

ЭЙЛЕРОВ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СОВМЕСТНОЙ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ СКОРОСТИ И КОНЦЕНТРАЦИЙ В ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЯХ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВ

О. Сулард, В. А. Сабельников

ONERA, Палезо, Франция, vladimir.sabelnikov@onera.fr

Ранее нами был предложен новый эйлеров (полевой) метод Монте-Карло решения уравнения, описывающего одновременную одноточечную плотность вероятностей концентраций в турбулентных течениях реагирующего газа. В настоящей статье этот метод обобщен на случай уравнения для совместной плотности вероятностей скорости и концентраций. Основу метода составляет переход от лагранжевых переменных, используемых в лагранжевых методах Монте-Карло, к эйлеровым переменным. В результате такого преобразования стохастические обыкновенные дифференциальные уравнения для лагранжевых траекторий жидких частиц переходят в стохастические уравнения в частных производных. По сравнению с классической гидродинамикой стохастическое поле скорости не удовлетворяет мгновенному уравнению неразрывности, а только осредненному. Эта трудность преодолевается введением стохастической плотности, которая будучи отличной от физической плотности, имеет то же среднее значение. Заново рассмотрен также случай плотности вероятностей концентраций. Полученные уравнения отличаются от выведенных ранее тем, что могут быть записаны в дивергентной форме. Но новая и прежняя формулировки статистически эквивалентны.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, турбулентное течение, плотность вероятности скорости и концентраций.

ВВЕДЕНИЕ

Один из перспективных подходов моделирования турбулентных течений реагирующих газов основан на использовании уравнения для совместных плотностей вероятностей концентраций, скорости и других величин, характеризующих течение [1, 2]. Плотности вероятностей в общем случае являются функциями большого числа переменных. Так, в трехмерном пространстве одновременная одноточечная плотность вероятностей скорости и концентраций будет функцией $7 + N$ переменных, где N — число реагентов. Для практически интересных случаев число N значительно больше единицы и может достигать нескольких десятков и даже сотен. Это обстоятельство препятствует использованию прямых конечно-разностных методов решения уравнений для плотностей вероятностей. Поэтому методы Монте-Карло являются сейчас неотъемлемым элементом при решении таких уравнений.

Наибольшее применение получили лагранжевы методы Монте-Карло [1], которые основаны на рассмотрении движения «жидких» частиц начиная с некоторого начального момента времени. Такое движение описывается модельными стохастическими уравнениями Навье — Стокса, записанными в переменных Лагранжа, т. е. стохастическими обыкновенными дифференциальными уравнениями.

К настоящему времени лагранжевы методы Монте-Карло хорошо освоены. В многочисленных публикациях показана их сходимости и приемлемая для приложений точность. Методы использовались во многих сложных расчетах (включая подсеточное моделирование методом крупных вихрей (LES)) и в течение последних нескольких лет они внедрены в коммерческие CFD-коды (например, FLUENT). Однако остаются еще некоторые проблемы при использовании лагранжевых методов Монте-Карло. В качестве примера можно указать трудности, хотя и технические, возникающие при сопряжении лагранжевых стохастических уравнений и эйлеровых кодов, используемых для решения осредненных уравнений Навье — Стокса (по

О. Soulard, V. A. Sabel'nikov.
ONERA, Chemin de la Huniere, 91761 Palaiseau Cedex,
France.

Рейнольдсу или по Фавру). Поэтому развитие и оценка новых альтернативных эйлеровых методов Монте-Карло является важным и необходимым направлением в численном моделировании турбулентных течений реагирующего газа, так как взаимная конкуренция лагранжевых и эйлеровых методов Монте-Карло будет способствовать развитию обоих.

Уже из названия следует, что эйлеровы методы Монте-Карло используют полевое эйлерово описание жидкости. Эйлеровы методы были предложены в [2, 3] для решения одновременной одноточечной плотности вероятностей концентраций в турбулентных течениях реагирующего газа.

В данной работе идея [3] распространена на более сложный случай совместной плотности вероятностей концентраций и скорости. Стохастические уравнения в частных производных, статистически эквивалентные уравнению для плотности вероятностей, выводятся в два этапа. На первом формулируются модельные уравнения для «жидких» частиц, используемые в лагранжевых методах Монте-Карло, и вводится соответствующая этим уравнениям лагранжева статистика. Стохастические обыкновенные дифференциальные уравнения описывают временную эволюцию скорости и концентраций жидкой частицы и могут быть рассмотрены как модельные уравнения Навье — Стокса в переменных Лагранжа. На втором этапе осуществляется переход от лагранжевых к эйлеровым переменным. По сравнению с классической гидродинамикой такой переход требует разрешения следующей проблемы. Стохастическое поле скорости, описываемое модельными лагранжевыми уравнениями, удовлетворяет осредненному, но не удовлетворяет мгновенному уравнению неразрывности. Эта трудность преодолевается введением стохастической плотности, отличной от физической, но с тем же средним значением. В результате получаются стохастические гиперболические уравнения в частных производных, описывающие эволюцию полей скорости, концентраций и стохастической плотности.

Статья состоит из трех частей. В первой части, для большей ясности изложения, описанная только что схема иллюстрируется примером турбулентного движения несжимаемой жидкости и рассмотрение ограничивается плотностью вероятностей скорости. Во второй части рассмотрен общий случай плот-

ности вероятностей скорости и концентраций турбулентных течений реагирующего газа при малых числах Маха. Статья завершается новым по сравнению с работой [3] анализом случая плотности вероятностей концентраций. Новые уравнения отличаются от полученных в [3] (несмотря на статистическую эквивалентность) тем, что могут быть записаны в дивергентной форме.

