

非预混燃烧中守恒标量在亚格子内的双高斯分布及其先验检验¹⁾

高福杰*, 张健^{*,2)}, 晋国栋*, 何国威*

* (非线性力学国家重点实验室, 中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要: 滤波概率密度函数 (Filtered Density Function 或 FDF) 方法通过标量的 FDF 描述亚格子湍流混合信息, 用于封闭化学反应流动中的反应速率项, 是非预混湍流燃烧大涡模拟 (Large Eddy Simulation 或 LES) 的一种重要方法。本文提出了亚格子内被动标量混合的双高斯 FDF 模型。在亚格子标量方差由大到小变化时, 该模型完整描述出亚格子内的标量分布从双峰到近高斯的改变。该模型进一步应用于具有无限快化学反应的均匀各向同性湍流中, 同时与直接数值模拟结果对比。在具有化学反应的流动中, 被动标量 FDF 的双高斯模型与 DNS 结果相符, 并且由双高斯 FDF 模型生成的化学反应生成物的滤波值与 DNS 经空间滤波后的结果符合很好。

关键词: 非预混燃烧, 湍流, FDF, 双高斯分布

引言

近年来, 大涡模拟 (LES) 在非预混湍流燃烧中得到快速的发展和应^[1-10]。LES 已经被用来研究飞行器的燃烧室燃烧和内燃机^[2-4]的燃烧室内的燃烧^[5]; 在发展非预混燃烧的过程中, 人们提出了不同亚格子模型来封闭化学反应项^[6], 比如动态模型, 滤波概率密度函数方法, 线性涡模型等。

在非预混燃烧的 LES 计算中, 燃料和氧化剂的混合——特别是在亚格子尺度 (Sub-grid scale, SGS) 的混合——主导了化学反应的发生。为了较好地预测燃烧过程, 准确描述亚格子内混合过程从而获得更加准确的化学反应速率至关重要。

滤波概率密度函数 (FDF) 方法是非预混燃烧 LES 中一种重要的方法, 该方法使用标量在亚格子内的概率密度分布来描述亚格子湍流混合信息, 进而计算化学反应的滤波组分质量分数。

在非预混燃烧中, 混合分数的 FDF 定义为^[9]

$$\begin{aligned} f_{\phi}(\hat{\phi}; \bar{x}, t) &= \int \delta[\phi(\bar{x}', t) - \hat{\phi}] G(\bar{x}' - \bar{x}) d\bar{x}' \\ &= \left\langle \delta[\phi(\bar{x}, t) - \hat{\phi}] \right\rangle_L \end{aligned} \quad (1)$$

其中, f_{ϕ} 为守恒标量的 FDF, $\hat{\phi}$ 表示标量空间, 在下文中, 均简写为 ϕ , δ 为 Dirac 脉冲函数, G 为滤波权函数, 本文中的滤波权函数均采用盒子滤波, $\langle \rangle_L$ 表示滤波, 滤波尺度为 L 。守恒标量的 FDF 的物理意义为标量在亚格子内的概率密度分布; 如果滤波函数 G 非负, FDF 满足 PDF 的所有性质。

FDF 方法最初是 RANS 中 PDF 方法在 LES 中的一种延伸。Givi 首先将 PDF 方法应用到平衡态化学反应流的 LES 中^[7], Cook 等人用 Givi 的方法研究了非平衡态化学反应流^[7,8], 在 Cook 之前, Pope 引入了 FDF 的概念和定义, 并用严格证明了该方法可以自动封闭化学反应方程^[9], 之后 Gao 等人推导了标量 FDF 的输运方程, 给出了获得标量 FDF 的一般方法^[10]。

FDF 方法的关键是获得标量的 FDF, 即亚格子内的标量混合的信息。获得标量 FDF 的方法主要有两类。一类是求解 FDF 的输运方程

$$\frac{\partial f_{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left\langle u_j | \hat{\phi} \right\rangle_L f_{\phi} \right\} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial f_{\phi}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \hat{\phi}^2} \left\{ \left\langle \chi | \hat{\phi} \right\rangle_L f_{\phi} \right\} \quad (2)$$

其中, D 为分子扩散系数, $\chi = D \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i}$ 是标量耗散率。然而, 求解标量 FDF 输运方程计算量较大, 对

