

**ШТУРМ-ЛИУВИЛЛ ТЕНДЕУІНІҢ КОШИ ЕСЕБІНІҢ
ӘЛДІ ШЕШІМІНІҢ ФУРЕЛІК КЕЙПІ**

С. Т. Ахметова, А. Б. Иманбаева, А. Ш. Шалданбаев

М. О. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент, Қазақстан

Тірек сөздер: Кошидің есебі, жалқы оператор, әсіре үзіксіздік, Штурм-Лиувилл тендеуі.

Аннотация. Бұл еңбекте Штурм-Лиувилл тендеуіне арналған Коши есебінің шешімінің Фурье кейпі табылды.

Поступила 07.07.2015 г.

N E W S

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 4, Number 302 (2015), 197 – 207

**INVESTIGATION OF FILTERED DENSITY FUNCTION
FOR LARGE EDDY SIMULATION
OF CHEMICALLY REACTING TURBULENT FLOWS**

M. K. Inkarbekov, A. Kaltayev

Kazakh national university named after Al-Farabi, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: inkarbekovm@gmail.com

Key words: turbulence, filtered density function, large-eddy simulation, Monte Carlo method, direct numerical simulation.

Abstract. The methodology of “filtered density function” (FDF) is surveyed and implemented for large eddy simulation (LES) of incompressible chemically reacting turbulent flows. In this methodology the effect of chemical reactions appears in a closed form and the influences of SGS mixing and convection are modeled. The FDF transport equation is solved numerically via a Lagrangian Monte Carlo scheme. The consistency of the FDF approach, the convergence of its Monte Carlo solution and the performance of the closures employed in the FDF transport equation are assessed by comparisons with results obtained by direct numerical simulation (DNS). The FDF results show a much closer agreement with filtered DNS results.

УДК 532; 533

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЛЬТРОВАННОЙ ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КРУПНЫХ ВИХРЕЙ ХИМИЧЕСКИ
РЕАГИРУЮЩИХ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ**

М. К. Инкарбеков, А. Калтаев

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

Ключевые слова: турбулентность, фильтрованная функция плотности, моделирования крупных вихрей, метод Монте-Карло, прямое численное моделирование.

Аннотация. Методология “фильтрованная функция плотности” (FDF) исследована и применена для моделирования крупных вихрей (LES) химически реагирующих турбулентных течений. В этой методологии, влияния нерешенных скалярных флуктуаций учитываются путем рассмотрения функции плотности вероятности подсеточных функций скалярных величин. В уравнении переноса для FDF эффект химических реакций находится в замкнутом виде. Уравнение переноса для FDF решается численно Лагранжевым методом Монте-Карло. Консистенция FDF подхода, сходимость его Монте-Карло решения и эффективность замыканий использованных в уравнении переноса для FDF оцениваются путем сравнения с результатами прямого численного моделирования (DNS). Полученные FDF результаты хорошо согласуются с фильтрованными DNS результатами.

1. Введение. Два статистических подхода были очень популярны в вычислении систем турбулентного горения [1]: (1) методы моментов и (2) методы функции плотности вероятностей (PDF). Первый подход рассматривает средние значения рассматриваемого течения через решения осредненных уравнений переноса [2]. Основной задачей в этом подходе является моделирование связи между неизвестными корреляциями в этих уравнениях и осредненными переменными переноса. Такие замыкания моментов используют смесь математического анализа и физического соображения. Несмотря на это, постройка окончательной математической модели требует дополнительных предположений и эмпирических взаимосвязей. В настоящее время, все полученные модели не являются универсально применимыми. В попытке исправить эти недостатки, достаточно много усилий были приложены на адаптацию этих моделей для определенных параметров течения. Второй подход, основанный на PDF, является весьма привлекательным в прогнозировании турбулентных реактивных течений, так как он преодолевает проблему замыкания связанную с химической реакцией. На практике, методы PDF стали применяться с помощью предложенных выше методов или через решение уравнения переноса, описывающее их дальнейшую эволюцию.

Значительные улучшения в вычислительных отраслях связанные с численными методами высокой точности облегчили моделирование простых турбулентных течений без турбулентных моделей. В этом подходе, известный как “прямое численное моделирование (DNS)” [3], все величины течения, включая самые мелкие турбулентные вихри, решаются напрямую. Такие моделирования стали ценными для фундаментальных исследований турбулентных течений для проверки моделей замыкания. Однако, из-за высоких требований к размерам вычислительной сетки в реальных инженерных течениях, DNS не является широко применимым для “практических” задач [4]. Трудности DNS заключаются в ограниченности компьютерных ресурсов. Количество требуемых сеточных узлов и временных шагов существенно превосходят современные вычислительные мощности.

Ниже представлена таблица, показывающая зависимость времени расчета от числа Рейнольдса для канала [5].

Время расчета турбулентного течения в канале с DNS при различных числах Рейнольдса [5]

Re	$5 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^8$
200 Mflop/s	68 дней	444 дней	610 лет	∞	∞
1 Tflops/s	13 дней	88 дней	122 года	∞	∞

Очевидно, что DNS позволяет получать результаты при современном развитии вычислительной техники только при малых числах Рейнольдса. Кроме этого существуют проблемы постановки граничных условий. Для описания случайного характера турбулентного течения необходимо адекватное задание нестационарных входных и выходных условий. С практической точки зрения, статистика, полученная с DNS, может быть использована для тестирования и калибровки моделей, базирующихся на осредненных уравнениях Рейнольдса.

