

可压缩双组分混合层的直接数值模拟研究

孙小波¹, 范学军², 陆夕云¹

(1. 中国科学技术大学近代力学系, 安徽合肥 230027; 2. 中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要:通过数值求解可压缩 Navier-Stokes 方程模拟了三维可压缩双组分混合层问题, 着重研究了双组分密度比和可压缩效应对混合层发展演化的影响. 研究表明, 随着密度比的增大, 混合层扰动增长率降低. 在混合层发展初期, 可压缩性作用尤其是斜压效应对旋涡的发展起主导作用; 在混合层发展后期, 可压缩性影响减弱, 旋涡的拉伸扭转效应占主导作用. 同时, 还分析讨论了可压缩混合层中湍流的转捩及拟序结构的演化过程.

关键词: 双组分; 密度比; 可压缩混合层; 直接数值模拟

中图分类号: O357.5 **文献标识码:** A

Direct numerical simulation of compressible binary species mixing layer

SUN Xiao-bo¹, FAN Xue-jun², LU Xi-yun¹

(1. Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China;

2. Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: Compressible binary species mixing layer was investigated using direct numerical simulation to solve the three-dimensional compressible Navier-Stokes and species equations. The effects of the density ratio of binary species and compressible effect were mainly discussed. Results show that, as the density ratio increases, the growth rate of the disturbances in the mixing layer decreases. In the early stage of the the mixing layer evolution, the compressible effect, especially the baroclinic effect, dominates the dynamics of the vortex; in the later stage, the compressibility becomes weak and the stretching effect plays a dominant role. The transition and evolution of the coherent structures were also analyzed.

Key words: binary species; density ratio; compressible mixing layer; direct numerical simulation

0 引言

可压缩混合层的演化特性与发动机内燃料的混合效率特性密切相关. 关于可压缩混合层的研究, 由于粘性及可压缩性效应, 给理论分析带来很大的难度. 在一定的时间或空间范围内, 可以用线性稳定性理论来描述可压缩混合层特性^[1]. 当混合层的不稳

定波发展为大尺度的旋涡后, 不断增强的流动非线性使得相关的理论分析变得非常困难, 因此数值模拟成为混合层研究的重要手段之一. 目前, 关于混合层稳定性的研究主要分为对流不稳定的空间模态和绝对不稳定的时间模态两种方法. 时间模态虽然在真实流动中难于实现, 但同样能够有助于认识混合层演化的物理特性^[2]. 研究表明, 由于 Kelvin-

收稿日期: 2007-04-09; 修回日期: 2007-05-21

基金项目: 国家自然科学基金(90405007)资助.

作者简介: 孙小波, 男, 1980年生, 博士. 研究方向: 湍流数值模拟. E-mail: shocklet@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 陆夕云, 博士/教授. E-mail: xlu@ustc.edu.cn; Tel: 0551-3603223

Helmholtz 不稳定性引发的展向旋涡对于亚谐波扰动很敏感,这将导致旋涡的配对.这种配对的现象在二维混合层以及三维湍流混合层流动中均被发现.混合层中的旋涡同样对三维扰动也很敏感,随着初始二维混合层的逐渐三维化,最终会导致其向湍流发展.

已有的研究表明,对流马赫数,即

$$M_c = (U_1 - U_2) / (C_1 - C_2),$$

是表示可压缩混合层中可压缩性强弱的一个重要参数,这里 U_1, U_2 和 C_1, C_2 分别对应上下层流动的速度和声速.随着对流马赫数的增加,可压缩效应越来越强,乃至会在混合层中存在小激波.但是,可压缩效应如何影响混合层的结构演化,依然缺乏足够的物理解释.此外,影响混合层流动的特征还包括其他的影响因素,如不同组分的密度比以及流动中的扰动方式等.由于超燃发动机中热力学状态的复杂性,当压力或温度超过流体的临界点时,流体在超临界状态下的混合层特性将发生显著变化^[3,4].尽管已有不少关于混合层的工作,但还需进一步开展与上述影响因素相关的可压缩混合层的研究.