计算机内存要求较高, 限制了其使用范围^[6]。

另一类较为常用的方法是假设 FDF 的形式, 利用标量的低阶 (一般是一阶和二阶) 滤波矩来确定假设函数中的待定系数。为了使用假设 FDF 函数方法给出形式上和物理上较为合理的标量 FDF, 本文提出了一种函数形式——双高斯函数。

本文结构如下, 第一节分析亚格子内标量混合的物理内涵, 提出双高斯 FDF 的两个假设, 并从假设出发, 给出亚格子内标量混合的 FDF; 在第二节中, 简单介绍 DNS 方法及使用该数据库得到的数据库, 得到亚格子标量的 FDF; 第三节介绍基于平衡态化学反应条件下对双高斯分布的先验检验方法, 以及检验结果; 最后一节是对本文的总结。

1 亚格子标量的混合及其双高斯分布

随着湍流非预混燃烧 LES 的快速发展, 亚格子尺度的标量混合引起了更多的关注。Tong 等人^[11,12]用射流实验数据研究了亚格子标量 FDF 的条件统计, 以及标量耗散率、标量扩散率等量的条件滤波。我们在之前的工作中, 使用具有平均标量梯度的稳态均匀各向同性湍流混合的 DNS 数据库, 对上述各物理量进行了考察^[13]。这些增加了我们对湍流混合的物理理解, 是本文工作的基础。

1.1 关于亚格子标量混合的两个假设

亚格子内的湍流混合主导着化学反应过程, 守恒标量的一阶滤波矩 (大尺度标量 $\langle \phi \rangle_L$) 和二阶滤波矩 (SGS 方差 $\langle \phi'^2 \rangle_L$) 常用来描述亚格子内的湍流混合。通过使用 $\langle \phi \rangle_L$ 和 $\langle \phi'^2 \rangle_L$ 作为条件量来研究标量耗散率、扩散率等量的条件统计, 人们发现亚格子湍流混合与初始状态为二元混合的整体湍流混合具有相似性, 前者存在于充分发展的湍流混合状态中, 而后者存在于发展过程中的湍流混合状态中。当 SGS 方差较大的时候, 亚格子标量的 FDF 是双峰分布, 以 SGS 标量为条件的耗散率滤波量在 FDF 的双峰之间达到最大值, 而标量扩散率也有相应的变化, 这个特点与二元湍流混合的初始状态类似; 当 SGS 方差较小的时候, 亚格子标量的 FDF 接近高斯分布, 表示混合充分的状态, 这与二元湍流混合的充分发展阶段相似。

对于均匀湍流混合, 其物理背景和统计特性 (比如近高斯概率密度分布) 研究比较充分。当 SGS 方差较大的时候, 亚格子标量的 FDF 会出现双峰分布, Tong 等人^[11,12]认为这与扩散层 (diffusion-layer like sheet) 结构有关。在 SGS 方差较大时, 扩散层将亚格子分为两个混合充分的部分, 而扩散层内存在较大的标量梯度和强烈的耗散。这一认识揭示了亚格子混合的非平衡性的存在 (SGS 方差较大的时候), 以及背后的物理图景, 这对于我们构建湍流混合的 SGS 模型很有意义。

根据以上湍流混合的实际过程, 我们首先抽象出一个概念: 基本区域。

在二元湍流混合中, 近似存在这样的单连通区域 Ω_ℓ :

1) 区域的尺度 $\ell \gg \eta_\phi$ (η_ϕ 为标量耗散尺度)

2) 区域内的混合过程是均匀的, 即不存在强耗散 (或者说扩散层等大尺度结构)

满足这两个条件的区域, 我们称为一个基本区域。

基于湍流混合的实际过程和基本区域的概念, 我们有以下假设:

(a) 守恒标量在一个基本区域内的概率密度分布接近高斯分布, 即 Ω_ℓ 内的守恒标量标量 ϕ_ℓ 的概率密度函数满足

$$P(\phi_\ell) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\phi} \exp\left(-\frac{(\phi - \mu_\phi)^2}{2\sigma_\phi^2}\right) \quad (3)$$

其中, $\mu_\phi = \langle \phi \rangle_\ell$, $\sigma_\phi^2 = \langle \phi^2 \rangle_\ell - \mu_\phi^2$, $\langle \cdot \rangle_\ell$ 表示在 Ω_ℓ 上做平均。

