштабной турбулентностью. В моделях класса PaSR тонкие структуры рассматриваются как реакторы, в которых непрерывно протекает горение. В работах [24,25] представлен успешный опыт применения моделей класса PaSR к описанию утолщенных пламен, в которых толщина фронта пламени в несколько раз превышает микромасштаб Колмогорова;

4) фронтальные модели для предварительно перемешанного горения [26–28], основанные на оценке скорости турбулентного пламени. Стоит отметить, что первые оценки этой скорости для различных режимов турбулентного горения были получены еще К.И. Щелкиным [29] и А.Г. Прудниковым [30]. Во фронтальных моделях, как правило, делается предположение, что в случае сильной турбулентности, типичном для практических приложений, горение происходит в мгновенных тонких реакционных зонах, структура которых слабо отличается от реакционных зон в ламинарном пламени. Такая картина течения была получена в ряде экспериментальных данных как для предварительно перемешанного горения [31–33], так и неперемешанного горения [34], а также средствами прямого численного моделирования турбулентности [35].

Главной проблемой многих моделей ТСІ является узкая область их применимости. Авторам настоящей работы представляется весьма перспективным класс моделей реактора частичного перемешивания (PaSR), поскольку практически любой режим турбулентного горения можно рассматривать в терминах реакторов (вообще говоря, неидеальных), движущихся вместе с потоком и обменивающихся массой и теплом с окружающей средой. Поэтому можно рассчитывать на то, что модели класса PaSR могли бы быть использованы для описания сложных течений со смешанными режимами турбулентного горения, если определять их параметры с учетом реальных физических механизмов разных режимов горения. Однако современные модели этого класса данным свойством не обладают и не могут претендовать на универсаль-

ное описание турбулентного горения. В настоящей работе будут подробно описаны несколько современных моделей TCI класса PaSR.

Менее исследован 2-й канал TCI. Нередко считают, что разработка моделей 2-го канала TCI важна в RANS-моделях течения (на основе уравнений Рейнольдса) и не важна при использовании вихреразрешающих подходов к моделированию турбулентных течений, т.к. основную роль во 2-м канале TCI играет крупномасштабная турбулентность, которая в вихреразрешающих подходах описывается напрямую. Однако при описании течений в каналах и обтекания тел приходится применять гибридные вихреразрешающие методы [36], которые в пристеночной области течения переходят в моделирование на базе нестационарных уравнений RANS. В этом случае в пристеночной области учет 2-го канала TCI оказывается существенным.

Чаще всего используется гипотеза об изотропном характере переноса скалярных величин (энтальпии и массовых долей компонент смеси), и тогда 2-й канал TCI учитывают путем введения переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта. Формула, выражающая турбулентное число Прандтля через характерные времена пульсаций скорости и скаляра, предложена в [37]. Алгебраические модели для турбулентных чисел Прандтля и Шмидта предложены, например, в [38,39]. Различные дифференциальные модели для турбулентных чисел Прандтля и Шмидта рассмотрены в [40]. Алгебраическая модель [39] и дифференциальная модель [41] предсказывают подобные распределения чисел Прандтля для эксперимента Берроуза и Куркова [42], включающие уменьшение турбулентного числа Прандтля вблизи фронта пламени. Тем не менее, более современная модель [43] не описывает данный эффект. Возможно, ошибкой модели [43] является отождествление характерных частот пульсаций скорости и скалярных параметров. Перспективные модели различных членов в уравнениях, которые используются при расчете турбулентных чисел Прандтля и Шмидта, описаны в работах [44–47].

В работе [48] описан подход к численному моделированию турбулентного горения в струйных течениях, в котором учитываются оба основных канала TCI. Для учета 1-го канала TCI задаются ФПВ концентраций и температуры, а для учета 2-го канала используется модель для переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта, восходящая к работе [37]. К сожалению, использованный в [48] статистический метод учета 1-го канала TCI не учитывает физические особенности реальных турбулентных пламен; к тому же в [48] не учитываются химические источники в уравнениях для нахождения турбулентных чисел Прандтля и Шмидта.

Современные методы учета TCI требуют значительных компьютерных ресурсов, а точность описания течений с турбулентным горением остается довольно низкой. Разработанные методы описания TCI реализованы в коммерческих пакетах вычислительной аэродинамики (ANSYS CFX [49], FASTRAN [50] и др.), но применение этих методов для решения сложных практических задач требует высокой квалификации вычислителя, глубокого понимания физики течения, умения вторгаться в программу для повышения ее устойчивости и качества.

В связи с большими вычислительными затратами при расчете трехмерных турбулентных течений с горением приходится использовать упрощенные модели химической кинетики, что приводит к погрешностям. Последовательность химических процессов в турбулентном потоке определяет локализацию зон тепловыделения и играет существенную роль в формировании газодинамической структуры течения и практически значимых характеристик энергетических устройств. Поэтому исследование взаимодействия модели химической кинетики с другими математическими моделями (моделью турбулентности, моделью турбулентного горения) важно для правильного воспроизведения физических процессов турбулентного горения в расчетах.

По количеству компонентов и реакций модели химической кинетики можно условно разделить на четыре категории: детальные, скелетные, упрощенные и гло-

бальные. Детальные механизмы горения водорода в воздухе, не учитывающие окисление азота и реакции с участием атомов углерода, обычно содержат около 20 реакций между 9 компонентами (напр., [51]). Детальные механизмы для углеводородов (напр., GriMech 3.0 [52]) включают сотни компонент и тысячи реакций. Скелетные механизмы [53] получаются из детальных путем исключения несущественных для условий задачи веществ и реакций; для углеводородов они могут включать десятки компонент и десятки или сотни реакций. Например, скелетный механизм окисления метана [54] содержит 35 реакций между 15 активными компонентами, а его уточненный аналог [55] — 42 реакций между 17 активными компонентами. Дальнейшее упрощение механизма (за счет сужения области применимости) обеспечивают редуцированные кинетические схемы [56, 57], которые получаются из скелетных с помощью методов квазистационарного состояния и квазиравновесных реакций. Самыми компактными (но и наиболее узкими по применимости) являются глобальные кинетические схемы, которые не выводятся напрямую из других механизмов, а представляют собой небольшой набор брутто-реакций, заменяющих целые этапы реального кинетического процесса. Скорости этих брутто-реакций могут аппроксимироваться абстрактными выражениями, отличающимися от аррениусовых зависимостей (см., напр., [58–60]). Рассматриваются также квазиглобальные модели, в которых одна или несколько глобальных реакций (напр., реакция разложения углеводорода на CO и H₂O) дополнены элементарными реакциями между более простыми частицами (пример — [61]).

Модели химической кинетики играют важную роль в получении точного результата моделирования турбулентного горения. Одновременно с развитием технологий компьютерного моделирования совершались отдельные попытки исследования влияния различных моделей химической кинетики на результат моделирования турбулентного горения. В работе [62] сравнивалось влияние моделей химической кинетики с 8 реакциями и с 25 реакциями на результаты расчетов кругового сверхзвукового потока всасываемого воздуха и двумерной щели в стенке аэродинамической трубы. В работах [63, 64] изучалось влияние неопределенности коэффициентов скорости на вычисленные времена задержки воспламенения, скорости горения и интегральные характеристики течения. Позже в работе [65] были рассмотрены и сопоставлены три кинетики для описания процесса воспламенения перемешанной системы водород/воздух в сверхзвуковом слое смешения с температурами более 1000 К. В работе [66] на базе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье—Стокса (RANS) исследовано влияние модели химической кинетики на приподнятые сверхзвуковые пламена. Также в работе [67] было исследовано влияние модели химической кинетики на распределение компонентов в пристеночном высокоскоростном горении водорода в воздухе. В последнее десятилетие большое внимание привлекло сочетание метода крупных вихрей (LES) с химическими кинетическими моделями и моделью турбулентного горения. Влияние кинетики на моделирование течения с высокоскоростным горением водорода в канале было рассмотрено в [68–70].

В разд. 2 настоящей статьи представлена базовая система уравнений и замыкающие ее модели турбулентности и химической кинетики. В разд. 3 рассматриваются различные модели 1-го канала TCI класса PaSR. Разд. 4 посвящен модели для переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта PrOm и ее сопряжению с моделью EPaSR.

Применение описанных моделей к воспроизведению конкретного эксперимента с дозвуковым предварительно перемешанным турбулентным горением будет представлено в следующей статье.

2. Математическая формулировка задачи. Подход Рейнольдса (RANS) основан на решении осредненных по времени нестационарных уравнений Навье—Стокса для

многокомпонентного сжимаемого реагирующего газа с конечными скоростями реакций:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{p} \tilde{u}_i) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p} \tilde{u}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{p} \tilde{u}_i \tilde{u}_k + \bar{p} \tilde{\delta}_{ik} + \tau_{ik}) = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{p} \tilde{H} \tilde{u}_i + \tau_{ik} \tilde{u}_k + q_i + \sum_{j=1}^{N_{sp}} J_{ij} \Delta h_{0,j} \right) = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p} \tilde{Y}_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{p} \tilde{Y}_j \tilde{u}_i + J_{ij}) = \tilde{s}_j \quad (2.4)$$

Здесь t – время, x_i ($i = 1, 2, 3$) – декартовы координаты, ρ – плотность, u_i ($i = 1, 2, 3$) – компоненты вектора скорости \vec{V} , $p = \rho R_0 T \sum_j Y_j / W_j$ – давление (R_0 – универсальная газовая постоянная, Y_j и W_j – массовая доля и молекулярный вес j -й компоненты газовой смеси), $E, H = E + p / \rho$ – полная энергия и полная энтальпия потока на единицу массы газа, \tilde{s}_j – химический источник массы j -й компоненты, связанный со скоростями химических реакций.

В статье принято суммирование по повторяющимся пространственным индексам. Черта сверху обозначает осреднение по Рейнольдсу, тильда – осреднение по Фавру.

Газ рассматривается как смесь N_{sp} компонент, так что необходимо решать N_{sp} уравнений переноса (2.4) для массовых долей \tilde{Y}_i . Фактически, можно было бы решать только $N_{sp} - 1$ уравнений, т.к. сумма \tilde{Y}_i всегда равна единице; но ради универсальности алгоритма лучше не исключать уравнение для какой-либо массовой доли. Этот подход требует процедуру перенормировки для поддержания единичной суммы \tilde{Y}_i на каждом шаге по времени в течение расчета.

Уравнения (2.2) и (2.3) содержат сумму напряжений Рейнольдса и вязких напряжений, которая представляется как

$$\tau_{ik} = \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_k'' - 2\tilde{\mu} \left(\tilde{S}_{ik} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \delta_{ik} \right), \quad (2.5)$$

где $\tilde{S}_{ik} = (\partial \tilde{u}_i / \partial x_k + \partial \tilde{u}_k / \partial x_i) / 2$ – тензор скоростей деформации, μ – динамическая молекулярная вязкость, определяемая по формуле Сазерленда. Для воздуха

$$\mu = 1.72 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{273} \right)^{3/2} \frac{273 + 122}{T + 122} \frac{\text{кг}}{\text{м} \cdot \text{с}}$$

Уравнение (2.3) включает полную энтальпию $\tilde{H} = \tilde{u}_i \tilde{u}_i / 2 + \tilde{k} + \tilde{\Delta h}_0 + \tilde{h}_s$, где $\tilde{k} = \tilde{u}_i \tilde{u}_i'' / 2$ – кинетическая энергия турбулентности, $\tilde{\Delta h}_0 = \sum_j \tilde{Y}_j \Delta h_{0,j}$ – удельная энтальпия образования смеси, $\tilde{h}_s = \sum_j \tilde{Y}_j h_{s,j}(\tilde{T})$ – явная, или же тепловая энтальпия смеси. Для аппроксимации суммарных энтальпий отдельных компонент,

$h_j(T) = \Delta h_{0,j} + h_{s,j}(T) = \Delta h_{0,j} + \int_{T_0}^T c_{p,j}(T') dT'$, используется база данных [71]. Полная энергия \tilde{E} равна $\tilde{H} - \bar{p} / \bar{\rho}$. Включение энтальпии образования компонент в \tilde{H} и \tilde{E} позволяет устранить химический источник в правой части уравнения энергии (2.3). Теплоемкость смеси при постоянном давлении считается как $c_p = \sum_j \tilde{Y}_j dh_j / dT$.