本文将通过数值求解三维可压缩 Navier-Stokes 方程,着重研究双组分密度比对混合层发展演化的影响,分析旋涡结构、配对以及层流向湍流结构演化的基本特性.文中还基于旋涡动力学方程的分析,探讨了可压缩性对混合层的影响.

1 控制方程和计算方法

1.1 控制方程

本文将通过数值求解三维可压缩 Navier-Stokes (N-S) 方程来研究双组分可压缩混合层的演化特性.三维可压缩 N-S 方程及双组分混合气体扩散方程形式为

$$\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial(u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_i + p \delta_{ii})}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial[(E+p)u_i]}{\partial x_j} = \frac{\partial(\tau_{ij} u_i - q_i)}{\partial x_j}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial(Y_2)}{\partial t} + \frac{\partial(Y_2 u_i)}{\partial x_j} = - \frac{\partial J_i}{\partial x_j}. \quad (4)$$

式中, u_j 代表 x_j 方向的速度分量, ρ 是密度, p 为压力, T 为温度, $E = p / (\gamma - 1) + (1/2) \rho u_i u_i$, E 为单位体积内的总能, γ 为比热常数. Y_2 代表下层流体的质量组分,则上层流体的质量组分为 $1 - Y_2$. 双组分混合气体的状态方程为

$$p = T \left[Y_2 + \frac{1 - Y_2}{\gamma} \right] R_2. \quad (5)$$

式中, R_2 代表下层流体的气体常数. 方程 (2) 和 (3) 中的粘性应力项为

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3} \mu_{ij} S_{ij},$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (6)$$

式中, S_{ij} 是应变张量, μ 是粘性系数.

多组分的气体导热与单组分气体不同,除了温度梯度所产生的热流外,还应考虑各组分扩散物质流所带入或带出的热流.忽略热扩散引起的能量传递,假定 $i = 1$ 代表混合层上层流体, $i = 2$ 代表混合层下层流体,则方程 (3) 中的热通量为

$$q_j = -k \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^2 h_i Y_i V r_{i,j}. \quad (7)$$

式中, k 是热扩散系数, h_i 对应组分 i 的焓, $V r_{i,j}$ 代表组分 i 相对于混合物总体平均速度在 x_j 方向上的分量.忽略组分由于温度梯度引起的热扩散,方程 (4) 中的扩散质量通量为

$$J_j = -D \frac{\partial Y_2}{\partial x_j}. \quad (8)$$

式中, D 为组分在混合物中的质量扩散系数.

1.2 物理模型和计算参数

如图 1 所示,不同组分的流体作平行但方向相反的流动.上层组分密度 ρ_1 较大,远场速度 U_1 ,下层组分密度 ρ_2 较小,远场速度 U_2 . 流向、展向和法向分别用 $x_1 (x)$, $x_2 (y)$ 和 $x_3 (z)$ 表示.这里,引入混合层

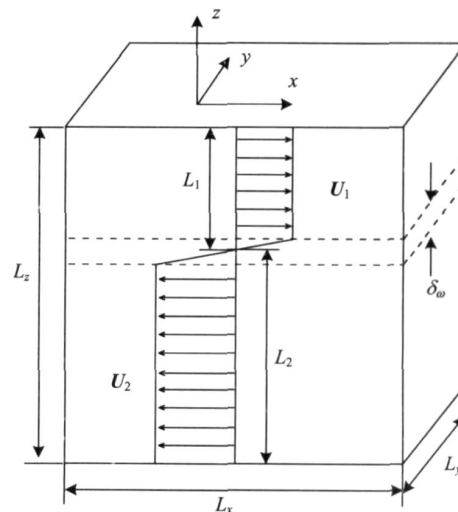


图 1 双组分可压缩混合层流动示意图
Fig. 1 Sketch of binary species mixing layer

厚度,并定义为

$$= \frac{U_1 - U_2}{(\partial U / \partial z)_{\max}} \quad (9)$$

Reynolds 数的定义基于下层流体远场声速、密度、粘性、初始混合层厚度,即 $Re = \rho_2 c_{2,0} / \mu_2$; 普朗特数 $Pr = \mu c_p / k$, c_p 为定压比热; 施密特数 $Sc = \mu / D$; 粘性系数 $\mu / \mu_2 = (T / T_2)^{0.7}$. 参见表 1 给出的计算参数, 对流马赫数 $Mc = 0.4$, 上下组分密度比为 $1/1$, $4/1$ 和 $12/1$. 本文所有的算例均取 $\gamma = 1.4$, $Re = 300$, $Pr = 0.7$, $Sc = 0.8$, 沿流向、展向和法向计算网格数为 $120 \times 72 \times 193$. 此外, 计算验证表明, 该网格数能够合理地预测上述参数下的流动问题.