(b) 扩散层结构将一个亚格子分割成两个基本区域。

1.2 双高斯分布及其对称情况

根据以上两个假设, 亚格子内的混合可以分为两个基本区域的组合。如果设其中一个基本区域所占亚格子体积比为 α , 则另一个为 $1-\alpha$ 。由全概率定理, 亚格子内标量的概率密度分布 (FDF) 为

$$f_\phi(\phi'') = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \exp\left(-\frac{(\phi'' - \mu_1)^2}{2\sigma_1^2}\right) + \frac{1-\alpha}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left(-\frac{(\phi'' - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2}\right) \quad (4)$$

这里, $\phi'' = (\phi - \langle \phi \rangle_L) / \sqrt{\langle (\phi - \langle \phi \rangle_L)^2 \rangle_L}$ 是无量纲化标量的亚格子部分, μ_1, μ_2 分别是 ϕ'' 在基本区域 1

和 2 的平均值, σ_1, σ_2 分别是 ϕ'' 在基本区域 1 和 2 内的方差。这里选用标量的亚格子部分和选用标量本身

是等价的, 因为在实际 LES 中, 标量的大尺度部分 $\langle \phi \rangle_L$ 和亚格子标量方差是已知的。

使用 SGS 方差作为唯一的条件来确定 (4) 式的参数时, 双高斯分布是对称的, 即 $\alpha = 0.5, \mu_1 = -\mu_2 = \mu, \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$, 从而 (4) 式化为

$$f_\phi(\phi'') = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \left(\exp\left(-\frac{(\phi'' - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(-\frac{(\phi'' + \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \right) \quad (5)$$

而 ϕ'' 的二阶滤波矩为 1, 从而有 $\sigma^2 + \mu^2 = 1$ 。

根据量纲分析, 我们确定 σ 的值如下:

$$\sigma^2 = C \frac{\sqrt{\langle \phi''^2 \rangle_L} \langle u''^2 \rangle}{\langle \chi \rangle_L} \quad (6)$$

其中, C 为常数。

2 稳态均匀各向同性湍流混合的直接数值模拟 (DNS)

本文使用带有平均标量梯度的稳态均匀各向同性湍流混合的 DNS 数据来检验亚格子标量混合的双高斯模型。设在空间的 Z 方向上存在平均标量梯度 β , 那么, 标量可以分解为

$$\Phi(x_i, t) = \phi(x_i, t) + \beta Z \quad (7)$$

在我们的算例中, 取 $\beta = -1.0$ 。将 (7) 式代入标量的对流扩散方程

$$\partial_t \Phi + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Phi = D \nabla^2 \Phi \quad (8)$$

可以得到标量脉动的控制方程

$$\partial_t \phi + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi = D \nabla^2 \phi - \beta w \quad (9)$$

其中, w 为 Z 方向的速度分量, 右边最后一项所起的作用是持续产生标量脉动, 这也是施加平均标量梯度的目的。

DNS 联合求解 (9) 式以及三维 NS 方程。数值上, 空间离散使用伪谱方法, 时间推进采用二阶 Adams-Bashforth 方法^[14]。求解区域是一个边长为 2π 的立方体。空间上采用周期性边界条件。本研究的计算中, 采用 512^3 的网格规模。更具体的算法可以参考 Wang^[14,15] 和 Pope 等人^[16] 的文献。

本文 DNS 计算的参数如表 1 所示。

表 1 计算参数和 DNS 特征统计量

Table 1 Summary of the calculation parameters and diagnostic quantities of the DNS

物理量	具体数值
网格量: N^3	512^3
Taylor 微尺度雷诺数: Re_λ	209
Kolmogorov 尺度: η	0.0084
最大波数与耗散尺度之积: $k_{\max} \eta$	2.02
湍动能: E	1.15
耗散率: ε	0.2
大涡翻转时间: Te	1.66
施密特数: Sc	0.7
标量方差: E_ϕ	1.51
标量耗散率: χ	0.85
标量耗散尺度: η_ϕ	0.011

使用以上 DNS 数据, 可以检验上文所提出的双高斯模型。本文使用物理空间三维盒子滤波器, 对 DNS 数据进行滤波处理。图 1 给出了标量谱和标量的滤波谱, 可以看到标量谱具有一定宽度的惯性区, 滤波谱在大波数区域有震荡, 这是滤波器在波数空间具有震荡的缘故^[11]。