При моделировании крупных вихрей (LES) [6], вместо того чтобы моделировать все турбулентные величины, как это делается в методе осреднения Рейнольдса, крупные вихри напрямую разрешаются на численной сетке и времени, а мельчайшие вихри подсеточного масштаба моделируются. Основной предпосылкой такого подхода является то, что наибольшие вихри несут

максимум рейнольдсовых напряжений и должны быть рассчитаны. Мелкие же вихри содержат низкие значения рейнольдсовых напряжений, кроме того, мелкомасштабная турбулентность близка к изотропной и имеет близкие к универсальным характеристики, в большей степени поддающиеся моделированию. Это приводит к некоторой степени облегченному решению по сравнению с решением DNS. В дополнении, предполагается что замыкание подсеточных величин в моделировании крупных вихрей являются более универсальными чем осредненные величины Рейнольдса.

За последние несколько десятилетия значительный прогресс был сделан в моделировании крупных вихрей турбулентных течений [7]. Сравнительно, небольшая работа была выполнена в моделировании крупных вихрей химических реагирующих течений. Использование схем PDF для метода крупных вихрей было предложено Пейманом Гиви[8] и первое его фактическое применение было выполнено Маднием и Гиви [9]. Стивен Поуп представил концепцию “фильтрованная функция плотности (FDF)” [10], который по существу является PDF переменных величин подсеточной функции. С помощью математического определения FDF, Поуп демонстрирует [10], что эффекты химической реакции находятся в замкнутом виде в уравнении переноса FDF.

Одним из сложных вопросов в области энергетической и экологической исследований связано с точностью прогнозирования турбулентных реагирующих течений. Оптимальным средством захвата подробную, нестационарную физику таких потоков, как уже показала практика, является моделирование крупных вихрей (LES) [11]. Задачей в моделировании крупных вихрей является точное и последовательное моделирование величин подсеточной функции [12]. Методология, фильтрованная функция плотности (FDF), включая ее серию осредненной по плотности, фильтрованная функция массовой плотности, оказалось особенно эффективной для достижения этих целей [13]. Фильтрованная функция плотности, по существу, является функцией плотности вероятности величин подсеточной функции. Поэтому фильтрованная функция плотности обеспечивает всю статистическую информацию касающуюся этих величин.

2. Постановка. Мы рассматриваем несжимающиеся, изотермическое, турбулентное реагирующее течение жидкости, включающее N_s компонентов. Для математического описания процесса, основными переменными переноса являются вектор скорости $u_i(x, t)$ ($i = 1, 2, 3$), давление $p(x, t)$, и массовые доли компонентов $\phi_\alpha(x, t)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, N_s$). Уравнениями, которые описывают перемещение этих переменных в пространстве и времени, являются:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial u_i \phi_\alpha}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} + \omega_\alpha, \quad (3)$$

где $\omega_\alpha(x, t) \equiv \hat{\omega}_\alpha(\Phi(x, t))$ химическая реакция для α компоненты, и $\Phi \equiv [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_s}]$ обозначает скалярный массив. Предполагая Ньютоновское течение с законом Фика для диффузии, тензор напряжения вязкости τ_{ij} и массоперенос J_j^α представляются в следующем виде

$$\tau_{ij} = \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad J_j^\alpha = -\Gamma \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j}, \quad (4)$$

где ν вязкость жидкости, Γ коэффициент диффузии, $\Gamma = \frac{\nu}{Sc}$, и Sc молекулярное число Шмидта.

В рамках LES используется осреднение по пространству, описываемое процедурой фильтрации [14]

$$\langle f(x, t) \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x', t) G(x', x) dx', \quad (5)$$

где G функция фильтра, $\langle f(x, t) \rangle_L$ представляет фильтрованное значение переменной переноса $f(x, t)$, и $f' = f - \langle f \rangle_L$ обозначает флуктуацию f от фильтрованного значения. После применение операции фильтрации к уравнениям переноса получается

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial x_i} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L}{\partial x_j} = - \frac{\partial \langle p \rangle_L}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle \tau_{ij} \rangle_L}{\partial x_j} - \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial x_j} = - \frac{\partial \langle J_j^\alpha \rangle_L}{\partial x_j} - \frac{\partial M_i^\alpha}{\partial x_j} + \langle \omega_\alpha \rangle_L, \quad (8)$$

где $T_{ij} = \langle u_i u_j \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L$ и $M_i^\alpha = \langle u_i \phi_\alpha \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L$ обозначают подсеточное напряжение и подсеточный массовый поток, соответственно.

3. Стратегия замыкания. В методе LES нереагирующих течений проблема замыкания связана с $T_{ij} = \langle u_i u_j \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle u_j \rangle_L$ и $M_i^\alpha = \langle u_i \phi_\alpha \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L$. В реагирующих течениях требуется дополнительная модель для $\langle \omega_\alpha \rangle_L$. Мы используем доступные на сегодняшний день замыкания, которые хорошо известны в нереагирующих течениях. Подсеточное напряжение моделируется через

$$T_{ij} - (\delta_{ij}/3)\Gamma_{kk} = -2\nu_t \langle S_{ij} \rangle_L, \quad (9)$$

где $\langle S_{ij} \rangle_L$ тензор деформации и ν_t подсеточная вязкость. Мы используем два вида замыкания для представления этой вязкости. Первый является таким же как традиционное замыкание Смагоринского [15]

$$\nu_t = C_s \Delta_G^2 \sqrt{\langle S_{ij} \rangle_L \langle S_{ij} \rangle_L}, \quad (10)$$

