

条件滤波大涡模拟方程封闭模型检验

张健 张星 姚华栋

(中国科学院力学研究所 非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘要 使用直接数值模拟和条件滤波大涡模拟相结合的方法检验了线性扩散假设和一阶近似在条件滤波大涡模拟中的应用。线性扩散假设用于封闭条件滤波大涡模拟方程中的混合分数空间输运项, 一阶近似用于封闭条件滤波大涡模拟方程中的条件滤波化学反应源项。通过使用条件滤波大涡模拟计算出的反应物大尺度量的一阶、二阶统计矩与直接数值模拟结果符合很好, 验证了这些近似的合理性, 为进一步发展条件滤波大涡模拟方法奠定了基础。

关键词 条件滤波; 大涡模拟; 湍流; 化学反应流

中图分类号: V231.2 文献标识码: A 文章编号: 0253-231X(2011)02-0357-03

EXAMINATIONS ON CLOSURE MODELS OF CONDITIONALLY FILTERED LES

ZHANG Jian ZHANG Xing YAO Hua-Dong

(LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract The DNS and the conditionally filtered LES (CFLES) were combined to examine the validity of the linear-diffusion approximation and the first-order closure in CFLES equation. The linear-diffusion approximation was applied to closing transport term in mixture-fraction space in CFLES equation, and the first-order closure was used in closing conditionally filtered reaction source term. The first two order moments of filtered mass-fraction of the reactant were obtained by using CFLES and were closed to results of the DNS, which well examined the validity of the approximations mentioned above.

Key words conditionally filtered; LES; turbulence; chemical reacting flow

0 引言

条件滤波是大涡模拟的一个新发展。条件滤波来源于九十年代分别由 Klimenko^[1] 和 Bilger^[2] 各自提出的 RANS 框架下的条件矩封闭模型。在条件矩封闭模型中, 输运方程组是以混合分数为条件变量的反应物标量的条件平均方程组。方程组依赖于时间, 空间和混合分数变量。以混合分数为条件变量, 此举大大简化了平均化学反应源项的模化问题。Pitsch^[3] 将条件滤波大涡模拟的发展分为两类, 一类是以 Bushe 等人的进展^[4,5] 为代表的, 称之为条件源项估计 (conditional source term estimation) 的方法。化学反应源项使用条件平均标量值和混合分数的 FPDF 封闭。对输运方程组求解出的无条件标量值应用条件矩封闭的概念, 通过反卷积求解条件滤波标量值。另一类沿袭了条件矩封闭的概念, 直接将条件滤波应用于 delta 函数和反应物标量的联

合输运方程, 导出并求解条件滤波大涡模拟的输运方程, 即我们所说的条件滤波大涡模拟方法。

Kim & Pitsch^[6] 首先得到了条件矩模型应用于大涡模拟的输运方程组, 并同时提出了各个不封闭项的模型, 并在混合层流动中使用 DNS 数据测试其中的部分模型。但是由于运算量和数值方法的限制, 直接求解这种输运方程是非常困难的, Kim & Pitsch 发展了一种低维的模型, 通过在一个物理方向上的空间积分, 使反应物的输运方程组的独立变量数目减少了一个, 以此减少运算量, 并利用这种模型计算出反应物标量的一阶条件矩。

Navarro-Martinez, Kronenburg and Di Mare^[7] 根据线性扩散假设导出了条件滤波大涡模拟方程, 得到了与 Kim & Pitsch 相同的最终化简形式, 与湍流大涡模拟相结合, 用于非预混射流火焰的计算。

收稿日期: 2009-12-25; 修订日期: 2011-01-13

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No.50906096; No.10732090; No.50890182); 973 资助项目子课题 (No.2009CB724103; No.2007CB814803)

作者简介: 张健 (1979-), 男, 黑龙江东宁人, 助理研究员, 博士, 主要从事湍流流动和湍流燃烧的大涡模拟研究。

主要的反应物和守恒标量的平均值和方差以及一阶条件矩的预测结果都较 CMC 方法有了很大的改善。

线性扩散假设和化学反应项的一阶封闭近似都是 RANS 框架下的 CMC 方程封闭的主要假设和近似，将这些假设直接用于大涡模拟框架中，其有效性仍待做进一步的检验。因此，本文采用直接数值模拟与条件滤波大涡模拟相结合的方法计算反应物标量大尺度量的均值和方差，通过与直接数值模拟结果的对比，检验线性扩散假设和一阶封闭近似的有效性。