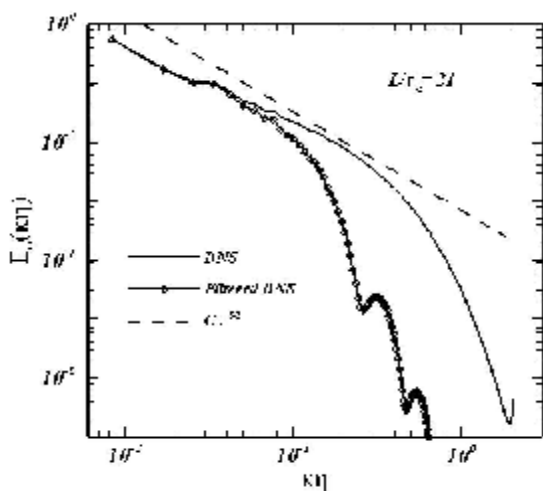
为了验证守恒标量的双高斯模型, 我们首先用 DNS 数据算得 $\langle f_\phi(\phi'' | \langle \phi''^2 \rangle_L) \rangle$, 然后给出双高斯模型的结果, 进行对照, 结果如图 2 所示。从图上可以看出, 模型可以很好的模拟 SGS 标量 FDF 的演化趋势, 即从 SGS 方差较大的时的双峰分布演变至 SGS 方差较小时的高斯分布。

图 1 标量谱和大尺度标量谱

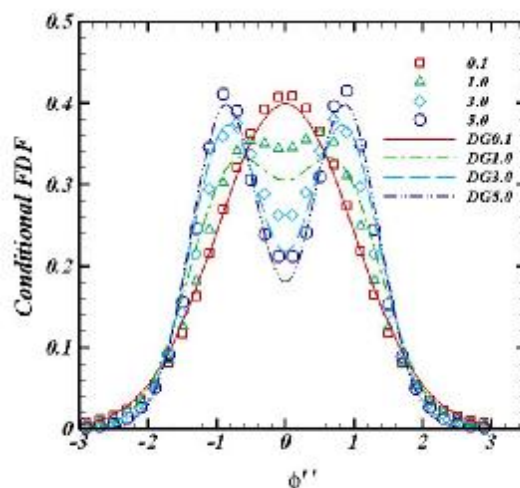
Figure 1 Spectra of the scalar and resolvable-scale scalar

图 2 SGS 标量 FDF 及其双高斯分布预测

Figure 2 SGS scalar FDF and its double-Gaussian model



注：图中横坐标是无量纲化的波数，纵坐标是标量谱值。实线是标量谱，虚线表示-5/3 对数律，带圈实线表示滤波后的标量的谱。L 是滤波尺度。



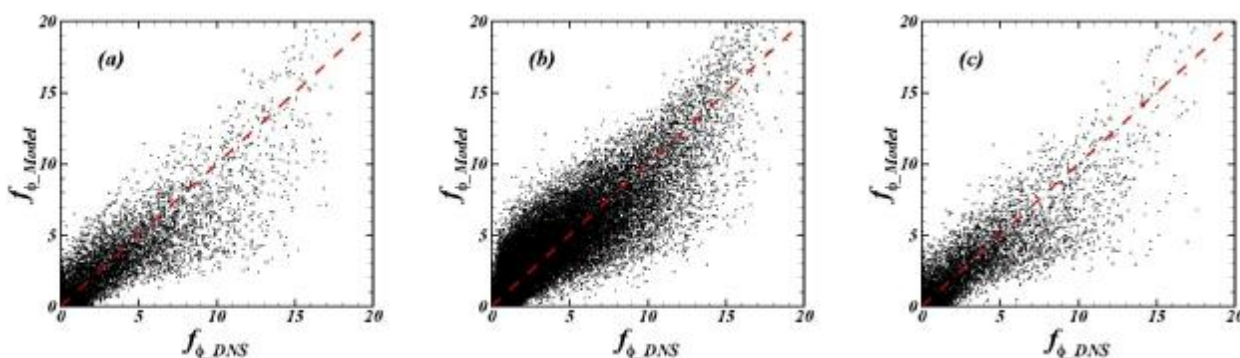
注：图中横坐标是 SGS 标量，纵坐标是 SGS 标量的 FDF；符号表示 DNS 值，线条表示模型值，不同的符号和线条代表不同的 SGS 方差条件，在图例中给出。滤波尺度为 L。

