

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО РЕАГИРУЮЩЕГО ТЕЧЕНИЯ МЕТОДОМ КРУПНЫХ ВИХРЕЙ, СОВМЕЩЕННЫМ С МЕТОДОМ МОНТЕ КАРЛО ДЛЯ РАСЧЕТА ПОДСЕТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ*

Р. Р. Тухватуллина¹, В. С. Иванов², С. М. Фролов³, Б. Басара⁴

Аннотация: Разработаны алгоритм и вычислительная программа для расчета сжимаемых турбулентных реагирующих течений комбинированным методом крупных вихрей с замыканием подсеточных турбулентных потоков с помощью отфильтрованной совместной функции плотности вероятностей скорости и скалярных переменных (Large Eddy Simulation / Velocity-Scalar-Mass-Filtered Density Function, LES/VSMFDF). Подсеточные турбулентные напряжения и подсеточные потоки массы и энергии моделируются с помощью взаимодействующих частиц, отражающих мгновенные локальные термодинамические состояния потока. Вычислительная программа использована для решения трех задач: (1) об эволюционирующем изотермическом слое смешения; (2) о слое смешения с химическими превращениями; (3) об обтекании квадратного цилиндра воздушным потоком. Проведено сравнение полученных результатов с прямым численным моделированием (Direct Numerical Simulation, DNS) и с моделированием по методу крупных вихрей с замыканием подсеточных турбулентных напряжений по Смагоринскому (LES / Smagorinsky Subgrid Model, LES/SSM). В задаче об обтекании квадратного цилиндра турбулентным воздушным потоком с числом Рейнольдса 22 000 проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными как по полям средней и пульсационной скорости, так и по коэффициенту сопротивления.

Ключевые слова: турбулентное течение; отфильтрованная функция плотности вероятности; метод крупных вихрей; метод Монте Карло; слой смешения

DOI: 10.30826/CE18110209

1 Введение

Метод моделирования крупных вихрей позволяет точно рассчитывать крупномасштабную турбулентность, а мелкомасштабная турбулентность моделируется как подсеточная турбулентность с использованием полуэмпирических соображений. Такой подход имеет физическое обоснование, поскольку на крупные масштабы турбулентного спектра высокочастотная часть (мелкомасштабная турбулентность) почти не влияет [1].

В основе метода LES лежит процедура фильтрации законов сохранения массы, количества движения и энергии. В результате фильтрации в уравнениях возникают слагаемые, характеризующие подсеточную турбулентность, которые необходимо дополнительно определить. В настоящее время метод отфильтрованной функции плотности ве-

роятности [2, 3] (Filtered Density Function, FDF) и ее разновидности (VFDF, Velocity Filtered Density Function; VSFDF, Velocity-Scalar Filtered Density Function; VSMFDF) рассматриваются как наиболее эффективные методы для замыкания LES, особенно в задачах турбулентного горения [3–7].

Фундаментальные свойства FDF заключаются в том, что она позволяет учитывать мелкомасштабную турбулентность вероятностным образом. Формализм FDF эффективно замыкает источники, описывающие химические реакции; разновидность VFDF [8] моделирует тензор подсеточных напряжений в инертном несжимаемом потоке; VSFDF [5] замыкает слагаемые, описывающие подсеточные напряжения и химические реакции в реагирующем несжимаемом потоке; наиболее общая формулировка VSMFDF [7] учитывает сжимаемость течения.

*Работа частично выполнена за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5.

¹Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, tukhvatullinarr@gmail.com

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ivanov.vls@gmail.com

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

⁴AVL LIST GmbH, Грац, Австрия, branislav.basara@avl.com

Цель данной работы — численная реализация метода LES/VSMFDF и проверка его применимости к многомерным задачам сжимаемых турбулентных реагирующих течений. Проведено численное моделирование эволюционирующего трехмерного слоя смешения, а также обтекания квадратного цилиндра турбулентным воздушным потоком при числе Рейнольдса 22 000 методом LES/VSMFDF. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными, а также с численными экспериментами, полученными методами DNS и LES/SSM с общепринятой подсеточной моделью Смагоринского [9]. Проведен анализ эффективности MPI (message passing interface) распараллеливания метода LES/VSMFDF.

2 Математическая постановка задачи

Рассмотрим течение сжимаемого реагирующего газа, состоящего из N компонентов. Течение характеризуется плотностью ρ , давлением p , скоростью $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$, энтальпией h и массовыми долями компонентов Y_α ($\alpha = \overline{1, N}$). Законы сохранения массы, количества движения, неразрывности компонентов ($\alpha = \overline{1, N}$) и энергии ($\alpha = N + 1$) имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} &= 0; \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} &= 0; \\ \frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \phi_\alpha}{\partial x_j} + \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} &= \rho S_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N+1}, \end{aligned} \right\} (1)$$

где $\phi_\alpha = Y_\alpha$ ($\alpha = \overline{1, N}$); $\phi_{N+1} = h$; τ_{ij} — компоненты тензора вязких напряжений; J_j^α — компоненты диффузионного потока массы ($\alpha = \overline{1, N}$); J_j^{N+1} — компоненты теплового потока за счет молекулярной теплопроводности; S_α — скорость химических превращений ($\alpha = \overline{1, N}$), S_{N+1} — скорость тепловыделения в результате химических превращений. Здесь и в дальнейшем предполагается суммирование по повторяющимся индексам.