где Δ_G размер фильтра, C_s эмпирическая константа. Недостатки этого замыкания хорошо известны[16]. Чтобы избежать некоторых из этих недостатков, мы также использовали второй вид замыкания, в котором подсеточная вязкость определяется на основе модифицированной подсеточной кинетической энергии

$$\nu_t = C_k \Delta_G \sqrt{\left| \langle u_i^* \rangle_L \langle u_j^* \rangle_L - \langle \langle u_i^* \rangle_L \rangle_{L'} \langle \langle u_j^* \rangle_L \rangle_{L'} \right|}, \quad (11)$$

где $u_i^* = u_i - U_i$, U_i этолонная скорость в направлении x_i . Индекс L' обозначает фильтр второго уровня, который имеет размер больше первого уровня L . Это замыкание известно как модифицированная вязкость кинетической энергии (MKEV).

Типичная модель используется для замыкания подсеточного массового потока [17]

$$M_i^\alpha = \Gamma_t \frac{\partial \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial x_i}, \quad (12)$$

где $\Gamma_t = \nu_t / Sc_t$, Sc_t подсеточное число Шмидта.

4. Фильтрованная функция плотности. Ключевой момент в этой формулировке это рассмотреть скаляр неустойчивости основного скалярного массива $\Phi(x, t)$ в вероятностным методом. Для этого мы определяем «Фильтрованную функцию плотности» (FDF), обозначается P_L , как [18]

$$P_L(\Psi; x, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \zeta [\Psi, \Phi(x', t)] G(x' - x) dx', \quad (13)$$

$$\varsigma[\Psi, \Phi(x, t)] = \delta[\Psi - \Phi(x, t)] \equiv \prod_{\alpha=1}^{N_s} \delta[\psi_\alpha - \phi_\alpha(x, t)], \quad (14)$$

где δ обозначает дельта-функцию и Ψ обозначает композиционную область скалярного массива. Значение $\varsigma[\Phi - \Psi(x, t)]$ это «мелкозернистая» плотность [19], и (13) уравнение означает что FDF является пространственно фильтрованным значением мелкозернистой плотности. Таким образом, P_L дает плотность в композиционном пространстве жидкости вдоль x взвешенную фильтром G . При условии положительного ядра фильтра, P_L имеет все свойства ФПВ [19].

Для дальнейших разработок, определим "условно отфильтрованное значение" переменной $Q(x, t)$ по

$$\langle Q(x, t) | \Psi \rangle_L = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} Q(x', t) \sigma[\Psi, \Phi(x', t)] G(x' - x) dx'}{P_L(\Psi; x, t)}, \quad (15)$$

где $\langle \alpha | \beta \rangle_L$ означает фильтрованное значение α обусловлено β . Уравнение (15) имеет свойства

$$(i) \text{ Для } Q(x, t) = c, \quad \langle Q(x, t) | \Psi \rangle_L = c, \quad (16)$$

$$(ii) \text{ Для } Q(x, t) \equiv \hat{Q}(\Phi(x, t)), \quad \langle Q(x, t) | \Psi \rangle_L = \hat{Q}(\Psi), \quad (17)$$

$$(iii) \text{ Интегриральное свойство: } \langle Q(x, t) | \Psi \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle Q(x, t) | \Psi \rangle_L P_L(\Psi; x, t) d\Psi, \quad (18)$$

где c это постоянная, и $Q(x, t) \equiv \hat{Q}(\Phi(x, t))$ означает случай, когда переменная Q может быть полностью описана композиционным переменным $\Phi(x, t)$. От этих свойств следует, что фильтрованное значение любой функции скалярной переменной (таких, как скорость реакции) получается интегрированием по композиционному пространству

$$\langle Q(x, t) \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{Q}(\Psi) P_L(\Psi; x, t) d\Psi. \quad (19)$$

Для того чтобы построить уравнение переноса для FDF, рассматривается производная по времени уравнения (13)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L(\Psi; x, t)}{\partial t} &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \phi_\alpha(x', t)}{\partial t} \frac{\partial \sigma[\Psi, \Phi(x', t)]}{\partial \psi_\alpha} \times G(x' - x) dx' = \\ &= - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \phi_\alpha(x', t)}{\partial t} \times \sigma[\Psi, \Phi(x', t)] G(x' - x) dx' \end{aligned} \quad (20)$$

В комбинации с уравнением (15), получается

$$\frac{\partial P_L(\Psi; x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} \right| \Psi \right]_L P_L(\Psi; x, t). \quad (21)$$

Подставляя (3) в уравнение (21) получим:

$$\frac{\partial P_L(\Psi; x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\{ \left[\left\langle \frac{\partial u_i \phi_\alpha}{\partial x_i} \right| \Psi \right]_L + \left\langle \frac{\partial J_i^\alpha}{\partial x_i} \right| \Psi \right]_L - \langle \hat{\omega}(\Phi) | \Psi \rangle_L \right\} P_L(\Psi; x, t) \quad (22)$$

в котором конвективный член может быть представлен в виде

$$\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{\partial u_i \phi_\alpha}{\partial x_i} \right| \Psi \right]_L P_L(\Psi; x, t) = \frac{\partial \langle u_i | \Psi \rangle_L}{\partial x_i} P_L(\Psi; x, t) \quad (23)$$