3 双高斯分布的先验检验

本文首先用 DNS 数据检验了被动标量 FDF 的双高斯模型。图 3 画出了 DNS 给出的被动标量 FDF 与双高斯 FDF 模型给出的 FDF 的散点图，从图上可以看出，散点落在在直线 $f_{\phi_DNS} = f_{\phi_Model}$ 周围，并在直线附近集中，显示了两者的相关性，被动标量的双高斯模型与 DNS 结果相符。

图 3 DNS 滤波和模型预测的标量 FDF 散点图

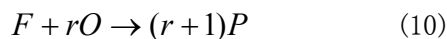
Figure 3 Scatter points of the scalar FDF from filtered DNS and model



注：横坐标为 DNS 滤波所得标量 FDF，纵坐标为模型预测标量 FDF。不同的图分别表示不同的标量值 (a) $0.5\phi_{st}$, (b) ϕ_{st} , (c) $1.5\phi_{st}$ 所对应的 FDF

在此基础上，本文进一步检验了无限快化学反应速率单步反应条件下，双高斯模型对生成物质量分数滤波值的预测。

平衡态的二元一步化学反应方程如下



由平衡态二元一步化学反应的解可知，燃料质量分数 y_f ，氧化剂质量分数 y_o 和生成物质量分数 y_p 可以表示为守恒标量的函数。对于生成物 y_p ，其表达式为

$$y_p = \begin{cases} \phi, \phi \leq \phi_{st} \\ (1-\phi)/(1-\phi_{st}), \phi > \phi_{st} \end{cases} \quad (11)$$

其中， $\phi_{st} = 1/(r+1)$ 是当量混合分数， r 为化学反应系数。

根据 FDF 的定义和性质，生成物的大尺度量 $\langle y_p \rangle_L$ 可以表示为

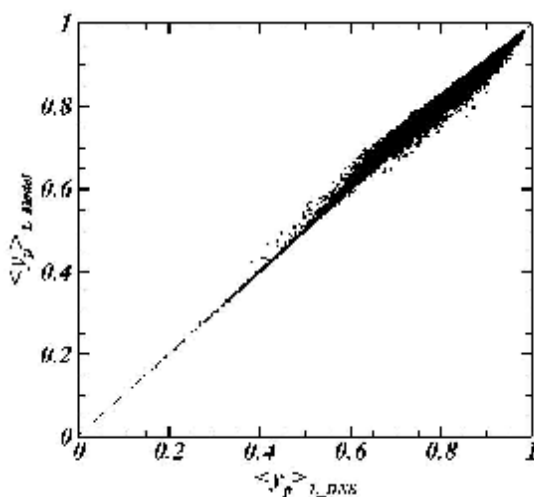
$$\langle y_p \rangle_L = \int_0^1 y_p(\phi) f_\phi(\phi) d\phi \quad (12)$$

其中， ϕ 是混合分数的样本空间变量。

图 4 显示了分别由 DNS 数据和双高斯模型生成物质量分数滤波值的散点图。由图可知，在 $\langle y_p \rangle_L$ 值较大的地方，有轻微的发散；在 $\langle y_p \rangle_L$ 较小处，数据点较为集中；然而所有的散点都集中在斜率为 1 的直线附近，这表明双高斯分布的 FDF 模型得出的 $\langle y_p \rangle_L$ 非常接近由 DNS 滤波得到的结果。

图 3 DNS 和模型给出的生成物滤波量的散点图

Figure3 Scatter points of the filtered y_p from DNS and model



注：横坐标为 DNS 得到的生成物滤波值，纵坐标为模型得到的生成物滤波值。

4 结论

标量混合是湍流燃烧的重要过程，亚格子内的标量混合是湍流燃烧 LES 要处理的关键问题。本文从标

量亚格子混合的物理特征直接入手, 提出了亚格子标量 FDF 的双高斯分布模型, 并用 DNS 数据对其做了先验检验。

文章通过考察湍流混合, 指出湍流混合中两种典型的混合状态: 均匀混合状态, 强耗散状态(扩散层), 并认为湍流混合主要是由这两种状态组合而成。由此抽象出了基本区域的定义, 它能很好的反映均匀湍流混合的主要统计特征。基于基本区域的定义, 本文提出了二元混合两个假设: 首先是基本区域内的标量概率密度分布接近高斯分布, 其次是扩散层将亚格子分为两个基本区域。根据这两个假设, 推导出了亚格子标量的 FDF 的双高斯分布形式。

