

研究论文

等温反应湍流流动标量关联量运输的直接模拟

王 方^{1,2}, 许春晓¹, 周力行¹

(¹ 清华大学工程力学系, 北京 100084; ² 北京航空航天大学能源与动力工程学院, 北京 100083)

摘要: 用谱方法对等温反应槽道湍流流动中标量关联量运输进行了三维直接模拟。所得到的无反应情况下的单标量时均值和脉动值与文献中差分法的直接模拟 (DNS) 数据一致。瞬态模拟结果显示有反应情况下标量脉动量也有条带结构。用直接模拟数据库对标量关联量运输方程各项的贡献进行了先验性统计, 发现产生项和耗散项的贡献最大, 扩散项和反应项的贡献很小, 然而化学反应对各项的大小和分布规律影响很大。对标量关联量方程 RANS 模拟各项的封闭模型进行了后验性检验。与 DNS 的统计值相比, 除了近壁区之外, 在流场的大部分区域, 模拟值与精确的统计值基本一致。

关键词: 直接模拟; 等温反应流动; 脉动关联量

中图分类号: TK 16

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2007) 03-0544-06

DNS of scalar correlation-moment transport in isothermal turbulent reacting flows

WANG Fang^{1,2}, XU Chunxiao¹, ZHOU Lixing¹

(¹ Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

² School of Jet Propulsion, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

Abstract: The 3-D direct numerical simulation (DNS) of scalar correlation-moment transport in isothermal turbulent reacting flows was carried out by using a spectral method. The obtained statistically averaged and root-mean square (RMS) values of concentration for a single species in non-reacting flows are in good agreement with those obtained by using a finite-difference method reported in references. The instantaneous results show the existence of strip structures of concentration fluctuation for reacting flows. The DNS statistical results give the budget of the concentration correlation-moment equation, showing that the contribution of production and dissipation terms is important whereas the contribution of diffusion and reaction terms is small. However, the effect of chemical reaction on the magnitude and distribution of each term is important. The DNS statistical data are used to validate the closure models in the correlation-moment equation of Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) modeling. It is found that generally the simulated values are in agreement with the DNS data in most flow regions, except in the near-wall region.

Key words: direct numerical simulation; isothermal reacting flows; scalar correlation-moment

引 言

最近几年, 湍流反应流动的直接模拟 (DNS)

取得了可观的进展^[1-2]。直接模拟可以求解各种尺度的湍流, 不需要任何湍流模型和湍流燃烧模型, 可以对复杂化学反应及 NO 生成等情况给出湍流和

化学反应相互作用的微观结构，也可以检验 RANS 模拟的湍流燃烧模型^[3-7]。但是由于直接模拟的计算量和存储量都非常大，对于湍流燃烧的模拟目前只能针对小尺寸、较低 Reynolds 数的简单流动。

Pope 等^[6-7]用直接模拟研究混合对反应的影响，检验混合模型，并对条件矩模型和准平衡近似燃烧模型及小火焰模型进行了分析。总的看来，对有反应的流动，用 DNS 检验 RANS 模拟封闭模型的研究尚嫌不足。本文用槽道湍流流动直接模拟的谱方法^[8]，对槽道内等温反应湍流流动标量脉动关联量运输进行直接模拟，研究有反应的标量脉动结构，由 DNS 的统计数据研究关联量运输方程中各项的贡献，并且把精确值和二阶矩封闭模型^[9-10]的相应项的模拟值对比检验封闭模型。

1 模拟方法

1.1 控制方程

对槽道内充分发展的等温反应流动，可以近似地处理成密度不变的不可压缩流动。对应的瞬态连续、动量和组分方程为

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial Y_1}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y_1}{\partial x_j} = \frac{1}{Re \times Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial Y_1}{\partial x_j} \right) - \omega_1 \quad (3)$$

$$\frac{\partial Y_2}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y_2}{\partial x_j} = \frac{1}{Re \times Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial Y_2}{\partial x_j} \right) - \omega_2 \quad (4)$$