表 1 算例计算参数

Tab. 1 Computational parameters

算例	ρ_1 / ρ_2	U_1	U_2	L_1 / δ	L_2 / δ
Case 1	1/1	0.4	-0.4	12.5	12.5
Case 2	4/1	0.2	-0.4	11.0	14.0
Case 3	12/1	0.116	-0.4	10.0	15.0

在不可压缩混合层流动中, 数值研究所采用的扰动往往都是基于线性稳定性分析所得出的最不稳定性波长来确定的. 对于不同密度比双组分可压缩混合层流动, 线性稳定性分析表明^[5]: 对于二维情形, 随着密度比的增加, 最不稳定性波长减小; 三维稳定性和二维类似, 但不存在纯展向模态. 进一步通过可压缩和不可压缩流的最不稳定性波长的数值结果对比表明^[6]: 在这两个波长范围内, 相同初始条件所产生的混合层后期流动情况不依赖于具体波长的大小. 故本文取流向不稳定性波长 $\lambda_1 = 7.29 \delta$, 对应于不可压缩流的线性无粘理论分析波长值. 计算域的流向长度 $L_x = 2 \lambda_1$, 满足不稳定性旋涡的卷起和后期的一次对并. 为了促使流动结构向展向发展以及混合层向湍流转化, 根据 Moser 等^[7]的处理, 取展向不稳定性波长 $\lambda_2 = 0.6 \lambda_1$, 展向的计算长度为 $L_y = 2 \lambda_2$. 为了尽量减小远场边界对混合层发展演化的影响, 表 1 中列出的法向计算长度 L_1 和 L_2 较大.

1.3 初边值条件

初始平均压力、平均温度设为均匀分布. 根据 Miller 等^[3]的做法, 平均速度、质量分数由误差函数给出. 平均密度分布由状态方程 (5) 得出, 上下不同组分的流体满足动压相等. 展向初始扰动选择一个基本模和一个亚谐波, 采用二维扰动涡^[7]. 此外, 为了促使混合层的三维演化, 需要对初始流场加上流向扰动涡, 其做法与展向旋涡类似, 这里不再赘述.

由于本文采用时间模式, 在流向和展向取周期性边界条件, 法向远场采用无反射边界条件. Poinso 等^[8]在进行直接数值模拟时对边界处做了特征分解, 引入了分别代表不同波的特征变量, 然后对各个特征变量逐一进行处理, 得到了边界点方程, 也就是时间依赖方程. 本文将这一思想推广到了双组分混合气体流动中, 计算验证表明, 能够取得满意的结果.

1.4 计算方法

本文需要模拟混合层中二维旋涡的配对、混合层的三维演化以及层流向湍流的发展过程. 迎风格式通过数值耗散来控制混淆误差, 虽然数值上较为稳定, 但其在模拟小尺度湍流结构时耗散的影响不容忽视. 中心格式不是数值耗散型的, 不会产生小尺度能谱的非物理陡降, 小尺度能够保持合理的含能. 因此, 本文采用中心差分格式进行混合层的数值模拟研究. 时间项采用三阶 Runge-Kutta 方法离散, 对流项和压力梯度项采用四阶中心差分, 扩散项采用二阶中心差分离散. 为了尽可能的减小混淆误差, 非线性项采用斜对称形式进行处理. 文中计算所采用的程序已得到广泛的验证^[9].