本文通过 DNS 结果, 检验了双高斯分布在平衡态二元一步化学反应流中的预测能力。结果显示, 被动标量的高斯模型与 DNS 结果相符; 并且, 双高斯 FDF 模型能够准确预测化学反应生成物质量分数的滤波值。

参考文献

1. H. Pitsch. Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion [J]. *Annu Rev Fluid Mech*, 2006, 38
2. F. Dimare, W. P. Jones, R. Menzies. Large eddy simulation of a model gas turbine combustor [J]. *Combustion and Flame*, 2004, 137(3): 278-94.
3. W. W. Kim, S. Menon, H. C. Mongia. Large-Eddy Simulation of a Gas Turbine Combustor Flow [J]. *Combustion Science and Technology*, 1999, 143(1-6): 25-62.
4. P. Moin. Advances in large eddy simulation methodology for complex flow [J]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2002, 23
5. D. C. Haworth, K. Jansen. Large-eddy simulation on unstructured deforming meshes: towards reciprocating IC engines [J]. *Computers & Fluids*, 2000, 29
6. 刘奕, 郭印诚, 张会强等. 大涡模拟及其在湍流燃烧中的应用 [J]. *力学进展*, 2001, 31
7. C. K. Madnia and P. Givi, "Direct numerical simulation and large eddy simulation of reacting homogeneous turbulence," in Ref. 11, Chap. 15, pp. 315-346.
8. A. W. Cook, J. J. Riley. A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows [J]. *Physics of Fluids*, 1994, 6(8): 2868.
9. S. B. Pope. *Computations of turbulent combustion: progress and challenges*. 1990
10. F. Gao, E. E. O'Brien. A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows [J]. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1993, 5(6): 1282.
11. C. Tong. Measurements of conserved scalar filtered density function in a turbulent jet [J]. *Physics of Fluids*, 2001, 13(10): 2923.
12. D. Wang, C. Tong. Conditionally filtered scalar dissipation, scalar diffusion, and velocity in a turbulent jet [J]. *Physics of Fluids*, 2002, 14(7): 2170.
13. J. Zhang, F. Gao, G. Jin, and G. He. "Conditionally statistical description of turbulent scalar mixing at subgrid scales" (in submission)
14. L. P. Wang, S. Chen, J. G. Brasseur, et al. Examination of hypotheses in the Kolmogorov refined turbulence theory through high-resolution simulations. Part 1. Velocity field [J]. *J Fluid Mech*, 1996, 309
15. L. Wang, S. Chen, J. G. Brasseur. Examination of hypotheses in the Kolmogorov refined turbulence theory through high-resolution simulations. Part 2. Passive scalar field [J]. *J Fluid Mech*, 1999, 400
16. V. Eswaran, S. B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar [J]. *Physics of Fluids*, 1988, 31(3): 506

DOUBLE-GAUSSIAN DISTRIBUTION OF THE PASSIVE SCALAR IN A SUB GRID IN NON-PREMIXED COMBUSTION AND ITS PRIORI TEST¹⁾

Fujie Gao^{*}, Jian Zhang^{*,2)}, Guodong Jin^{*}, Guowei He^{*}

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

Abstract: As an important large-eddy simulation (LES) method of non-premixed turbulent combustion, filtered density function (FDF) method describes the SGS scalar mixing by using the passive scalar FDF, and closes the chemical rate term automatically. Double Gaussian distribution for the passive scalar FDF is proposed here. For the SGS scalar variance from large to small, the double Gaussian model is able to reproduce the evolution of the SGS scalar distribution from the bimodal to the Gaussian. The model is further used in homogeneous isotropic turbulent combustion with an infinitely fast chemistry reaction and the results are compared with that of the filtered DNS. In the combustion flow, the FDF of passive scalar gained by the double Gaussian method are in good agreement with the DNS result and the filtered mass fraction of the production calculated by the double Gaussian method fits well with that of DNS.

Key words: non-premixed, turbulent combustion, FDF, double-Gaussian distribution, DNS

1) The project was supported by 973 Program of China (2009CB724100) and NSFC (50906096, 11072247)

2) E-mail: zhangjian@lm.imech.ac.cn