其中， $\omega_1 = \omega_2 = B\rho Y_1 Y_2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) = KY_1 Y_2$ 。3 个模拟工况的反应速率系数 K 值分别取为 0、0.1 和 1.0。

1.2 模拟方法

模拟方法采用谱方法，详见文献 [8]。空间上采用 Galerkin-Tau 谱展开方法，在 x 、 z 方向采用 Fourier 变换， y 方向采用 Chebyshev 变换，同时采用三阶精度的时间分裂格式。对组分浓度的求解，每个时间步都被分成非线性步和黏性步两个子步。

2 模拟结果和讨论

计算域及坐标系如图 1 所示，以槽道半宽 H 、平均速度 U_m 定义的 Reynolds 数为 3000。 x 、 z 方向均匀布置 128 个节点， y 方向为 129 个。时间步长为 0.01 倍 H/U_m 。组分 Y_1 浓度上壁面处为

1.0，下壁面处为 0，组分 Y_2 浓度上壁面处为 0，下壁面处为 1.0。

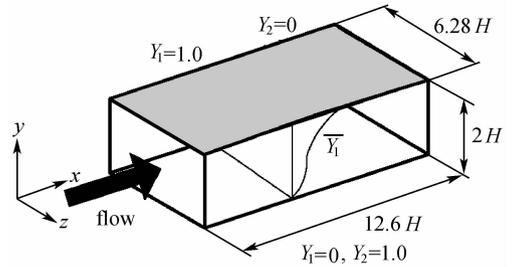
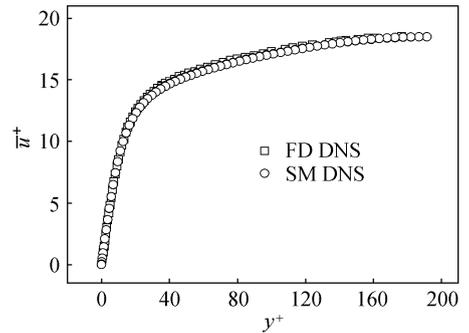


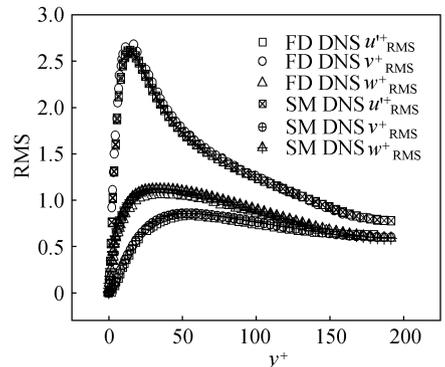
图 1 计算域示意

Fig. 1 Computational domain

对计算达到稳定后的谱方法直接模拟（图中表示为 SM DNS）结果进行统计，得到的速度和单标量的时均量和脉动量与文献 [11] 中的差分法直接模拟（图中表示为 FD DNS）结果进行了对比。例如速度脉动和速度-浓度关联量的对比见图 2 和图 3。谱方法计算得到的 $u_\tau = 0.063845247$ 、 $Re_m = 3000$ 、 $Re_\tau = 191.54$ ，差分法的 $Re_m = 2850$ 、 $Re_\tau = 180$ ，所以结果略有不同。



(a)

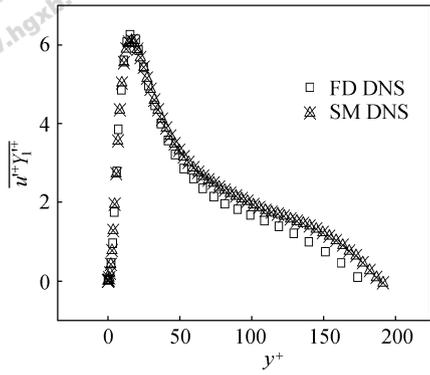


(b)