Незамкнутый характер конвекции обозначается обусловленным фильтрованным значением скорости, который далее разлагается на разрешенный и подсеточный компоненты

$$\langle u_i | \Psi \rangle_L P_L = \langle u_i \rangle_L P_L + \langle u_i | \Psi \rangle_L - \langle u_i \rangle_L | P_L, \quad (24)$$

так что уравнение (21) может быть выражено следующим образом

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_L P_L}{\partial x_i} = - \frac{\partial [\langle u_i | \Psi \rangle_L - \langle u_i \rangle] P_L}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{\partial J_i^\alpha}{\partial x_i} \middle| \Psi \right\rangle_L P_L \right] - \frac{\partial [\hat{\omega}_\alpha(\Psi) P_L]}{\partial \psi_\alpha}. \quad (25)$$

Это точное уравнение переноса для FDF и похож на уравнение, который был представлен Гао и О'Брайен [20]. Последний член в правой части этого уравнения за счет химической реакции и находится в замкнутом виде. Второе слагаемое в левой части представляет отфильтрованную конвекцию FDF в физическом пространстве, и также замкнуто (известно что при условии $\langle u_i \rangle_L$). Незамкнутые члены связаны с первым слагаемым в правой части, обозначающей последствий неразрешенного подсеточного масштаба конвекции, и вторым слагаемым в правой части, представляющий влияние молекулярной диффузии. Подсеточный конвективный поток моделируется

$$[\langle u_i | \Psi \rangle_L - \langle u_i \rangle_L] P_L = -\Gamma_t \frac{\partial P_L}{\partial x_i}. \quad (26)$$

Преимущество разложения (уравнение (24)) и последующего моделирования (уравнение (26)) в том, что они дают результаты, аналогичные тому, что в традиционном LES для первого момента FDF.

Первыми моментами согласно уравнениям (24) и (26) являются

$$\langle u_i \phi_\alpha \rangle_L = \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L + [\langle u_i \phi_\alpha \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L] \quad (27)$$

$$[\langle u_i \phi_\alpha \rangle_L - \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L] = -\Gamma_t \frac{\partial \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial x_i} \quad (28)$$

Слагаемые в квадратных скобках в уравнении (27) - обобщенный скалярный поток в виде рассмотренных в традиционном LES [21]. Следовательно, уравнение (28) становится тождественным уравнению (12).

Замыкание для обусловленной подсеточной диффузии основано на линейной среднеквадратичной оценки (LMSE) [22] модели, которая также известна как IEM замыкание [23]. Модель включает разложение диффузационного члена в уравнении (25),

$$\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \right) \middle| \Psi \right\rangle_L P_L \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial P_L}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left[\left\langle \Gamma \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial x_i} \middle| \Psi \right\rangle_L P_L \right]. \quad (29)$$

Первое слагаемое в правой части этого уравнения означает эффекты молекулярной диффузии в пространственном перемещении FDF. Второе слагаемое представляет собой диссипативную природу подсеточного скалярного смешивания. Модель среднеквадратичной оценки предполагает

$$\frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left[\left\langle \Gamma \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial x_i} \middle| \Psi \right\rangle_L P_L \right] = -\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\Omega_m (\psi_\alpha - \langle \psi_\alpha \rangle_L) P_L], \quad (30)$$

где Ω_m является "частотой смешивания в подсеточном масштабе". Эта частота может быть связана с коэффициентом подсеточной диффузии и длины фильтра: $\Omega_m = C_\Omega (\Gamma + \Gamma_t) / \Delta_G^2$. Второе значение уравнения (30) представляет собой выражение для общей подсеточной скалярной диссипации

$$\varepsilon_\alpha = 2\Gamma \left\langle \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \right\rangle_L = 2\Omega_m (\langle \phi_\alpha^2 \rangle_L - \langle \phi_\alpha \rangle_L^2), \quad (31)$$

Применяя полученные замыканиями (26) и (30), получаем смоделированное уравнение переноса для FDF

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} + \frac{\partial [\langle u_i \rangle_L P_L]}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\Gamma + \Gamma_t) \frac{\partial P_L}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\Omega_m (\psi_\alpha - \langle \phi_\alpha \rangle_L P_L)] - \frac{\partial [\hat{\omega}_\alpha(\Psi) P_L]}{\partial \psi_\alpha}. \quad (32)$$

Это уравнение может быть интегрировано чтобы получить уравнений переноса для моментов подсеточного масштаба. Уравнение для первого подсеточного момента, $\langle \phi_\alpha \rangle_L$, и обобщенная подсеточная дисперсия, $\sigma_\alpha = \langle \phi_{(\alpha)}^2 \rangle_L - \langle \phi_\alpha \rangle_L^2$ находятся

$$\frac{\partial \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_L \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\Gamma + \Gamma_t) \frac{\partial \langle \phi_\alpha \rangle_L}{\partial x_i} + \langle \omega_\alpha \rangle_L, \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle_L \sigma_\alpha}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\Gamma + \Gamma_t) \frac{\partial \sigma_\alpha}{\partial x_i} \right] - 2\Omega_m \sigma_\alpha \\ &+ 2(\Gamma + \Gamma_t) \left[\frac{\partial \langle \phi_{(\alpha)} \rangle_L}{\partial x_i} \frac{\partial \langle \phi_{(\alpha)} \rangle_L}{\partial x_i} \right] + 2(\langle \phi_{(\alpha)} \omega_{(\alpha)} \rangle_L - \langle \phi_{(\alpha)} \rangle_L \langle \omega_{(\alpha)} \rangle_L). \end{aligned} \quad (34)$$

