«Оптика атмосферы и океана», **14,** № 10 (2001)

УДК 551.511.61

В.Д. Перминов

Верификация Лагранжевой стохастической модели распространения дымовых струй в турбулентной атмосфере

Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского, г. Жуковский Московской обл.

Поступила в редакцию 17.09.2001 г.

Предлагается статистический численный алгоритм для решения задачи распространения дымовых струй в турбулентной атмосфере на основе Лагранжевой модели. Алгоритм рассчитан на применение массово-параллельных компьютеров и реализован в системе MPI. Верификация работоспособности модели и предложенного метода была проведена для задачи турбулентной дисперсии возмущений от линейного источника тепла.

Введение

Известно, что турбулентные течения часто встречаются в природе и, в частности, в атмосфере. Почти столь же хорошо известно, что все построенные модели описания таких течений значительно сложнее аналогичных моделей для ламинарных течений как по уровню делаемых при их выводе предположений, так и по трудоемкости решений получаемых уравнений. Справедливость этих общих замечаний отчетливо просматривается и на примере истории исследования задачи о распространении дыма в турбулентной атмосфере. Основными особенностями этой практически важной задачи можно считать различие температуры струи и атмосферы, порождающее интенсивное смешение, и химические реакции, которые протекают в струе. Таблица, заимствованная из работы [1] (там же можно найти и достаточно подробный обзор литературы), дает ясное представление о различных подходах к решению этой задачи, их достоинствах и недостатках и областях применения.

Прежде всего, интересно отметить, что автомодельные решения, основанные на упрощенном учете всех факторов, в сочетании с простейшими геометрическими моделями дисперсии до сих пор составляют основу инженерных методов расчета концентраций компонентов дымовых струй в окрестности их источников [2].

Исследования распространения струй с помощью осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса (сокращение RANS на рисунке и далее в тексте) используют упрощенные представления для членов уравнений, описывающих химические реакции компонентов струи и их смешение с атмосферой. Такой подход, так же как и автомодельные решения, позволяет получить только средние характеристики струи и часто порождает дополнительные параметры, которые невозможно измерить экспериментально.

В противоположность этим подходам Лагранжевы статистические модели – дисперсии (LDM) и турбулентности (LTM) – дают возможность получить не только средние, но и статистические характеристики струи. Лагранжевы модели дисперсии имитируют процессы в струе, но подразумевают, что поле основного течения известно, т.е. рассчитано другими методами или аппроксимировано. С помощью Лагранжевых моделей турбулентности все поле течения может быть рассчитано при различных зависимостях скорости ветра и температуры от высоты, которые, как известно, определяют режимы распространения дымовых струй. Важным достоинством этих моделей является возможность учета даже нелинейных химических реакций, происходящих в дымовой струе. Одна из таких моделей будет рассмотрена подробно в этой работе.

При прямом численном моделировании (DNS) и моделировании движения крупных вихрей (LES) непосредственно решаются уравнения Навье–Стокса. Однако в LES делаются дополнительные предположения о поведении мелкомасштабной турбулентности. Оба эти подхода характеризуются большими вычислительными затратами, ограничениями на числа Рейнольдса, Шмидта, Дамкелера и на форму и размеры рассматриваемой задачи и в силу этого в настоящее время применяются для получения решения простых задач, которые потом могут быть использованы как тестовые при верификации других моделей.

Различные методы решения задачи о распространении дымовых струй

Степень учета смешения и реакций	Точное Представление	–	LTM (реакции)	DNS
	Моделирование	–	LTM (смешение)	–
	Параметризация	Автомодельные решения	RANS LDM	LES
		Параметризация	Моделирование	Точное Представление
	Степень учета смешения и реакций течения в струе и атмосфере			

1. Описание модели

Лагранжева модель турбулентности, предложенная в [1], основана на линейных стохастических дифференциальных уравнениях для координат $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, скоростей $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ и потенциальной температуры θ газовых частиц:

$$\frac{d}{dt}\, x_i(t) = u_i(t),$$

$$\frac{d}{dt}\, u_i(t) = a_i + G_{ij}(u_j - <u_j>) + G_i(\theta - <\theta>) + b_{ij}\, \frac{dW_j}{dt}\ ,$$

$$\frac{d}{dt}\, \theta(t) = a_4 + G_{4j}(u_j - <u_j>) + G_4(\theta - <\theta>) + b_4\, \frac{dW_4}{dt}\ .$$