1 湍流化学反应流系统

本文选用了简化反应系，即：



各反应物按一定的质量比例，进行化学反应，产生一定的反应产物。忽略了化学反应的各中间过程以及中间产物。其中， F 代表燃料， O 为氧化剂， P 表示生成物。该系统在理论研究中有广泛应用，如在 Mell^[8] 等人的直接数值模拟研究中，在该系统中检验了稳态层流小火焰模型 (SLFM-steady laminar flamelet model) 和条件矩封闭模型 (CMC-conditional moment closure) 的效果。当然该系统也有一定的局限性，针对所研究问题的具体要求，人们可以有选择地部分或全部去掉这些假设，求得计算精度的提高。

燃料和氧化剂的质量分数遵守下列方程：

$$\frac{\partial Y_F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y_F = D_F \nabla^2 Y_F + \omega_F \quad (2)$$

$$\frac{\partial Y_O}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y_O = D_O \nabla^2 Y_O + \omega_O \quad (3)$$

在非预混化学反应中，定义混合分数为：

$$\xi = \frac{1 + Y_F - Y_O}{2} \quad (4)$$

假设 $D_F = D_O = \Gamma$ ，即 Lewis 数为 1，可以方便地导出混合分数 ξ 遵守的方程：

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \xi = \Gamma \nabla^2 \xi \quad (5)$$

在均匀各向同性湍流中，加入该化学反应系统。本文使用了加力湍流场，湍流场和标量场的参数列于表 1 中。

表 1 湍流场和标量场参数表

Table 1 Parameters in scalar turbulence field

Re_λ	ν	Pr	Da	$\langle \xi \rangle$	A_f	Size
98	0.004	0.1	10	0.5	5.55	128^3

2 条件滤波大涡模拟方程的化简假设

条件滤波变量的输运方程为：

$$\frac{\partial P_L \langle Y_F | \eta \rangle_L}{\partial t} + \nabla \cdot (P_L \langle u Y_F | \eta \rangle_L) = \frac{\partial J_Y}{\partial \eta} + \Gamma \nabla^2 (P_L \langle Y_F | \eta \rangle_L) + P_L \langle \omega_F | \eta \rangle_L \quad (6)$$

其中，

$$J_Y = 2\Gamma P_L \langle \nabla \xi \nabla Y_F | \eta \rangle_L - \frac{\partial}{\partial \eta} [P_L \langle Y_F N | \eta \rangle_L] \quad (7)$$

通过引入线性扩散假设和一阶封闭近似，可以化简为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L \langle Y_F | \eta \rangle_L}{\partial t} + \nabla \cdot (P_L \langle u Y_F | \eta \rangle_L) &= \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \eta} P_L \langle Y_F | \eta \rangle_L \langle N | \eta \rangle_L - \right. \\ \left. 2 \langle Y_F | \eta \rangle_L \frac{\partial P_L \langle N | \eta \rangle_L}{\partial \eta} \right\} + \\ \Gamma \nabla^2 (P_L \langle Y_F | \eta \rangle_L) - \\ A_f P_L \langle Y_F | \eta \rangle_L \langle Y_O | \eta \rangle_L \end{aligned} \quad (8)$$

线性扩散假设可以表示为以下关系：

$$\langle \Gamma (\nabla Y_F \cdot \nabla \xi) | \eta \rangle_L \approx \langle N | \eta \rangle_L \frac{\partial}{\partial \eta} \langle Y_F | \eta \rangle_L \quad (9)$$

$$\langle NY_F | \eta \rangle_L \approx \langle N | \eta \rangle_L \langle Y_F | \eta \rangle_L \quad (10)$$

一阶封闭近似可以表示为：

$$P_L \langle \omega_F | \eta \rangle_L \approx -P_L A_f \langle Y_F | \eta \rangle_L \langle Y_O | \eta \rangle_L \quad (11)$$

3 计算结果和讨论

本文计算采用的是直接数值模拟与条件滤波大涡模拟相耦合的方法。流动速度场和守恒标量场由直接数值模拟计算，反应物标量的大尺度量使用条件滤波大涡模拟计算，即求解方程 (6)。这种方法可以使我们的研究目光集中于条件滤波大涡模拟本身计算反应物标量的效果，而忽略流场和守恒标量场的计算误差，可以独立地考察条件滤波大涡模拟的使用效果，这种方法在 Kim & Pitsch^[6] 的研究中也被用到。

从条件滤波大涡模拟方程中并不能直接求出反应物标量的大尺度量，而是直接求出反应物标量的

条件滤波量 $\langle Y_F | \eta \rangle_L$, 再通过与滤波密度函数的乘积在守恒标量空间内的积分计算出最终的大尺度量。

$$\langle Y_F \rangle_L = \int_0^1 \langle Y_F | \eta \rangle_L P_L(\eta; \mathbf{x}, t) d\eta \quad (12)$$