5. Решение FDF методом Монте-Карло. Решение уравнения переноса для FDF предоставляет всю статистическую информацию относительно скалярной переменной $\Phi(x, t)$. Это уравнение может быть решено эффективно с помощью Лагранжевого метода Монте-Карло [24]. Преимущество этого метода хорошо известен тем что в нем особо не проявляется численная диффузия. Основой Лангранжевого решения уравнения переноса для FDF является принцип эквивалентных систем. Две системы с разными мгновенными значениями могут иметь идентичную статистику, который полностью удовлетворяет уравнение переноса для FDF. В Лагранжевом методе Монте-Карло каждая частица перемещается согласно определенным уравнениям. Эти частицы подвергаются движению за счет конвекции из-за фильтрованной средней скорости потока, и диффундируют за счет молекулярной и подсеточной диффузии. Главный диффузионный процесс представляется в стохастической форме и описывается следующим стохастическим дифференциальным уравнением (СДУ) [24, 25]

$$dX_i(t) = D_i(X_i(t), t)dt + E(X_i(t), t)dW_i(t), \quad (35)$$

где X_i Лагранжевое расположение стохастической частицы, D_i и E известные как коэффициенты “сноса” и “диффузии” соответственно, W_i означает процесс Винер-Леви.

$$E \equiv \sqrt{2(\Gamma + \Gamma_t)}, \quad D_i \equiv \langle u_i \rangle_L + \frac{\partial(\Gamma + \Gamma_t)}{\partial x_i} \quad (36)$$

Поэтому СДУ, которое определяет пространственное перемещение FDF, является

$$dX_i(t) = \left(\langle u_i \rangle_L + \frac{\partial(\Gamma + \Gamma_t)}{\partial x_i} \right) dt + \sqrt{2(\Gamma + \Gamma_t)} dW_i(t), \quad (37)$$

Композиционный состав частиц развивается одновременно благодаря действию подсеточного смешивания и реакции

$$\frac{d\phi_\alpha^+}{dt} = -\Omega_m \left(\phi_\alpha^+ - \langle \phi_\alpha \rangle_L \right) + \omega_\alpha, \quad (38)$$

где $\phi_\alpha^+ = \phi_\alpha(X_i(t), t)$ является скалярной величиной частицы с Лагранжевым вектором расположения X_i .

6. Результаты. Для того чтобы показать эффективность FDF модели, рассмотрена задача развивающегося по времени слоя смешивания. Этот слой состоит из двух параллельных потоков бегущих в противоположных направлениях с одинаковыми по абсолютной величине скоростями. Рассматривается реакция простого типа A + B → P, в которой предполагается константная скорость химической реакции и течение считается изотермической. Реагенты A и B вводятся в верхний и нижний потоках соответственно.

Переменные течения нормированы относительно эталонных величин. Этапонными величинами в задаче развивающегося по времени слоя смешивания являются величины свободного

потока и длина L_r , которая определяется как $\delta_{v0}/L_r = 2.83$, где δ_{v0} начальная толщина завихренности. Эталонные величины определяют число Рейнольдса $Re = U_r L_r / \nu$. Скорость химической реакции параметризуется с помощью числа Дёмклера $Da = K/(U_r/L_r)$.

Проведены DNS и LES расчеты. В методе DNS используется полностью конечно-разностный подход. Процедура в LES основана на методе Монте-Карло для решения уравнения переноса FDF, а фильтрованные гидродинамические переменные решаются конечно-разностным методом. Для 2D DNS расчета максимальным разрешением сетки является 433×577 точек с $Re = 500$ и $Da = 2$. В случае 3D DNS, расчет на сетке с количеством узлов $217 \times 289 \times 133$ точек с $Re = 400$ и $Da = 1$.

FDF и LES-FD расчеты проводились на более грубой сетке с размером 74×98 для 2D случая, и $82 \times 108 \times 64$ точек для 3D. Для сравнения полученных результатов, DNS данные фильтруются следующей функцией фильтра

$$G = (x' - x) = \prod_{i=1}^{N_D} \tilde{G}(x'_i - x_i),$$

$$\tilde{G}(x'_i - x_i) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_G} & |x'_i - x_i| \leq \frac{\Delta_G}{2} \\ 0 & |x'_i - x_i| > \frac{\Delta_G}{2} \end{cases} \quad (39)$$

в которой N_D обозначает размерность области.

Чтобы показать консистенцию FDF подхода и сходимость схемы Монте-Карло, результаты LES нереагирующих течений полученные с помощью FDF и LES-FD сравниваются. Так как точность метода конечных разностей хорошо исследована, такой сравнительный анализ дает возможность хорошо оценить производительность метода Монте-Карло.

На рисунке 1 представлены результаты LES для развивающегося по времени слоя смешивания, полученные с помощью FDF и LES-FD. Эти рисунки представляют простую визуальную наглядность консистенции FDF с помощью результатов полученных методом частиц в соответствии с результатами полученных с помощью LES-FD. В действительности результаты полученные методом Монте-Карло в какой-то мере более привлекательные, так как содержат меньше численную диффузию по сравнению с результатами LES-FD.