Для удобства введем обозначение:

$$\phi = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N+1}],$$

где ϕ — формальный вектор скалярных переменных (массовые доли компонентов и энтальпия газа). Энтальпия многокомпонентного газа h определяется по соотношению:

$$h = \sum_{\alpha=1}^N h_\alpha \phi_\alpha.$$

Система уравнений (1) дополняется термическим и калорическим уравнениями состояния:

$$\left. \begin{aligned} p &= \rho R^0 T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{M_\alpha}; \\ h_\alpha &= h_\alpha^0 + \int_{T_0}^T c_{p\alpha}(T') dT'. \end{aligned} \right\} (2)$$

Здесь R^0 — универсальная газовая постоянная; M_α — молекулярная масса компонента α ; T и T_0 — текущая и начальная температуры газа соответственно; h_α^0 — энтальпия компонента α при температуре T_0 , включающая химическую часть; $c_{p\alpha}(T)$ — теплоемкость при постоянном давлении для компонента α (заданная функция температуры).

Компоненты тензора вязких напряжений и диффузии имеют следующий стандартный вид:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right); \quad J_j^\alpha = -\gamma_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j},$$

где μ — динамическая вязкость; γ_α — коэффициенты молекулярной диффузии ($\alpha = \overline{1, N}$) и коэффициент молекулярной теплопроводности ($\alpha = N + 1$).

В основе метода LES лежит процедура фильтрации (осреднения):

$$\langle f(\mathbf{r}, t) \rangle = \int_D f(\mathbf{r}', t) G(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \Delta) d\mathbf{r}', \quad (3)$$

где $G(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \Delta) \equiv G(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ — функция-фильтр с шириной фильтра Δ [7]; $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ — радиус-вектор в физическом пространстве; D — область решения, причем предполагается, что $\Delta \ll D$, а f может быть скалярной, векторной или тензорной функцией, определенной на D . Процедура фильтрации позволяет разделять вихри на «крупные» (больше размера Δ) и «мелкие» (меньше размера Δ). В дальнейшем будут также использоваться осреднение по Фавру $\overline{f(\mathbf{r}, t)} = \langle \rho f \rangle / \langle \rho \rangle$ и пульсационные составляющие $\delta f = f - \langle f \rangle$ и $f' = f - \tilde{f}$. Применение операции фильтрации (3) к уравнениям (1) приводит к следующей системе осредненных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{u}_i}{\partial x_i} &= 0; \\ \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} - \frac{\partial \langle \tau_{ij} \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \rho \rangle T_{ij}}{\partial x_j} &= 0; \\ \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{\phi}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{u}_i \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle J_i^\alpha \rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle \rho \rangle M_{\alpha i}}{\partial x_i} &= \langle \rho S_\alpha \rangle, \end{aligned} \right\} (4)$$

где T_{ij} — компоненты тензора подсеточных напряжений; $M_{\alpha i}$ — компоненты вектора подсеточной диффузии и теплопроводности, характеризующие мелкомасштабное течение:

$$T_{ij} = (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) ; M_{\alpha i} = (\widetilde{u_i \phi_\alpha} - \widetilde{u_i} \widetilde{\phi_\alpha}) . \quad (5)$$

Система уравнений (4) позволяет разрешать «крупные» вихри точно, а моделирование «мелких» вихрей и их взаимодействие с крупными вихрями описывается слагаемыми T_{ij} , $M_{\alpha i}$ и $\langle \rho S_\alpha \rangle$, которые необходимо дополнительно определить: обеспечить «замыкание».

Отфильтрованные уравнения состояния (2) имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} \langle p \rangle &= \langle \rho \rangle R^0 \widetilde{T} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\widetilde{Y}_\alpha}{M_\alpha} ; \\ \widetilde{h}_\alpha &= h_\alpha^0 + \int_{T_0}^{\widetilde{T}} c_{p\alpha}(T') dT' . \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

3 Отфильтрованная функция плотности вероятности VSMFDF

Для моделирования незамкнутых членов (5) рассмотрим отфильтрованную функцию плотности вероятности $P(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{r}, t)$, определенную следующим образом [3, 7]:

$$P(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{r}, t) = \int_D \rho(\mathbf{r}', t) \zeta(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{u}(\mathbf{r}', t), \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}', t)) G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d\mathbf{r}' , \quad (7)$$

где $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi})$ — пространство элементарных событий для $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\phi})$, а ζ — функция, построенная на основе дельта-функций δ :

$$\zeta(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}, t)) = \prod_{i=1}^3 \delta(v_i - u_i(\mathbf{r}, t)) \prod_{\alpha=1}^{N+1} \delta(\psi_\alpha - \phi_\alpha(\mathbf{r}, t)) .$$

Эволюция функции (7) в пространстве и времени описывается уравнением переноса, полученным в [7]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial v_i P}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left\langle \frac{1}{\rho(\boldsymbol{\phi})} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right|_{\boldsymbol{\psi}, \mathbf{v}} \right] P + \\ &+ \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{1}{\rho(\boldsymbol{\phi})} \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} \right|_{\boldsymbol{\psi}, \mathbf{v}} \right] P - \\ - \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left\langle \frac{1}{\rho(\boldsymbol{\phi})} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right|_{\boldsymbol{\psi}, \mathbf{v}} \right] P &- \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha(\boldsymbol{\psi}) P] . \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь операция $\langle \cdot \rangle$ означает условно отфильтрованные значения:

$$\langle f |_{\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}} \rangle = \frac{\int_D \rho(\mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}', t) \zeta(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{u}(\mathbf{r}', t), \boldsymbol{\phi}(\mathbf{r}', t)) G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d\mathbf{r}'}{P(\mathbf{v}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{r}, t)} .$$

Уравнения типа (8) часто решают статистическим методом Монте Карло, используя частицы, отображающие мгновенные локальные термодимические состояния потока. Каждая частица несет информацию о положении $\mathbf{X}^+(t)$, скорости $\mathbf{U}^+(t)$ и других свойствах (например, $\Phi_\alpha^+(t)$). В этом случае уравнение (8) моделируют системой стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) движения всех частиц в области D с учетом их взаимодействия друг с другом через потоки массы, количества движения и энергии [7].