1. ЭЙЛЕРОВ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

Рассмотрим плотность вероятностей скорости в несжимаемой вязкой жидкости. На протяжении всей этой части плотность считается постоянной ($\rho = \text{const}$). Уравнение для плотности вероятностей скорости $f_U(U; x, t)$ выводится из уравнений Навье — Стокса с использованием ставшей теперь стандартной техники [1, 4–6]. В этом уравнении только нестационарный и конвективные члены выражаются через f_U , в то время как члены, описывающие влияние градиента давления и вязких напряжений, остаются незамкнутыми. В данной работе сумма этих двух членов моделируется обобщенной лагранжевой моделью (GLM) [6]. В результате получаем следующее полуэмпирическое уравнение:

$$\frac{\partial f_U}{\partial t} + U_j \frac{\partial f_U}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial U_j} \left[\left(- \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_j} + G_{ij}(U_j - \langle U_j \rangle) \right) f_U \right] + \frac{1}{2} C_0 \langle \varepsilon \rangle \frac{\partial^2 f_U}{\partial U_j \partial U_j}, \quad (1)$$

$$\langle U \rangle = \int U f_U(U; x, t) dU, \quad (2)$$

$$f_U(U; x, t = 0) = f_0(U; x).$$

Здесь P — давление, ε — скорость диссипации энергии турбулентности, знак $\langle \rangle$ обозначает осреднение по статистическому ансамблю, C_0 — эмпирическая постоянная, G_{ij} — симметричный тензор второго ранга (зависящий от тензора напряжений Рейнольдса, градиента средней скорости и средней диссипации), конкретный вид которого нам не понадобится. Уравнение (1) дополняется осредненным уравнением неразрывности

$$\text{div} \langle U \rangle = 0, \quad (3)$$

которое необходимо, чтобы удовлетворить условию нормировки плотности вероятностей.

Хорошо известно, что уравнение (3) позволяет найти также среднее давление $\langle P \rangle$.

Параболическое уравнение (1) является уравнением Фоккера — Планка [6, 7]. Ему можно поставить в соответствие статистически эквивалентный стохастический диффузионный процесс [5, 7]. Обыкновенные дифференциальные уравнения, описывающие этот процесс, и составляют основу лагранжевых методов Монте-Карло [1, 6].

1.1. Лагранжевы методы Монте-Карло

1.1.1. Лагранжевы уравнения

Уравнение Фоккера — Планка (1) статистически эквивалентно следующей стохастической системе обыкновенных дифференциальных уравнений [1, 5, 6]:

$$dU_j^+(t) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_j} \Big|_+ dt + G_{ij}(U_j - \langle U_j \rangle)_+ dt + \sqrt{C_0 \langle \varepsilon \rangle}_+ dW_j, \quad (4)$$

$$dx_j^+(t) = U_j^+ dt, \quad (5)$$

$$x^+(0) = x_0, \quad U^+(0) = U_0, \quad (6)$$

где $U^+(t)$ — стохастическая лагранжева скорость жидкой частицы, $x^+(t)$ — лагранжева траектория, $W_j(t)$ — независимые стандартные винеровские процессы, $W_j(0) = 0$, dW_j — их соответствующие дифференциалы, $\langle dW_i dW_j \rangle = \delta_{ij} dt$. Винеровские процессы также независимы и для различных лагранжевых частиц, т. е. частиц с различными начальными положениями и скоростями x_0, U_0 . Величины x_0, U_0 для жидких частиц независимы от винеровских процессов. В начальный момент времени x_0 и U_0 распределены с плотностью вероятностей $f_{UX}(U_0, X_0; 0)$:

$$f_{UX}(U_0, X_0) = \langle \delta(x_0 - X_0) \delta(U_0 - U_0) \rangle, \quad (7)$$

где осреднение проводится по реализациям начальных данных x_0 и U_0 .

Как показано в [1] (см. также I.1.3), уравнения (4), (5) с начальными данными (6), (7) достаточны для определения функции $f_U(1)$.

1.1.2. Стохастическая плотность

Стохастические уравнения (4), (5) представляют собой не что иное, как модельные

уравнения Навье — Стокса, записанные в лагранжевых переменных. Чтобы получить эйлерово описание, необходимо перейти от лагранжевых к эйлеровым переменным. И здесь возникает существенное различие между модельными и «настоящими» уравнениями Навье — Стокса. А именно, поле мгновенной плотности, которое можно определить на основании уравнений (4), (5), оказывается переменным, а не постоянным, вопреки предположению, что физическая плотность ρ постоянна. Тем не менее эта трудность, как показано ниже, преодолима.

Чтобы отличить плотность, связанную с лагранжевыми уравнениями (4), (5), от физической плотности ρ , обозначим первую через r^+ и будем называть ее далее стохастической плотностью. Заметим также, что в лагранжевых методах Монте-Карло присутствует только средняя плотность. Ниже (в I.2.2) будет показано, что $\langle r^+ \rangle = \rho = \text{const}$. Этим объясняется тот факт, что в работах, где используются лагранжевы методы Монте-Карло, стохастическая плотность и мгновенное уравнение неразрывности не рассматриваются. Но при переходе к эйлерову описанию стохастическая плотность и тем самым мгновенное уравнение неразрывности играют ключевую роль.

Дополним систему (4), (5), после сделанных замечаний, уравнением неразрывности в лагранжевых переменных

$$r^+ d^3 x^+ = r_0 d^3 x_0, \quad (8)$$

где r_0 — стохастическая плотность в начальный момент времени. Так как $\langle r^+ \rangle = \rho = \text{const}$ (см. ниже I.2.2), без ограничения общности можно принять $r_0 = \rho$. Из (8) следует, что $r^+(t)$ полностью определяется якобианом $j^+(t)$ преобразования от x_0 к $x^+(t, x_0)$:

$$r^+ = \frac{r_0}{j^+}, \quad (9)$$

где

$$j^+(t) = \text{Det}[j_{ik}], \quad j_{ik} = \frac{\partial x_i^+}{\partial x_{0k}}. \quad (10)$$

Дифференцируя (9), (10) по времени, получаем

$$dr^+ = -r^+ \text{div} U^+ dt, \quad (11)$$

$$dj^+ = j^+ \text{div} U^+ dt. \quad (12)$$

Уравнение для $\text{div} U^+$ следует из (4) после дифференцирования по x^+ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\operatorname{div}\mathcal{U}^+) &= -\frac{\partial\mathcal{U}_i}{\partial x_j} \frac{\partial\mathcal{U}_j}{\partial x_i} \Big|_+ - \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2\langle P \rangle}{\partial x_i \partial x_i} \Big|_+ + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_i} [G_{ij}(\mathcal{U}_j - \langle U_j \rangle)] \Big|_+ + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{C_0}{\langle \varepsilon \rangle}} \frac{\partial \langle \varepsilon \rangle}{\partial x_i} \Big|_+ \dot{W}_i. \end{aligned} \quad (13)$$

Точка над W означает здесь и далее производную по времени от винеровского процесса (белый шум). Из уравнения (13) видно, что $\operatorname{div}\mathcal{U}^+$ обращается в нуль только для частного случая однородной турбулентности. Следовательно, стохастическая плотность r^+ в общем случае не является постоянной, равной физической плотности. Но в то же время $\langle r^+ \rangle = \rho$, как будет показано ниже в 1.2.2.

