

大涡模拟中的条件滤波耗散和扩散的统计特性¹⁾

张 健^{*,2)} 何国威[†] 陆利蓬^{*} 王银春[†]

^{*}(北京航空航天大学能源与动力工程学院流体机械系, 北京 100083)

[†](中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100080)

摘要 当大涡模拟用于研究化学反应流动时, 传统的滤波方法会导致化学反应项不封闭. 为克服这个困难, 发展了条件滤波大涡模拟方法. 在选择适当的条件变量后, 条件滤波的化学反应项可以表达为一个封闭项. 但同时也带来了新的问题: 条件滤波耗散或条件滤波扩散项的不封闭. 为解决这一问题, 采用了直接数值模拟方法研究了它们在大小尺度上的统计特性. 研究表明: 条件滤波耗散和扩散对于大尺度的依赖主要体现在大尺度度量场中扩散层结构的影响, 同时小尺度脉动的变化几乎与条件滤波扩散无关, 而它对条件滤波耗散却显示出明显的作用. 在构造条件滤波耗散的亚格子模型时, 小尺度脉动的作用不容忽视.

关键词 条件滤波, 大涡模拟, 化学反应流动, 直接数值模拟

中图分类号: O351 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2006)04-0433-05

引 言

大涡模拟^[1,2]的特点在于可直接求解湍流的大尺度量, 而小尺度对大尺度的影响可用基于能量级串过程的亚格子模型模化. 但是, 当把大涡模拟用于化学反应流时^[3,4], 会出现两类问题: (1) 化学反应流动中组分的混合尺度很小, 反应主要集中在小尺度区内, 如果过滤掉小尺度则很难反映化学反应过程; (2) 化学反应流中不存在能量级串过程, 为构造亚格子模型需要重新认识不封闭项的物理特性.

本文发展了一种条件滤波方法, 作为将大涡模拟用于化学反应流动的一种新的尝试. 条件滤波是指一个物理量在另一个物理量的等位面上滤波, 相比之下, 通常的滤波就是无条件滤波. 当条件滤波用于化学反应流时, 选取适当的条件变量, 条件滤波的化学反应项可以表达为一个封闭项. 除化学反应项外, 条件滤波后的组分输运方程中, 仍存在着其它不封闭项: 条件滤波对流项、条件滤波扩散或条件滤波耗散项, 后者分别对应输运方程的两种表达类型: 扩散型和耗散型. 对这种方法的研究, 一方面可以借鉴无条件滤波中对于对流项的处理, 另一方面, 要发展条件滤波耗散或扩散项的亚格子模型,

就要首先研究它们的物理特性. 本文中, 作者利用直接数值模拟研究了二者对大小尺度的依赖性.

由于组分方程中的各变量都是随机的, 随机变量的条件滤波仍然是随机变量. 研究随机变量的某一个样本的物理特性意义不大, 因此通常采用研究随机变量统计矩的方法研究不封闭项. 本文初步研究了条件滤波扩散和条件滤波耗散项的一阶条件矩, 用来分析它们在大小尺度上的统计依赖特性.

1 条件滤波的大涡模拟方法

引入了条件滤波的概念. 设 A, B, C 为随机变量, a, b, c 为它们在样本空间的取值, 借鉴新近发展的滤波密度函数方法^[4], 得到 A 的滤波值为

$$\langle A \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x', t) G(x' - x) dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} a P_L^A(a; x, t) da \quad (1)$$

这里 G 是滤波函数, P_L^A 表示随机变量 A 的滤波密度函数

$$P_L^A(a; x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho[a, A(x', t)] G(x' - x) dx' \quad (2)$$

2004-12-06 收到第 1 稿, 2006-01-23 收到修改稿.

1) 国家杰出青年基金项目 (10325211), 中国科学院创新项目 (KJJCX-SW-L08) 资助.