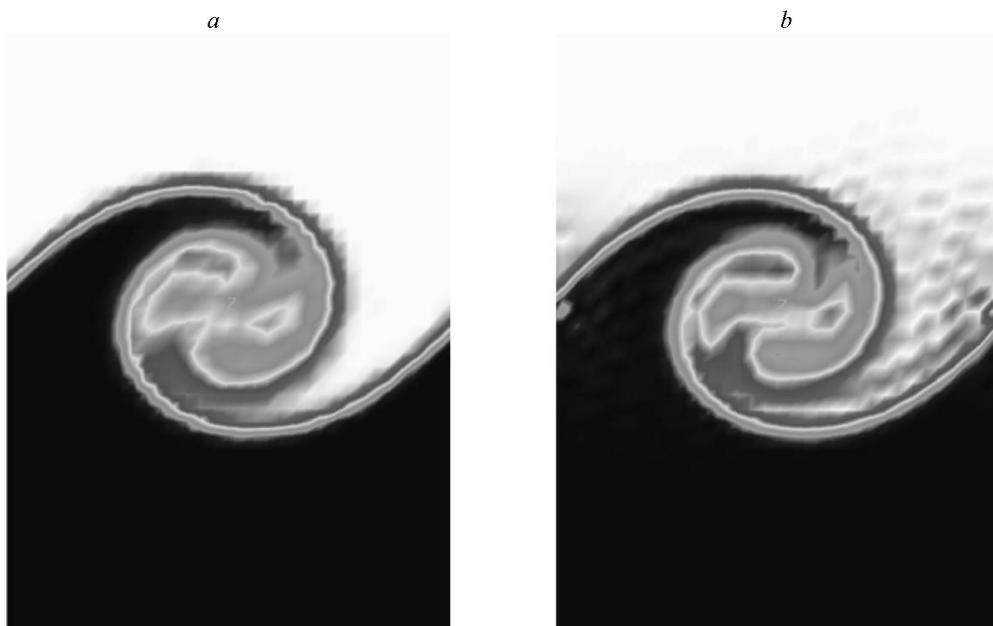


Рисунок 1 – Контур распределения фильтрованного скалярного поля: *a* – FDF и *b* – LES-FD

Для двумерного моделирования, значения фильтрованной массовой доли полученные методом Монте-Карло, согласуются с решением полученным с помощью метода конечных разностей. Это проиллюстрировано на рисунке 2, в котором показан Точечный график сравнения отфильтрованных значений скаляра полученных с помощью FDF и LES-FD.

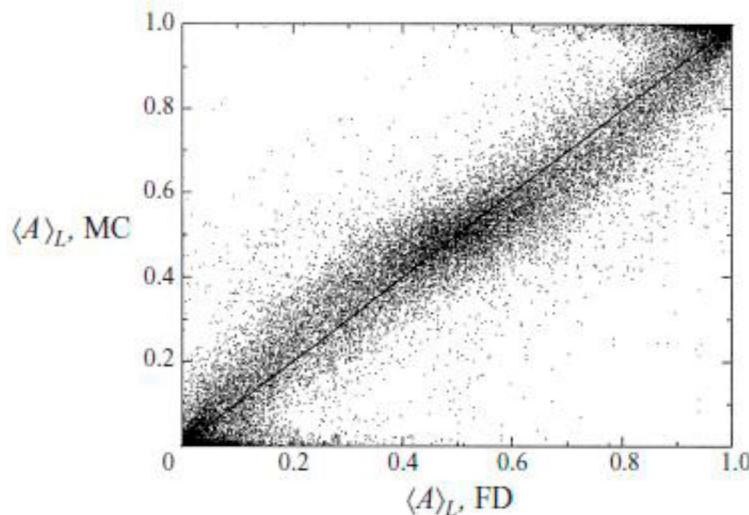


Рисунок 2 – Точечный график сравнения отфильтрованных значений скаляра полученных с помощью FDF и LES-FD

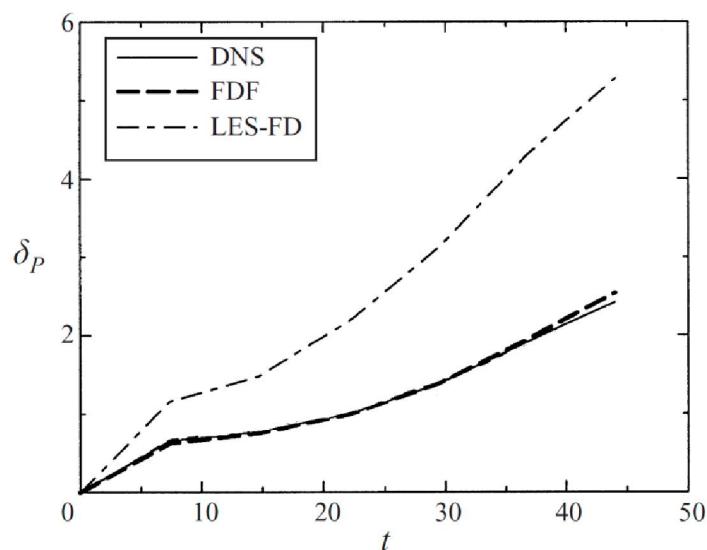


Рисунок 3 – Изменение массовой доли конечного продукта со временем

Преимущество FDF подхода над традиционным LES-FD проявляется особенно в реагирующих течениях. Такая неконсистенция метода LES-FD, которая стимулирует использование FDF, проиллюстрировано на рисунке 3, где показано изменение массовой доли конечного продукта со временем. Где также результаты LES расчетов сравниваются с данными DNS. По сравнению с LES-FD результаты LES показывают очень близкую согласованность с результатами DNS.