1.1.3. Лагранжева статистика

Следуя в основном изложению в [5], опишем лагранжеву статистику, которая определяется стохастическими уравнениями (4), (5), и установим ее связь с уравнением (1).

Введем лагранжеву плотность вероятности того, что жидкая частица будет иметь скорость U и положение X (независимо от того, какие начальные условия она имела в начальный момент):

$$f_{UX}(U, X; t) = \langle \delta(U - \mathcal{U}^+(t)) \delta(X - x^+(t)) \rangle, \quad (14)$$

где $\mathcal{U}^+(t)$ и $x^+(t)$ подчиняются (4), (5) и осреднение выполняется по начальным значениям x_0 и \mathcal{U}_0 и по реализациям винеровских процессов. Используя стандартную технику [5–7], можно показать, что f_{UX} удовлетворяет следующему уравнению Фоккера — Планка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{UX}}{\partial t} + U_j \frac{\partial f_{UX}}{\partial X_j} &= -\frac{\partial}{\partial U_j} \left[\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial X_j} + \right. \right. \\ &\left. \left. + G_{ij}(U_j - \langle U_j \rangle) \right) f_{UX} \right] + \frac{1}{2} C_0 \langle \varepsilon \rangle \frac{\partial^2 f_{UX}}{\partial U_j \partial U_j}. \end{aligned} \quad (15)$$

Несмотря на очевидное внешнее сходство уравнений (1) и (15), функции f_{UX} и f_U в общем случае различны. Это следует уже из того факта, что статистические характеристики \mathcal{U}^+ и X^+ (например, моменты) находятся интегрированием f_{UX} по полному объему, занимаемому жидкостью, а функция f_U дает среднее значение в одной пространственной точке.

Но можно указать условия, когда f_{UX} и f_U пропорциональны. Для этого введем в рассмотрение условную лагранжеву плотность вероятностей $f_{U|X}$ наблюдения скорости U в данной точке X :

$$f_{U|X}(U, X; t) = \frac{f_{UX}(U, X; t)}{f_X(X; t)}, \quad (16)$$

где $f_X(X; t) = \int f_{UX}(U, X; t) dU$ — лагранжева плотность вероятностей координаты жидкой частицы. Несмотря на то, что уравнение (16) связывает только лагранжевы плотности вероятностей, условная плотность вероятностей $f_{U|X}$ по смыслу близка теперь к эйлеровой плотности вероятностей f_U в (1). Условное среднее произвольной лагранжевой характеристики $Q(\mathcal{U}^+, X^+)$ находится с помощью соответствующего интегрирования:

$$\langle Q|X \rangle = \int Q(U, X) f_{U|X} dU. \quad (17)$$

Уравнение, которому удовлетворяет условная плотность вероятностей $f_{U|X}$, вытекает из (15), (16):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_X f_{U|X}) + U_j \frac{\partial}{\partial X_j}(f_X f_{U|X}) &= \\ = -\frac{\partial}{\partial U_j} \left[\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial X_j} + G_{ij}(U_j - \langle U_j \rangle) \right) f_X f_{U|X} \right] + \\ + \frac{1}{2} C_0 \langle \varepsilon \rangle \frac{\partial^2}{\partial U_j \partial U_j}(f_X f_{U|X}). \end{aligned} \quad (18)$$

Сравнивая между собой уравнения (1), (18), можно заключить, что $f_{U|X}$ и f_U тождественны при выполнении следующих условий согласования:

- 1) f_X является постоянной,
- 2) $f_{U|X}$ и f_U совпадают в начальный момент времени.

Второе условие удовлетворяется выбором начальных и граничных условий для лагранжевых уравнений (4), (5), (7). Первое же из условий согласования накладывает ограничение на поле средней скорости $\langle U \rangle$. Действительно, проинтегрируем (18) по U в предположении, что выполнено второе условие согласования. В результате получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_X) + \frac{\partial}{\partial X_i}(f_X \langle U_j \rangle) = 0. \quad (19)$$

Как следует из (19), выполнить условие $f_X = \text{const}$ можно, только если средняя скорость соленоидальна, т. е. удовлетворено осредненное уравнение неразрывности (3).

Таким образом, при выполнении двух вышеприведенных условий согласования справедливо тождество

$$f_{U|X} = f_U. \quad (20)$$

В этом случае в уравнении (18) $\langle U \rangle = \langle U|X \rangle$ и в уравнении (4) скорость $\langle U \rangle^+$ может быть заменена на $\langle U|X = x^+ \rangle$. Тогда уравнение неразрывности (3) можно переписать в виде

$$\operatorname{div} \langle U|X = x \rangle = 0. \quad (21)$$

Заметим, наконец, что в рассматриваемом случае из условия нормировки $f_X = 1/V_0$, где V_0 — объем, занимаемый жидкостью, и из уравнений (16) и (20) следует, что f_U и $f_{U|X}$ пропорциональны.

1.2. Эйлеровы методы Монте-Карло

Опишем вначале преобразование лагранжевых уравнений (4), (5), (12) в стохастические уравнения в частных производных для эйлеровых полей скорости \mathcal{U} и стохастической плотности r . Затем покажем, что полученные уравнения в частных производных статистически эквивалентны уравнению (1). И наконец, установим соответствие между лагранжевыми и эйлеровыми статистиками.

1.2.1. Эйлеровы уравнения

Следуя [3], лагранжевы уравнения (4), (5), (11) можно рассматривать как уравнения характеристик нижеприведенных гиперболических уравнений первого порядка:

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \mathcal{U}_j \frac{\partial r}{\partial x_j} = -r \frac{\partial \mathcal{U}_j}{\partial x_j}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \mathcal{U}_i}{\partial t} + \mathcal{U}_j \frac{\partial \mathcal{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} + G_{ij}(\mathcal{U}_j - \langle U_j \rangle) + \sqrt{C_0 \langle \varepsilon \rangle} \dot{W}_j, \quad (23)$$

$$r(x, t = 0) = r_0(x) = \rho, \quad (24)$$

$$\mathcal{U}(x, t = 0) = U_0(x). \quad (25)$$

Уравнения (22), (23) представляют собой модельные уравнения Навье — Стокса, записанные в эйлеровых переменных. Подчеркнем, что в эти уравнения входит стохастическая (в общем случае переменная) плотность r , несмотря

на то, что нами рассматривается несжимаемая жидкость. Уравнения (22), (23) могут быть записаны также в дивергентной форме:

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (r \mathcal{U}_j) = 0, \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (r \mathcal{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (r \mathcal{U}_j \mathcal{U}_i) = -\frac{r}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} + r G_{ij}(\mathcal{U}_j - \langle U_j \rangle) + r \sqrt{C_0 \langle \varepsilon \rangle} \dot{W}_j, \quad (27)$$

$$r(x, t = 0) = r_0(x) = \rho, \quad (28)$$

$$\mathcal{U}(x, t = 0) = U_0(x). \quad (29)$$

1.2.2. Эйлерова плотность вероятностей скорости

Докажем, что уравнения (22), (23) статистически эквивалентны уравнению (1).