В данной работе в отличие от [7] мы, во-первых, рассчитываем не мгновенную скорость частиц \mathbf{U}^+ , а ее пульсационную составляющую \mathbf{U}' , и, во-вторых, рассчитываем не мгновенные значения скалярных величин Φ_α^+ , а только их пульсационные Φ'_α и химические составляющие $\Phi_\alpha^{\text{chem}}$:

$$\left. \begin{aligned} dX_i^+ &= dU_i^+ dt + \sqrt{\frac{2\mu}{\rho(\Phi^+)}} dW_i^X ; \\ dU_i^+ &= G_{ij} (U_j^+ - \widetilde{u}_j) dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} dW_i^U + \\ &+ \sqrt{\frac{2\mu}{\rho(\Phi^+)}} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} dW_j^X ; \\ d(\Phi'_\alpha + \Phi_\alpha^{\text{chem}}) &= -C_\alpha \omega \Phi'_\alpha dt + S_\alpha(\Phi^+) dt . \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Здесь $i = \overline{1, 3}$; $\alpha = \overline{1, N+1}$; \mathbf{X}^+ , \mathbf{U}^+ , Φ_α^+ , $\Phi_\alpha^{\text{chem}}$ — случайные процессы; dW^X и dW^U — Винеровский процесс (броуновское движение) в физическом пространстве и в пространстве скоростей соответственно; $\omega = \varepsilon/k$ — подсеточная частота турбулентных пульсаций; $\varepsilon = C_\varepsilon (k^{3/2}/\Delta)$ — подсеточная скорость диссипации; $k = T_{ii}/2$ — подсеточная кинетическая энергия; константы $C_0 = 2,1, C_\varepsilon = 1$ и $C_\alpha = 1$ устанавливаются такими же, как в [7]; коэффициент G_{ij} определяется по соотношению:

$$G_{ij} = -\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \delta_{ij} .$$

Полные скорость и скалярные составляющие частицы могут быть рассчитаны через соотношения $\mathbf{U}^+ = \widetilde{\mathbf{u}} + \mathbf{U}'$ и $\Phi_\alpha^+ = \Phi'_\alpha + \Phi_\alpha^{\text{chem}} + \widetilde{\phi}_\alpha$, где $\widetilde{\mathbf{u}}$ и $\widetilde{\phi}_\alpha$ — решения системы уравнений (4), а \mathbf{U}' и $\Phi'_\alpha + \Phi_\alpha^{\text{chem}}$ — решения СДУ (9).

4 Численный алгоритм

Численный алгоритм метода LES/VSMFDF содержит следующие основные этапы:

1. Устанавливаются начальные условия для средних значений переменных $\langle \rho \rangle$, $\langle p \rangle$, $\tilde{\phi}$ и $\tilde{\mathbf{u}}$, а также для свойств частиц \mathbf{X}^+ , \mathbf{U}' и $\Phi' + \Phi^{\text{chem}}$.
2. Для каждой частицы явно решается система СДУ (9) методом Эйлера–Муриаммы (см. приложение А), чтобы получить свойства, определенные на частицах, на новом временном слое $\widehat{\mathbf{X}}^+$, $\widehat{\mathbf{U}}'$ и $\widehat{\Phi}' + \widehat{\Phi}^{\text{chem}}$.
3. Система уравнений (4) замыкается на основе статистической информации, полученной в результате осреднения по ансамблю частиц. В каждой расчетной ячейке соотношения (5) представляются в следующем дискретном виде:

$$\begin{aligned} \widetilde{gf} - \widetilde{g}\widetilde{f} &\approx \\ &\approx \frac{1}{N_E} \sum_{k \in \Delta_E} (g^k - \langle g \rangle_E) (f^k - \langle f \rangle_E), \quad (10) \end{aligned}$$

где $f = \tilde{f} + f'$ и $g = \tilde{g} + g'$ — скалярные, векторные или тензорные функции, определенные в области решения; f^k и g^k — их значения на k -й частице.

Отметим, что в (10) сумма берется по всем частицам в рассматриваемой расчетной ячейке, N_E — число частиц в ячейке, а $\langle f \rangle_E \equiv (1/N_E) \sum_{k \in \Delta_E} f^k$ — среднее значение функции f в ячейке. Таким образом, здесь при осреднении используется неявный фильтр — расчетная ячейка с характерным размером фильтра $\Delta = \sqrt[3]{V}$, где V — объем ячейки. При стремлении объема ячейки к нулю и числа частиц к бесконечности осреднение переменной по ансамблю частиц стремится к точному отфильтрованному значению.

4. Система уравнений (4) решается методом конечных объемов для получения средних значений переменных на новом временном слое $\langle \widehat{\rho} \rangle$, $\langle \widehat{p} \rangle$, $\widehat{\mathbf{u}}$ и $\widehat{\phi}$. Потoki на гранях расчетных ячеек аппрокимируются стандартными методами направленной разности или центральной разности в зависимости от решаемого уравнения. По времени система уравнений дискретизируется неявно методом Эйлера первого порядка, за исключением слагаемых (5), которые рассчитываются на старом временном слое.
5. Переход к п. 2.

5 Результаты и их обсуждение

Алгоритм LES/VSMFDF, описанный в разд. 4, реализован в виде вычислительной программы, решающей уравнения (4)–(6) методом конечных объемов и уравнения (9) методом Монте Карло для получения замыкающих соотношений (5). Вычислительный код реализован на основе MPI-технологий для распараллеливания расчета. Разработанная вычислительная программа использовалась для решения трех задач: (1) об эволюционирующем слое смешения между двумя потоками химически инертных газов; (2) об эволюционирующем слое смешения между двумя потоками химически реагирующих газов; (3) об обтекании квадратного цилиндра воздушным потоком. Для проверки метода проведено сравнение полученных результатов расчетов с результатами, полученными DNS, и результатами, полученными методом LES с общепринятым замыканием SSM [9]. Методом DNS решалась исходная система уравнений (1) на очень мелкой сетке, позволяющей пространственное и временное разрешение вихрей Колмогоровского масштаба. Для решения системы (1) использовался метод конечных объемов с той же аппроксимацией потоков, что в п. 4 (см. разд. 4).