Также (2.3) содержит сумму турбулентных и молекулярных потоков явной энтальпии:

$$q_i = \bar{\rho} \widetilde{h_s''} u_i'' - \frac{\tilde{\mu}}{\text{Pr}} \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} \quad (2.6)$$

Уравнения (2.3) и (2.4) содержат также сумму турбулентного и молекулярного потоков массы j -го компонента:

$$J_{ji} = \bar{\rho} \widetilde{Y_j''} u_i'' - \frac{\tilde{\mu}}{\text{Sc}} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_i} \quad (2.7)$$

Для замыкания системы уравнений (2.1)–(2.4) необходимы три физические модели: модель турбулентности, модель химической кинетики и модель взаимодействия турбулентности и горения (TCI – turbulence combustion interaction).

В рамках данной работы используются дифференциальные модели турбулентности класса $k - \omega$ (модель SST [72] и модель Baseline $k - \omega$ [73]). Эти модели основаны на гипотезе Буссинеска, а турбулентные потоки в (2.5)–(2.7) представлены по аналогии с молекулярными потоками:

$$\bar{\rho} \widetilde{u_i''} u_k'' \approx \frac{2}{3} \rho \tilde{k} \delta_{ik} - 2\mu_T \left(\tilde{S}_{ik} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \delta_{ik} \right) \quad (2.8)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{h_s''} u_i'' \approx - \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} \quad (2.9)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{Y_j''} u_i'' \approx - \frac{\mu_T}{\text{Sc}_T} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

В моделях класса $k - \omega$ турбулентная вязкость считается следующим образом:

$$\mu_T = \rho F_\mu \frac{\tilde{k}}{\omega}, \quad (2.11)$$

где ω – характерная частота пульсаций скорости, а F_μ – пристеночная функция, которая равна единице в свободной турбулентности. В модели SST, $F_\mu = \min(1; 0.31\omega/(SF_2))$, где $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$, и F_2 – гладкая функция, которая равна единице у стенок и стремится к нулю при удалении от них. В модели Baseline $k - \omega$, $F_\mu = 1$.

Параметры \tilde{k} и ω определяются из решения дополнительных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho}\tilde{k}\tilde{u}_i - \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T^k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) &= \bar{\rho}(\tilde{P} - \tilde{\varepsilon}) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\omega) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho}\omega\tilde{u}_i - \left(\tilde{\mu} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T^\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right) &= \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} &= \bar{\rho} \left(C_{\omega 1} \frac{\tilde{P}}{\mu_T} - C_{\omega 2} \frac{\omega}{\tilde{k}} \tilde{\varepsilon} \right) + C_{\omega 3} \bar{\rho} (1 - F_1) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \\ \frac{1}{\text{Pr}_T^k} &= \frac{1}{\text{Pr}_{T,1}^k} F_1 + \frac{1}{\text{Pr}_{T,2}^k} (1 - F_1), \quad \frac{1}{\text{Pr}_T^\omega} = \frac{1}{\text{Pr}_{T,1}^\omega} F_1 + \frac{1}{\text{Pr}_{T,2}^\omega} (1 - F_1) \\ C_{\omega 2} &= C_{\omega 2,1} F_1 + C_{\omega 2,2} (1 - F_1), \quad C_{\omega 1} = \frac{C_{\omega 2}}{C_\mu} - \frac{0.41^2}{\text{Pr}_T^\omega \sqrt{C_\mu}}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $\tilde{P} = -\widetilde{u_i'' u_k''} \cdot \partial \tilde{u}_i / \partial x_k$ – производство кинетической энергии турбулентности \tilde{k} , $\tilde{\varepsilon} = 0.09 \tilde{k} \omega$ – скорость диссипации \tilde{k} и F_1 – гладкая функция, которая равна единице у стенок и стремится к нулю при удалении от них, $\text{Pr}_{T,1}^k, \text{Pr}_{T,1}^\omega, C_{\omega,2,1}$ – значения эмпирических коэффициентов для пристеночной турбулентности, $\text{Pr}_{T,2}^k, \text{Pr}_{T,2}^\omega, C_{\omega,2,2}$ – для свободной турбулентности. Эмпирические коэффициенты $\text{Pr}_{T,1}^k, \text{Pr}_{T,1}^\omega, C_{\omega,2,1}, \text{Pr}_{T,2}^k, \text{Pr}_{T,2}^\omega, C_{\omega,2,2}$ и $C_{\omega,3}$ указаны в работе [72] (для модели SST) и в работе [73] (для модели Baseline $k - \omega$). Они отличаются только значениями коэффициента $\text{Pr}_{T,1}^k$, равного 1.176 в модели SST и 2 в Baseline $k - \omega$.

Модель химической кинетики определяет список веществ и формулы для скоростей реакций, $\dot{\omega}_j$, входящих в массовые источники компонентов \dot{s}_i в уравнении (2.4).

В настоящей работе используются модели обоих основных каналов TCI. Модели 1-го канала TCI (влияние турбулентности на средние скорости химических реакций, $\bar{\omega}_j$) будут обсуждаться в разд. 3. Если модели 1-го канала TCI не используются, $\bar{\omega}_j$ можно рассчитать путем подстановки средних параметров в стандартные формулы химических реакций (так называемое квазиламинарное приближение). В рамках гипотезы Буссинеска второй канал TCI можно описать введением переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта (см. (2.9), (2.10)). Модель для переменных Pr_T и Sc_T будет рассмотрена в разделе 4. Если 2-й канал TCI не учитывается, то расчеты можно выполнить с постоянными числами $\text{Pr}_T = 0.9, \text{Sc}_T = 1.0$.

3. Модели 1-го канала TCI. На основе успешного опыта [24, 25] в данной работе для описания первого канала TCI используется класс моделей реакторов с частичным перемешиванием (PaSR).

Концепция PaSR рассматривает турбулентное течение с горением как двухфазный поток, состоящий из так называемых тонких структур, в которых происходит горение, и окружающей среды, в которой реакции отсутствуют. Экспериментальные данные подтверждают существование тонких структур, см. [20]. Тонкие структуры рассматриваются как реакторы, осуществляющие обмен массой и теплом с окружающей средой за счет диффузии. Параметры в тонких структурах будем обозначать верхним индексом “*”, а параметры окружающей среды индексом “0”. Практичнее решать уравнения для тонких структур и для средних параметров, обозначаемых чертой (осреднение по Рейнольдсу) и тильдой (осреднение по Фавру). Зная объемную долю тонких структур γ^* , можно выписать следующие соотношения между этими тремя типами условно осредненных параметров:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \gamma^* \rho^* + (1 - \gamma^*) \rho^0, \quad \bar{\rho} \tilde{Y}_j = \gamma^* \rho^* Y_j^* + (1 - \gamma^*) \rho^0 Y_j^0 \\ \bar{\rho} \sum_{j=1}^{N_{sp}} \tilde{Y}_j h_j(\tilde{T}) &= \gamma^* \rho^* \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^* h_j(T^*) + (1 - \gamma^*) \rho^0 \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^0 h_j(T^0) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Наиболее известными моделями этого класса являются Eddy Dissipation Concept (EDC) [20, 74] и PaSR [21]. Эти модели основаны на предположении, что время реакции в тонких структурах существенно меньше характерного времени изменения среднего потока. В этом случае состояние тонких структур является квазистационарным и описывается следующей системой алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \rho^* \frac{Y_j^* - Y_j^0}{\tau^*} &= \dot{s}_j \left(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_{N_{sp}}^* \right) \\ \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^* h_j(T^*) &= \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^0 h_j(T^0) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Значение ρ^* / τ^* является средним потоком массы через единичный объем тонких структур, и τ^* может быть интерпретировано как характерное время смешения, определяющее скорость обмена тонких структур массой и теплом с окружающим пространством. Скорость газа, как в тонких структурах, так и в окружающей среде предполагается равной локальной средней скорости потока. Следовательно, естественно принять, что

$$\rho^* = \rho^0 = \bar{\rho} \quad (3.3)$$

Соотношение (3.3) используется в реализации подхода PaSR в программе **zFlare**, разработанной в ЦАГИ [75]. Тем не менее, в программе ANSYS Fluent© [49] используется другое предположение вместо (3.3):

$$\rho^* = \rho^0 = \bar{\rho} \quad (3.4)$$

Уравнения (3.1)–(3.2) образуют замкнутую систему алгебраических уравнений, позволяющую через заданные параметры осредненного потока $(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{Y}_1, \dots, \bar{Y}_{N_{sp}})$ найти параметры газа в тонких структурах и в окружающей среде. После нахождения параметров газа в тонких структурах средние скорости химических реакций определяются по следующей формуле:

$$\bar{s}_j \approx \gamma^* \dot{s}_j(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_{N_{sp}}^*) = \gamma^* \rho^* \frac{Y_j^* - Y_j^0}{\tau^*} \quad (3.5)$$

В модели PaSR [21] объемная доля тонких структур γ^* и характерное время смешения газа в тонких структурах выражаются формулами

$$\gamma^* = \frac{\tau_{chem}}{\tau_{chem} + \tau^*}, \quad \tau^* = C_\tau \sqrt{\tau_T \tau_K}, \quad (3.6)$$

где τ_{chem} – характерное время реакции в тонких структурах, $\tau_T = \tilde{k} / \tilde{\varepsilon} \sim 1 / \omega$ – интегральный временной масштаб турбулентных пульсаций, а $\tau_K = \sqrt{\tilde{\nu}} / \tilde{\varepsilon}$ – микромасштаб Колмогорова. Отметим, что формулу (3.6) можно переписать в виде $\gamma^* = [1 + C_\tau \sqrt{Da / Ka}]^{-1}$, где $Da = \tau_T / \tau_{chem}$ и $Ka = \tau_{chem} / \tau_K = \sqrt{Re_T} / Da$ – числа Дамкелера и Карловица, сочетание которых определяет режим турбулентного горения [4]. Коэффициент C_τ в работе [21] принят равным единице.

Решение системы алгебраических уравнений (3.1)–(3.2) в **zFlare** реализовано с использованием установления по псевдовремени. Следующие уравнения интегрируются по псевдовремени t' до достижения стационарного состояния ($d / dt' \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} \rho^* \frac{dY_j^*}{dt'} + \rho^* \frac{Y_j^* - Y_j^0}{\tau^*} &= \dot{s}_j(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_{N_{sp}}^*) \\ \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^* h_j(T^*) &= \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^0 h_j(T^0) \end{aligned} \quad (3.7)$$

При интегрировании по псевдовремени используется формула (3.3).