Введем эйлерову плотность вероятностей скорости \mathcal{U} , связанную с уравнениями (22), (23):

$$f_{\mathcal{U}}(U; x, t) = \langle \delta(U - \mathcal{U}(x, t)) \rangle. \quad (30)$$

Так как с формальной точки зрения уравнения (22), (23) описывают течение жидкости с переменной плотностью, то, следуя общепринятой практике (см., например, [1, 4]), введем наряду с плотностью вероятностей (30), часто называемую рейнольдсовой плотностью вероятностей, еще одну плотность вероятностей — фавровскую. Эта плотность вероятностей определяется следующим образом:

$$f_{\mathcal{U}:r}(U; x, t) = \frac{\langle r \delta(U - \mathcal{U}(x, t)) \rangle}{\langle r \rangle} = \frac{\langle r | U \rangle}{\langle r \rangle} f_{\mathcal{U}}(U; x, t). \quad (31)$$

Среднее значение по Фавру произвольной функции Q , зависящей от \mathcal{U} , обозначается $\langle Q \rangle_r$ и записывается в виде

$$\langle Q \rangle_r = \int Q(U) f_{\mathcal{U}:r} dU. \quad (32)$$

Уравнение для фавровской плотности вероятностей $f_{\mathcal{U}:r}$ следует из эйлеровых уравнений (22), (23) после применения стандартной техники [5, 7]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\langle r \rangle f_{U:r}) + U_j \frac{\partial}{\partial x_j}(\langle r \rangle f_{U:r}) = \\ & = - \frac{\partial}{\partial U_j} \left[\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_j} + G_{ij}(U_j - \langle U_j \rangle) \right) \langle r \rangle f_{U:r} \right] + \\ & \quad + \frac{1}{2} C_0 \langle \varepsilon \rangle \frac{\partial^2}{\partial U_j \partial U_j} (\langle r \rangle f_{U:r}). \end{aligned} \quad (33)$$

Сравнивая уравнения (1) и (33), можно заключить, что функции $f_{U:r}$ и f_U тождественны при выполнении двух условий согласования:

- 1) $\langle r \rangle = \rho = \text{const}$,
- 2) $f_{U:r}$ и f_U совпадают в начальный момент времени.

Условия согласования накладывают также ограничения на поле средней скорости. Действительно, если условия 1 и 2 выполнены, то после интегрирования уравнения (33) по U получаем

$$\frac{\partial \langle r \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle r \rangle \langle U_j \rangle) = 0. \quad (34)$$

Так как $\langle r \rangle = \rho = \text{const}$, то (34) сводится к уравнению неразрывности (3).

Таким образом, если два условия согласования выполнены, то справедливо тождество

$$f_{U:r} = f_U. \quad (35)$$

В этом случае

$$\langle U \rangle = \langle U \rangle_r \quad (36)$$

и средняя скорость $\langle U \rangle$ может быть заменена на $\langle U \rangle_r$ в (3), (27) и (33).

Тем самым доказано, что стохастические уравнения (22), (23) статистически эквивалентны уравнениям для плотностей вероятностей f_U (1).

1.2.3. Связь между лагранжевыми и эйлеровыми статистиками

Чтобы установить связь между лагранжевыми и эйлеровыми распределениями вероятностей скорости, описываемой модельными уравнениями Навье — Стокса, можно использовать, например, технику, разработанную в [3]. Но тот же результат после проделанной выше работы получается прямым сравнением уравнений (20) и (35). Как результат такого сравнения, имеем следующее тождество:

$$f_{U|X} = f_{U:x}(U; x, t).$$

Таким образом, условная лагранжева плотность вероятностей $f_{U|X}$ равна фавровской плотности вероятностей скорости $f_{U:r}$. В то же время каждая из этих плотностей вероятностей равна эйлеровой плотности вероятностей f_U из уравнения (1). Тот факт, что определение условной лагранжевой плотности вероятностей $f_{U|X}$ не требует знания стохастической плотности, объясняет возможную причину того, почему до сих пор не опубликовано преобразование лагранжевых модельных уравнений Навье — Стокса к эйлеровым переменным, где стохастическая плотность играет ключевую роль.

II. ЭЙЛЕРОВЫ МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ СОВМЕСТНОЙ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ СКОРОСТИ И КОНЦЕНТРАЦИЙ

Обратимся к рассмотрению совместной плотности вероятностей скорости и концентраций в турбулентных течениях реагирующего газа. Чтобы не усложнять выкладки, далее рассматривается только один реагент с концентрацией c . Но все полученные результаты непосредственно обобщаются на случай нескольких концентраций. Для статистического описания турбулентных течений с переменной плотностью традиционно (как уже указывалось выше) используется фавровское осреднение. Фавровская и обычная (рейнольдсова) плотности вероятностей скорости и концентраций связаны известным соотношением

$$\tilde{f}_{Uc}(U, c) = \frac{\langle \rho | U, c \rangle}{\langle \rho \rangle} f_{Uc}(U, c), \quad (37)$$

где \tilde{f}_{Uc} и f_{Uc} — фавровская и рейнольдсова плотности вероятностей, $\langle \rho | U, c \rangle$ — условная плотность при фиксированных значениях скорости и концентрации. Рейнольдсово и фавровское средние значения произвольной величины Q обозначаются $\langle Q \rangle$ и \tilde{Q} соответственно. Из (37) следует

$$\tilde{Q} = \langle \rho Q \rangle / \langle \rho \rangle. \quad (38)$$

Соответствующие флуктуации определяются соотношениями

$$Q' = Q - \langle Q \rangle, \quad (39)$$

$$Q'' = Q - \tilde{Q}. \quad (40)$$

Ниже ограничимся случаем течений с малым числом Маха, т. е. когда кинетическая энергия пренебрежимо мала по сравнению с тепловой. В этом случае плотность ρ и химический источник S в уравнении для концентрации являются функциями только скаляра c (см., например, [1, 4]), т. е.