本文得到了 $\langle Y_F \rangle_L$ 的一阶矩和二阶矩的变化情况(图 1 和图 2)。一阶矩 $\langle \langle Y_F \rangle_L \rangle$, 条件滤波大涡模拟与直接数值模拟的数值差别很小, 曲线变化趋势完全一致;

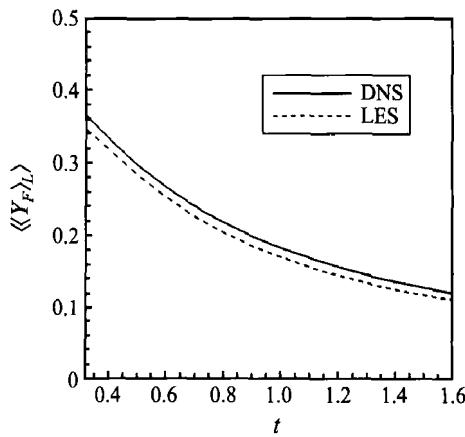


图 1 反应物标量大尺度量的一阶统计矩。直线代表 DNS 的结果, 虚线代表大涡模拟的结果

Fig. 1 The first-order statistical moment of filtered mass-fraction of reactant. Solid line is DNS, dashed line is LES

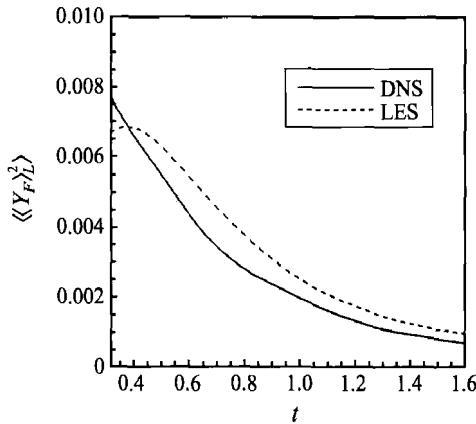


图 2 反应物标量大尺度量的二阶统计矩。直线代表 DNS 的结果, 虚线代表大涡模拟的结果

Fig. 2 The second order moment of filtered mass-fraction of reactant. Solid line is DNS, dashed line is LES.

致; 而二阶矩 $\langle \langle Y_F \rangle_L^2 \rangle$, 除在引入条件滤波大涡模拟计算的初期, 余下的时间演化过程与直接数值模拟的结果非常接近, 曲线变化趋势几乎一致。条件滤波大涡模拟方法可以较好地模拟出大尺度量的一阶和二阶矩的变化情况, 本文的结果说明, 在第 2 节所列出的化简假设和封闭模型在本文的计算结果中都表现出了较好的封闭效果。

3 结 论

条件滤波大涡模拟方程的简化用到了线性扩散假设和化学反应项的封闭近似, 本质上都是一阶封闭模型。为了检验它们的封闭效果, 本文使用条件滤波大涡模拟计算出大尺度标量的一阶矩、二阶矩, 结果表明, 条件滤波大涡模拟对于大尺度标量的一、二阶矩都可以给出较好的模拟。虽然封闭模型只是一阶近似, 但是仍然可以得到足够好的结果, 这也是条件滤波大涡模拟方法的优势之一, 如果能够进行更加深入的研究, 这种新的方法将会体现出更加优越的性能。

参 考 文 献

- [1] Klimenko A Y. Multicomponent Diffusion of Various Scalars in Turbulent Flow [J]. Fluid Dyn., 1990, 25: 327–34
- [2] Bilger R W. Conditional Moment Closure for Turbulent Reacting Flow [J]. Phys. Fluids, 1993, A5: 436–44
- [3] Pitsch H. Large-eddy Simulation of Turbulent Combustion [J]. Annu. Rev. Fluid Mech., 2006, 38: 453–82
- [4] Bushe W K, Steiner H. Conditional Moment Closure for Large Eddy Simulation of Nonpremixed Turbulent Reacting Flows [J]. Phys Fluids, 1999, 11(5): 1896
- [5] Bushe W K, Steiner H. Laminar Flamelet Decomposition for Conditional Source-term Estimation [J]. Phys. Fluids, 2003, 15(6): 1564
- [6] Kim S H, Pitsch H. Conditional Filtering Method for Large Eddy Simulation of Turbulent Nonpremixed Combustion [J]. Phys. Fluids, 2005, 17: 105103
- [7] Navarro-Martinez, Kronenburg A, Di Mare F. Conditional Moment Closure for Large Eddy Simulation. Flow, Turbul Combust [J]. 2005, 75: 245–274
- [8] Mell W E, Kosaly G, Riley J J. Investigation of Closure Models for Nonpremixed Turbulent Reacting Flows [J]. Phys. Fluids, 1994, 6: 1331–1356