В ANSYS Fluent© используется модификация модели PaSR – так называемая PFR (Plug Flow Reactor [76–78]), где (3.2) с допущением (3.4) заменяется на систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{dY_j^*}{dt'} &= \dot{s}_j \left(\bar{\rho}, T^*, Y_1^*, \dots, Y_{N_{sp}}^* \right) \\ \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^* h_j(T^*) &= \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^0 h_j(T^0) \end{aligned} \quad (3.8)$$

В начальный момент псевдовремени, $t' = 0$, параметры в тонких структурах принимаются равными параметрам окружающего газа: $Y_j^*(0) = Y_j^0$, $T^*(0) = T^0$. Интегрирование (3.8) по псевдовремени ведется в интервале $t' \in [0; \tau^*]$. В итоге, вместо (3.5) используется следующая формула:

$$\bar{s}_j \approx \gamma^* \int_0^{\tau^*} \dot{s}_j \left(\bar{\rho}, T^*(t'), Y_1^*(t'), \dots, Y_{N_{sp}}^*(t') \right) dt' = \gamma^* \bar{\rho} \frac{Y_j^*(\tau^*) - Y_j^0}{\tau^*} \quad (3.9)$$

В работах [22,79] была предложена расширенная модель PaSR (Extended PaSR – EPaSR). Для учета изменения параметров тонких структур в пространстве и во времени было предложено решать дополнительные уравнения в частных производных для параметров тонких структур:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\gamma^* \rho^* Y_j^*)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\gamma^* (\rho^* Y_j^* \tilde{u}_i + J_{ji}^*)] &= \\ = -\gamma^* \rho^* \left(C_g \frac{\tilde{\epsilon}}{\bar{k}} (Y_j^* - Y_j^0) \right) + \gamma^* \rho^* \bar{s}_j \left(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_{N_{sp}}^* \right) + \\ + \frac{\dot{m} + |\dot{m}|}{2} Y_j^0 + \frac{\dot{m} - |\dot{m}|}{2} Y_j^*; \quad j = 1, \dots, N_{sp} - 1 \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\gamma^* \rho^* E^*)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\gamma^* \left(\rho^* E^* \tilde{u}_i + \bar{p} \tilde{u}_i + \tau_{ki} \tilde{u}_k + q_i^* + \sum_{j=1}^{N_{sp}} J_{ji}^* \Delta h_{0,j} \right) \right] &= \\ = -\gamma^* \rho^* C_g \frac{\tilde{\epsilon}}{\bar{k}} \sum_{j=1}^{N_{sp}} (Y_j^* h_j(T^*) - Y_j^0 h_j(T^0)) + \\ + \frac{\dot{m} + |\dot{m}|}{2} \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^0 h_j(T^0) + \frac{\dot{m} - |\dot{m}|}{2} \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^* h_j(T^*) \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial(\gamma^* \rho^*)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\gamma^* \rho^* \tilde{u}_i] = \dot{m}; \quad \dot{m} = -\rho^* \frac{\gamma^* - \gamma_{eq}^*}{\tau^*} \quad (3.12)$$

Константа C_g в релаксационных терминах (описывающая диффузионный обмен между тонкими структурами и окружающей средой) была выбрана равной 10.5, исходя из теоретических соображений [24]. Это было подтверждено параметрическими расчетами [80].

Слагаемые с множителем \dot{m} ответственны за изменение параметров вследствие обмена массы от тонких структур к окружающему газу и обратно. Объемная доля тонких структур, γ^* , определяется из уравнения (3.12), где $\gamma_{eq}^* = \tau_{chem} / (\tau_{chem} + \tau^*)$. На практике вместо решения уравнения (3.12) уравнение (3.10) решается также для $j = N_{sp}$. (Сумма уравнений (3.10) для $j = 1, 2, \dots, N_{sp}$ эквивалентна уравнению (3.12).) Вместе с системой (3.10)–(3.12) используется соотношение (3.3). Также предполагается, что турбулентная вязкость и турбулентные числа Прандтля и Шмидта для тон-

ких структур такие же, как и для среднего течения, и используются следующие формулы для диффузионных потоков:

$$q_i^* = - \left(\frac{\mu(T^*)}{Pr} + \frac{\mu_T}{Pr_T} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_j^* h_{s,j}(T^*) \right) \quad (3.13)$$

$$J_{ji}^* = - \left(\frac{\mu(T^*)}{Sc} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial Y_j^*}{\partial x_i} \quad (3.14)$$

4. Модели 2-го канала TCI. Модель PrOm [81] описывает турбулентный перенос на основе переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта для потоков тепла и массы соответственно. Этот подход рассматривает турбулентное число Прандтля для произвольного скаляра f как функцию частоты пульсаций скорости ω и частоты пульсаций скаляра ω_f . Первая частота находится из уравнений для модели турбулентности класса $k - \omega$ (Baseline $k - \omega$ или SST). Для нахождения частоты пульсаций скаляра ω_f требуется решение дополнительных дифференциальных уравнений для среднего квадрата пульсаций скаляра $\overline{f''^2}$, а также для самой частоты пульсаций скаляра ω_f . Более предпочтительно решать отдельные дифференциальные уравнения для частот, поскольку асимптотическое поведение их решения вблизи стенки близко к реальному [2], и их низкорейнольдсовые версии не требуют искусственных эмпирических пристеночных коррекций.

Формула для турбулентного числа Прандтля была впервые предложена в работе [37]. Существуют различные способы получения этой формулы. Один из способов представлен в Приложении. Он основан на рассмотрении дифференциального уравнения для турбулентного потока скаляра $f''u_i''$. Обзор различных замыканий для этого уравнения представлен в Приложении. В результате применения этих замыканий и приравнивания нулю правой части уравнения для $f''u_i''$ можно получить следующую простую формулу для турбулентного числа Прандтля в приближении Буссинеска $\overline{f''u_i''} \approx - \frac{\mu_T}{\bar{\rho} Pr_T^f} \frac{\partial f}{\partial x_i}$:

$$Pr_T^f = C_\Phi \sqrt{\frac{\omega_f}{\omega}} \quad (4.1)$$

Для простоты определим частоту пульсаций скаляра по формуле, аналогичной формуле для частоты пульсаций скорости $\omega = \tilde{\varepsilon} / (C_\mu \tilde{k})$, $C_\mu = 0.09$:

$$\omega_f = \frac{\varepsilon_f}{0.09 \sigma_f}, \quad (4.2)$$

где $\sigma_f \equiv \overline{f''^2}$ – квадрат пульсаций скаляра и $\varepsilon_f = 2 \frac{\tilde{\mu}}{\bar{\rho}} \frac{\partial f''}{\partial x_j} \frac{\partial f''}{\partial x_j}$ – его диссипация.

Согласно измерениям [82] соотношение частот пульсаций скаляра и скорости варьируется в диапазоне от 0.67 до 2.38. По данным Сринивасана и др., в экспериментах для сдвиговых течений [83] число Прандтля варьируется от 0.4 до 1.1. Предположим, что наименьшее турбулентное число Прандтля 0.4 достигается при $\omega_f = 0.67\omega$, тогда, согласно формуле (4.1), $C_\Phi = 0.51$. Это значение будет в дальнейшем использоваться в данной статье.

Стоит отметить, что существует сильный разброс в оценке этой константы, например, в работе [37] предлагается значение C_Φ , равное 0.82. В диссертации [48], значение $C_\Phi = 0.52$ было получено путем применения соотношения между квадратом

пульсации нормальной к линии тока компоненты скорости и кинетической энергией турбулентности: $v_n''^2 / \bar{k} \approx 0.5$.

Точные уравнения для квадрата пульсации скаляра σ_f и его диссипации ϵ_f приведены ниже:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \sigma_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \sigma_f \tilde{u}_i + \bar{\rho} \widetilde{f''^2 u_i''} - \tilde{\mu} \frac{\partial \sigma_f}{\partial x_i} \right] = \\ = -2\bar{\rho} \widetilde{f'' u_k''} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_k} - 2\tilde{\mu} \frac{\partial f''}{\partial x_k} \frac{\partial f''}{\partial x_k} + 2\overline{f'' s_f} \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \epsilon_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \epsilon_f \tilde{u}_i + \bar{\rho} \widetilde{\epsilon_f u_i''} - \tilde{\mu} \frac{\partial \epsilon_f}{\partial x_i} \right] = \\ = -4\tilde{\mu} \underbrace{\frac{\partial f''}{\partial x_m} \frac{\partial f''}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_m}}_{\text{EI}} - 4\tilde{\mu} \underbrace{\frac{\partial f''}{\partial x_m} \frac{\partial u_k''}{\partial x_m} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_k}}_{\text{EII}} - \\ - 4\tilde{\mu} \cdot \underbrace{\frac{\tilde{\mu}}{\bar{\rho}} \frac{\partial^2 f''}{\partial x_m \partial x_k} \frac{\partial^2 f''}{\partial x_m \partial x_k}}_{\text{EIII}} - 4\tilde{\mu} \underbrace{\frac{\partial f''}{\partial x_m} \frac{\partial f''}{\partial x_k} \frac{\partial u_k''}{\partial x_m}}_{\text{EIV}} + 4 \underbrace{\frac{\tilde{\mu}}{\bar{\rho}} \frac{\partial f''}{\partial x_m} \frac{\partial s_f''}{\partial x_m}}_{\text{EIV}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

В правой части уравнения для скалярной диссипации (4.4) имеются четыре незамкнутых члена. Слагаемое EI ответственно за производство ϵ_f градиентами среднего поля скорости. Однако, это одно из самых противоречивых слагаемых, так как оно может также вести себя как сток, особенно для положительной дивергенции скорости и для расширяющихся топологий тензора градиента скорости $\partial \tilde{u}_i / \partial x_j$ (как было показано в [45]). Замыкание, предложенное в текущей статье, разрешает отрицательные значения этого слагаемого при помощи добавления к стандартной аппроксимации (основанной на производстве кинетической энергии турбулентности \bar{P}) дополнительного слагаемого, отрицательного и квадратичного по дивергенции скорости, как показано ниже:

$$\text{EI} = \bar{\rho} \frac{\epsilon_f}{\bar{k}} \left\{ C_{P2} \bar{P} - C_{P3} \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right)^2 \right\}$$

Здесь $C_{P2} = 1.45$ [40]. Значение коэффициента C_{P3} было получено авторами в параметрических расчетах эксперимента [42]. Второе слагаемое препятствует чрезмерному росту Pr_T^f в областях с повышенными значениями дивергенции скорости, например, области с косым скачком уплотнения и отраженной волной. Слагаемое, обозначенное как EII, представляет собой производство ϵ_f вследствие среднего градиента скаляра и является сверткой среднего градиента скаляра с вектором диссипации турбулентного потока скаляра: $\text{FIII}_k = 4\mu \partial f'' / \partial x_m \partial u_k'' / \partial x_m$, рассмотренным в Приложении. Пренебрегая вторым слагаемым в выражении для FIII_k (П.2), и применяя формулу Буссинеска для потока скаляра, можно предложить следующее замыкание для слагаемого EII:

$$\text{EII} = C_{P1} \frac{\epsilon_f}{\sigma_f} 2 \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T^f} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_m} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_m} = C_{P1} \bar{\rho} \frac{\epsilon_f}{\sigma_f} P_f, \quad C_{P1} = \frac{0.46}{(\text{Pr}_T^f)^2}$$

Два отдельных слагаемых в EIII представляют собой деструкцию ϵ_f из-за кривизны изоповерхностей поля скаляра и за счет механизма турбулентного растяжения,

соответственно. Замыкание этих членов для режима флеймлетов рассматривалось в [47]. Авторы считают, что слагаемое, ответственное за турбулентное растяжение, должно быть линейным по скалярной диссипации, тогда как член, связанный с кривизной изоповерхностей скаляра, должен быть квадратичным. Несмотря на наличие зависимости от турбулентного числа Рейнольдса, эта модель упускает один важный факт, который был получен для пассивного скаляра в [44]. Согласно экспериментальным данным для сдвиговых потоков [83] анизотропия поля средней скорости приводит к резкому уменьшению турбулентного числа Прандтля. С другой стороны, Ши, Ламли и Яника [44] вывели зависимость квадратичной деструкции от второго инварианта II тензора анизотропии a_{ij} , где

$$a_{ij} = \frac{\overline{u_i' u_j'}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij}, \quad II = a_{ij} a_{ij}$$

Принимая во внимание это исследование, предложенное замыкание для члена ЕIII имеет вид:

$$\text{ЕIII} = -\bar{\rho} \varepsilon_f \left\{ C_{D1} \frac{\varepsilon_f}{\sigma_f} + C_{D2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \right\}; \quad C_{D1} = 1 + \frac{3}{4} b_{ij} b_{ij}, \quad b_{ij} = \frac{a_{ij}}{2}, \quad C_{D2} = 0.9$$

Тензор анизотропии рассчитывается по формуле Буссинеска (2.8). Следовательно, первый коэффициент в замыкании выражается как

$$C_{D1} = 1 + \frac{3}{4} S_{ij}^{dil} S_{ij}^{dil} / \omega^2,$$

$$\text{где } S_{ij}^{dil} = \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_n} \delta_{ij}.$$

Слагаемое EIV рассматривалось в [46] для активного скаляра в случае предварительно перемешанного пламени и выражается через скорость ламинарного фронта пламени и включается в деструкцию на основе кривизны изоповерхностей скаляра, квадратичную по скалярной диссипации.