$$\rho = \rho(c), \quad S = S(c). \quad (41)$$

Уравнение (37) тогда принимает более простой вид

$$\tilde{f}_{Uc}(U, c) = \frac{\rho(c)}{\langle \rho \rangle} f_{Uc}(U, c). \quad (42)$$

Незамкнутое уравнение для \tilde{f}_{Uc} выводится из уравнений Навье — Стокса и уравнения диффузии с химическим источником. Как и в § I, член с давлением и вязкий член моделируются далее с использованием GLM [6]. Для моделирования члена с молекулярной диффузией используется модель взаимодействия со средним значением IEM [8]. Напомним, что согласно этой модели процесс молекулярного смешения в турбулентном потоке происходит под влиянием разности $c - \bar{c}$ мгновенной (c) и средней (\bar{c}) концентраций с характерным временем смешения, пропорциональным временному масштабу турбулентности. В результате модельное уравнение для \tilde{f}_{Uc} записывается в виде [1]

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \tilde{f}_{Uc}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \rho \rangle U_j \tilde{f}_{Uc}) = \\ & = - \frac{\partial}{\partial U_j} \left[\langle \rho \rangle \left(- \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_j} + G_{ij}(U_j - \tilde{U}_j) \right) \tilde{f}_{Uc} \right] + \\ & \quad + \frac{1}{2} C_0 \langle \rho \rangle \tilde{\varepsilon} \frac{\partial^2 \tilde{f}_{Uc}}{\partial U_j \partial U_j} - \\ & \quad - \frac{\partial}{\partial c} (- \langle \rho \rangle \langle \omega_c \rangle (c - \bar{c}) \tilde{f}_{Uc} + \langle \rho \rangle S \tilde{f}_{Uc}). \quad (43) \end{aligned}$$

В правой части (43) первые два члена соответствуют GLM, предпоследний член — модели IEM, в которой $\langle \omega_c \rangle$ есть средняя частота турбулентных пульсаций.

Для получения стохастических эйлеровых уравнений для полей скорости \mathcal{U} и концентрации θ , статистически эквивалентных (43), применяется тот же подход, что и в § I для несжимаемой жидкости. Вначале рассматривается статистически эквивалентная система лагранжевых уравнений для жидких частиц. По сравнению со случаем несжимаемой жидкости

здесь добавляется уравнение для θ (см., например, [1, 3]). Затем проводится переход к эйлеровым переменным. И здесь вновь стохастическая плотность играет ключевую роль. Приведем, опуская вывод, окончательный результат:

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (r \mathcal{U}_j) = 0, \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r \mathcal{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (r \mathcal{U}_j \mathcal{U}_i) = & - \frac{r}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} + \\ & + r G_{ij} (\mathcal{U}_j - \langle \mathcal{U}_j \rangle_r) + r \sqrt{C_0 \tilde{\varepsilon}} \dot{W}_j, \quad (45) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (r \theta) + \frac{\partial}{\partial x_j} (r \mathcal{U}_j \theta) = - r \langle \omega_c \rangle (\theta - \langle \theta \rangle_r) + r S, \quad (46)$$

где, как и прежде, r — стохастическая плотность; $\langle \mathcal{U} \rangle_r = \langle r \mathcal{U} \rangle / \langle r \rangle$, $\langle \theta \rangle_r = \langle r \theta \rangle / \langle r \rangle$ — фавровские средние скорости и концентрации, но, в отличие от (38), здесь в качестве веса используется стохастическая плотность.

Заметим, что в уравнениях (45), (46) мы сразу написали $\langle \mathcal{U} \rangle_r$ и $\langle \theta \rangle_r$ вместо \tilde{U} и \tilde{c} . Законность такой подстановки следует из установленного ниже тождества (50).

Введем рейнольдсову ($f_{U\theta}$) и фавровскую ($f_{U\theta:r}$) плотности вероятностей, связанные с системой (44)–(46):

$$f_{U\theta:r}(\mathcal{U}, \theta) = \frac{\langle r | \mathcal{U}, \theta \rangle}{\langle r \rangle} f_{U\theta}(\mathcal{U}, \theta). \quad (47)$$

Средние значения $\langle \mathcal{U} \rangle_r$ и $\langle \theta \rangle_r$ очевидным образом выражаются через $f_{U\theta:r}$.

Уравнение для $f_{U\theta:r}$ следует из (44)–(46) с использованием стандартной техники [5, 7] и здесь не выписывается, так как имеет тот же вид, что и (43), за одним исключением: вместо средней физической плотности $\langle \rho \rangle$ в уравнении для $f_{U\theta:r}$ фигурирует средняя стохастическая плотность $\langle r \rangle$. Таким образом, используя те же рассуждения, что и в I.1.3, можно заключить, что если выполнены два условия согласования:

$$1) \langle r \rangle = \langle \rho \rangle, \quad (48)$$

$$2) \tilde{f}_{Uc} \text{ и } f_{U\theta:r} \text{ совпадают в начальный момент времени,}$$

то справедливо тождество

$$\tilde{f}_{Uc} = f_{U\theta:r}. \quad (49)$$

Из (49) следуют тождества

$$\tilde{U} = \langle U \rangle_r, \quad \tilde{c} = \langle \theta \rangle_r, \quad (50)$$

которые использовались выше при записи (45), (46). Тем самым доказано, что эйлеровы уравнения (44)–(46) статистически эквивалентны уравнению (43).

Отметим, что эйлерова плотность вероятности $f_{U\theta}$, определяемая (47), (49), связана с f_{Uc} (42) следующим соотношением (получаемым комбинацией (42), (47) и (49)):

$$f_{Uc}(U, c) = \frac{\langle \rho \rangle}{\rho(c)} \tilde{f}_{Uc}(U, c) = \frac{\langle r|U, c \rangle}{\rho(c)} f_{U\theta}(U, c). \quad (51)$$

В общем случае $\langle r|U, c \rangle \neq \rho(c)$, и тем самым из (51) следует

$$f_{Uc} \neq f_{U\theta}. \quad (52)$$

Таким образом, эйлерова плотность вероятностей $f_{U\theta}$ не имеет прямого физического смысла.