5.1 Задача об изотермическом слое смешения

Расчетная область представляет собой прямоугольный параллелепипед со сторонами $L_x = 0,1$ м, $L_y = 0,125$ м и $L_z = 0,1$ м. Рассматриваются два параллельных потока газа (кислород и азот), движущихся с одинаковыми, но разнонаправленными скоростями. На границах расчетной области устанавливаются периодические краевые условия. Число Рейнольдса в такой задаче рассчитывается на основе начального слоя смешения

$$\text{Re} = \frac{U_r L_r}{\nu}.$$

Здесь $U_r = \Delta u/2$, где Δu — разность скоростей; $L_r = d_0/2$, где d_0 — начальный слой смешения. Сеточное разрешение для LES — $50 \times 60 \times 50$ (в дальнейшем «грубая» сетка), DNS — $150 \times 180 \times 150$ (в дальнейшем «мелкая» сетка).

В начальный момент времени скорость задается в виде функции гиперболического тангенса: $u_x = \text{th}(300y)$, $u_y = \text{th}(300y)$ и $u_z = 0$, массовые концентрации задаются $\phi_{\text{O}_2} = 1$ и $\phi_{\text{N}_2} = 0$ в верхней полуплоскости и $\phi_{\text{O}_2} = 0$ и $\phi_{\text{N}_2} = 1$ — в нижней. Течение считается изотермическим, т. е. температура и давление в обоих потоках одинаковы и равны 293 К и 0,1 МПа соответственно.

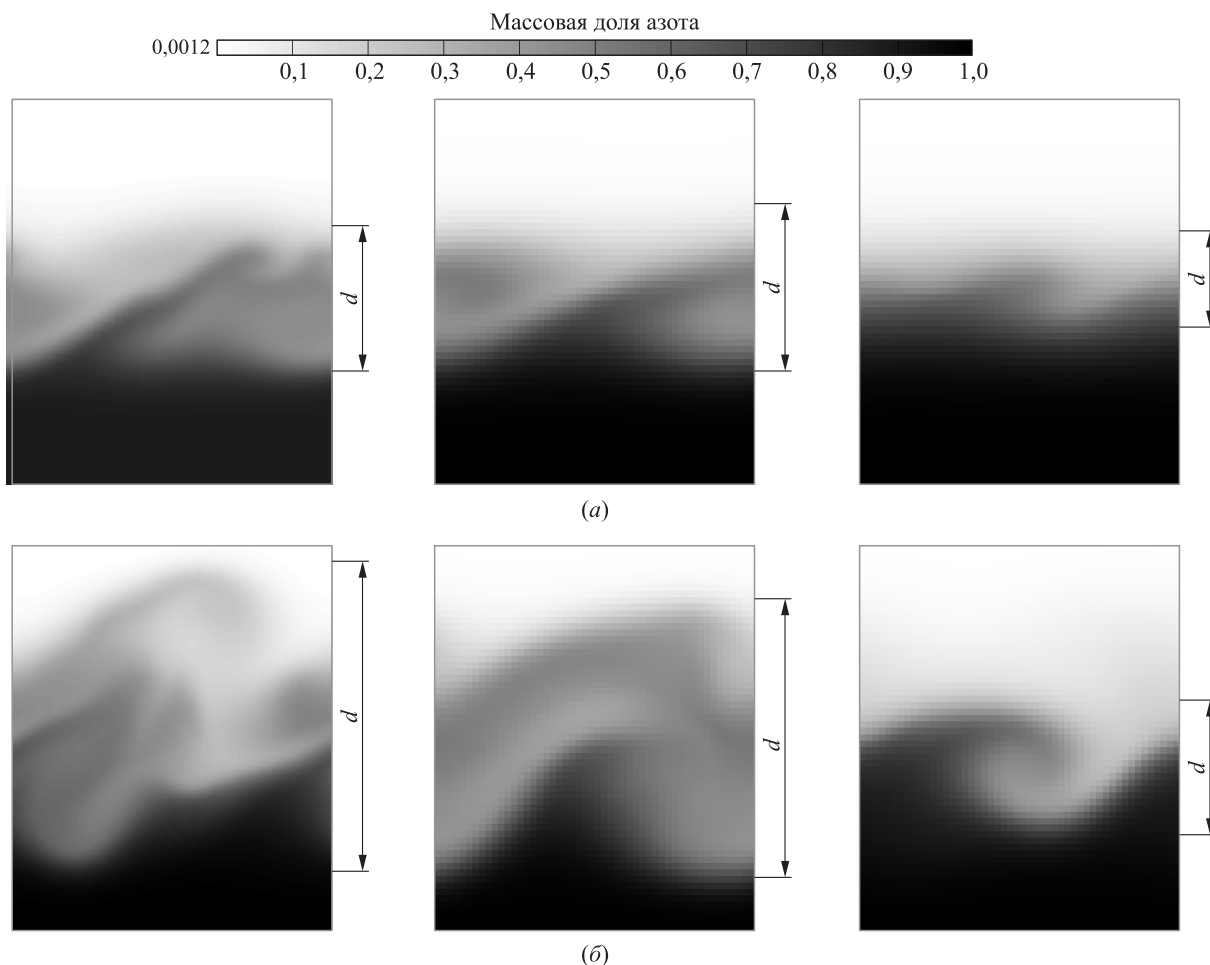


Рис. 1 Результаты численных расчетов массовой доли азота в разные моменты времени: (а) $t = 0,25$ с; (б) $t = 0,4$ с в центральном сечении $z = 0,05$ м, $Re = 20$. Левый столбец — DNS; средний столбец — LES/VSMFDF; правый столбец — LES/SSM

На рис. 1 представлены результаты расчетов массовой доли азота в потоке, полученные методами DNS и LES с различными замыканиями в моменты времени $t = 0,25$ и $0,4$ с. Видно, что метод LES/VSMFDF лучше коррелирует с результатами, полученными методом DNS, чем LES/SSM. В частности, LES/VSMFDF лучше описывает толщину слоя смешения d .