2 结果和讨论

图 2 给出了展向旋涡的发展分布. 受基本模扰动的影响, 流动很快失稳, 两个“涡元”逐渐增长, 形成两个较大尺度的旋涡, 之后非线性效应逐渐增强, 亚谐波作用逐渐增大, 导致两个旋涡一起旋转, 最终对并成一个大尺度旋涡. 在流动的初期过程, 其流动现象类似于二维情况, 可以定义混合层动量厚度

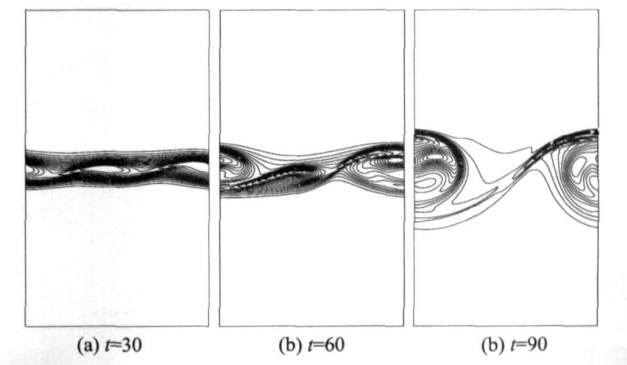


图 2 沿 $y = L_y / 2$ 截面展向旋涡的发展分布 (Case 1)
(涡量等值线间距为 0.035)

Fig. 2 Development of the spanwise vorticity component over a section of $y = L_y / 2$ (Case 1)
(The contour increment is 0.035)

$$m = \frac{1}{(\rho_1 - \rho_2)^2} \int_{-L_2}^{L_1} (\rho_2 - \rho) (\rho - \rho_1) dz, \quad (10)$$

$$\rho_1 = \rho|_{z=L_1}, \quad \rho_2 = \rho|_{z=-L_2}.$$

式中, ρ 代表周期性方向的空间平均. 与方程(9)定义的混合层厚度不同, 这里动量厚度代表积分量, 通常用来衡量混合层的扰动增长率. 图 3 给出了不同密度比时混合层动量厚度随时间的发展过程. 可以看出, 随着密度比的增大, 动量厚度增长趋势减缓, 即混合层中扰动的增长率下降, 这与线性稳定性分析结果^[5]定性一致. 图 4 还给出了总动能随时间的发展分布, 这里的总动能为整个计算域进行空间积分, 即

$$K = \frac{1}{2} \int u_i u_i dx. \quad (11)$$

这里所预测的变化特征与 Vreman 等^[10]的计算结果相符, 总动能 K 随扰动的发展而衰减. 此外, 随着密度比的增大, 总动能衰减率是降低的. 这是由于密度比越大, 混合层扰动发展越慢, 扰动旋涡影响区域较窄, 远离剪切区域的流体未受影响所造成的.

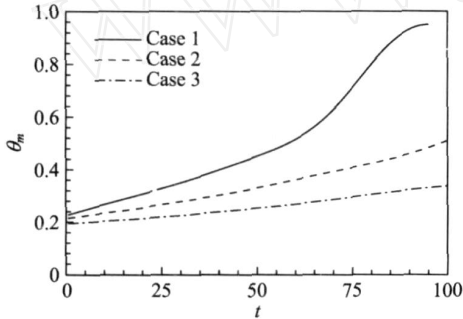


图 3 动量积分厚度 θ_m 随时间的变化

Fig. 3 Time evolution of momentum thickness θ_m

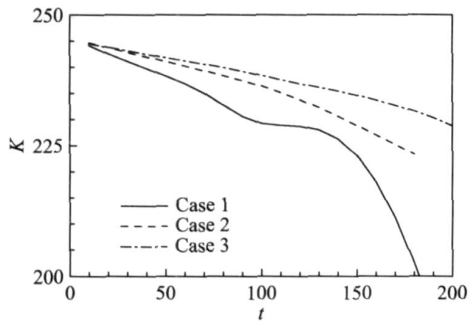


图 4 总动能 K 随时间的变化

Fig. 4 Time evolution of total kinetic energy K

图 5 给出了不同密度比双组分混合层在 $t = 80$ 时的热力学参量脉动均方根值的分布. 随着密度比

的增大, 图 5(a) 表明密度脉动增加. 而由图 5(b), (c) 所示, 温度和压力脉动随着密度比的增加而减弱. 由于高密度比混合层发展相对缓慢, 所以热力学量脉动分布的宽度相对较窄. 对于带密度比的混合层流动, 脉动量的极值都会偏离 $z = 0$ 的位置, 而靠近高密度一侧.