Другой подход, который используется в текущей статье, заключается в том, чтобы выразить EIV как функцию от химического источника $Q_f^{\text{chem}} \equiv 2f'' \dot{s}_f$. Итоговое замыкание записывается следующим образом:

$$\text{EIV} = C_{W1} \frac{\varepsilon_f}{\sigma_f} Q_f^{\text{chem}}; \quad C_{W1} = 0.4$$

Замыкание Q_f^{chem} на основе модели EPaSR рассмотрено ниже.

Уравнения для частоты пульсаций скаляра ω_f могут быть легко выведены из (4.3) и (4.4), применяя соотношение (4.2).

Ради краткости, мы, наконец, рассмотрим уравнения, описывающие турбулентный перенос явной энтальпии h_s и массовых долей Y_i . Согласно (2.9) и (2.10), они требуют определения турбулентного числа Прандтля Pr_T и турбулентного числа Шмидта Sc_T . Эти числа могут быть посчитаны по формулам, аналогичным (4.1):

$$\text{Pr}_T = C_\Phi \sqrt{\frac{\omega_h}{\omega}}, \quad \text{Sc}_T = C_\Phi \sqrt{\frac{\omega_c}{\omega}} \quad (4.5)$$

В этих формулах (см. (4.2)):

$$\omega_h = \frac{\varepsilon_h}{0.09 \sigma_h}, \quad \omega_c = \frac{\varepsilon_c}{0.09 \sigma_c} \quad (4.6)$$

Здесь $\sigma_h = \widetilde{h_s''^2}$, $\sigma_c = \sum_{j=1}^{N_{sp}} \widetilde{Y_j''^2}$, и ε_h , ε_c – их диссипации соответственно. Следовательно, определение турбулентного числа Прандтля Pr_T и турбулентного числа Шмидта Sc_T требует решения четырех дополнительных дифференциальных уравнений для σ_h , ω_h , σ_c и ω_c . Эти уравнения приведены ниже:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \sigma_h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \sigma_h \tilde{u}_k - D_T^h \frac{\partial \sigma_h}{\partial x_k} \right] = 2 \frac{\mu_T}{Pr_T^h} \left(\frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_k} \right)^2 - \bar{\rho} \varepsilon_h + 2 \overline{\tilde{h}_s'' \dot{s}_h} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \omega_h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \omega_h \tilde{u}_k - D_T^h \frac{\partial \omega_h}{\partial x_k} \right] &= \bar{\rho} \frac{\omega_h}{\sigma_h} \left(C_{p1}^h - 1 \right) 2 \frac{\mu_T}{Pr_T^h} \left(\frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_k} \right)^2 + \\ &+ C_{p2} \mu_T \frac{\omega_h}{\tilde{k}} 2 S_{ij}^{dil} S_{ij}^{dil} - C_{p3} \mu_T \frac{\omega_h}{\tilde{k}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right)^2 + \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} &+ (1 - C_{D1}) C_{\mu} \bar{\rho} \omega_h^2 - C_{D2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon} \omega_h}{\tilde{k}} - 2 \left(1 - \frac{C_{W1}}{2} \right) \frac{\omega_h}{\sigma_h} \overline{\tilde{h}_s'' \dot{s}_h} \\ \frac{\partial \bar{\rho} \sigma_c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \sigma_c \tilde{u}_k - D_T^c \frac{\partial \sigma_c}{\partial x_k} \right] &= 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \sum_{j=1}^{N_{sp}} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_k} - \bar{\rho} \varepsilon_c + 2 \sum_{j=1}^{N_{sp}} \overline{\tilde{Y}_j'' \dot{s}_j} \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \omega_c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \omega_c \tilde{u}_k - D_T^c \frac{\partial \omega_c}{\partial x_k} \right] &= \bar{\rho} \frac{\omega_c}{\sigma_c} \left(C_{p1}^c - 1 \right) 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \sum_{j=1}^{N_{sp}} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_k} + \\ &+ C_{p2} \mu_T \frac{\omega_c}{\tilde{k}} 2 S_{ij}^{dil} S_{ij}^{dil} - C_{p3} \mu_T \frac{\omega_c}{\tilde{k}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \right)^2 + \\ &+ (1 - C_{D1}) \bar{\rho} C_{\mu} \omega_c^2 - C_{D2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon \omega_c}{\tilde{k}} - 2 \left(1 - \frac{C_{W1}}{2} \right) \frac{\omega_c}{\sigma_c} \sum_{j=1}^{N_{sp}} \overline{\tilde{Y}_j'' \dot{s}_j} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Здесь использованы обозначения $D_T^h = \tilde{\mu} / Pr + \mu_T / Pr_T$ и $D_T^c = \tilde{\mu} / Sc + \mu_T / Sc_T$. Коэффициенты C_{p1}^h и C_{p1}^c равны $0.46 / Pr_T^2$ и $0.46 / Sc_T^2$, соответственно.

Слагаемое с перекрестной диффузией $\mu_T \partial \tilde{f}''^2 / \partial x_k \partial \omega_f / \partial x_k$, которое появляется при переходе от уравнений класса $\sigma_f - \varepsilon_f$ к уравнениям класса $\sigma_f - \omega_f$, подлежит удалению из моделей для частоты пульсаций. Дело в том, что это слагаемое ведет к нефизичному росту турбулентного числа Прандтля в слоях смешения и струях, что противоречит экспериментальным данным для сдвиговых течений [82].

Химические источники $Q_h^{chem} = \overline{2 \tilde{h}_s'' \dot{s}_h}$ и $Q_c^{chem} = 2 \sum_{j=1}^{N_{sp}} \overline{\tilde{Y}_j'' \dot{s}_j}$ представляют собой корреляции между флуктуациями скаляра и их источниками, где \dot{s}_h – скорость тепловыделения, \dot{s}_j – источник массы для j -го компонента, они определяются через скорости реакций $\dot{\omega}_k$ и разность стехиометрических коэффициентов в левой и правой частях уравнения прямой реакции: $\Delta v_{jr} = v_{jr}^f - v_{jr}^b$:

$$\dot{s}_j = -W_j \sum_{r=1}^{N_{react}} \left(\Delta v_{jr} \dot{\omega}_r^f - \Delta v_{jr} \dot{\omega}_r^b \right), \quad \dot{s}_h = - \sum_{j=1}^{N_{sp}} \Delta h_j^0 \dot{s}_j$$

Здесь W_j — молярная масса j -го компонента. В прямых реакциях $\Delta v_{jr} > 0$ для исходных веществ и $\Delta v_{jr} < 0$ для продуктов.

Существует множество подходов к моделированию корреляций источника скаляра вида $Q_h^{\text{chem}} = 2\overline{h_s''\dot{s}_h}$ и $Q_c^{\text{chem}} = 2\sum_{j=1}^{N_{sp}}\overline{Y_j''\dot{s}_j}$. Простейший подход, описанный в [41, 84], — алгебраическая модель, выражающая корреляцию $2\overline{f''\dot{s}_f}$ через средние источники, \dot{s}_f , и среднеквадратичное отклонение пульсаций скаляра, $\sqrt{\sigma_f}$. Был проведен [85] анализ предварительно перемешанного турбулентного пламени на основе функций плотности вероятности (ФПВ), предложены аппроксимации данных слагаемых, основанные на переменной прогресса реакции. В текущей статье используется модель, основанная на методе PaSR для первого канала TCI:

$$\sum_{j=1}^{N_{sp}}\overline{Y_j''\dot{s}_j} = \gamma^* \sum_{j=1}^{N_{sp}} (Y_j^* - \widetilde{Y}_j) \dot{s}_j^*, \quad \overline{h_s''\dot{s}_h} = \gamma^* (h_s^* - \widetilde{h}_s) \dot{s}_h^* \quad (4.11)$$

Это замыкание должно в основном оставаться положительным. Действительно, если j -й компонент представляет собой реагент, расходующийся при горении, то наиболее вероятно, что в тонких структурах массовая доля реагента меньше, чем в окружающем пространстве: $Y_j^* < Y_j^0$ и, следовательно, $Y_j^* < \widetilde{Y}_j$ (см. (3.1)). В то же время, мы можем ожидать, что $\dot{s}_j^* < 0$. Следовательно, произведение $(Y_j^* - \widetilde{Y}_j) \dot{s}_j^*$ будет в основном положительным. Легко проверить, что оно также будет преимущественно положительным, если j -й компонент представляет собой продукт, образующийся при горении. Следовательно, в большинстве случаев $Q_c^{\text{chem}} = 2\sum_{j=1}^{N_{sp}}\overline{Y_j''\dot{s}_j} > 0$. Аналогич-

ный вывод может быть сделан для Q_h^{chem} , так как явная энтальпия смеси должна увеличиваться вследствие тепловыделения. Однако, отрицательное значение корреляции тоже возможно, если состав и явная энтальпия в окружающем газе формируются не только вследствие обмена с тонкими структурами, но также подвержены сильному влиянию диффузии от соседних ячеек расчетной области. Чтобы предотвратить возможные осцилляции, которые не могут и не должны разрешаться в рамках RANS подхода, следует ограничить значение замыкания для Q^{chem} нулем снизу.

Граничные условия для модели PrOm сравнительно простые. Квадрат пульсаций скаляра на стенке принимается равным нулю $\sigma_h|_w = 0$, $\sigma_c|_w = 0$. Градиенты турбулентных чисел Прандтля и Шмидта предполагаются равными нулю на стенке: $\partial \text{Pr}_T^h / \partial n|_w = 0$, $\partial \text{Sc}_T / \partial n|_w = 0$. Эти условия совместно с соотношением (4.5) позволяют связать граничные значения частоты пульсации скаляра с граничным условием для ω .