2) E-mail: zhjian@sjp.buaa.edu.cn

其中, ρ 是狄拉克函数

$$\rho[a, A(\mathbf{x}, t)] = \delta[a - A(\mathbf{x}, t)] \quad (3)$$

进一步地, 定义 A 在 B 上的条件滤波值为

$$\langle A|B=b \rangle_L = \frac{1}{P_L^B(b; \mathbf{x}, t)} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{x}', t) \rho[b, A(\mathbf{x}', t)] G(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}' \quad (4)$$

那么

$$\langle A \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle A|B=b \rangle_L P_L^B(b; \mathbf{x}, t) db \quad (5)$$

显然, A 在 B 上的条件滤波就是 A 在 $B=b$ 的等位面上的滤波. 在已知 A 的条件滤波和 B 的滤波值后, 可以用式 (5) 计算出 A 的滤波值. 值得注意的是 $\langle A|B=b \rangle_L$ 仍然是一个随机变量, 本文将重点研究 A 在 B 上滤波的条件矩

$$\begin{aligned} \langle \langle A|B=b \rangle_L | C=c \rangle &= \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \langle A|B=b \rangle_L P(b|c) db &= \\ \int_{-\infty}^{+\infty} P_L^B(b; \mathbf{x}, t)^{-1} P(b|c) db & \\ \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{x}', t) \rho[b, A(\mathbf{x}', t)] G(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}' & \quad (6) \end{aligned}$$

这里值得注意的是, 该条件矩仅是 c 的函数, 而非 b, c 的函数^[5].

将条件滤波用于化学反应流动的组分方程

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = \Gamma \nabla^2 \Phi + \omega(\Phi) \quad (7)$$

$\omega(\Phi)$ 表示反应物组分 Φ 的化学反应项, 相应的反应物组分的条件滤波输运方程就是

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \Phi | \Psi \rangle_L}{\partial t} + \langle \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi | \Psi \rangle_L &= \\ \Gamma \langle \nabla^2 \Phi | \Psi \rangle_L + \langle \omega(\Phi) | \Psi \rangle_L & \quad (8) \end{aligned}$$

或

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \Phi | \Psi \rangle_L}{\partial t} + \langle \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi | \Psi \rangle_L &= \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \Phi} (\Gamma \langle (\nabla \Phi)^2 | \Psi \rangle_L) + & \\ \langle \omega(\Phi) | \Psi \rangle_L & \quad (9) \end{aligned}$$

若选取条件 Ψ 为组分 Φ 的某一样本值, 则根据条件滤波的定义 (4), 可以得到

$$\langle \omega(\Phi) | \Psi \rangle_L = \omega(\Psi) \quad (10)$$

即, 化学反应源项表达为一个封闭形式. 条件滤波对流项可以借鉴无条件滤波中对流项的模化封闭方法, 条件滤波扩散和条件滤波耗散项的物理特性则有待于本文的进一步研究. 为此, 定义了以下 4 个无量纲变量

$$\begin{aligned} \langle \langle \nabla^2 \phi | \psi \rangle_L | \langle \phi \rangle_L \rangle_+ &= \\ \frac{\langle \langle \nabla^2 \phi | \psi \rangle_L | \langle \phi \rangle_L \rangle * \langle \langle \phi \rangle_L^2 \rangle^{1/2}}{\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L \rangle} & \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L | \langle \phi \rangle_L \rangle_+ &= \\ \frac{\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L | \langle \phi \rangle_L \rangle}{\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L \rangle} & \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \langle \nabla^2 \phi | \psi \rangle_L | \langle \phi'^2 \rangle_L \rangle_+ &= \\ \frac{\langle \langle \nabla^2 \phi | \psi \rangle_L | \langle \phi'^2 \rangle_L \rangle * \langle \langle \phi \rangle_L^2 \rangle^{1/2}}{\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L \rangle} & \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L | \langle \phi'^2 \rangle_L \rangle_+ &= \\ \frac{\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L | \langle \phi'^2 \rangle_L \rangle}{\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L \rangle} & \quad (14) \end{aligned}$$

分别对应于条件滤波扩散和条件滤波耗散项在大小尺度上的统计依赖特性. 本文将通过被动标量在湍流中的强制混合的直接数值模拟 (DNS) 来研究它们的性质.

2 条件滤波耗散项和扩散项的数值研究

湍流速度场 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ 和被动标量 $\Phi = \phi + \beta x_1$ 满足下面的 Navier-Stokes 方程组和对流-扩散方程

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \Gamma \nabla^2 \phi + \beta u_1 \quad (17)$$

其中 ν 是黏性系数, Γ 是扩散系数. \mathbf{F} 是作用在速度场大尺度上的外力, β 是标量场的平均梯度. 求解区域为边长为 2π 的立方体, 并取周期边界条件. 初始速度场和标量场为均匀各向同性高斯场, 它们的初始能量谱均为 $k^{-5/3}$.