III. ЭЙЛЕРОВ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ КОНЦЕНТРАЦИЙ

III.1. Вывод эйлеровых уравнений

В [3] уже был предложен эйлеров метод Монте-Карло для плотности вероятностей концентраций, удовлетворяющей уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \tilde{f}_c) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \rho \rangle \tilde{U}_j \tilde{f}_c) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle \rho \rangle \Gamma_T \frac{\partial \tilde{f}_c}{\partial x_j} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial c} (\langle \rho \rangle \langle \omega_c \rangle (c - \tilde{c}) \tilde{f}_c) - \frac{\partial}{\partial c} (\langle \rho \rangle S(c) \tilde{f}_c), \end{aligned} \quad (53)$$

где $\Gamma_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}$ — коэффициент турбулентной диффузии, \tilde{f}_c — фавровская плотность вероятностей концентраций, \tilde{k} — осредненная по Фавру энергия турбулентности, C_μ — эмпирическая постоянная.

Вывод в работе [3] эйлерова стохастического уравнения, статистически эквивалентного (53), был основан на приближении дельта-коррелированности во времени пульсационного поля скоростей (см., например, [5]). Подход, изложенный в [3], не потребовал введения стохастической плотности (хотя якобиан j

(10) и присутствовал в анализе). В итоге полученное в [3] стохастическое эйлерово уравнение для концентрации сразу дает фавровскую плотность вероятностей. Отметим также, что уравнение из [3] имеет недивергентную форму. Это свойство уравнения может создать определенные неудобства при численном решении.

Возникает естественный вопрос, можно ли получить эйлерово уравнение для концентрации непосредственно из системы (44)–(46), рассмотрев предельный случай малого времени релаксации в уравнении (45) для поля скорости. Ответ на этот вопрос положителен, ниже мы приведем этот вывод и покажем, что в результате получается формулировка, альтернативная работе [3], хотя и статистически эквивалентная. Такой предел, как будет видно ниже (см. (65)), формально эквивалентен приближению дельта-коррелированности во времени пульсационной скорости. Уравнение (53) является предельным случаем (1). Оно получается из (1) после рассмотрения предела $\tau = \tilde{k}/\tilde{\varepsilon} \rightarrow 0$ при ограниченной величине произведения $\tilde{\varepsilon}\tau^2 = \tilde{k}^2/\tilde{\varepsilon}$, которое пропорционально Γ_T в (53).

Ограничимся, как и в [3], приближением изотропной турбулентной диффузии. Это приближение соответствует упрощенной ланжевенной модели SLM [5], когда тензор G_{ij} в GLM является изотропным, т. е.

$$G_{ij} = \frac{1}{\tau_{rel}} \delta_{ij}, \quad (54)$$

где

$$\frac{1}{\tau_{rel}} = \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}. \quad (55)$$

Рассмотрим предел $\tau_{rel} \rightarrow 0$ (по сравнению с другими характерными временами). Уравнение (45) в таком пределе принимает вид

$$r \circ \mathcal{U} - r \langle \mathcal{U} \rangle_r + r \sqrt{C_0 \tilde{\varepsilon} \tau_{rel}^2} \dot{W} = 0. \quad (56)$$

Знак \circ в первом члене (56) указывает на интерпретацию Стратоновича стохастического произведения r и \mathcal{U} . Заметим, что в стохастических уравнениях всегда принималась интерпретация Ито. Не вдаваясь в математические детали, отметим только, что среднее значение стохастического произведения с винеровским процессом равно нулю при интерпретации Ито и отлично от нуля при интерпретации Стратоновича. Дальнейшие сведения о различных

интерпретациях стохастического произведения можно найти, например, в [7].

Будем искать решение уравнения (56) в следующем виде:

$$\mathcal{U} = \langle \mathcal{U} \rangle_r + \mathcal{U}'' , \quad (57)$$

$$\mathcal{U}'' = \mathcal{U}^d + v, \quad v = \sqrt{2\Gamma_T} \dot{W}, \quad (58)$$

$$2\Gamma_T = C_0 \langle \varepsilon \rangle \tau_{rel}^2,$$

где в \mathcal{U}'' введена неслучайная компонента скорости \mathcal{U}^d , подлежащая определению. Смысл этого будет ясен из дальнейшего (см. уравнение (64)).

После подстановки (57), (58) в (56) получаем

$$r\mathcal{U}^d + r \circ \sqrt{2\Gamma_T} \dot{W} + r \sqrt{2\Gamma_T} \dot{W} = 0. \quad (59)$$

Чтобы найти \mathcal{U}^d , осредним (59). Так как последний член представляет собой стохастическое произведение в интерпретации Ито, его среднее равно нулю. В результате получаем

$$\mathcal{U}^d = -\langle r \circ \sqrt{2\Gamma_T} \dot{W} \rangle / \langle r \rangle. \quad (60)$$

Остается найти корреляцию $\langle r \circ \sqrt{2\Gamma_T} \dot{W} \rangle$. Предварительно заметим, что согласно (44), (57) и (58) стохастическая плотность r является функционалом винеровского процесса. Корреляции функционалов с самим винеровским процессом можно найти двумя способами — используя формулу Фуруцу — Новикова [5] либо связь между интерпретациями Ито и Стратоновича. Применим второй способ. Справедливо соотношение [3, 7]

$$r \circ v = rv + \frac{1}{2} drv. \quad (61)$$

Дифференциал стохастической плотности находится из (44):

$$dr = -\frac{\partial}{\partial x_i} (r \circ U_i) dt. \quad (62)$$

Подстановка (62) в (61), учет (57), (58) и последующее осреднение (61) дают для \mathcal{U}^d (60) соотношение

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^d &= \frac{1}{\langle r \rangle} \sqrt{\Gamma_T} \frac{\partial}{\partial x_i} (\sqrt{\Gamma_T} \langle r \rangle) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\partial \Gamma_T}{\partial x} + \frac{\Gamma_T}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x}, \quad (63) \end{aligned}$$

так как $\langle r \rangle = \langle \rho \rangle$. Заметим, что из уравнений (58), (63) следует, что

$$\langle r \circ \mathcal{U}'' \rangle = 0, \quad (64)$$

тем самым \mathcal{U}'' есть фавровская пульсация скорости.