Было также обнаружено [86], что модель градиентной диффузии Буссинеска может нарушать критерий реализуемости турбулентного потока. Критерий реализуемости формулируется согласно неравенству Шварца:

$$\widetilde{f''u_i''f''u_i''} \leq 2\tilde{k}\sigma_f$$

Принимая во внимание аппроксимацию Буссинеска $\widetilde{f''u_i''} \approx -\frac{\tilde{k}}{\omega \text{Pr}_T^f} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i}$ и соотношение (4.1), получаем нижнюю границу для Pr_T^f :

$$\text{Pr}_T^f \geq \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{1}{2} \frac{\tilde{k}}{\sigma_f} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j}}$$

Заключение. В следующей статье авторы представят применение моделей двух каналов ТСИ и моделей химической кинетики, которые были описаны выше, к численному моделированию эксперимента с дозвуковым турбулентным горением предварительно перемешанного метана и воздуха.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарят рецензента за внимательное прочтение работы и сделанные замечания и предложения, учтенные при доработке статьи. Представленные в статье новые результаты получены при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Договор № 14.G39.31.0001 от 13 февраля 2017).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Соломатин Р.С.* Численное моделирование процессов высокоскоростного смешения и горения в неоднородных топливно-воздушных смесях / Дисс. на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2022, 191 с.
2. *Wilcox D.C.* Turbulence Modeling for CFD. La Cañada: DCW Industries, 2006. 544 p.
3. *Колмогоров А.Н.* Уравнения турбулентного движения несжимаемой жидкости // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1942. Т. 6. № 1–2. С. 56–58.
4. *Poinsot T., Veynante D.* Theoretical and Numerical Combustion. Flouertown: RT Edwards Inc., 2005. 522 p.
5. *Peters N.* Turbulent Combustion. Cambridge: Univ. Press, 2000. 304 p.
6. *Lipatnikov A.* Fundamentals of Premixed Turbulent Combustion. Boca Raton: CRC Press, 2012. 548 p.
7. *Щетинков Е.С.* Физика горения газов. М.: Наука, 1965. 292 с.
8. *Kuznetsov V.R., Sabel'nikov V.A.* Turbulence and Combustion. New York: Hemisphere, 1990. 384 p.
9. *Su J., Liu A., Xiao H., Luo K., Fan J.* Entropy: an inspiring tool for characterizing turbulence–combustion interaction in swirling flames via direct numerical simulations of non-premixed and premixed flames // Entropy. 2023. V. 25. № 8. P. 1151.
10. *Borghi R.* Turbulent combustion modeling // Progress in Energy&Combust. Sci. 1988. V. 14. № 4. P. 245–292.
11. *Klimenko A.Y., Bilger R.W.* Conditional moment closure for turbulent combustion // Progress in Energy&Combust. Sci. 1999. V. 25. № 6. P. 595–687.
12. *Baurle R.A., Girimaji S.S.* Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations // Combust.&Flame. 2003. V. 134. № 1–2. P. 131–148.
13. *Зимонт В.Л., Мещеряков Е.А., Сабельников В.А.* Простая модель для учета молекулярного смешения при турбулентном горении неперемешанных газов // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14. № 3. С. 55–62.
14. *Molchanov A.M., Yanyushev D.S., Bykov L.V.* Influence of turbulent fluctuations on non-equilibrium chemical reactions in the flow // J. of Phys.: Conf. Ser. IOP. 2017. V. 891. № 1. Art. No. 012106.
15. *Мещеряков Е.А., Сабельников В.А.* Горение водорода в сверхзвуковом турбулентном потоке в канале при спутной подаче горючего и окислителя // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17. № 2. С. 55–64.
16. *Peters N.* Laminar flamelet concepts in turbulent combustion // Int. Symp. on Combustion. Elsevier, 1988. V. 21. № 1. P. 1231–1250.
17. *Zheng L.L., Bray K.N.C.* The application of new combustion and turbulence models to H₂-air nonpremixed supersonic combustion // Combust.&Flame. 1994. V. 99. № 2. P. 440–448.
18. *Flamelet Model Application for Non-Premixed Turbulent Combustion: NAS 1.26: 202176* / ed. by *Secundov A. et al.* Washington D.C.: NASA, 1996.
19. *Piffaretti S.G.* Flame age model: a transient laminar flamelet approach for turbulent diffusion flames. Дисс. на соискание уч. ст. доктора физ.-мат. наук. Цюрих: Швейцарский федеральный институт технологии, 2007. 194 с.
20. *Magnussen B.F.* The eddy dissipation concept: A bridge between science and technology // ECCOMAS Conf. on Comput. Combust. Lisbon, Portugal. 2005.

21. *Chomiak J., Karlsson A.* Flame liftoff in diesel sprays // Int. Symp. on Combust. Elsevier. 1996. V. 26. № 2. P. 2557–2564.
22. *Sabelnikov V., Fureby C.* LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy // Combust.&Flame. 2013. V. 160. № 1. P. 83–96.
23. *Moule Y., Sabelnikov V., Mura A.* Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen–air coflowing jets // Combust.&Flame. 2014. V. 161. № 10. P. 2647–2668.
24. *Petrova N., Sabelnikov V., Bertier N.* Numerical simulation of a backward-facing step combustor using RANS/Extended Partially Stirred Reactor model // EUCASS-2015. 17 p.
25. *Власенко В.В., Ноздрачев А.Ю., Сабельников В.А., Ширяева А.А.* Анализ механизмов стабилизации турбулентного горения по данным расчетов с применением модели реактора частичного перемешивания // Горение и взрыв. 2019. Т. 12. № 1. С. 43–57.
26. *Zimont V.L.* Gas premixed combustion at high turbulence // Turbulent Flame Closure Combust. Model. Experim. Thermal&Fluid Sci. 2000. V. 21. № 1–3. P. 179–186.
27. *Lipatnikov A.N., Chomiak J.* Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations // Progr. in Energy&Combust. Sci. 2002. V. 28. № 1. P. 1–74.
28. *Августинович В.Г., Куценко Ю.Г.* Создание и применение методологии комплексного расчета малоэмиссионной камеры сгорания // Изв. вузов. Авиационная техника. 2011. № 2. С. 37–42.
29. *Шелкин К.И.* К вопросу о турбулентном горении и фазах горения в двигателе // Изв. АН СССР. ОТН. 1953. № 3. С. 463–471.
30. *Раушенбах Б.В., Белый С.А., Беспалов И.В., Бородачев В.Я., Волинский М.С., Прудников А.Г.* Физические основы рабочего процесса в камерах сгорания воздушно-реактивных двигателей. М.: Машиностроение, 1964. 526 с.
31. *Chen Y.C., Mansour M.S.* Investigation of flame broadening in turbulent premixed flames in the thin-reaction-zones regime // Int. Symp. on Combustion. 1998. V. 27. P. 811–818.
32. *Skiba A.W., Wabel T.M., Carter C.D., Hammack S.D., Temme J.E., Driscoll J.F.* Premixed flames subjected to extreme levels of turbulence. Part I: Flame structure and a new measured regime diagram // Combust.&Flame. 2018. V. 189. P. 407–432.
33. *Wabel T.M., Skiba A.W., Driscoll J.F.* Evolution of turbulence through a broadened preheat zone in a premixed piloted Bunsen flame from conditionally-averaged velocity measurements // Combust.&Flame. 2018. V. 188. P. 13–27.
34. *Ratner A., Driscoll J.F., Donbar J.M., Carter C.D., Mullin J.A.* Reaction zone structure of non-premixed turbulent flames in the intensely wrinkled regime // Proc. Combust. Inst. 2000. V. 28. P. 245–252.
35. *Sabelnikov V.A., Yu R., Lipatnikov A.N.* Thin reaction zones in highly turbulent medium // Int. J. Heat Mass Transfer. 2019. V. 128. P. 1201–1205.
36. *Heinz S.* A review of hybrid RANS-LES methods for turbulent flows: Concepts and applications // Progr. in Aerospace Sci. 2020. V. 114. P. 100–597.
37. *Nagano Y., Kim C.* A two-equation model for heat transport in wall turbulent shear flows // J. of Heat Transfer. 1988. V. 110. P. 583–589.
38. *Wikström P.M., Wallin S., Johansson A.V.* Derivation and investigation of a new explicit algebraic model for the passive scalar flux // Phys. of Fluids. 2000. V. 12. № 3. P. 688–702.
39. *Goldberg U.* Variable turbulent Schmidt and Prandtl number modeling // Eng. App. Comp. Fluid Mech. 2010. V 4. P. 511–520.
40. *Sanders J.P.H., Gokalp I.* Scalar dissipation rate modelling in variable density turbulent axisymmetric jets and diffusion flames // Phys. of Fluids. 1998. V. 10. № 4. P. 938–948.
41. *Xiao X., Hassan H.A., Baurle R.A.* Modeling scramjet flows with variable turbulent Prandtl and Schmidt numbers // AIAA J. 2006. V. 45. P. 1415–1423.
42. *Burrows M.C., Kurkov A.P.* An analytical and experimental study of supersonic combustion of hydrogen in vitiated air stream // AIAA J. 1973. V. 11. № 9. P. 1217–1218.

43. *Hoste J.J.O.E., Fechter S., Karl S., Hannemann K.* Study of a supersonic reacting wall jet with a variable turbulent Prandtl and Schmidt number approach // *Aerospace Sci.&Technol.* 2020. V. 106. Art. No. 106070.
44. *Shih T., Lumley J., Janicka J.* Second-order modelling of a variable-density mixing layer // *J. of Fluid Mech.* 1987. V. 180. P. 93–116.
45. *Danish M., Sinha S., Girimaji S.* Influence of flow topology and dilatation on scalar mixing in compressible turbulence // *J. of Fluid Mech.* 2016. V. 793. P. 633–655.
46. *Mantel T., Borghi R.* A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation // *Combust.&Flame.* 1994. V. 96. № 4. P. 443–457.
47. *Mura A., Borghi R.* Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion // *Combust.&Flame.* 2003. V. 133. № 1–2. P. 193–196.
48. *Тушканов А.С.* Термически и химически неравновесные процессы в факеле маршевого двигателя твердого топлива / Дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук. М.: МАИ, 2019. 167 с.
49. ANSYS CFD. <https://www.ansys.com/products/fluids#tab1-2>
50. CFD-FASTRAN. <https://www.esi.com.au/software/cfd-ace/fastran>
51. *Zettervall N., Fureby C.* A computational study of ramjet, scramjet and dual-mode ramjet combustion in combustor with a cavity flameholder // *AIAA Aerospace Sci. Meeting.* AIAA paper. 2018: 1146. 14 p.
52. *Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., Moriarty N.W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C.T., Hanson R.K., Song S., William C. Gardiner J., Lissianski V.V., Qin Z.* GRI-MECH 3.0. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
53. *Лебедев А.В., Окунь М.В., Баранов А.Е., Деминский М.А., Потапкин Б.В.* Систематическая процедура упрощения кинетических механизмов химических процессов // *Химич. физика и мезоскопия.* 2011. Т. 13. № 1.
54. *Smooke M.D.* Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames: A Topical Volume. Lecture Notes in Physics. Vol. 384. Berlin: Springer, 1991. 251 p.
55. *Larsson A., Zettervall N., Hurtig T., Nilsson E., Ehn A., Petersson P., Alden M., Larfeldt J., Fureby C.* Skeletal methane–air reaction mechanism for large eddy simulation of turbulent microwave-assisted combustion // *Energy&Fuels.* 2017. V. 31. № 2. P. 1904–1926.
56. *Peters N., Rogg B.* Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems. Berlin: Springer Sci.&Business Media, 1993. 362 p.
57. *Goussis D.* On the construction and use of reduced chemical kinetic mechanisms produced on the basis of given algebraic relations // *J. of Comput. Phys.* 1996. V. 128. № 2. P. 261–273.
58. *Westbrook C.K., Dryer F.L.* Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // *Progr. in Energy&Combust. Sci.* 1984. V. 10. № 1. P. 1–57.
59. *Franzelli B., Riber E., Gicquel L.Y., Poinot T.* Large eddy simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame // *Combustion and Flame.* 2012. V. 159. № 2. P. 621–637.
60. *Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М.* Глобальные кинетические механизмы для расчета турбулентных реагирующих течений. Ч. 1. Основной химический процесс тепло-выделения // *Хим. физ.* 1998. Т. 7. № 9. С. 112–128.
61. *Kundu K., Penko P., Yang S.* Reduced reaction mechanisms for numerical calculations in combustion of hydrocarbon fuels // 36th AIAA Aerospace Sci. Meeting&Exhibit. AIAA paper. 1998. V. 98. Art. No. 0803. 16 p.
62. *Evans J.S., Schexnayder Jr.C.J.* Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames // *AIAA J.* 1980. V. 18. № 2. P. 188–193.
63. *An Analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism with Application to Scramjet Combustion: NASA Tech. Rep. 2791 / ed. by Jachimowski C.J.* Washington D.C.: NASA, 1988.
64. *Chemical Kinetic Analysis of Hydrogen-Air Ignition and Reaction Times: NASA Tech. Rep. 1856 / ed. by Rogers R.C., Schexnayder C.J.* Washington D.C.: NASA, 1981.
65. *Ju Y., Niioka T.* Reduced kinetic mechanism of ignition for nonpremixed hydrogen/air in a supersonic mixing layer // *Combust.&Flame.* 1994. V. 99. № 2. P. 240–246.