直接数值模拟^[6] 采用了伪谱方法, 网格点数为 128^3 . 时间积分为二阶的 Adams-Bashforth 方法, 相应的物理步长为 0.004. CFL 数为 $0.45 < 1$. 其它的计算参数可以参见表 1.

表 1 直接数值模拟参数表

Table 1 DNS parameters and statistical quantities of 128^3 run

kinematic viscosity	ν	0.006 2
mean energy dissipation rate	$\langle \varepsilon \rangle$	0.18
integral length scale	L_f	1.62
taylor-scale Reynolds number	Re_λ	80
eddy turnover time	τ	1.96
velocity derivation skewness	S_3	-0.46
molecular diffusivity	Γ	0.006 2

图 1 是条件滤波耗散项在大尺度标量上的条件矩. 图中显示, 条件滤波耗散的条件矩具有近抛物分布特性. 随大尺度标量的不同, 该统计量是变化的, 并且具有一个峰值位置, 在本文中大致位于 $\langle \phi \rangle_L \approx 0.6$ 处. 这种抛物分布在二元混合初始阶段的条件耗散的研究中也被发现: 是由于标量场中存在有扩散层结构, 该结构将近均匀分布的标量场分离开来, 进而形成了条件耗散的近抛物分布 [7,8].

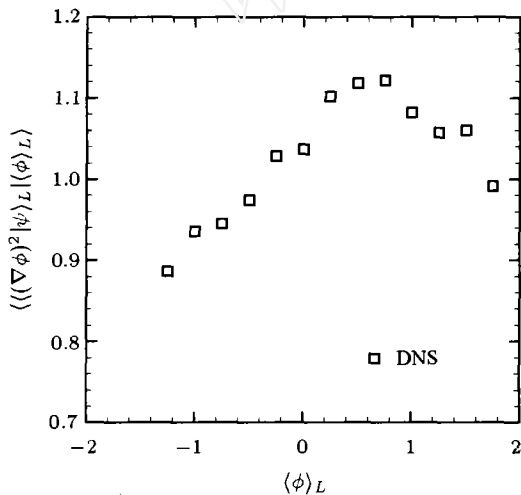


图 1 条件滤波耗散项随大尺度量的变化特性

Fig.1 Conditional moment of conditionally filtered dissipation vs. resolvable scale scalar

图 2 是条件滤波扩散项在大尺度标量上的条件矩. 与图 1 中的条件滤波耗散项相对应的, 条件滤波扩散显现出线性分布性. 由于大尺度标量场中存在着扩散层结构, 使得条件滤波扩散随大尺度标量的变化率大致为常数, 条件滤波扩散在大尺度标量上分布比较均匀, 因而表现出来很好的线性特性.

在图 3 中可以看到, 大尺度标量场是一种近高斯分布, 大尺度标量在物理空间分布比较均匀, 大尺度标量场中的扩散层结构也类似地将近均匀分布的大尺度标量场分离开来, 从而形成了条件滤波耗散与大尺度标量之间的这种近抛物特性.

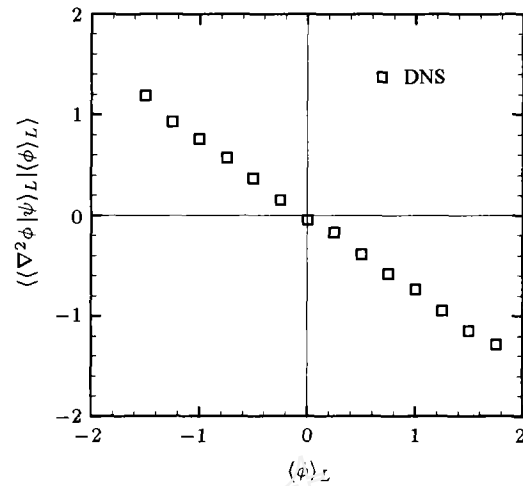


图 2 条件滤波扩散项随大尺度量的变化特性

Fig.2 Conditional moment of conditionally filtered diffusion vs. resolvable scale scalar