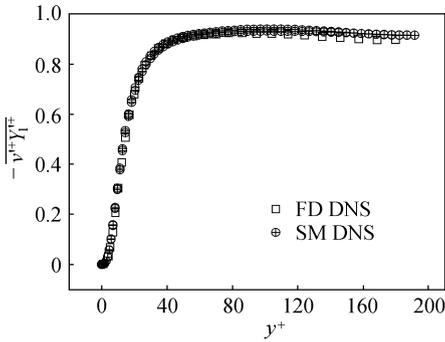
图 2 平均速度 (a) 和速度脉动 (b) 图

Fig. 2 Averaged (a) and RMS values (b) of velocity

图 4 给出化学反应速率系数不同时及时平均浓度剖面。可见 K 值越大，时平均浓度越小。



(a)



(b)

图 3 标量与速度 u (a) 和速度 v (b) 的关联

Fig. 3 u - Y (a) and v - Y (b) correlations

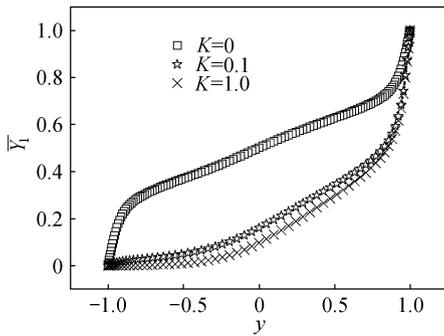
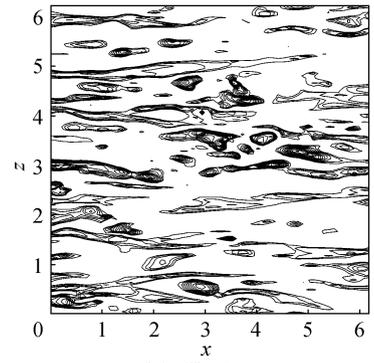


图 4 时平均浓度剖面图

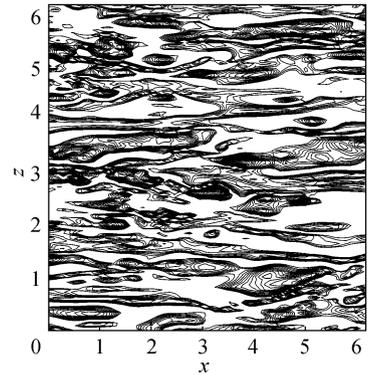
Fig. 4 Averaged correlation

图 5 和图 6 是反应速率系数为 0 和 0.1 时组分脉动量 $Y_1' \geq 2.5$ 的瞬时云图。可以看出，标量场类似于速度场，存在丰富的湍流结构。在近壁区，标量场也有类似于速度场的条带结构，反映了该处层流黏性对湍流的产生和发展的影响。随着 y^+ 增加，条带结构会趋于破碎。化学反应似乎增强了这种破碎的趋势。