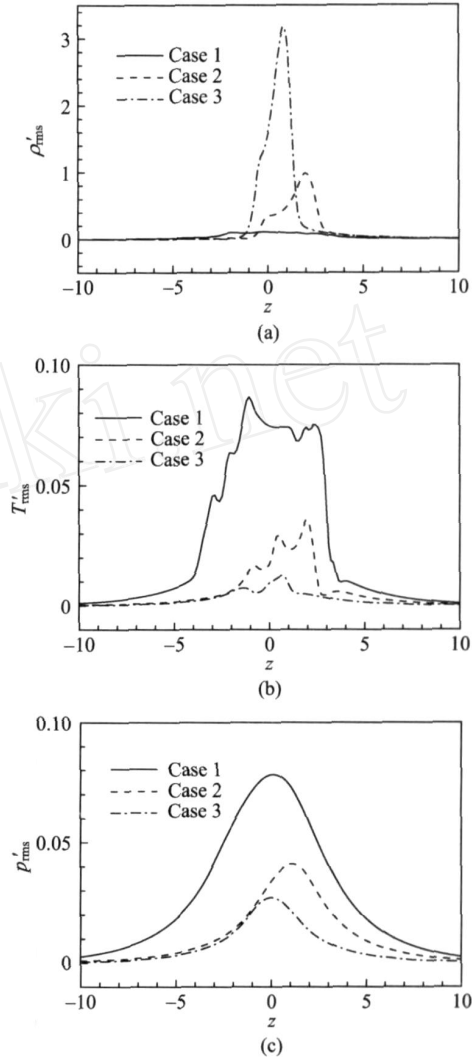


图 5 在 $t = 80$ 时刻热力学变量的脉动均方根值分布

Fig. 5 The root-mean-square values of the fluctuation of density, temperature and pressure at $t = 80$

通常采用旋涡动力学分析有助于揭示流体运动的本质特性. 忽略粘性项, 涡量动力学方程的展向形式为

$$\frac{d\omega_z}{dt} = -\omega_z \frac{\partial u}{\partial x_i} - \omega_z \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial p}{\partial x_3} - \frac{\partial}{\partial x_3} \frac{\partial p}{\partial x_1}. \quad (12)$$

方程(12)右边第一项为涡量拉伸扭转项,表示旋涡的拉伸、扭转导致涡量的变化;第二项为散度项,反映流体质点在流动过程中其体积微元的收缩或膨胀对涡量的影响;第三项为斜压项,代表效应对旋涡的影响。由于混合层流动的复杂性,分析单个旋涡运动规律较为复杂。本文借鉴 Kravchenko 等^[11]采用的条件平均方法,对涡量较大区域,即

$$y \quad w_y / \max, \quad (13)$$

进行选择性的平均, α 为给定的参数,这里取 0.95。对方程(12)中各项及散度、密度、压力、组分进行条件平均。图 6 给出了条件平均量的瞬态分布图。图 6(a)为瞬态的展向涡量。图 6(b)给出了旋涡拉伸扭转项分布,这一项量级很小,在旋涡中心位置为正,对旋涡的发展起增强作用。旋涡拉伸扭转效应是层流向湍流转捩的重要机制,但对于二维流动这项为零。图 6(c)表明旋涡中心位置处,散度取最大值,表明流体在此处膨胀得最厉害。受流体体积变化的影响,图 6(d)中散度效应降低了旋涡中心位置的涡量。由于双组分混合层流动存在一个沿法向的密度分层,图 6(e)表明在旋涡中心附近存在一个高密度梯度分布区域。与一般的混合层流动一样,图 6(f)中压力在旋涡中心附近较小。由于密度梯度和压力