66. Gerlinger P., Nold K., Aigner M. Investigation of hydrogen-air reaction mechanisms for supersonic combustion // 44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf.&Exhibit. 2008.
67. Shiryayeva A., Vlasenko V., Anisimov K. Development and application of numerical technology for simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flows // 44th AIAA Fluid Dyn. Conf. Amer. Inst. of Aeron.&Astron. 2014.
68. Berglund M., Fedina E., Fureby C., Tegnér J., Sabel'nikov V. Finite rate chemistry large-eddy simulation of self-ignition in supersonic combustion ramjet // AIAA J. 2010. V. 48. № 3. P. 540–550.
69. Liu B., He G.-Q., Qin F., An J., Wang S., Shi L. Investigation of influence of detailed chemical kinetics mechanisms for hydrogen on supersonic combustion using large eddy simulation // Int. J. of Hydrogen Energy. 2019. V. 44. № 10. P. 5007–5019.
70. Fureby C. Subgrid models, reaction mechanisms, and combustion models in large-eddy simulation of supersonic combustion // AIAA J. 2021. V. 59. № 1. P. 215–227.
71. Third Millenium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion (with Update from Active Thermochemical Tables). Rep. No. ANL-05/20 / ed. by Burcat A., Ruscic B. Argonne, IL: Argonne National Lab (ANL), 2005. 414 p.
72. Menter F.R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // Turbul., Heat Mass Transfer. 2003. V. 4. № 1. P. 625–632.
73. Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA J. 1994. V. 32. № 8. P. 1598–1605.
74. Magnussen B.F. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // 19th AIAA Aerospace Sci. Meeting: Missouri. USA, 1981. 7 p.
75. Трошин А.И., Молев С.С., Власенко В.В., Михайлов С.В., Бахнэ С., Матяш С.В. Моделирование турбулентных течений на основе подхода iddes с помощью программы *zflare* // Вычисл. мех. сплошных сред. 2023. Т. 16 № 2. С. 203–218.
76. Lewandowski M.T., Ertesvåg I.S. Analysis of the eddy dissipation concept formulation for MILD combustion modelling // Fuel. 2019. V. 224. P. 687–700.
77. Li Z., Cuoci A., Sadiki A., Parente A. Comprehensive numerical study of the Adelaide jet in Hot-Coflow burner by means of RANS and detailed chemistry // Energy. 2017. V. 139. P. 555–570.
78. De A., Oldenhof E., Sathiah P., Roekaerts D. Numerical simulation of delft-jet-in-hot-coflow (djhc) flames using the eddy dissipation concept model for turbulence–chemistry interaction // Flow, Turbul.&Combust. 2011. V. 87. P. 537–567.
79. Moule Y., Sabel'nikov V., Mura A. Modelling of self-ignition processes in supersonic non premixed coflowing jets based on a PaSR approach // 17th AIAA Int. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf. 2011. P. 2396.
80. Ширяева А.А. Моделирование высокоскоростных течений со смешанными режимами турбулентного горения на основе трехмерных уравнений Рейнольдса. Дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук. Москва: МФТИ, 2019. 217 с.
81. Балабанов Р.А., Власенко В.В., Ноздрачев А.Ю. Описание предварительно перемешанного турбулентного горения в канале со ступенькой при помощи моделей класса PaSR // Физика горения и взрыва. Т. 60. № 4. С. 44–55.
82. Warhaft Z., Lumley J. An experimental study of the decay of temperature fluctuations in grid-generated turbulence // J. of Fluid Mech. 1978. V. 88. № 4. P. 659–684.
83. Sreenivasan K.R., Antonia R.A., Chambers A.J. On the variation of the turbulent Prandtl number in shear flows // Int. Commun. in Heat&Mass Transfer. 1984. V. 11. № 5. P. 497–501.
84. Keistler P., Xiao X., Hassan H., Rodriguez C. Simulation of supersonic combustion using variable turbulent Prandtl/Schmidt number formulation // 36th AIAA Fluid Dyn. Conf.&Exhibit. 2006. 3733.
85. Libby P.A. A non-gradient theory for premixed turbulent flames // in: Mech. Today: Vol. 5. New York: Pergamon, 1980. P. 215–232.
86. Shih T.-H., Lumley J.L., Chen J.-Y. Second-order modeling of a passive scalar in a turbulent shear flow // AIAA J. 1990. V. 28. № 4. P. 610–617.
87. Dakos T., Gibson M.M. On Modelling the Pressure Terms of the Scalar Flux Equations. Berlin;Heidelberg: Springer, 1987.

88. *Craft T.J., Ince N.Z., Launder B.E.* Recent developments in second-moment closure for buoyancy-affected flows // *Dyn. of Atmosph. & Oceans*. 1996. V. 23. № 1–4. P. 99–114.
89. Johns Hopkins University Turbulence Database. <http://turbulence.pha.jhu.edu/> (дата обращения: 22 декабря 2023)
90. *Balabanov R., Usov L., Troshin A., Vlasenko V., Sabelnikov V.* A differential subgrid stress model and its assessment in large eddy simulations of non-premixed turbulent combustion // *Appl. Sci.* 2022. V. 12. Art No. 8491.

Приложение. Для вывода алгебраической формулы для турбулентного числа Прандтля необходимо рассмотреть уравнение для турбулентного потока скаляра $f''u_i''$. Незамкнутое уравнение записывается так:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho} \widetilde{f''u_i''})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \widetilde{f''u_i''} \widetilde{u_j''} + \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_i'' f''} + \overline{p' f \delta_{ij}} - \bar{\mu} \frac{\partial \widetilde{f''u_i''}}{\partial x_j} \right] = \\ \underbrace{-\bar{\rho} \widetilde{f''u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i''}}{\partial x_j}}_{\text{FI}} - \underbrace{\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{f''}}{\partial x_j}}_{\text{FII}} + \underbrace{\overline{p' \frac{\partial f''}{\partial x_i}}}_{\text{FIII}} - \underbrace{2\bar{\mu} \frac{\partial f''}{\partial x_j} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}_{\text{FIV}} + \underbrace{\overline{u_i' \dot{s}_f}}_{\text{FV}} \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

Первое слагаемое в правой части, обозначенное как FI, является производством градиентами среднего поля скорости и градиентом среднего поля скаляра, эти слагаемые не требуют замыкания. Слагаемые, отмеченные FII, являются корреляцией пульсации давления с градиентом скаляра, которое тоже обычно разделяют на медленную и быструю часть. Первая часть ведет себя как медленная изотропизация турбулентного потока, которая похожа на диссипацию и пропорциональна самому потоку. Вторая часть члена FII более сложная, она также считается быстрой частью обменного слагаемого и представляет собой реакцию направления турбулентного потока на пульсации давления. Физическая интерпретация этого слагаемого заключается в его стремлении повернуть вектор турбулентного потока скаляра в направлении, параллельном направлению собственного вектора бездивергентного тензора скоростей деформации $S_{ij}^{dil} = \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \delta_{ij}$, который соответствует собственному

числу, приводящему к разрежению α^S , которое положительно и удовлетворяет условию $\alpha^S > \beta^S > \gamma^S$. Последнее собственное число γ^S отрицательное, тогда как знак β^S определяет форму трехмерного сжатия-растяжения жидкой частицы. Подобные рассуждения, анализирующие топологию градиентов скорости, использовались для описания производства скалярной диссипации в [45]. Простое замыкание для члена FII записывается так:

$$\text{FII}_i = -C_{\Phi 1} \bar{\rho} \frac{1}{T_f} \widetilde{f''u_i''} + C_{\Phi 2} \bar{\rho} S_{ij}^{dil} \widetilde{f''u_j''} \quad (\text{П.2})$$

Здесь $C_{\Phi 1} = 3.0$ и $C_{\Phi 2} = 1.0$; T_f – смешанный масштаб времени, $T_f^{-1} \approx \sqrt{\omega_f \omega}$. Конечно, это замыкание нужно лишь для вывода алгебраической модели. Существует множество работ, где представлены очень изощренные модели (см., напр., [86–88]). Простое замыкание (П.2), которое предлагается в этой статье, было протестировано на DNS базе данных турбулентного течения Рэлея–Тейлора с плавучестью [89] и продемонстрировало коэффициент корреляции, близкий к 0.4–0.45, тогда как гораздо более сложные модели не превышали значения коэффициента корреляции, равного 0.6. Коэффициент корреляции определяется следующим образом:

$$\frac{\sum_{ijk}^{N_{\text{cells}}} \text{FII}_m^{\text{real}} \text{FII}_m^{\text{model}}}{\sqrt{\sum_{ijk}^{N_{\text{cells}}} (\text{FII}_m^{\text{real}})^2 \sum_{ijk}^{N_{\text{cells}}} (\text{FII}_m^{\text{model}})^2}}$$

Процедура калибровки, похожая на градиентный спуск, описана в статье [90]. Согласно полученным коэффициентам корреляции упрощение, вносимое уравнением (П.2), можно считать приемлемым.

Следующее слагаемое, обозначаемое как FIII, является анизотропной диссипацией. Оно может быть описано более точно с дополнительным слагаемым, которое является сверткой потока скаляра с тензорами напряжений Рейнольдса:

$$\text{FIII}_i = \bar{\rho}\omega_f \left(C_{\epsilon 1} \widetilde{f''u_i''} - C_{\epsilon 2} \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{\tilde{k}} \widetilde{f''u_j''} \right) \quad (\text{П.3})$$

Значения коэффициентов $C_{\epsilon 1}$ и $C_{\epsilon 2}$ были подобраны для оптимального описания базы данных DNS турбулентного течения Рэлея–Тейлора [89] и смогли воспроизвести точное значение FIII_i с коэффициентом корреляции 0.73. Эффекты мелкомасштабной анизотропии в этом конкретном потоке были связаны с эффектами плавучести, что привело к появлению второго дополнительного слагаемого. Значения $C_{\epsilon 1}$ и $C_{\epsilon 2}$ оказались низкими, поэтому членом FIII_i можно пренебречь при создании алгебраической модели. Легко продемонстрировать, что этот член пренебрежимо мал для изотропного случая, поскольку для изотропной турбулентности корреляция между градиентами скаляра и градиентами скорости определяется мелкомасштабными вихрями, для которых не существует выделенного направления градиента скаляра, поэтому мелкомасштабная скорость и скалярные градиенты статистически независимы, что приводит к нулевому пределу этого члена при числе Рейнольдса, стремящемся к бесконечности. Более того, этот член на самом деле является вектором и не должен иметь выделенного направления для мелкомасштабной изотропной турбулентности, поэтому им пренебрегают в случае пассивного скаляра. Однако он может быть существенным из-за мелкомасштабной анизотропии, которую можно наблюдать для активного скаляра в факельном режиме горения, где число Карловица $\text{Ka} = \tau_{\text{chem}} / \tau_k$ меньше единицы. Рассматривая режим расширенного фронта пламени, где $\text{Ka} \gg 1$ и много микромасштабных вихрей присутствует внутри фронта пламени, можно допустить локальную изотропность и пренебречь членом FIII_i .