6. Заключение. Основной целью этой работы является исследование методологии “фильтрованная функция плотности” для моделирования крупных вихрей турбулентных реагирующих течений. Показано что FDF является мощным инструментом при моделировании реагирующих течений. Этот метод похож на метод функция плотности вероятности (PDF), который используется в подходе Рейнольдса. Здесь FDF используется для обработки скалярных величин потока. Здесь так же как в методах PDF, эффект химических реакций получаются в замкнутом виде.

Смоделированное уравнение переноса для FDF решается численно Лагранжевым методом Монте-Карло. Показано что Лагранжевый метод Монте-Карло по сравнению с традиционным методом конечных разностей, хорошо подавляет эффект численной диффузии. Этот подход применен для LES задачи развивающегося по времени слоя смешивания. Полученные результаты сравниваются с результатами традиционного метода моделирования крупных методов, где влияния флуктуации подсеточного масштаба пренебрегаются, и с данными прямого численного моделирования (DNS) течения с идентичными значениями физических параметров. Консистенция FDF подхода и сходимость схемы Монте-Карло показываются с помощью сравнений с результатами LES-FD нереагирующих течений. Преимущество FDF над LES-FD проявляется при проведении сравнительного анализа с данными DNS. Показано что эффекты флуктуации подсеточного масштаба имеют большое влияние на решение фильтрованной скорости химической реакции. Таким образом, моделирование реагирующих турбулентных течений с помощью FDF имеет большую перспективу в будущем.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Libby, P.A., Williams, F.A. (Eds): *Turbulent Reacting Flows*, Academic Press, London, UK, chap. 5, pp. 185–218, 1994.
- [2] Jones, W. P., “Turbulence Modeling and Numerical Solution Methods for Variable Density and Combusting Flows”, in “*Turbulent Reacting Flows*” (P. A. Libby and F. A. Williams, Eds.) pp. 309–374, Academic Press, 1994.
- [3] Givi, P. 1994 Spectral and random vortex methods in turbulent reacting flows. In *Turbulent Reacting Flows* (ed. P. A. Libby & F. A. Williams), chap. 8, pp. 475–572. Academic.
- [4] Correa, S.M., “A Review of NO_x Formation Under Gas-Turbine Combustion Conditions,” *Combust. Sci. Technol.*, vol. 87, pp. 329–362, 1992.
- [5] Menter F.R. Methoden, Möglichkeiten und Grenzen numerischer Stromungsberechnungen. Numet. Erlangen, 2002.
- [6] R. S. Rogallo and P. Moin, “Numerical simulation of turbulent flow,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* 16, 99 1984.
- [7] Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads, Lecture Notes in Physics, edited by J. L. Lumley, Springer, New York, 1990, Vol. 357.
- [8] Givi, P. 1989 Model free simulations of turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* 15, 1–107.
- [9] Madnia, C. K. & Givi, P. 1993 Direct numerical simulation and large eddy simulation of reacting homogeneous turbulence. In *Large Eddy Simulations of Complex Engineering and Geophysical Flows* (ed. B. Galperin & S. A. Orszag), chap. 15, pp. 315–346. Cambridge University Press.
- [10] S. B. Pope. Computations of turbulent combustion: Progress and challenges. *Proc. Combust. Inst.*, 23:591–612, 1990.
- [11] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R. T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA, second edition, 2011.
- [12] J. Janicka and A. Sadiki. Large eddy simulation of turbulent combustion systems. *Proc. Combust. Inst.*, 30:537–547, 2005.
- [13] P. Givi. Filtered density function for subgrid scale modeling of turbulent combustion. *AIAA J.*, 44(1):16–23, 2006.
- [14] A. A. Aldama, “Filtering techniques for turbulent flow simulations,” *Lecture Notes in Engineering* (Springer, New York, 1990), Vol. 49.
- [15] J. H. Ferziger, “Higher level simulations of turbulent flows,” Stanford University Report No. TF-16, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford, California, 1981.
- [16] T. A. Zang and U. Piomelli, “Large eddy simulation of transitional flow,” in Ref. 11, Chap. 11, pp. 209–227.
- [17] T. M. Elidson, “Numerical simulation of the turbulent Rayleigh-Bénard problem using subgrid modelling,” *J. Fluid Mech.* 158, 245 (1985).
- [18] S. B. Pope, “Computations of turbulent combustion: Progress and challenges,” in Proceedings of the 23rd Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990), pp. 591–612.
- [19] S. B. Pope, “PDF methods for turbulent reactive flows,” *Prog. Energy Combust. Sci.* 11, 119 (1985).
- [20] F. Gao and E. E. O’Brien, “A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows,” *Phys. Fluids A* 5, 1282 (1993).
- [21] M. Germano, “Turbulence: The filtering approach,” *J. Fluid Mech.* 238, 325 (1992).
- [22] C. Dopazo and E. E. O’Brien, “Statistical treatment of non-isothermal chemical reactions in turbulence,” *Combust. Sci. Technol.* 13, 99 (1976).
- [23] R. Borghi, “Turbulent combustion modeling,” *Prog. Energy Combust. Sci.* 14, 245 (1988).
- [24] S. B. Pope, “Lagrangian PDF methods for turbulent flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* 26, 23 (1994).
- [25] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation, Methods of Solution and Applications* (Springer, New York, 1989).