Подведем итог. В пределе $\tau_{rel} \rightarrow 0$, $\tilde{\varepsilon} \tau_{rel}^2 < \infty$, и в приближении изотропной турбулентной диффузии (54) стохастическая скорость дается конечным выражением (57), (58), (63), а система эйлеровых уравнений принимает вид

$$U_i = \tilde{U}_i + \Gamma_T \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Gamma_T}{\partial x_i} + \sqrt{2\Gamma_T} \dot{W}_i, \quad (65)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (r \circ U_j) = 0, \quad (66)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (r\theta) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((r\theta) \circ U_j) = -r \langle \omega_c \rangle (\theta - \langle \theta \rangle_r) + rS. \quad (67)$$

Уравнение для фавровской $f_{\theta;r}$ плотности вероятностей, вытекающее из системы (65)–(67), получается с использованием стандартной техники [5, 7]. Это уравнение эквивалентно уравнению (53), если выполнены два условия согласования (см. аналогичные условия в § II):

- 1) $\langle r \rangle = \langle \rho \rangle$,
- 2) $f_{\theta;r}$ и f_c совпадают в начальный момент времени.

Таким образом, система (65)–(67) статистически эквивалентна уравнению (53). Так как τ_{rel} в эту систему не входит отдельным множителем, то это утверждение остается в силе, даже если τ_{rel} не мало.

III.2. Некоторые замечания о системе (65)–(67). Тест и сравнение с экспериментом

Формулировка системы уравнений (65)–(67) отлична от предложенной в [3]. Стохастическое эйлерово уравнение для скаляра в [3] записано в таком виде, что безусловное осреднение по ансамблю реализаций дает непосредственно фавровскую статистику. Это достигается путем отказа от введения стохастической плотности и использования мгновенного уравнения неразрывности. В результате стохастическое скалярное уравнение не может быть записано в консервативной форме. Заметим, что такой подход, как это следует из § II, исключен

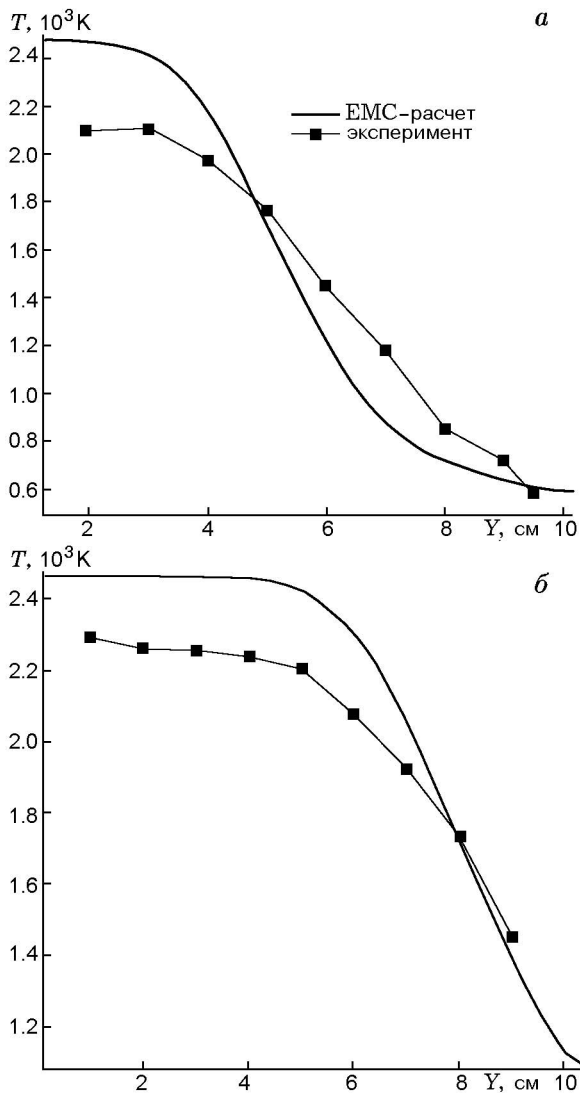


Рис. 1. Профиль средней температуры в сечениях $x = 0.025$ м (а) и 0.046 м (б) вниз по потоку от уступа

при рассмотрении совместной плотности вероятностей и концентраций.

В отличие от [3] новая формулировка дает уравнения (66), (67), записанные в дивергентной форме. Это обстоятельство может упростить интеграцию изложенного эйлера метода Монте-Карло в CFD-коды, которые часто базируются на дивергентной форме записи уравнений Навье — Стокса и консервативных численных схемах.

Новая формулировка (65)–(67) была использована М. Ouglias (PhD студент в ONERA) для расчета (и сопоставления с экспериментальными данными [9]) турбулентного горе-

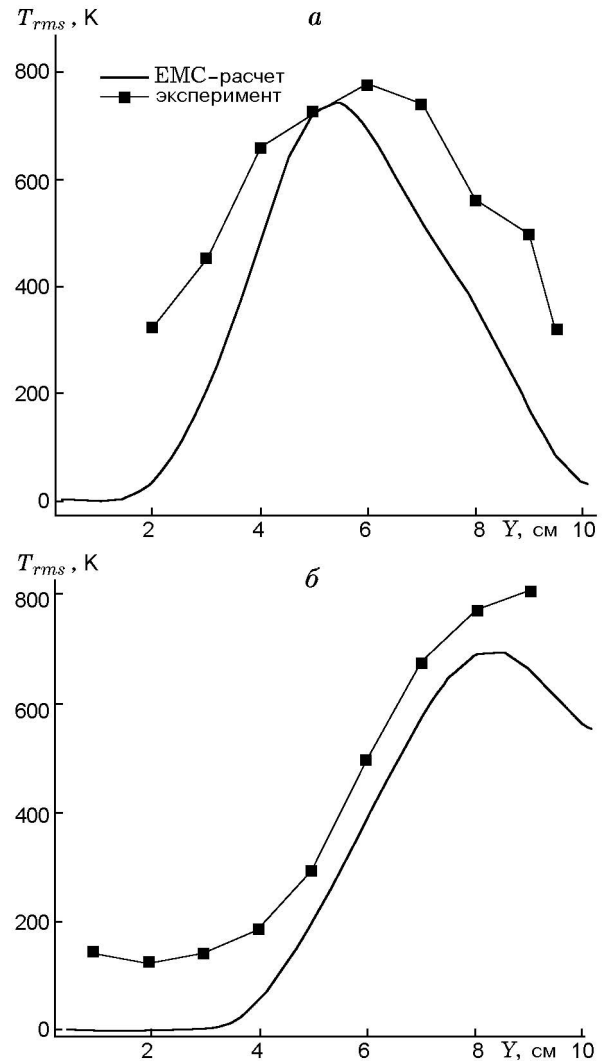


Рис. 2. Профиль среднеквадратичной пульсации температуры в сечениях $x = 0.025$ м (а) и 0.046 м (б) вниз по потоку от уступа