梯度存在一个夹角,且密度梯度较大,如图 6(g)所示,这时的斜压效应尤为明显,量级也最大。斜压项分布为负的区域,抑制了旋涡的生成,反之促进了旋涡的发展。图 6(h)则说明流体组分的分布与密度很类似。

从拟涡能的角度,同样可以考察各效应对混合层旋涡的影响。拟涡能输运方程形式为

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \omega^2 \right) = \underbrace{\dots}_{\text{term-1}} \cdot S \cdot \underbrace{\dots}_{\text{term-2}} / \omega^2 (\nabla \cdot \omega) + \underbrace{\dots}_{\text{term-3}} - \frac{\nabla \times \nabla p}{2} \cdot \omega + \nu T. \quad (14)$$

式中, ω 和 u 表示涡量和速度矢量, S 为应变速率张量。方程右边前三项 (term-1、term-2、term-3) 分别代表旋涡拉伸扭转效应、散度效应和斜压效应对拟涡能的影响,右边第四项 νT 代表粘性扩散项。图 7 给出了 $t = 40$ 和 $t = 180$ 时刻 Case 2 情形下,拟涡能输运方程(14)中各子项分布。与上面的分析结果一致,在 $t = 40$ 阶段,对涡量影响最大的是斜压作用,拉伸扭转作用很小。此外,平均拟涡能最大值位于 $z = 0.8$ 处,在此处散度项 term-2 取最小值,对拟涡能的生长起削弱作用。但是,在混合层发展到了后期,层流向湍流转捩后,各项分布却发生很大的改变。如图 7(b),在 $t = 180$ 时刻,可压缩影响项对拟

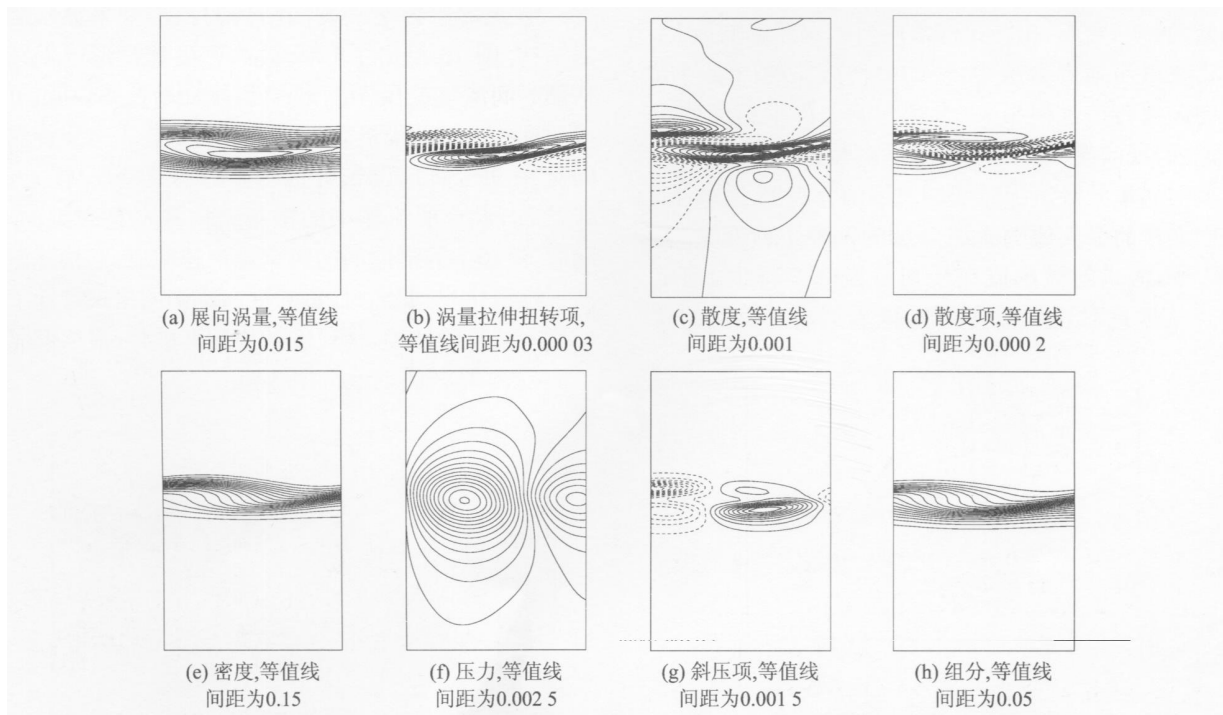


图 6 在 $t = 40$ 时刻基于展向涡量的条件平均的物理量分布(Case 2)

