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:

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}\widetilde{f''u_i''}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\bar{\rho}\widetilde{f''u_i''}\tilde{u}_j+\bar{\rho}\widetilde{u_j''u_i''f''}+\overline{p'f}\delta_{ij}-\tilde{\mu}\frac{\partial\widetilde{f''u_i''}}{\partial x_j}\right]= \\ \underbrace{-\bar{\rho}\widetilde{f''u_j''}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}-\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j}}_{\mathrm{FI}}+\underbrace{\overline{p'\frac{\partial f}{\partial x_i}}}_{\mathrm{FII}}-\underbrace{2\tilde{\mu}\overline{\frac{\partial f''}{\partial x_j}\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}}_{\mathrm{FIII}}+\underbrace{\overline{u_i'\dot{s}_f}}_{\mathrm{FIV}} \tag{П.1}$$

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 $S_{ij}^{dil}=\tilde{S}_{ij}-\frac{1}{3}\frac{\partial\tilde{u}_m}{\partial x_n}\delta_{ij}$, 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:

$$\mathrm{FII}_i=-C_{\Phi1}\bar{\rho}\frac{1}{T_f}\widetilde{f''u_i''}+C_{\Phi2}\bar{\rho}S_{ij}^{dil}\widetilde{f''u_j''} \tag{П.2}$$

Здесь $C_{\Phi1}=3.0$ и $C_{\Phi2}=1.0$; 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:

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

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:

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

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 $\mathrm{Ka} = \tau_{\mathrm{chem}} / \tau_K$ меньше единицы. Рассматривая режим расширенного фронта пламени, где $\mathrm{Ka} \gg 1$ 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:

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

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 $\mathrm{FIV}_i = \overline{u_i'\dot{s}_f} \approx 0$.

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

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

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

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

Здесь θ – функция Хэвисайда. Интегрируя $u_i'\dot{s}_f$ с совместной функцией плотности вероятности $\mathrm{PDF}\left(\vec{u},\hat{\gamma}\right)$, 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:

$$C_{\Phi1}\bar{\rho}T_f^{-1}\widetilde{f''u_i''} = -\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j}$$

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:

$$\widetilde{f''u_i''} = -\bar{\rho}\frac{2}{C_{\Phi1}}\tilde{k}T_f\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_i} = -\frac{\mu_T}{\mathrm{Pr}_T^f}\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_i}; \quad \mu_T = \bar{\rho}\frac{\tilde{k}}{\omega}$$

Тогда турбулентное число Прандтля определяется следующим образом:

$$\mathrm{Pr}_T^f = \frac{C_{\Phi1}}{2}\frac{1}{\omega T_f} = C_\Phi\sqrt{\frac{\omega_f}{\omega}}$$

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

V. V. Vlasenko[a,b,#], R. A. Balabanov[a,b], Wencha[o] Liu[b], S. S. Molev[a], V. A. Sabelnikov[a]

[a]*TsAGI, Zhukovsky, Russia*
[b]*MIPT, 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–ω 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