用 DNS 统计数据研究了标量关联量运输方程中各项的贡献。有反应时组分浓度脉动关联量 $\overline{Y_1' Y_2'}$ 运输方程的精确形式为

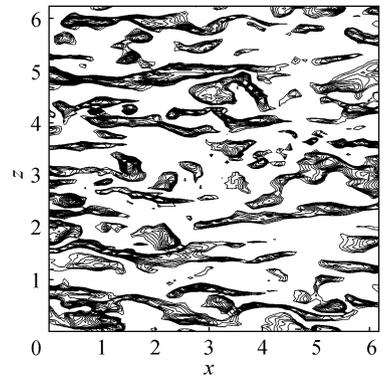


(a) $K=0$

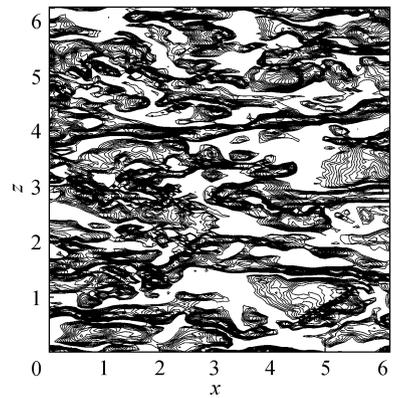


(b) $K=0.1$

图 5 $y^+ = 8.60$ 处浓度脉动 $Y_1' \geq 2.5$ 的瞬时云图
Fig. 5 Instantaneous map of $Y_1' \geq 2.5$ at $y^+ = 8.60$



(a) $K=0$



(b) $K=0.1$

图 6 $y^+ = 23.6$ 处浓度脉动 $Y_1' \geq 2.5$ 的瞬时云图
Fig. 6 Instantaneous map of $Y_1' \geq 2.5$ at $y^+ = 23.6$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\overline{Y_1' Y_2'}) + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} = \\ & \frac{1}{Re \times Pr} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} \right) - 2 \frac{\partial \overline{Y_1'} \partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j \partial x_j} \right] - \\ & \left(\overline{Y_1' u_j} \frac{\partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j} + \overline{Y_2' u_j} \frac{\partial \overline{Y_1'}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial \overline{Y_1' u_j' Y_2'}}{\partial x_j} - \\ & K (\overline{Y_2' Y_1 Y_2} + \overline{Y_1' Y_1 Y_2}) \end{aligned} \quad (10)$$

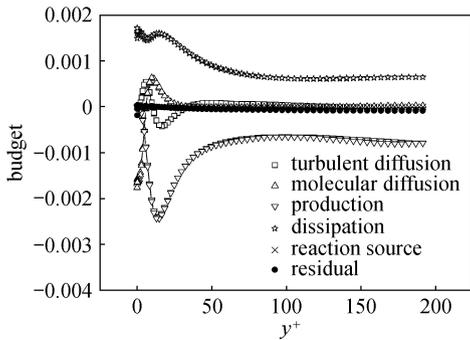
或者

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\overline{Y_1' Y_2'}) + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} = D_{12} + P_{12} + \varepsilon_{12} + S_{12} = \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\overline{Y_1' u_j' Y_2'} + \frac{1}{Re \times Pr} \frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} \right) - \left(\overline{Y_1' u_j} \frac{\partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j} + \right. \\ & \left. \overline{Y_2' u_j} \frac{\partial \overline{Y_1'}}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{Re \times Pr} - 2 \frac{\partial \overline{Y_1'} \partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j \partial x_j} - K (\overline{Y_2' Y_2' Y_1'} + \\ & \overline{Y_1' Y_2' Y_2'} + \overline{Y_2' Y_1' Y_2'} + \overline{Y_2' Y_1' Y_1'} + \overline{Y_1' Y_2' Y_1'} + \overline{Y_1' Y_1' Y_2'}) \end{aligned} \quad (11)$$

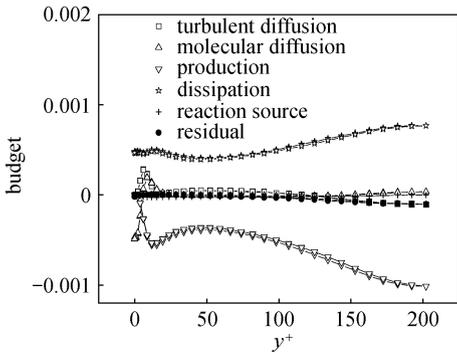
其中， D 、 P 、 ε 和 S 分别代表扩散项、产生项、耗散项和反应源项。反应速率系数 K 为 0、0.1 和 1.0 时的 DNS 统计结果如图 7 所示。可以看到，产生项和耗散项的相对作用比较大，扩散和反应项的相对作用都比较小，因此耗散项的封闭起重要作用，而扩散项的封闭起次要作用。但是，总体上看，由于反应影响了平均浓度及其梯度，所以反应对各项的大小和分布规律有明显的影响。