5.2 Задача о реагирующем слое смешения

Расчетная область та же, что в подразд. 5.1. Начальные скорости задаются в виде функции гиперболического тангенса: $u_x = 5\text{th}(300y)$, $u_y = 5\text{th}(300y)$ и $u_z = 0$. Массовые доли азота и кислорода такие же, как в подразд. 5.1, но азот предполагается горячим (2500 К), а кислород — холодным (293 К). В области смешения происходят химические превращения, которые моделируются

Таблица 1 Глобальный кинетический механизм образования NO ($n = -0,5$)

Реакция	A , л, моль, с	E , ккал/моль
$O_2 + N_2 \rightarrow NO + NO$	$1,7 \cdot 10^{17}$	136
$NO + NO \rightarrow O_2 + N_2$	$4,1 \cdot 10^{15}$	93

Таблица 2 Массовая доля NO в слое смешения ($Re = 175$)

Метод решения	Массовая доля NO
DNS	0,0015
LES/VSMFDF	0,0013
LES/SSM	0,0020

глобальным кинетическим механизмом [10], представленным в табл. 1.

В табл. 2 показаны конечные значения средней массовой доли NO в расчетной области, полу-

ченными методами DNS, LES/SSM и LES/VSMFDF для числа Рейнольдса $Re = 175$. Видно, что метод LES/VSMFDF лучше предсказывает установившийся уровень NO, чем метод LES/SSM.

5.3 Задача об обтекании квадратного цилиндра

Рассматривается каноническая задача об обтекании квадратного цилиндра воздушным потоком [11]. Схема расчетной области представлена на рис. 2.

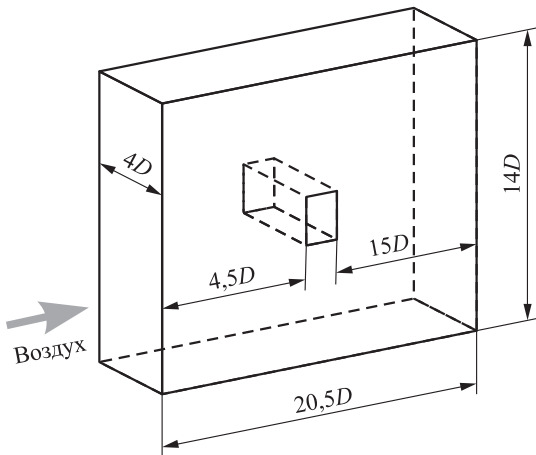
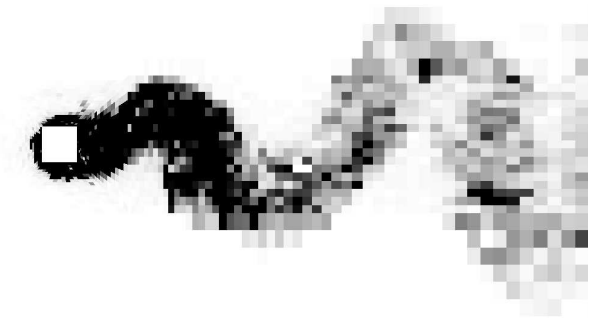
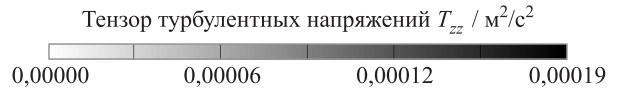


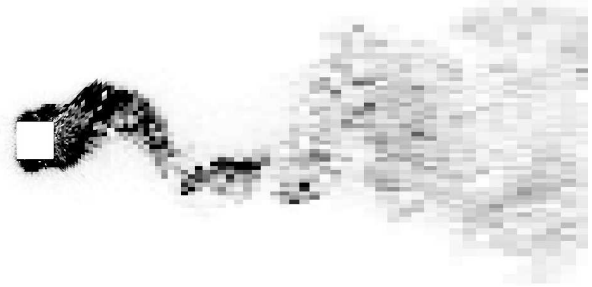
Рис. 2 Схема расчетной области

В рассматриваемой задаче число Рейнольдса $Re = U_{in}D/\nu \approx 22\,000$, где U_{in} — скорость набегающего потока; $D = 1$ м — сторона квадратного цилиндра. При этих условиях Колмогоровский масштаб турбулентности $\sim 0,1$ мм, что делает рассматриваемую задачу крайне трудоемкой для использования DNS (требуемое число расчетных ячеек $\sim 10^9$). Скорость воздушного потока и турбулентная кинетическая энергия на входе задаются равными $U_{in} = 0,311$ м/с и $5,8 \cdot 10^{-5}$ м²/с² соответственно; на выходе расчетной области устанавливается нормальное давление (0,1 МПа); снизу/сверху области устанавливаются условия симметрии по всем переменным; слева/справа области устанавливаются периодические краевые условия.