Fig. 6 Distributions of quantities based on the conditional average in the spanwise direction at $t = 40$ (Case 2)

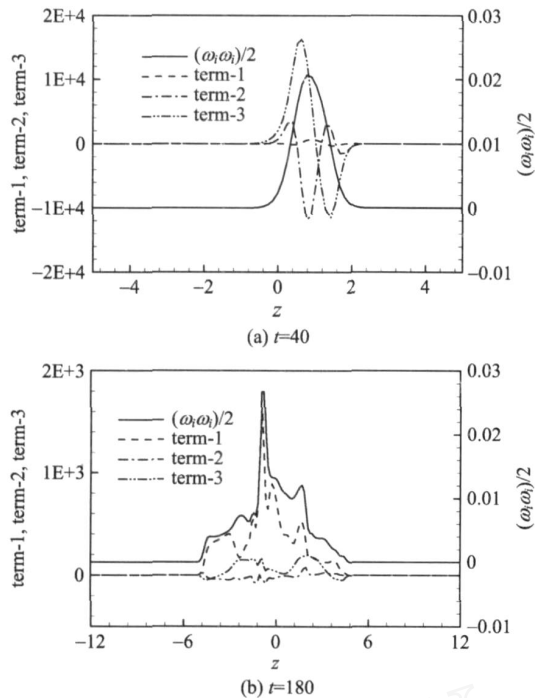


图 7 不同时刻拟涡能输运方程中各项沿法向的分布 (Case 2)

Fig. 7 Distributions of some terms in the transport equation of enstrophy at two instants (Case 2)

涡能的影响变小,扭转拉伸效应对拟涡能影响最大.

在可压缩混合层中,负的展向旋涡的出现与层流向湍流转捩过程相关. 由于初始条件中速度分布的原因,展向旋涡在最初阶段一直是正值. 图 8 给出了展向涡量的极值随时间的发展演化趋势. 总体上,展向涡量的最大值随着混合层的发展不断变大. 另一方面,涡量的最小值在最初阶段 ($t < 50$ 时) 恒定为 0,表明此时还是层流状态. 随着混合层旋涡的卷

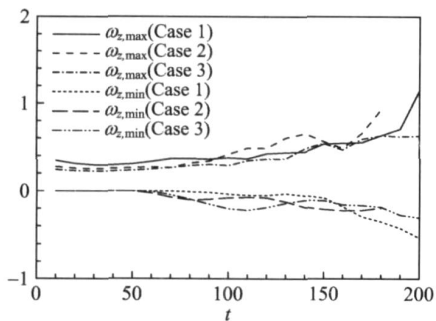


图 8 展向涡量的极大和极小值随时间的变化

Fig. 8 Time evolution of the maximum and minimum of span wise vorticity

起,流场出现了第二次失稳,大尺度结构破碎,小尺度结构出现. 展向出现了与初始旋涡方向相反的旋涡,即负的展向涡,且随着时间发展这些负的展向涡结构越来越明显. 图 9 显示了混合层发展后期在 $t = 240$ 时刻瞬时展向旋涡分布,可以清晰地看出负的展向涡结构.



图 9 在 $t = 240$ 时刻 $y = L_y/2$ 截面瞬时展向旋涡分布 (Case 3),等值线间距为 0.05

Fig. 9 Contours of the span wise vorticity component over a section of $y = L_y/2$ at $t = 240$ (Case 3) The contour increment is 0.05

为了合理给出流场的涡结构,基于 Pirozzoli 等^[12]发展的一类定义旋涡结构的 准则来显示旋涡结构. 图 10 给出了 Case 3 高密度比情形下涡结构随时间演化过程. 由于混合层扰动增长率较低,可以发现旋涡结构发展较慢,直到 $t = 180$ 才出现旋涡的对并,并且此时已带有很明显的三维特征. 在 $t = 90$ 之前,混合层流场中的拟序结构基本是二维的. 随后,流场中的流向涡的影响越来越明显,结构逐渐向三维演化. 与此同时,负的展向旋涡的出现带动了层流向湍流的转捩,大尺度结构逐渐破碎,最终形成了 $t = 270$ 复杂的三维拟序结构.