在 RANS 模拟的封闭形式的 $\overline{Y_1' Y_2'}$ 输运方程中，时间变化项、对流项、分子扩散项和反应项都是精确而无须模拟的，由平均浓度梯度引起的产生项、湍流扩散项和耗散项需要进行封闭。对于产生项，采用各向同性湍流模型 (σ_Y 取为 0.7)

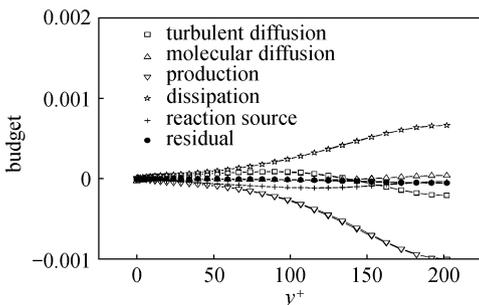
$$P_{12} = - \left(\overline{u_j' Y_1'} \frac{\partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j} + \overline{u_j' Y_2'} \frac{\partial \overline{Y_1'}}{\partial x_j} \right) = 2 \frac{\mu_c}{\rho \sigma_Y} \frac{\partial \overline{Y_1'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j}$$



(a) $K=0$

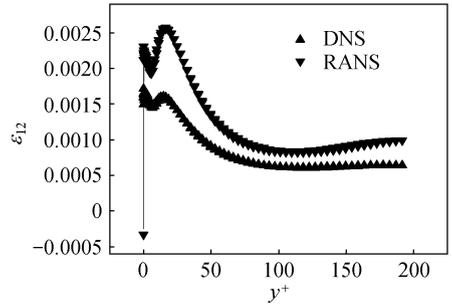


(b) $K=0.1$

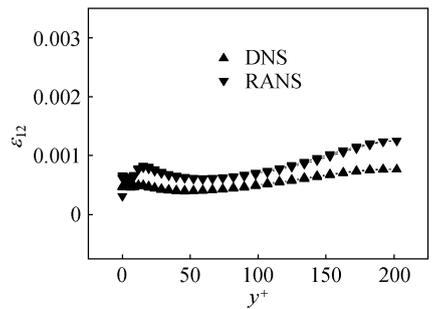


(c) $K=1.0$

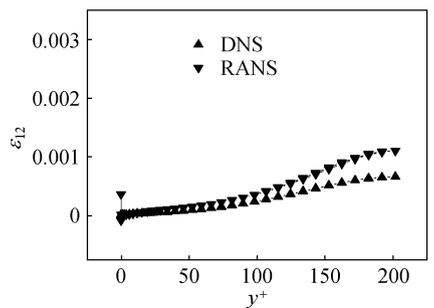
图 7 标量关联量输运方程中有关项的贡献
Fig. 7 Budget of terms in transport equation of scalar correlation-moments



(a) $K=0$



(b) $K=0.1$



(c) $K=1.0$

图 8 耗散项的统计值与模拟值对比
Fig. 8 Dissipation term of correlation-moments

假设关联量的耗散正比于该量本身

$$\epsilon_{12} = 2 \frac{1}{Re \times Pr} \frac{\partial \overline{Y_1'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j} = -2C_2 \frac{\epsilon}{k} \overline{Y_1' Y_2'}$$

对扩散项用梯度模拟

$$D_{12} = \frac{1}{Re \times Pr} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} \right) \right] - \frac{\partial \overline{u_j' Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} = \frac{\mu_t}{\rho \sigma_Y} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} \right) \right]$$