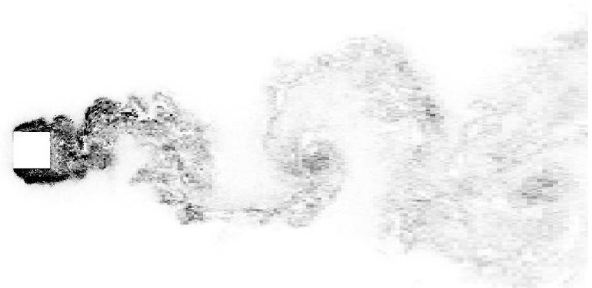
Для исследования сеточной сходимости расчеты проводились на трех сетках (табл. 3): «мелкой», «средней» и «грубой». На рис. 3 показано рас-



(a)



(б)



(в)

Рис. 3 Компоненты тензора турбулентных напряжений T_{zz} (распределение по пространству в центральном сечении цилиндра в момент времени $t = 1040$ с): (a) грубая сетка; (б) средняя сетка; (в) мелкая сетка

Таблица 3 Параметры расчетных сеток

Сетка	$\Delta_{z,\min}$, М	$\Delta_{z,\max}$, М	$\Delta_{y,\min}$, М	$\Delta_{y,\max}$, М	Δ_x , М	Общее число ячеек
Мелкая	0,0125	0,15	0,0125	0,15	0,18	2 294 240
Средняя	0,0333	0,396	0,0333	0,396	0,2666	125 940
Грубая	0,0666	0,41	0,0666	0,5	0,2666	58 365

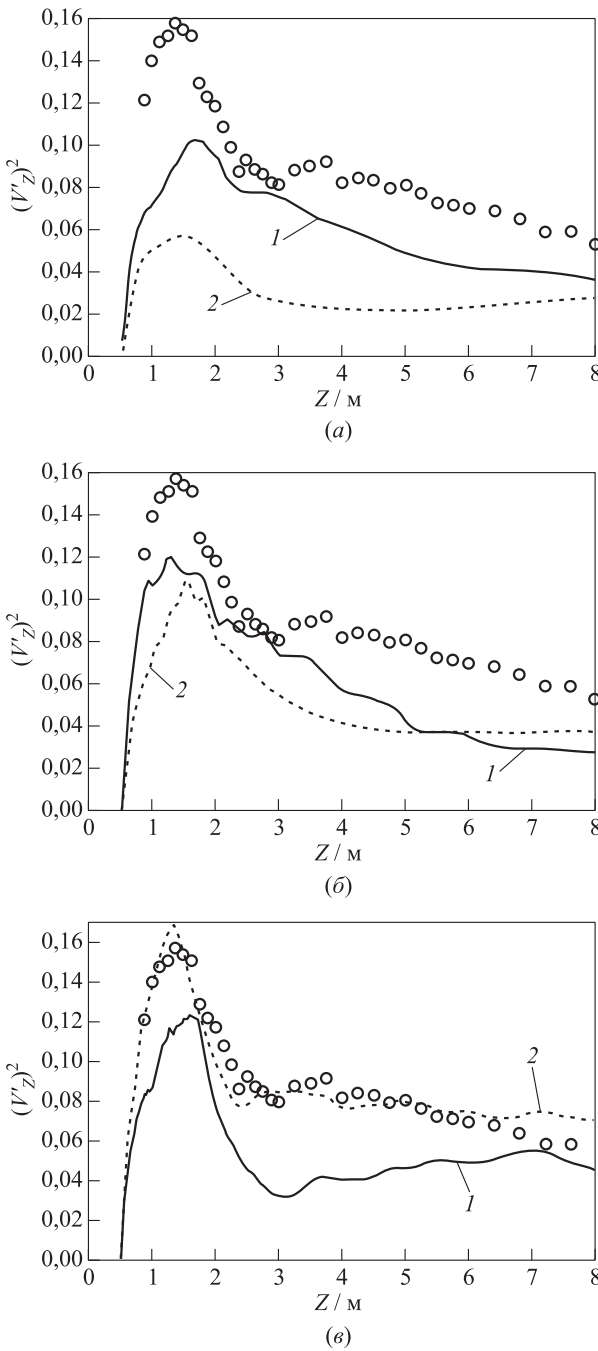


Рис. 4 Квадрат продольной безразмерной пульсационной составляющей скорости на грубой (а), средней (б) и мелкой сетках (в): значки — эксперимент; кривые — расчет (1 — LES/VSMFDF; 2 — LES/SSM)

четное поле компоненты T_{zz} подсеточного тензора турбулентных напряжений T_{ij} , рассчитанной методом LES/VSMFDF на различных сетках. Видно, что при измельчении сетки абсолютные значения компонент тензора T_{zz} убывают, т. е. решение отфильтрованных законов сохранения (4) стремится

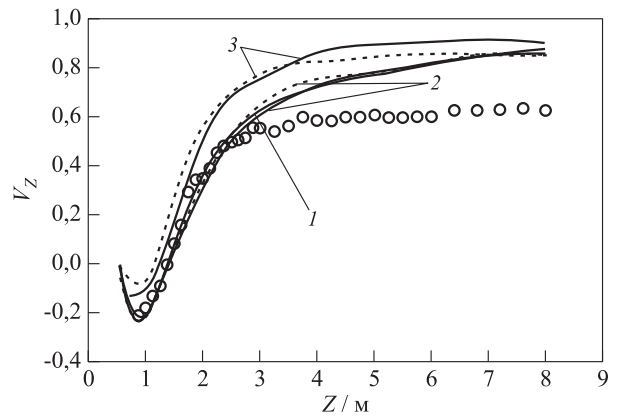


Рис. 5 Средняя безразмерная скорость: значки — эксперимент; кривые — расчет (сплошные — LES/VSMFDF; пунктирные — LES/SSM); 1 — грубая сетка; 2 — средняя сетка; 3 — мелкая сетка

к решению исходных законов сохранения (1). На рис. 4 и 5 приведено сравнение экспериментальных данных с результатами численных расчетов, полученных методами LES/VSMFDF и LES/SSM: для безразмерного квадрата пульсационной составляющей скорости $(V_z')^2$ (см. рис. 4) и безразмерной средней составляющей скорости V_z (см. рис. 5), осредненных по времени в условиях установившегося течения (см. приложение Б), полученных на разных расчетных сетках. Видно, что поле осредненной скорости за цилиндром описывается методами LES/ VSMFDF и LES/SSM практически с одинаковой точностью. Однако что касается пульсационной составляющей скорости, то LES/ VSMFDF лучше описывает эксперимент, чем LES/SSM на «грубой» и «средней» сетках. На мелкой сетке наблюдается обратная картина.