Детерминированные изменения скорости и потенциальной температуры частицы описываются первыми тремя слагаемыми в правых частях с неизвестными коэффициентами a_i, G_{ij}, G_i. Первый член отражает влияние градиентов в поле течения, второй и третий – различие в скорости и температуре между газовой частицей и средней скоростью и температурой потока в рассматриваемой точке соответственно. Последние слагаемые описывают влияние «стохастических сил». «Белый шум» dW_i/dt представляет собой гауссовский процесс с нулевым средним значением $\langle dW_i/dt \rangle = 0$ и некоррелированными значениями для разных моментов времени $\langle dW_i/dt(t_1)\ dW_j/dt(t_2) \rangle = \delta_{ij}\, \delta(t_1 - t_2)$. Последнее условие, записанное для $i = 4$, означает, что стохастические члены в уравнениях для скорости и температуры не порождают систематического влияния на движение частиц, если шаги по времени много больше характерного значения времени, введенного А.Н. Колмогоровым [3].

Для получения выражений для коэффициентов a_i, G_{ij}, G_i [1] используют следующую процедуру. С помощью выписанных уравнений получают транспортное уравнение Фоккера–Планка для плотности распределения вероятности $\Psi(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \theta)$. Умножая полученное уравнение на соответствующие комбинации $\mathbf{u}$ и θ и интегрируя правые и левые части, авторы приходят к системе уравнений для моментов плотности распределения вероятности, которые сопоставляют с RANS. Если при таком сопоставлении сделать следующие предположения: 1) справедливо приближение Буссинеска; 2) RANS замыкаются с помощью теорий [3] и [4] и 3) функциональный вид коэффициентов b_{ij} соответствует работе [5], то для коэффициентов модели имеем соотношения

$$(b^2)_{ij} = C_0\, q^2 \delta_{ij}/(2\tau);\ b_4 = C_1 <(\theta - <\theta>)^2>/(2\tau);$$

$$C_0 = (k_1 - 2)/3;\ C_1 = 2k_3 - 2k_4 - k_1;\ G_{ij} = -k_1\delta_{ij}/(4\tau);$$

$$G_i = \beta g \delta_{i3};\ G_{4i} = 0;\ G_4 = -(2k_3 - k_1)/(4\tau);$$

$$a_i = \nu\, \frac{\partial^2 \langle u_i \rangle}{\partial x_k \partial x_k} - \frac{\partial p}{\rho \partial x_i} - g\delta_{i3}\ (i = 1, 2, 3);\ a_4 = \alpha\, \frac{\partial^2 \langle \theta \rangle}{\partial x_k \partial x_k}\ ,$$

где ρ, p, ν, α, g – средние значения плотности и давления, коэффициенты кинематической вязкости и теплопроводности и ускорение свободного падения соответственно; $q^2 = <(u_i - <u_i>)\ (u_i - <u_i>)>$ – удвоенная кинетическая энергия турбулентных пульсаций; $\tau = q^2/(2\varepsilon)$ – время диссипации; ε – скорость диссипации этой энергии; β – коэффициент термического расширения; k_i – коэффициенты замыкания.

Такое определение коэффициентов приводит к тому, что стохастические дифференциальные уравнения модели зависят от функции τ, которая описывает процесс смешения дымовой струи с атмосферой. Согласно [6] эта функция может быть описана уравнением

$$\frac{d\tau}{dt} = (C_{\varepsilon 2} - 1) - (C_{\varepsilon 1} - 1) \times$$

$$\times\ \frac{2\tau}{q^2} \left[\begin{array}{l} - < (u_k - \langle u_k \rangle)\ (u_i - \langle u_i \rangle)\ \dfrac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_k} \\ + \beta g < (u_3 - \langle u_3 \rangle)(\theta - \langle \theta \rangle) \end{array} \right] .$$

С введением этого уравнения система уравнений для LTM становится замкнутой для заданных начальных и граничных условий, так как все величины, от которых зависят изменения характеристик газовых частиц (средние скорость и температура, ковариации этих величин и градиент давления), могут быть рассчитаны как средние (по Эйлеру) от соответствующих параметров газовых частиц [7].