REFERENCES

- [1] Libby, P.A., Williams, F.A. (Eds): *Turbulent Reacting Flows*, Academic Press, London, UK, chap. 5, pp. 185–218, 1994.
- [2] Jones, W. P., “Turbulence Modeling and Numerical Solution Methods for Variable Density and Combusting Flows”, in “*Turbulent Reacting Flows*” (P. A. Libby and F. A. Williams, Eds.) pp. 309–374, Academic Press, 1994.

- [3] Givi, P. 1994 Spectral and random vortex methods in turbulent reacting flows. In Turbulent Reacting Flows (ed. P. A. Libby & F. A. Williams), chap. 8, pp. 475–572. Academic.
- [4] Correa, S.M., "A Review of NO_x Formation Under Gas-Turbine Combustion Conditions," *Combust. Sci. Technol.*, vol. 87, pp. 329–362, 1992.
- [5] Menter F.R. Methoden, Moeglichkeiten und Grenzen numerischer Stroemungsberechnungen. Numet. Erlangen, 2002.
- [6] R. S. Rogallo and P. Moin, "Numerical simulation of turbulent flow," *Annu. Rev. Fluid Mech.* 16, 99 1984.
- [7] Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads, Lecture Notes in Physics, edited by J. L. Lumley, Springer, New York, 1990, Vol. 357.
- [8] Givi, P. 1989 Model free simulations of turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* 15, 1–107.
- [9] Madnia, C. K. & Givi, P. 1993 Direct numerical simulation and large eddy simulation of reacting homogeneous turbulence. In Large Eddy Simulations of Complex Engineering and Geophysical Flows (ed. B. Galperin & S. A. Orszag), chap. 15, pp. 315–346. Cambridge University Press.
- [10] S. B. Pope. Computations of turbulent combustion: Progress and challenges. *Proc. Combust. Inst.*, 23:591–612, 1990.
- [11] T. Poinsot and D. Veynante. Theoretical and Numerical Combustion. R. T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA, second edition, 2011.
- [12] J. Janicka and A. Sadiki. Large eddy simulation of turbulent combustion systems. *Proc. Combust. Inst.*, 30:537–547, 2005.
- [13] P. Givi. Filtered density function for subgrid scale modeling of turbulent combustion. *AIAA J.*, 44(1):16–23, 2006.
- [14] A. A. Aldama, "Filtering techniques for turbulent flow simulations," *Lecture Notes in Engineering* (Springer, New York, 1990), Vol. 49.
- [15] J. H. Ferziger, "Higher level simulations of turbulent flows," Stanford University Report No. TF-16, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford, California, 1981.
- [16] T. A. Zang and U. Piomelli, "Large eddy simulation of transitional flow," in Ref. 11, Chap. 11, pp. 209–227.
- [17] T. M. Eidsom, "Numerical simulation of the turbulent Rayleigh-Benard problem using subgrid modelling," *J. Fluid Mech.* 158, 245 (1985).
- [18] S. B. Pope, "Computations of turbulent combustion: Progress and challenges," in Proceedings of the 23rd Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990), pp. 591–612.
- [19] S. B. Pope, "PDF methods for turbulent reactive flows," *Prog. Energy Combust. Sci.* 11, 119 (1985).
- [20] F. Gao and E. E. O'Brien, "A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows," *Phys. Fluids A* 5, 1282 (1993).
- [21] M. Germano, "Turbulence: The filtering approach," *J. Fluid Mech.* 238, 325 (1992).
- [22] C. Dopazo and E. E. O'Brien, "Statistical treatment of non-isothermal chemical reactions in turbulence," *Combust. Sci. Technol.* 13, 99 (1976).
- [23] R. Borghi, "Turbulent combustion modeling," *Prog. Energy Combust. Sci.* 14, 245 (1988).
- [24] S. B. Pope, "Lagrangian PDF methods for turbulent flows," *Annu. Rev. Fluid Mech.* 26, 23 (1994).
- [25] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation, Methods of Solution and Applications* (Springer, New York, 1989).

ХИМИЯЛЫҚ ЭСЕРЛЕСУШ ТУРБУЛЕНТТИ АҒЫНДАРДЫҢ ҮЛКЕН ҚҰЙЫНДАРДЫ МОДЕЛЬДЕУ ӘДІСІ ҮШИН ФИЛЬТРЛЕНГЕН ТЫҒЫЗДЫҚ ФУНКЦИЯСЫН ЗЕРТТЕУ

М. Қ. Інкәрбеков, А. Қалтаев

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

Тірек сөзлер: турбуленттік, фильтрленген тығыздық функциясы, үлкен құйындарды модельдеу, Монте-Карло әдісі, тұра сандық модельдеу.

Аннотация. Жұмыста "фильтрленген тығыздық функциясы" (FDF) әдістемесі зерттелген және сығылмайтын эсерлесуши турбулентті ағындардың үлкен құйындарды модельдеу (LES) әдісіне колданылған. Бұл әдістемеде химиялық реакциялардың эсері тұйыкталған түрде келеді, ал торасты шамалардың эсері және конвекция модельденеді. FDF тасымал тендеуі Лагранждық Монте-Карло әдісі арқылы сандық шешіледі. FDF тәсілінің консистенциясы, және оның Монте-Карло шешімінің жинақтылығы тұра сандық модельдеу әдісінің нәтижелерімен салыстыру арқылы көрсетіледі. FDF арқылы алынған нәтижелер DNS мәліметтерімен ең жақын сыйбайластық көрсетеді.

Поступила 07.07.2015 г.