Дополнительно проведено сравнение расчетов с экспериментальными данными по коэффициенту сопротивления квадратного цилиндра C_d (табл. 4). По этому важному параметру LES/VSMFDF лучше описывает эксперимент, чем LES/SSM.

На рис. 6 представлены результаты расчетов по оценке эффективности MPI-распараллеливания методов LES/VSMFDF и LES/SSM (общее число расчетных ячеек 167500); LES/VSMFDF эффективнее распараллеливается, чем LES/SSM. Несмотря на то что для замыкания системы (4) соотношени-

Таблица 4 Коэффициент сопротивления C_d

Метод	C_d
LES/SSM (мелкая сетка)	2,3
LES/VSMFDF (мелкая сетка)	2,1
LES/SSM (средняя сетка)	2,43
LES/VSMFDF (средняя сетка)	2,25
Эксперимент	2,1

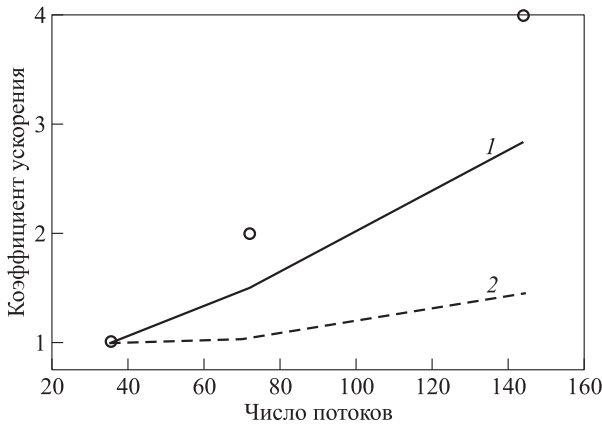


Рис. 6 Эффективность MPI-распараллеливания задачи: 1 — LES/VSMFDF; 2 — LES/SSM; значки — идеальное распараллеливание

ями (5) в LES/VSMFDF необходимо дополнительно решать около 10^7 уравнений для 3 350 000 частиц (в данной задаче), уравнения на частицах решаются явно и тем самым достигается более эффективное распараллеливание задачи.

6 ВЫВОДЫ

Разработаны алгоритм и вычислительная программа расчета сжимаемых турбулентных реагирующих течений методом LES/VSMFDF. В этом методе подсеточные турбулентные напряжения, а также подсеточные потоки массы и энергии моделируются с помощью взаимодействующих частиц, отражающих возможные мгновенные локальные термодимические состояния потока. Вычислительная программа использована для решения трех задач:

- (1) об эволюционирующем изотермическом слое смешения;
- (2) о слое смешения с химическими превращениями;
- (3) об обтекании квадратного цилиндра воздушным потоком.

Полученные результаты сравнивались с результатами DNS и численного моделирования по методу LES/SSM. Показано, что метод LES/VSMFDF лучше предсказывает толщину слоя смешения, чем метод LES/SSM, а также выход NO. В задаче об обтекании квадратного цилиндра турбулентным воздушным потоком при числе Рейнольдса $\approx 22\,000$ проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными как по полям средней и пульсационной скорости, так и по коэффициенту

сопротивления. Показано, что на грубых сетках метод LES/VSMFDF лучше описывает эксперимент, чем метод LES/SSM.

Приложение А

Разностная схема решения стохастических дифференциальных уравнений для частиц

$$\hat{X}_i^k = X_i^k + \left((\tilde{u} + U_i^{k'}) \delta t + \sqrt{\frac{2\mu}{\langle \rho \rangle}} N_i(0, 1) \sqrt{\delta t} \right);$$

$$\hat{U}_i^{k'} = \left(U_i^{k'} + \sqrt{C_0 k \omega} N_i'(0, 1) \sqrt{\delta t} + \sqrt{\frac{2\mu}{\langle \rho \rangle}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} N_i(0, 1) \sqrt{\delta t} \right) / (1 - G_{ij} \delta t);$$

$$\hat{\phi}_\alpha^k = \phi_\alpha^k e^{-C_\alpha \omega \delta t} + S_{chem},$$

где индекс k обозначает k -ю частицу; δt — шаг интегрирования; \hat{f} обозначает новый слой по времени; все переменные без крышечки берутся со старого временного слоя; $N_i(0, 1)$ и $N_i'(0, 1)$ — независимые стандартные нормальные распределения. Отфильтрованные переменные, такие как \tilde{f} и $\langle f \rangle$, задаются значениями переменных в расчетной ячейке, в которой находится частица.

Приложение Б

Способы осреднения

Для сравнения с экспериментальными данными введем в рассмотрение следующие средние величины:

$$\langle V_i' \rangle^2 = \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t v_i'(\tau) v_i'(\tau) d\tau,$$

где $v'(\tau) = u(\tau)/U_{in} - V$ — пульсационная составляющая скорости потока в точке измерения; индекс i обозначает x, y, z ; $u(t)$ — скорость потока в точке измерения; V — средняя (по времени) скорость:

$$V = \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t \frac{u(\tau)}{U_{in}} d\tau.$$

Процедура осреднения: за первые 520 с расчет выходит на квазистационарное решение, в последующие 520 с собирается статистическая информация, т.е. $t_0 = 520$ с, $t = 1040$ с.