2. Численный метод

Лагранжевы модели, по своей сути, ориентированы на применение статистических методов решения (методов Монте-Карло). В начальный момент времени задаются координаты и скорости N частиц в расчетной области. В последующие моменты времени эти частицы двигаются в соответствии с уравнениями модели и заданными граничными условиями. При больших значениях времени t мы должны получить решение стационарной задачи. Рассмотрим кратко основные особенности применяемого алгоритма для случая прямоугольной расчетной области.

1. Точность результатов, получаемых с помощью методов Монте-Карло, обычно пропорциональна $N^{-1/2}$ (N – число частиц). Это означает повышенные требования к памяти используемого компьютера и достаточно большое время решения задачи. Эти требования можно существенно ослабить, решая задачу на массово-параллельных компьютерах с разделенной памятью. При этом для распараллеливания алгоритма проще всего использовать разбиение расчетной области на несколько подобластей. Обмен между процессорами, в основном, сводится к передаче от одного процессора к другому тех частиц, которые покидают за временной шаг соответствующую подобласть.

2. На левой границе расчетной области должна быть задана функция распределения влетающих частиц по скоростям. Поскольку в рассматриваемых газодинамических задачах точный вид этой функции, как правило, неизвестен, то используют некоторый функциональный класс (например, локальное максвелловское распределение), параметры которого рассчитываются на основе дополнительной экспериментальной информации (например, скорости и температуры и их дисперсий) вдоль этой границы.

3. На верхней и нижней границах расчетной области должны быть заданы условия, отражающие характер взаимодействия газовых частиц с соответствующей этой границе поверхностью. Это может быть как поверхность Земли или экспериментальной установки, так и некоторая линия в потоке, по одну сторону от которой течение не

рассматривается. К сожалению, эти условия также неизвестны. Наиболее часто на этих границах принимают условие зеркального отражения, согласно которому частица, взаимодействуя с поверхностью, сохраняет неизменной тангенциальную компоненту импульса и меняет знак нормальной компоненты на противоположный.

4. В уравнение для времени диссипации турбулентных пульсаций τ входят производные компонентов вектора средней скорости по координатам. Поскольку компоненты вектора скорости вычисляются как среднее от соответствующих компонент скорости газовых частиц, находящихся в данный момент в рассматриваемой ячейке сетки, и, следовательно, содержат статистическую ошибку, то для корректного расчета производных приходится принимать специальные меры. Во-первых, для уменьшения статистической ошибки компоненты вектора скорости вычисляются как среднее значение для некоторого числа (порядка нескольких десятков) временных шагов. Во-вторых, перед вычислением производных решается задача о кубичном сплайне, который минимизирует значение сглаживающего функционала [8].

5. При решении стационарных задач методами статистического моделирования на основе корректно построенной модели проблемы задания начального приближения и устойчивости решения, как правило, отсутствуют.

6. Рассматриваемая Лагранжева модель содержит числовые параметры. Хотя эти параметры и подчиняются некоторым ограничениям, порождаемым математической формой и физическими особенностями модели, задача поиска оптимального набора этих параметров является одной из наиболее трудоемких составляющих процесса верификации работоспособности модели.

3. Описание тестовой задачи и обсуждение результатов

Для верификации модели и численного метода была выбрана работа [9], в которой экспериментально исследовалось распространение температурных возмущений в турбулентном пограничном слое. В аэродинамической трубе на некотором расстоянии $z = h = 60$ мм от шероховатой стенки устанавливалась проволока, по которой пропускался электрический ток. В нескольких сечениях вдоль по потоку измерялись две компоненты скорости и температура. Измерения показали, что градиент давления во всем поле течения равен нулю, а средняя скорость хорошо описывается формулой $u/u_* = 2{,}63 \ln(500z/h)$, где $u_* = 0{,}48$ м/с. Это течение рассчитывалось методом Монте-Карло на основе рассмотренной Лагранжевой модели. На левой границе прямоугольной расчетной области для влетающих частиц задавалась локально-максвелловская функция распределения по скоростям. При этом средняя скорость принималась равной измеренной, а множители в экспонентах определялись по измеренным значениям среднеквадратических отклонений компонент скорости от среднего значения. На верхней и нижней границах области задавалось условие зеркального отражения, а на правой границе – свободное условие: все вылетающие частицы исключались из рассмотрения. Расчеты проводились на массово-параллельном компьютере Института математического моделирования РАН.