ния заранее перемешанной стехиометрической метановоздушной смеси. Пламя стабилизировалось с помощью рециркуляционной зоны в плоском канале с внезапным расширением — уступом, расположенным на нижней стенке канала. Высота канала перед уступом равнялась 0.065 м, высота уступа — 0.035 м. Средняя скорость (вычисленная по расходу смеси) и средняя температура в набегающем потоке равны 58 м/с и 525 К соответственно. Дальнейшие сведения о геометрии канала и условиях опытов можно найти в [9, 10]. Численный метод решения стохастических уравнений в частных производных при интерпретации стохастического произведения по Стратоновичу подробно описан в [3, 10]. Уравнения (65)–(67) решались

совместно с осредненными (по Фавру) уравнениями Навье — Стокса, замкнутыми с помощью k - ϵ -модели. Горение метана в воздухе моделировалось с помощью глобальной одноступенчатой химической реакции, описывающей полное сгорание метана до CO_2 и H_2O [11]. Несмотря на то, что одноступенчатая реакция является весьма приблизительным описанием процесса окисления метана и, в частности, несколько завышающим уровни температуры T , она была использована для начального тестирования развитого ЕМС. Еще одно упрощение было сделано при записи граничных условий для температуры на стенках канала. Стенки предполагались адиабатическими, хотя в экспериментах они охлаждались холодной водой. Принятые в расчетах упрощающие предположения надо иметь в виду при данном ниже сравнении результатов расчетов с экспериментальными данными. Предварительно заметим, что ранее эта задача была решена с использованием формулировки [3]. Результаты расчетов и сопоставление с экспериментом [9] опубликованы в [10]. Новая формулировка дает практически те же результаты, что и [10], что не удивительно, так как она статистически эквивалентна тому же уравнению для плотности вероятностей (53). В качестве примера на рисунках показано сравнение результатов расчета с использованием новой формулировки (65)–(67) и измерений средней температуры (рис. 1) и среднеквадратичных пульсаций температуры (рис. 2) в двух сечениях вниз по потоку от ступеньки [9] ($x = 0.025$ и 0.046 м). Измерения температуры в [9] были выполнены с помощью CARS. Сравнение можно считать удовлетворительным, хотя и наблюдаются некоторые отличия от эксперимента. Подробное обсуждение различий имеется в [10]. Заметим только, что они вызваны как упрощающими предположениями, сделанными в расчетах (см. выше), так и погрешностями измерений методом CARS.

К настоящему времени эйлеровский метод Монте-Карло решения уравнения для совместной плотности вероятностей концентраций, использующий новую формулировку (65)–(67), интегрирован в индустриальный CFD-код ONERA, CEDRE. Что касается формулировок (44)–(46) решения уравнения для совместной плотности вероятностей скорости и концентрации, то сейчас проводится ее тестирование на ряде простых модельных тече-

ний, когда возможно прямое решение методом конечных разностей уравнения для плотности вероятностей и сравнение этого решения с методом Монте-Карло. После такого тестирования эйлеров метод Монте-Карло также будет интегрирован в код CEDRE.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен новый эйлеров метод Монте-Карло решения уравнений для совместной плотности вероятностей скорости и концентраций в турбулентных реагирующих течениях. В основе метода лежит переход от лагранжевых переменных, используемых в лагранжевых методах Монте-Карло, к эйлеровому описанию. В результате такого перехода получают стохастические эйлеровы уравнения, статистически эквивалентные уравнению для плотности вероятностей. По сравнению с классической гидродинамикой стохастические поля скорости не удовлетворяют мгновенному уравнению неразрывности, а удовлетворяют только осредненному. Для преодоления этой трудности вводится понятие стохастической плотности, связанной с полем стохастической скорости. Стохастическая плотность отлична от физической, но имеет то же среднее значение. Заново рассмотрен также случай плотности вероятности концентраций. Полученные эйлеровы уравнения для стохастической концентрации отличаются от выведенных ранее [3] тем, что могут быть записаны в дивергентной форме. Но новая и прежняя [3] формулировки статистически эквивалентны.

Настоящая работа выполнена в рамках докторской диссертации первого автора при поддержке ONERA.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Pope S. B.** Pdf methods for turbulent reactive flows // *Progress in Energy and Combust. Sci.* 1985. V. 27. P. 119–192.
2. **Valiño L.** A field Monte Carlo formulation for calculating the probability density function of a single scalar in a turbulent flow // *Flow, Turbulence and Combust.* 1998. V. 60. P. 157–172.
3. **Sabel'nikov V. A., Souldard O.** Rapidly decorrelating velocity field model as a tool for solving Fokker — Planck pdf equations of turbulent reactive scalars // *Phys. Rev. E.* 2005. V. 72. 016301.
4. **Kuznetsov V. R., Sabel'nikov V. A.** *Turbulence and Combustion.* London: Hemisphere Publ. Corp., 1990.

5. **Кляцкин В. И.** Стохастические уравнения глазами физика. М.: Физматлит, 2001.
6. **Pope S. B.** Turbulent Flows. Cambridge Univ. Press, 2000.
7. **Gardiner C.** Handbook of Stochastic Methods. 2nd ed. Springer, 1985.
8. **Villermaux J., Devillon J.** Représentation de la redistribution des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d'interaction phénoménologique // 2nd Intern. Symp. Chem. React. Engng Amsterdam. 1972. V. B-1-13.
9. **Magre P., Collin G.** Application de la drasc à l'opération A3C // Techn. Report R.T.S. ONERA 7/3608 EY, ONERA/DEFA, 1994.
10. **Sabel'nikov V. A., Soulard O.** White in time scalar advection model as a tool for solving joint composition PDF equations: derivation and application // Flow, Turbulence and Combust. 2006. V. 68.
11. **Westbrook C. K., Dryer F. L.** Chemical kinetics modeling of hydrocarbon combustion // Progr. Energy Combust. Sci. 1984. V. 10, N 1. P. 1-57.

Поступила в редакцию 5/IV 2006 г.