Литература

1. Белоцерковский Б. П., Опарин А. М., Четкин В. М. Турбулентность: новые подходы. — М.: Наука, 2003. 286 с.
2. Givi P. Model-free simulations of turbulent reactive flows // Prog. Energ. Combust., 1989. Vol. 15. No. 1. P. 1–107.
3. Pope S. B. Computations of turbulent combustion: Progress and challenges // Symposium (International) on Combustion. — Elsevier, 1991. Vol. 23. No. 1. P. 591–612.
4. Sheikhi M. R. H., Drozda T. G., Givi P., Pope S. B. Velocity-scalar filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows // Phys. Fluids, 2003. Vol. 15. No. 8. P. 2321–2337.
5. Sheikhi M. R. H., Drozda T. G., Givi P., Jaber F. A., Pope S. B. Large eddy simulation of a turbulent non-premixed piloted methane jet flame (Sandia Flame D) // Proc. Combust. Inst., 2005. Vol. 30. No. 1. P. 549–556.
6. Givi P. Filtered density function for subgrid scale modeling of turbulent combustion // AIAA J., 2006. Vol. 44. No. 1. P. 16–23.
7. Haji-Sheikhi M.-R. Joint velocity scalar filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. University of Pittsburgh, 2006. Diss.
8. Gicquel L. Y., Givi P., Jaber F. A., Pope S. B. Velocity filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows // Phys. Fluids, 2002. Vol. 14. No. 3. P. 1196–1213.
9. Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment // Mon. Weather Rev., 1963. Vol. 91. No. 3. P. 99–164.
10. Frolov S. M., Basevich V. Ya., Neuhaus M. G., Tatshl R. A joint velocity-scalar PDF method for modeling premixed and non-premixed combustion // Advanced computation and analysis of combustion / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, P. Givi. — M.: ENAS Publs., 1997. P. 537–562.
11. Trias F. X., Gorobets A., Oliva A. Turbulent flow around a square cylinder at Reynolds number 22,000: A DNS study // Comput. Fluids, 2015. Vol. 123. P. 87–98.

Поступила в редакцию 23.05.18

SIMULATION OF TURBULENT REACTIVE FLOW BY THE LARGE EDDY SIMULATION METHOD COMBINED WITH THE MONTE-CARLO METHOD FOR CALCULATING SUBGRID STRESSES

R. R. Tukhvatullina¹, V. S. Ivanov¹, S. M. Frolov¹, and B. Basara²

¹N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

²AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria

Abstract: The algorithm and computational program are developed for modeling compressible turbulent reactive flows by the LES/VSFMD (Large Eddy Simulation coupled with the Velocity-Scalar Filtered Mass Density Function) method. Subgrid turbulent stresses and subgrid turbulent mass and energy fluxes are modeled by interacting particles representing local instantaneous thermochemical states of the flow. The computational program was used to solve three problems: (i) the problem of the evolving isothermal mixing layer; (ii) the problem of the mixing layer with chemical reactions; and (iii) the problem of the airflow around the square cylinder. Results were compared with the Direct Numerical Simulation and with the simulation by LES/SSM (LES coupled with the Smagorinsky model for the subgrid turbulent stresses) method. In the problem of the airflow around the square cylinder at Reynolds number of 22 000, the results of numerical calculations are compared with the experimental data for the fields of mean and pulsating velocity and for the drag coefficient.

Keywords: turbulent flows; Large Eddy Simulation; Filtered Density Function; Monte-Carlo method, mixing layer

DOI: 10.30826/CE18110209

Acknowledgments

This work is partly supported by the subsidy given to the N. N. Semenov Institute of Chemical Physics to implement the state assignment on the topic No. 0082-2016-0011 “Fundamental studies of conversion processes

of energetic materials and development of scientific grounds of controlling these processes” (State Registration No. AAAA-A17-117040610346-5).

References

1. Belotserkovskiy, B. P., A. M. Oparin, and V. M. Chechetkin. 2003. *Turbulentnost': novye podhody* [Turbulence — new approaches]. Moscow: Nauka. 286 p.
2. Givi, P. 1989. Model-free simulations of turbulent reactive flows. *Progr. Energ. Combust.* 15(1):1–107.
3. Pope, S. B. 1991. Computations of turbulent combustion: Progress and challenges. *Symposium (International) on Combustion*. Elsevier. 23(1):591–612.
4. Sheikhi, M. R. H., T. G. Drozda, P. Givi, and S. B. Pope. 2003. Velocity-scalar filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows. *Phys. Fluids* 15(8):2321–2337.
5. Sheikhi, M. R. H., T. G. Drozda, P. Givi, F. A. Jaber, and S. B. Pope. 2005. Large eddy simulation of a turbulent nonpremixed piloted methane jet flame (Sandia Flame D). *Proc. Combust. Inst.* 30(1):549–556.
6. Givi, P. 2006. Filtered density function for subgrid scale modeling of turbulent combustion. *AIAA J.* 44(1):16–23.
7. Haji-Sheikhi, M.-R. 2006. Joint velocity scalar filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. University of Pittsburgh. Diss.
8. Gicquel, L. Y., P. Givi, F. A. Jaber, and S. B. Pope. 2002. Velocity filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows. *Phys. Fluids* 14(3):1196–1213.
9. Smagorinsky, J. 1963. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment. *Mon. Weather Rev.* 91(3):99–164.
10. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, M. G. Neuhaus, and R. Tatshl. 1997. A joint velocity-scalar PDF method for modeling premixed and non-premixed combustion. *Advanced computation and analysis of combustion*. Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, and P. Givi. Moscow: ENAS Publs. 537–562.
11. Trias, F. X., A. Gorobets, and A. Oliva. 2015. Turbulent flow around a square cylinder at Reynolds number 22,000: A DNS study. *Comput. Fluids* 123:87–98.

Received May 23, 2018

Contributors

Tukhvatullina Ruzana R. (b. 1988) — junior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; tukhvatullinarr@gmail.com

Ivanov Vladislav S. (b. 1986) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; ivanov.vls@gmail.com

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

Basara Branislav (b. 1964) — PhD, Doctor hab., chief developer, AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria; branislav.basara@avl.com