这样，封闭后的关联量运输方程为

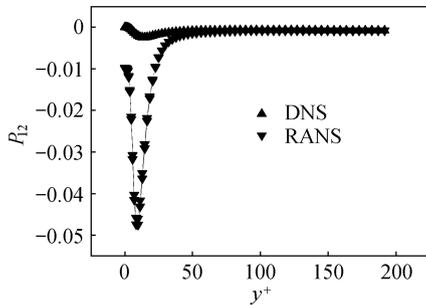
$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{Y_1' Y_2'}) + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\rho \sigma_Y} \frac{\partial \overline{Y_1' Y_2'}}{\partial x_j} \right) +$$

$$2 \frac{\mu_T}{\rho \sigma_Y} \frac{\partial \overline{Y_1'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{Y_2'}}{\partial x_j} - 2C_2 \frac{\epsilon}{k} \overline{Y_1' Y_2'} +$$

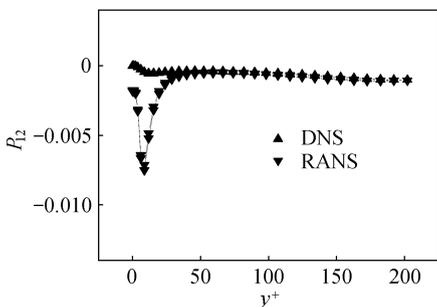
$$K (\overline{Y_2' Y_2' Y_1'} + \overline{Y_1' Y_2' Y_2'} + \overline{Y_2' Y_1' Y_1'} + \overline{Y_1' Y_2' Y_1'}) \quad (12)$$

式中 $\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon}$ ， C_μ 为 0.09。

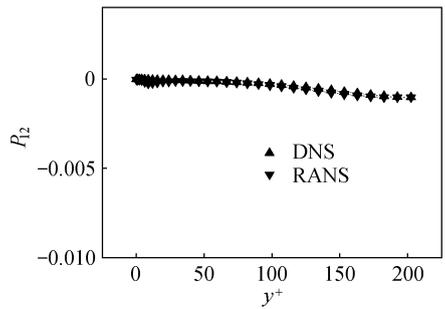
反应速率系数 K 为 0、0.1 和 1.0 时，耗散项、产生项和扩散项 DNS 统计的精确值和模拟值的对比分别见图 8~图 10。可以看到，DNS 统计值和 RANS 模拟值在近壁区以外的大部分区域内符合较好，验证了 RANS 模拟的封闭模型的合理性。在近壁区内产生项的模拟值低于精确值，而扩散项的模拟值高于精确值，其原因是，产生项和扩散项是基于充分发展湍流的梯度模拟，但是在近壁区，湍流不是充分发展的，速度和标量全有条带结构，因此对近壁区的封闭模拟要进行改进，例如可以采用大涡模拟等。化学反应对耗散项的影响最



(a) $K=0$



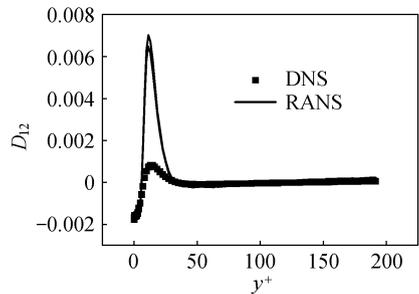
(b) $K=0.1$



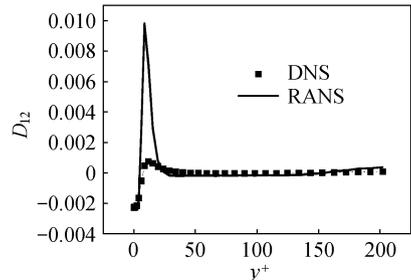
(c) $K=1.0$

图 9 产生项的统计值与模拟值对比

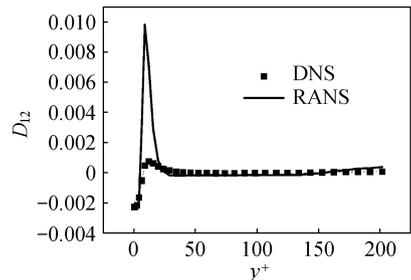
Fig. 9 Production term of correlation-moments