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными в двух сечениях $x/h = 2{,}5$ и 15 представлено на рис. 1 и 2 в виде зависимостей u/u_* и θ/θ_* от z/h. Видно, что результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными вдали от верхней и нижней границ. Около нижней поверхности как следствие некорректных граничных условий формируется своеобразный «пограничный слой», в котором скорость потока возрастает. Отличное от экспериментально установленного поведение зависимости $\theta/\theta_*(z/h)$ (см. рис. 2) вблизи стенки при $x/h = 15$ объясняется двумя факторами. Во-первых, в этом сечении уже заметно влияние вычислительного «пограничного слоя» на стенке, во-вторых, обмен энергией на стенке в условиях эксперимента и расчета был различным: условие зеркального отражения подразумевает отсутствие обмена, в то время как в эксперименте использовалась поверхность с конечной теплопроводностью.

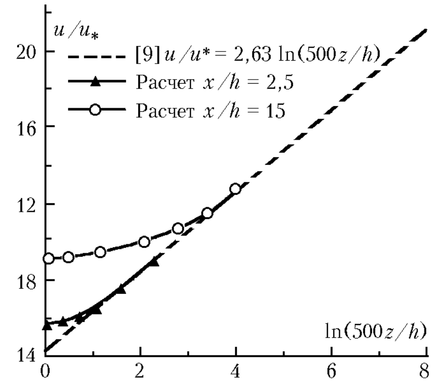

Рис. 1. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными (скорость потока)

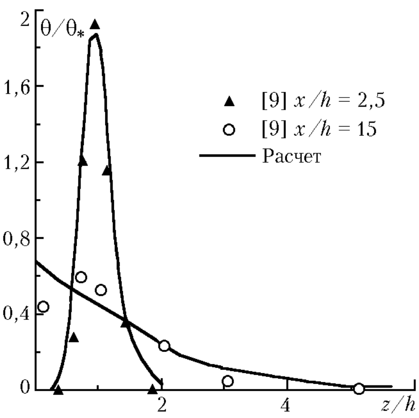

Рис. 2. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными (температура потока)

Заметим, что вычислительный «пограничный слой» становится тоньше, если вместо условия зеркального отражения использовать более физически оправданное условие отражения с максвелловской функцией распределения с нулевой средней скоростью.

Выводы

Проведенное исследование показало:

1. Рассмотренная Лагранжева стохастическая модель может быть использована для решения задач распространения струй дымовых труб в турбулентной атмосфере.

2. Показана работоспособность предложенного численного алгоритма статистического моделирования.

3. При решении практических задач необходимо принимать во внимание наличие вычислительного «погранично-

го слоя» около поверхности земли и принять меры для его уменьшения.

Работа выполнена при поддержке Государственной программы поддержки ведущих научных школ (код проекта 00-15-96069).

1. *Heinz S. and van Dop H.* Buoyant plume rise described by a Lagrangian turbulence model // Atmos. Environ. 1999. V. 33. № 33. P. 2031–2043.
2. http://www.lakes-environmental.com/
3. *Kolmogorov A.N.* Equations of turbulent motion of an incompressible fluid // Izvestiya Academii Nauk SSSR. 1942. Seriya Physika. V. 6. P. 56–58.
4. *Rotta J.C.* Statistische Theorie nichtgomogener Turbulentz // Zeitschrift für Physik. 1951. V. 129. P. 547–572.
5. *Van Dop H., Nieuwstadt F.T.M., Hunt J.C.R.* Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows // Phys. Fluids. 1985. V. 28. № 7. P. 1639–1653.
6. *Heinz S.* Time scales of stratified turbulent flows and relations between second-order closure parameters and flow numbers // Phys. Fluids. 1998. V. 10. № 4. P. 958–973.
7. *Pope S.B.* PDF methods for turbulent reactive flows // Progress in energy combustion science. 1985. V. 11. P. 119–192.
8. *Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж.* Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972.
9. *Raupach M.R., Legg B.J.* Turbulent dispersion from an elevated line source: measurements of wind concentration moments and budgets // J. Fluid Mech. 1983. V. 136. № 1. P. 111–137.

V.D. Perminov. **Verification of the Lagrangian stochastic model of the smoke plume propagation in the turbulent atmosphere**.

In this paper a numerical method for solution of the problem of the smoke plume propagation in the turbulent atmosphere on the basis of the Lagrangian model is proposed. The algorithm was adapted to massive parallel computers and was realised within the framework of the MPI system. A verification of the model and numerical method efficiency has been carried out for the turbulent dispersion problem.