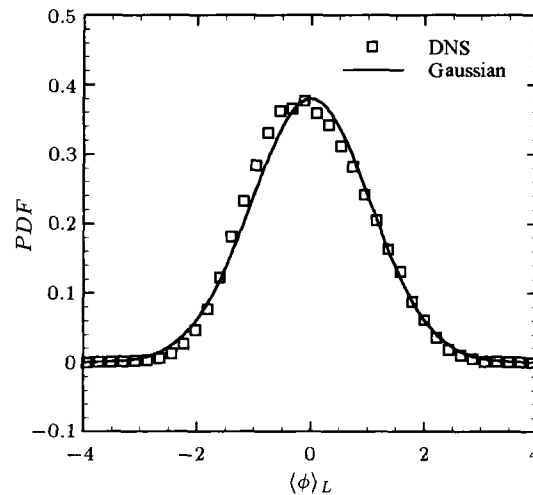


图 3 大尺度标量的概率密度的近高斯分布

Fig.3 Near-Gaussian probability density distribution of resolvable scale scalar

图 4 是条件滤波耗散项在小尺度脉动上的条件矩. 从图 4 中可以看到条件滤波耗散项与小尺度脉动之间也存在着密切的关系, 条件滤波耗散是一种规则的渐近式分布. 根据式 (14), 当条件滤波耗散与小尺度脉动无关时, 无量纲变量 $\langle \langle (\nabla \phi)^2 | \psi \rangle_L | \langle \phi''^2 \rangle_L \rangle_+ = 1$. 图 4 中对此情况有所反映, 当小尺度脉动很大时, 显示出条件滤波耗散逐渐与小尺度脉动无关, 并且最终趋近于 1. 通过图 4 与图 1 的对比可以看出, 在一定的范围内, 小尺度标量脉动值比大尺度标量值更能体现条件滤波耗散的强弱性, 小尺度脉动强, 则条件滤波耗散也强, 小尺度脉动弱, 则条件滤波耗散也弱.

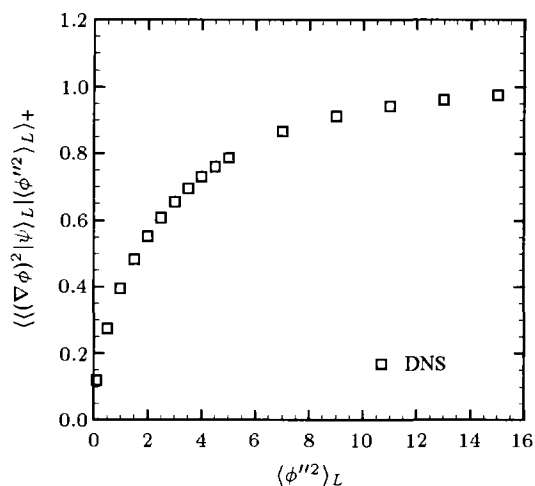


图 4 条件滤波耗散项随小尺度脉动的变化特性

Fig.4 Conditional moment of conditionally filtered dissipation vs. the scalar fluctuations at subgrid scales

图 5 是条件滤波扩散项在小尺度脉动上的条件矩. 在图 5 中, 条件滤波扩散与小尺度脉动变化几乎无关, 并且条件滤波扩散的数值相对较小. 这说明, 条件滤波扩散主要是由大尺度场中的扩散层结构引起, 小尺度脉动不会对扩散层结构产生明显的影响.

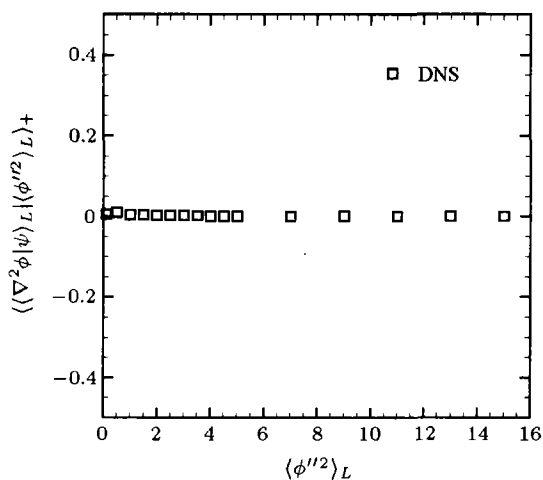


图 5 条件滤波扩散项随小尺度脉动的变化特性

Fig.5 Conditional moment of conditionally filtered diffusion vs. the scalar fluctuations at subgrid scales

3 结 论

在大涡模拟中, 传统的滤波方法用于化学反应流时, 常常带来模化化学反应项的困难. 本文提出的条件滤波方法在克服化学反应项模化困难的同时也带来了新的问题——如何构造条件滤波扩散或条件滤波耗散项的亚格子模型. 为此, 作者利用了直

接数值模拟研究了条件滤波扩散项和条件滤波耗散项分别在大小尺度上的一阶条件矩, 以观察它们在大小尺度上的统计依赖特性.