Слагаемое FV не существует для пассивного скаляра. Его замыкание для активного скаляра в режиме предварительно перемешанных флеймлетов рассмотрено Либби в [85], где предполагается Гауссова функция плотности вероятности скорости и добавляя ее зависимость от переменной прогресса реакции. Замыкание для этого источника на основе подхода PaSR, аналогичное (4.11), может быть сформулировано следующим образом:

$$\text{FIV}_i = \overline{u_i' \dot{s}_f} = \gamma^* (u_i^* - \tilde{u}_i) \dot{s}_f (T^*, f^*) \quad (\text{П.4})$$

В рамках классического подхода PaSR, которое используется в настоящей статье, скорость газа в тонких структурах и в окружающем пространстве одинакова: $u_i^* = u_i^0 = \tilde{u}_i$. Тогда (П.4) дает $\text{FIV}_i = u_i' \dot{s}_f \approx 0$.

Однако для предварительно перемешанных пламен, используя некоторые идеи из статьи Либби [85], можно предложить более точную трактовку этого члена, основанную на PaSR:

$$\text{FIV}_i = \overline{u_i' \dot{s}_f} = C_B \gamma^* \left(1 - \gamma^* \right) \frac{\delta_f}{\tau^*} n_i \dot{s}_f (T^*, f^*) \quad (\text{П.5})$$

Здесь n_i – нормаль к фронту пламени, направленная в сторону горячей области, δ_f – толщина пламени, τ^* – характерное время протекания газа через тонкие струк-

туры. Это замыкание легко получить, предположив совместную ФПВ, которая зависит как от мгновенной скорости, так и от дискретной случайной величины $\hat{\gamma}$, которая равна единице в тонких структурах и нулю в окружающем пространстве. Среднее значение скорости, которое присутствует в гауссовом распределении, зависит от $\hat{\gamma}$ следующим образом:

$$\tilde{u}_i(\hat{\gamma}) = \tilde{u}_i^0 + \theta \left(\hat{\gamma} - \frac{1}{2} \right) \frac{\delta_f}{\tau} n_i, \quad \tilde{u}_i^0 = \tilde{u}_i - \gamma^* \frac{\delta_f}{\tau} n_i$$

Здесь θ — функция Хэвисайда. Интегрируя $u_i' \dot{s}_f$ с совместной функцией плотности вероятности $\text{PDF}(\tilde{u}, \hat{\gamma})$, можно получить аналитическое выражение (П.5). Процесс вывода аналогичен описанному в статье Либби [85].

Наконец, вернемся к выводу алгебраического выражения для турбулентного числа Прандтля. Будем рассматривать f как пассивный скаляр, тогда членами FIII и FIV можно пренебречь. Для получения решения необходимо приравнять сумму слагаемых FI и FII в правой части уравнения к нулю. Очевидно, что производство градиентами скорости полностью компенсируется быстрой частью обменного члена, если в обоих случаях брать бездивергентные тензоры скорости деформации. Таким образом, два оставшихся слагаемых — это производство градиентами скаляра и изотропизация:

$$C_{\Phi 1} \bar{\rho} T_f^{-1} \widetilde{f'' u_i''} = -\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j}$$

Для случая изотропных пульсаций скорости ($\widetilde{u_1''^2} = \widetilde{u_2''^2} = \widetilde{u_3''^2} = 2\tilde{k}/3$) это выражение превращается в формулу Буссинеска, которую можно приравнять к формуле градиентной диффузии с турбулентным числом Прандтля:

$$\widetilde{f'' u_i''} = -\bar{\rho} \frac{2}{C_{\Phi 1}} \tilde{k} T_f \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} = -\frac{\mu_T}{\text{Pr}_T^f} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i}; \quad \mu_T = \bar{\rho} \frac{\tilde{k}}{\omega}$$

Тогда турбулентное число Прандтля определяется следующим образом:

$$\text{Pr}_T^f = \frac{C_{\Phi 1}}{2} \frac{1}{\omega T_f} = C_{\Phi} \sqrt{\frac{\omega_f}{\omega}}$$

Models for Description of Subsonic Flows with Premixed Turbulent Combustion in Channels

V. V. Vlasenko^{a,b,#}, R. A. Balabanov^{a,b}, Wenchao Liu^b, S. S. Molev^a, V. A. Sabelnikov^a

^aTsAGI, Zhukovsky, Russia

^bMIPT, Dolgoprudny, Russia

[#]e-mail: vlasenko.vv@yandex.ru

The review of works on numerical modeling of turbulent combustion is presented. The article presents the discussion about three classes of models, which are necessary for closure of mathematical model of flow (turbulence model, model of chemical kinetics, model of turbulence combustion interaction). The description of mathematical approach for modeling of subsonic flows with premixed turbulent combustion in channels within Reynolds equations with closure based on $k-\omega$ turbulence models is provided. Various models of turbulent combustion interaction based on PaSR (Partially Stirred Reactor) — quasi-steady models PaSR and PFR, and also model with memory effects EPaSR. The new model for influence of combustion on turbulent heat and mass transfer intensity — variable turbulent Prandtl and Schmidt model, compatible with $k-\omega$ turbulence models

and PaSR based turbulence combustion interaction models. The appendix includes the description of differential model for turbulent scalar flux, which was a priori calibrated against DNS database of turbulent Rayleigh–Taylor flow.

Keywords: premixed turbulent combustion; numerical modeling; turbulence combustion interaction.

REFERENCES

1. *Solomatin R.S.* Numerical modeling of high speed mixing and combustion processes in heterogeneous fuel–air mixtures. Phd Thesis. Moscow: Keldysh Inst. of Appl. Math., 2022, 191 p. (in Russian)
2. *Wilcox D.C.* Turbulence modeling for CFD. La Cañada: DCW Industries, 2006. 544 p.
3. *Kolmogorov A.N.* Equations of turbulent motion in an incompressible fluid // *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1942, vol. 6, no. 1–2, pp. 56–58. (in Russian)
4. *Poinsot T., Veynante D.* Theoretical and Numerical Combustion. Flourtown: RT Edwards Inc., 2005. 522 p.
5. *Peters N.* Turbulent Combustion. Cambridge: Univ. Press, 2000. 304 p.
6. *Lipatnikov A.* Fundamentals of Premixed Turbulent Combustion. Boca Raton: CRC Press, 2012. 548 p.
7. *Schetnikov E.S.* Physics of Gas Combustion. Moscow: Nauka, 1965. 292 p. (in Russian)
8. *Kuznetsov V.R., Sabel'nikov V.A.* Turbulence and Combustion. N.Y.: Hemisphere, 1990. 384 p.
9. *Su J., Liu A., Xiao H., Luo K., Fan J.* Entropy: an inspiring tool for characterizing turbulence–combustion interaction in swirling flames via direct numerical simulations of non-premixed and premixed flames // *Entropy*, 2023, vol. 25, no. 8, pp. 1151.
10. *Borghi R.* Turbulent combustion modeling // *Progr. in Energy&Combust. Sci.*, 1988, vol. 14, no. 4, pp. 245–292.
11. *Klimenko A.Y., Bilger R.W.* Conditional moment closure for turbulent combustion // *Progr. in Energy&Combust. Sci.*, 1999, vol. 25, no. 6, pp. 595–687.
12. *Baurle R.A., Girimaji S.S.* Assumed PDF turbulence–chemistry closure with temperature–composition correlations // *Combust.&Flame*, 2003, vol. 134, no. 1–2, pp. 131–148.
13. *Zimont V.L., Meshcheryakov E.A., Sabel'nikov V.A.* A simple model for calculation of molecular mixing in the turbulent combustion of unmixed gases // *Combust., Explos.&Shock Waves*, 1978, vol. 14, no. 3, pp. 315–320.
14. *Molchanov A.M., Yanyushev D.S., Bykov L.V.* Influence of turbulent fluctuations on non-equilibrium chemical reactions in the flow // *J. of Physics: Conf. Ser. IOP*, 2017, vol. 891, no. 1, art. no. 012106.
15. *Meshcheryakov E.A., Sabel'nikov V.A.* Combustion of hydrogen in a supersonic turbulent flow in a channel with simultaneous delivery of fuel and oxidant // *Combust., Explos.&Shock Waves*, 1981, vol. 17, no. 2, pp. 159–167.
16. *Peters N.* Laminar flamelet concepts in turbulent combustion // *Int. Symp. on Combustion*. Elsevier, 1988. vol. 21. no. 1. pp. 1231–1250.
17. *Zheng L.L., Bray K.N.C.* The application of new combustion and turbulence models to H₂–air nonpremixed supersonic combustion // *Combust.&Flame*, 1994, vol. 99, no. 2, pp. 440–448.
18. Flamelet model application for non-premixed turbulent combustion: NAS 1.26: 202176 / ed. by *Secundov A. et al.* Washington D.C.: NASA, 1996.
19. *Piffaretti S.G.* Flame age model: a transient laminar flamelet approach for turbulent diffusion flames. Ph.D. Thesis. Zurich: Swiss Federal Inst. of Technol., 2007. 194 p.
20. *Magnussen B.F.* The eddy dissipation concept: A bridge between science and technology // *ECCOMAS Conf. on Comput. Combust.*, Lisbon, 2005.
21. *Chomiak J., Karlsson A.* Flame liftoff in diesel sprays // *Int. Symp. on Combust.*, Elsevier, 1996, vol. 26, no. 2, pp. 2557–2564.
22. *Sabelnikov V., Fureby C.* LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy // *Combust.&Flame*, 2013, vol. 160, no. 1, pp. 83–96.
23. *Moule Y., Sabelnikov V., Mura A.* Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen–air coflowing jets // *Combust.&Flame*, 2014, vol. 161, no. 10, pp. 2647–2668.
24. *Petrova N., Sabelnikov V., Bertier N.* Numerical simulation of a backward-facing step combustor using RANS/Extended Partially Stirred Reactor model // *EUCASS-2015*. 17 p.