(a) $K=0$



(b) $K=0.1$



(c) $K=1.0$

图 10 扩散项的统计值与模拟值对比

Fig. 10 Diffusion term of correlation-moments

大，降低了耗散，对产生项的影响则在近壁区较大，在湍流充分发展的槽道中心区影响不大。化学反应对扩散项影响最小。

3 结 论

(1) 槽道内湍流流动谱方法单标量扩散直接模

拟结果与文献中差分法直接模拟结果一致。

(2) 等温反应湍流流动的 DNS 结果显示出有反应情况下标量脉动在近壁区有条带结构。

(3) 对标量脉动关联量运输方程有关项的 DNS 统计结果指出, 产生项和耗散项的贡献最大, 扩散项和反应项的贡献很小。但反应对各项大小和分布形状有明显影响。

(4) 标量脉动关联量运输方程有关项的精确值和 RANS 模拟封闭模型中相应的模拟值的对比表明, 耗散项的模拟很好, 产生项和扩散项的模拟总体上也可以, 但是在近壁区有待改进。

符号说明

K ——反应速率系数, $K = B \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$, 其中 B 是化学反应速率的指前因子, E 是活化能, R 是气体常数

RMS——脉动均方根值

u_τ ——壁面摩擦速度, $m \cdot s^{-1}$

w ——化学反应速率

Y_i^+ ——用 u_τ 对组分 Y_i 量纲 1 化得到的量纲 1 浓度

y^+ ——用 u_τ 量纲 1 化得到的量纲 1 纵向坐标

References

- [1] Shankar M, Jacqueline H C, Luc V. Finite-rate chemistry and transient effects in direct numerical simulations of turbulent non-premixed flames. *Combustion and Flames*, 1995, **102**: 285-297
- [2] Benoit B, Fokion N E, Thierry P. Direct numerical simulation of heat release and NO_x formation in turbulent non-premixed flames. *Combustion and Flame*, 1999, **119**: 69-83
- [3] Montgomery C J, Kosaly G, Riley J J. Direct numerical simulation of turbulent reacting flow using a reduced hydrogen-oxygen mechanism. *Combustion and Flame*, 1993, **95** (3): 247-260
- [4] Wang Y, Trouvé A. Artificial acoustic stiffness reduction in fully compressible, direct numerical simulation of combustion. *Combustion Theory and Modelling*, 2004, **8**: 633-660
- [5] Bedat B, Egolfopoulos F N, Thierry Poinso. Direct numerical simulation of heat release and NO_x formation in turbulent nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, 1999, **119**: 69-83
- [6] Overholt M R, Pope S B. Direct numerical simulation of a statistically stationary, turbulent reacting flow. *Combustion Theory and Modelling*, 1999, **3**: 371-408
- [7] Lee Y Y, Pope S B. Non-premixed turbulent reacting flow near extinction. *Combustion and Flame*, 1995, **101**: 501-528
- [8] Xu Chunxiao (许春晓). Direct numerical simulation of turbulent channel flows [D]. Beijing: Tsinghua University, 1995
- [9] Zhou Lixing (周力行), Wang Fang (王方), Zhang Jian (张健). Simulation of swirling combustion and NO formation using a USM turbulence-chemistry model. *Fuel*, 2003, **82** (13): 1579-1586
- [10] Wang Fang (王方), Zhou Lixing (周力行), Xu Chunxiao (许春晓). Large-eddy simulation of correlation moments in turbulent combustion and validation of the RANS-SOM combustion model. *Fuel*, 2006, **85**: 1242-1247
- [11] Kawamura H, Abe H, Shingai K. DNS of turbulence and heat transport in a channel flow with different Reynolds and Prandtl numbers and boundary conditions//Nagano Y, Hanjalic K, Tsuji. 3rd Int. Symp. on Turbulence, Heat and Mass Transfer. Tokyo, 2000: 15-32