研究结果发现, 在大尺度标量场中存在着扩散层结构, 这使得条件滤波耗散在大尺度上呈抛物分布, 条件滤波扩散在大尺度上呈线性分布, 并且条件滤波扩散几乎与小尺度脉动变化无关, 主要是由大尺度场中的扩散层结构引起, 小尺度脉动不会对扩散层结构有明显的影响. 但是条件滤波耗散在小尺度脉动上表现出与大尺度完全不同的依赖特性. 小尺度脉动过大时, 条件滤波耗散逐渐与之无关, 表现出一种渐进特性. 而在一定的小尺度脉动范围内, 小尺度脉动更能体现条件滤波耗散的强弱, 小尺度脉动强, 则条件滤波耗散强, 小尺度脉动弱, 则条件滤波耗散弱.

因此, 在考虑发展条件滤波耗散项和条件滤波扩散项的亚格子模型时, 一方面要能够体现出大尺度标量场中的扩散层结构的作用, 另一方面, 特别是发展条件滤波耗散项的亚格子模型时, 小尺度脉动对其影响不容忽视.

致谢 何国威感谢 Clemson 大学 Tong C. N. 教授的有益讨论.

参 考 文 献

- 1 Li JC. Large eddy simulation of complex turbulent flows: physical aspects and research trends. *Acta Mech Sinica*, 2001, 17(14): 289~301
- 2 Wang Lei, Lu Xiyun. An investigation of turbulent oscillatory heat transfer in channel flows by large eddy simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, 47: 2161~2172
- 3 Bushe WK, Steiner H. Conditional moment closure for large eddy simulation of nonpremixed turbulent reacting flows. *Phys Fluids*, 1999, 11: 1896~1906
- 4 Colucci PJ, et al. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. *Phys Fluids*, 1998, 10: 499~515
- 5 Wang Danhong, Tong Chenning. Conditionally filtered scalar dissipation, scalar diffusion, and velocity in a turbulent jet. *Phys Fluids*, 2002, 14: 2170~2185
- 6 He Guowei, et al. Effect of subgrid-scale modeling on time correlations in large eddy simulation. *Phys Fluids*, 2002, 14: 2186~2193
- 7 Overholt MR, Pope SB. Direct numerical simulation of a passive scalar with imposed mean gradient in isotropic turbulence. *Phys Fluids*, 1996, 8 (11): 3128~3148
- 8 Eswaran V, Pope SB. Direct numerical simulation of the turbulent mixing of a passive scalar. *Phys Fluids*, 1988, 31(3): 506~520

STATISTICS OF CONDITIONALLY FILTERED DISSIPATION AND DIFFUSION IN LARGE EDDY SIMULATION¹⁾

Zhang Jian^{*,2)} He Guwei[†] Lu Lipeng^{*} Wang Yinchun[†]

**(Department of Fluids Machinery, School of Jet Propulsion, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)*

†(State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100080, China)

Abstract In the large eddy simulation of turbulent reacting flows, the filtered reaction terms are unclosed. It is difficult to construct the subgrid scale (SGS) model for filtered reaction terms due to the absence of a universal energy cascade process, which is the foundation of SGS models in fluid turbulence. With the conditional filter approach, the SGS models for conditionally filtered reaction terms can be closed, but the conditional diffusion and dissipation have to be modeled. We use a direct numerical simulation of turbulent mixing to investigate the scale-dependence of the conditional filtered diffusion and dissipation. The results show that the conditional filtered diffusion depends on large scales, but the conditional filtered dissipation depends on both large and small scales. The effects of small scales on the conditional filtered dissipation have to be included in its SGS models.

Key words conditional filter, large eddy simulation, turbulent reacting flow, direct numerical simulation

Received 6 December 2004, revised 23 January 2005.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10325211) and Chinese Academy of Sciences under the Innovative Project "Multi-scale Modelling and Simulation in Complex System" (KJCX-SW-L08).

2) E-mail: zhjian@sjp.buaa.edu.cn