25. *Vlasenko V.V., Nozdrachev A.Yu., Sabelnikov V.A., Shirayeva A.A.* Analysis of stabilization mechanisms of turbulent combustion on the data of calculations with application of partially stirred reactor // *Combust.&Explos.*, 2019, vol. 12, no. 1, pp. 43–57. (in Russian)
26. *Zimont V.L.* Gas premixed combustion at high turbulence // *Turbulent Flame Closure Combust. Model. Experim. Thermal&Fluid Sci.*, 2000, vol. 21, no. 1–3, pp. 179–186.
27. *Lipatnikov A.N., Chomiak J.* Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations // *Progr. in Energy&Combust. Sci.*, 2002, vol. 28, no. 1, pp. 1–74.
28. *Avgustinovich V.G., Kutsenko Y.G.* Creation and application of combined calculation methodology for low emission combustion chamber // *Izv. vuzov. Rus. Aeron.*, 2011, vol. 54, no. 2, pp. 170–178.
29. *Schelkin K.I.* On the issue of turbulent combustion and combustion phases in the engine. // *Izv. AN SSSR. OTN*, 1953, no. 3, pp. 463–471. (in Russian)
30. *Rauschenbach B.V., Belyi S.A., Bespalov I.V., Borodachev V.Ya., Volynskiy M.S., Prudnikov A.G.* The Physical Basis of the Working Process in the Combustion Chambers of Air-Jet Engines. Moscow: Mashinostroenie, 1964. 526 p. (in Russian)
31. *Chen Y.C., Mansour M.S.* Investigation of flame broadening in turbulent premixed flames in the thin-reaction-zones regime // *Int. Symp. on Combustion*, 1998, vol. 27, pp. 811–818.
32. *Skiba A.W., Wabel T.M., Carter C.D., Hammack S.D., Temme J.E., Driscoll J.F.* Premixed flames subjected to extreme levels of turbulence part I: Flame structure and a new measured regime diagram // *Combust.&Flame*, 2018, vol. 189, pp. 407–432.
33. *Wabel T.M., Skiba A.W., Driscoll J.F.* Evolution of turbulence through a broadened preheat zone in a premixed piloted Bunsen flame from conditionally-averaged velocity measurements // *Combust.&Flame*, 2018, vol. 188, pp. 13–27.
34. *Ratner A., Driscoll J.F., Donbar J.M., Carter C.D., Mullin J.A.* Reaction zone structure of non-premixed turbulent flames in the intensely wrinkled regime // *Proc. Combust. Inst.*, 2000, vol. 28, pp. 245–252.
35. *Sabelnikov V.A., Yu R., Lipatnikov A.N.* Thin reaction zones in highly turbulent medium // *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2019, vol. 128, pp. 1201–1205.
36. *Heinz S.* A review of hybrid RANS-LES methods for turbulent flows: Concepts and applications // *Progr. in Aerospace Sci.*, 2020, vol. 114, pp. 100–597.
37. *Nagano Y., Kim C.* A two-equation model for heat transport in wall turbulent shear flows // *J. of Heat Transfer*, 1988, vol. 110, pp. 583–589.
38. *Wikström P.M., Wallin S., Johansson A.V.* Derivation and investigation of a new explicit algebraic model for the passive scalar flux // *Phys. of Fluids*, 2000, vol. 12, no. 3, pp. 688–702.
39. *Goldberg U.* Variable turbulent Schmidt and Prandtl number modeling // *Engng. App. Comp. Fluid Mech.*, 2010, vol. 4, pp. 511–520.
40. *Sanders J.P.H., Gokalp I.* Scalar dissipation rate modelling in variable density turbulent axisymmetric jets and diffusion flames // *Phys. of Fluids*, 1998, vol. 10, no. 4, pp. 938–948.
41. *Xiao X., Hassan H.A., Baurle R.A.* Modeling scramjet flows with variable turbulent Prandtl and Schmidt numbers // *AIAA J.*, 2006, vol. 45, pp. 1415–1423
42. *Burrows M.C., Kurkov A.P.* An analytical and experimental study of supersonic combustion of hydrogen in vitiated air stream // *AIAA J.*, 1973, vol. 11, no. 9, pp. 1217–1218.
43. *Hoste J.J.O.E., Fechter S., Karl S., Hannemann K.* Study of a supersonic reacting wall jet with a variable turbulent Prandtl and Schmidt number approach // *Aerospace Sci.&Technol.*, 2020, vol. 106, art. no. 106070.
44. *Shih T., Lumley J., Janicka J.* Second-order modelling of a variable-density mixing layer // *J. of Fluid Mech.*, 1987, vol. 180, pp. 93–116.
45. *Danish, M., Sinha, S., Girimaji, S.* Influence of flow topology and dilatation on scalar mixing in compressible turbulence // *J. of Fluid Mech.*, 2016, vol. 793, pp. 633–655.
46. *Mantel T., Borghi R.* A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation // 1994, vol. 96, no. 4, pp. 443–457.
47. *Mura A., Borghi R.* Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion // *Combust.&Flame*, 2003, vol. 133, no. 1–2, pp. 193–196.
48. *Tushkanov A.S.* Thermally and chemically unsteady processes in jet of solid fuel propulsion engine. Phd Thes. Moscow: Moscow Aviation Institute, 2019. 167 p. (in Russian)
49. ANSYS CFD // <https://www.ansys.com/products/fluids#tab1-2>

50. CFD-FASTRAN // <https://www.esi.com.au/software/cfd-ace/fastran>
51. Zettervall N., Fureby C. A computational study of ramjet, scramjet and dual-mode ramjet combustion in combustor with a cavity flameholder // AIAA Aerospace Sci. Meeting, AIAA paper, 2018, vol. 1146, 14 p.
52. Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., Moriarty N.W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C.T., Hanson R.K., Song S., William C., Gardiner J., Lissianski V.V., Qin Z. GRI-MECH 3.0. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
53. Lebedev A.V., Okun M.V., Baraniv A.E., Deminsky M.A., Potapkin B.V. Systematic procedure of kinetic mechanisms reduction of chemical processes // Chem. Phys. & Mesoscopy, 2011, vol. 13, no. 1. (in Russian)
54. Smooke M.D. Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames: A Topical Volume. Lecture Notes in Physics. Vol. 384. Berlin: Springer, 1991. 251 p.
55. Larsson A., Zettervall N., Hurtig T., Nilsson E., Ehn A., Petersson P., Alden M., Larfeldt J., Fureby C. Skeletal methane-air reaction mechanism for large eddy simulation of turbulent microwave-assisted combustion // Energy & Fuels, 2017, vol. 31, no. 2, pp. 1904–1926.
56. Peters N., Rogg B. Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems. Berlin: Springer Science & Business Media. 1993. 362 p.
57. Goussis D. On the construction and use of reduced chemical kinetic mechanisms produced on the basis of given algebraic relations // J. of Comput. Phys., 1996, vol. 128, no. 2, pp. 261–273.
58. Westbrook C.K., Dryer F.L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Progr. in Energy & Combust. Sci., 1984, vol. 10, no. 1, pp. 1–57.
59. Franzelli B., Riber E., Gicquel L.Y., Poinot T. Large eddy simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame // Combust. & Flame, 2012, vol. 159, no. 2, pp. 621–637.
60. Basevich V.Ya., Belyaev A.A., Frolov S.M. Global kinetic mechanisms for calculation of turbulent reacting flows. P. 1. Basic chemical process of heat release // Chem. Phys., 1998, vol. 7, no. 9, pp. 112–128. (in Russian)
61. Kundu K., Penko P., Yang S. Reduced reaction mechanisms for numerical calculations in combustion of hydrocarbon fuels // 36th AIAA Aerospace Sci. Meeting & Exhibit, AIAA paper, 1998, vol. 98, no. 0803. 16 p.
62. Evans J.S., Schexnayder Jr. C.J. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames // AIAA J., 1980, vol. 18, no. 2, pp. 188–193.
63. An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion: NASA Tech. Rep. 2791 / ed. by Jachimowski C.J. Washington D.C.: NASA, 1988.
64. Chemical kinetic analysis of hydrogen-air ignition and reaction times: NASA Tech. Rep. 1856 / Ed. by Rogers R.C., Schexnayder C.J. Washington D.C.: NASA, 1981.
65. Ju Y., Niioka T. Reduced kinetic mechanism of ignition for nonpremixed hydrogen/air in a supersonic mixing layer // Combust. & Flame, 1994, vol. 99, no. 2, pp. 240–246.
66. Gerlinger P., Nold K., Aigner M. Investigation of hydrogen-air reaction mechanisms for supersonic combustion // 44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf. & Exhibit., 2008.
67. Shiryaeva A., Vlasenko V., Anisimov K. Development and Application of Numerical Technology for simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flows // 44th AIAA Fluid Dyn. Conf. Amer. Inst. of Aeron. & Astron., 2014.
68. Berglund M., Fedina E., Fureby C., Tegnér J., Sabel'nikov V. Finite rate chemistry large-eddy simulation of self-ignition in supersonic combustion ramjet // AIAA J., 2010, vol. 48, no. 3, pp. 540–550.
69. Liu B., He G.-Q., Qin F., An J., Wang S., Shi L. Investigation of influence of detailed chemical kinetics mechanisms for hydrogen on supersonic combustion using large eddy simulation // Int. J. of Hydrogen Energy, 2019, vol. 44, no. 10, pp. 5007–5019.
70. Fureby C. Subgrid models, reaction mechanisms, and combustion models in large-eddy simulation of supersonic combustion // AIAA J., 2021, vol. 59, no. 1, pp. 215–227.
71. Third millenium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion (with update from active thermochemical tables): Rep. No. ANL-05/20 / ed. by Burcat A., Ruscic B. Argonne, IL: Argonne National Lab (ANL), 2005. 414 p.
72. Menter F.R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // Turbul., Heat Mass Transfer, 2003, vol. 4, no. 1, pp. 625–632.

73. *Menter F.R.* Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // *AIAA J.*, 1994, vol. 32, no. 8, pp. 1598–1605.
74. *Magnussen B.F.* On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // 19th AIAA Aerospace Sci. Meeting: Missouri. USA, 1981. 7 p.
75. *Troshin A.I., Molev S.S., Vlasenko V.V., Mikhailov S.V., Bakhne S., Matyash S.V.* Modeling of turbulent flows on the basis of ideas method in *zflare* program // *Comput. Contin. Mech.*, 2023, vol. 16, no. 2, pp. 203–218. (in Russian)
76. *Lewandowski M.T., Ertesvåg I.S.* Analysis of the eddy dissipation concept formulation for MILD combustion modelling // *Fuel*, 2019, vol. 224, pp. 687–700.
77. *Li Z., Cuoci A., Sadiki A., Parente A.* Comprehensive numerical study of the Adelaide jet in Hot-Coflow burner by means of RANS and detailed chemistry // *Energy*, 2017, vol. 139, pp. 555–570.
78. *De A., Oldenhof E., Sathiah P., Roekaerts D.* Numerical simulation of delft-jet-in-hot-coflow (djhc) flames using the eddy dissipation concept model for turbulence–chemistry interaction// *Flow, Turbul.&Combust.*, 2011, vol. 87, pp. 537–567.
79. *Moule Y., Sabel'nikov V., Mura A.* Modelling of self-ignition processes in supersonic non premixed coflowing jets based on a PaSR approach // 17th AIAA Int. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf., 2011, pp. 2396.
80. *Shiryaeva A.A.* Modeling of high speed flows with mixed regimes of turbulent combustion on the basis of three dimensional Reynolds equations. Phd Thes. Moscow: MIPT, 2019. 217 p. (in Russian)
81. *Balabanov R.A., Vlasenko V.V., Nozdrachev A.Yu.* Description of premixed turbulent combustion in a channel with a step using partially stirred reactor models // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2024, vol. 60, no. 4, pp. 460–470.
82. *Warhaft Z., Lumley J.* An experimental study of the decay of temperature fluctuations in grid-generated turbulence // *J. of Fluid Mech.*, 1978, vol. 88, no. 4, pp. 659–684.
83. *Sreenivasan K.R., Antonia R.A., Chambers A.J.* On the variation of the turbulent Prandtl number in shear flows // *Int. Commun. in Heat&Mass Transfer*, 1984, vol. 11, no. 5, pp. 497–501.
84. *Keistler P., Xiao X., Hassan H., Rodriguez C.* Simulation of supersonic combustion using variable turbulent Prandtl/Schmidt number formulation // 36th AIAA Fluid Dyn. Conf.&Exhibit. 2006. 3733.
85. *Libby P.A.* A non-gradient theory for premixed turbulent flames // in: *Mechanics Today: Vol. 5.* N.Y.: Pergamon, 1980. pp. 215–232.
86. *Shih T.-H., Lumley J.L., Chen J.-Y.* Second-order modeling of a passive scalar in a turbulent shear flow // *AIAA J.*, 1990, vol. 28, no. 4, pp. 610–617.
87. *Dakos T., Gibson M.M.* On Modelling the Pressure Terms of the Scalar Flux Equations. Berlin; Heidelberg: Springer, 1987.
88. *Craft T.J., Ince N.Z., Launder B.E.* Recent developments in second-moment closure for buoyancy-affected flows // *Dyn. of Atmos.&Oceans*, 1996, vol. 23, no. 1–4, pp. 99–114.
89. Johns Hopkins University Turbulence Database. <http://turbulence.pha.jhu.edu/> (date of access: 22 december 2023).
90. *Balabanov R., Usov L., Troshin A., Vlasenko V., Sabelnikov V.* A differential subgrid stress model and its assessment in large eddy simulations of non-premixed turbulent combustion // *Appl. Sci.*, 2022, vol. 12, art. no. 8491.