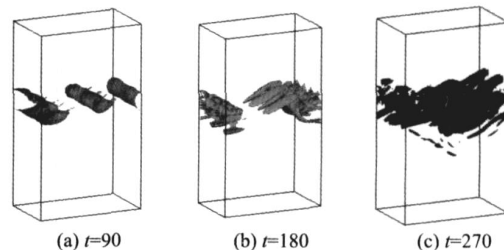


图 10 混合层中拟序涡结构随时间的演化 (Case 3)

Fig. 10 Time sequence of coherent vortical structures in the mixing layer (Case 3)

3 结论

本文通过数值求解三维可压缩 Navier-Stokes 方程,研究了三维双组分混合层的发展演化过程,分析了不同密度比组分情况下对混合层演化的影响.研究表明,随着密度比的增大,混合层扰动增长率降低.文中还从拟涡能输运方程分析了可压缩性对旋涡结构的影响.在混合层发展初期,可压缩性作用尤其是斜压效应对旋涡的发展起主导作用.而在混合层发展后期,可压缩性影响减弱,旋涡拉伸扭转作用占主导地位.文中还再现了混合层从层流向湍流的转捩过程以及流场中拟序结构的三维演化过程.对于这里所研究的三维双组分混合层流动,存在两次失稳过程:其一是初始扰动涡元发展成基本旋涡,在旋涡对并后形成大尺度涡;其二是层流向湍流转捩,流场中的拟序结构也逐渐向三维演化,形成复杂的三维拟序结构.

参考文献(References)

- [1] Sandham N D, Reynolds W C. Compressible mixing layer: Linear theory and direct simulation[J]. AIAA J, 1990, 28(4): 618-624.
- [2] Vreman A W, Sandham N D, Luo K H. Compressible mixing layer growth rate and turbulence characteristics [J]. J Fluid Mech, 1996, 320: 129-137.
- [3] Miller R S, Harstad K G, Bellan J. Direct numerical simulation of supercritical fluid mixing layers applied to heptane-nitrogen[J]. J Fluid Mech, 2001, 436: 1-39.
- [4] Okong'o N A, Bellan J. Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer: Heptane and nitrogen[J]. J Fluid Mech, 2002, 464: 1-34.
- [5] Okong'o N A, Bellan J. Real gas effect on mean flow and temporal stability of binary-species mixing layers [J]. AIAA J, 2003, 41(12): 2 429-2 443.
- [6] Okong'o N A, Bellan J. Perturbation and initial Reynolds number effects on transition attainment of supercritical, binary, temporal mixing layers [J]. Computers Fluids, 2004, 33: 1 023-1 046.
- [7] Moser R D, Rogers M M. The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: Paring and transition to turbulence[J]. J Fluid Mech, 1993, 247: 275-320.
- [8] Poinso T J, Lele S K. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows [J]. J Comput Phys, 1992, 101: 104-129.
- [9] Sun X B, Lu X Y. A large eddy simulation approach of compressible turbulent flow without density weighting [J]. Phys Fluids, 2006, 18: 118101.
- [10] Vreman B, Geurts B, Kuerten H. Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer[J]. J Fluid Mech, 1997, 339: 357-390.
- [11] Kravchenko A G, Choi H, Moin P. On the relation of near-wall streamwise vortices to wall skin friction in turbulent boundary layers[J]. Phys Fluids, 1993, 5(12): 3 307-3 309.
- [12] Pirozzoli S, Grasso F. Direct numerical simulation of impinging shock wall/turbulent boundary layer interaction at $M = 2.25$ [J]. J Fluid Mech, 2006, 18: 065113.