

文章编号: 1000-8055(2007)09-1512-06

三维超声速混合层内标量混合的大涡模拟

孙明波, 范晓樯, 梁剑寒, 王振国
(国防科技大学 航天与材料工程学院, 长沙 410073)

摘 要: 对三维对流马赫数 0.62 的超声速混合层流动的标量混合进行大涡模拟, 控制方程对流项采用五阶精度的 WENO 格式求解, 小尺度涡的作用采用一方程 LDKM 亚格子模型处理, 过滤后的组分方程中的亚格子组分对流量采用梯度扩散模化. 模拟得到了混合层流场大尺度拟序结构以及标量场的演化过程, 研究表明标量混合过程受混合层内涡系演化所控制, 标量场具有明显的三维特征. 模拟得到的速度、组分及其脉动的统计时均结果和实验结果相符较好.

关 键 词: 航空、航天推进系统; 超声速混合层; 标量混合; 大涡模拟; 当地动力亚格子动能模型 (LDKM)
中图分类号: V435.12 **文献标识码:** A

Large eddy simulation of scalar mixing in a 3D supersonic mixing layer

SUN Ming bo, FAN Xiaoliang, LIANG Jianhan, WANG Zhenguo
(College of Aerospace and Material Engineering,
National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Large eddy simulation was conducted to study the scalar mixing of a 3D supersonic shear layer with convective Mach number 0.62. Governing equations of large scale eddy were solved with fifth order WENO scheme, and effect of small scale eddy was simulated by using localized dynamic kinetic subgrid scale model (LDKM). The subgrid convective species flux in the filtered species equation was modeled using gradient diffusion method. The results reveal the evolution of the vortex structure of the mixing layer and the scalar field. Simulations show that coherent structures dominate the scalar mixing and the instantaneous distribution of scalar field exhibits obvious 3D characteristics. Statistics such as mean and the root mean square (RMS) of the velocity and the scalar field compares well with the experimental measurements.

Key words: aerospace propulsion system; supersonic shear layer; scalar mixing; large eddy simulation; localized dynamic kinetic subgrid scale model (LDKM)

对于超声速混合层内标量混合的研究, 具有十分重要的学术意义和应用价值. 例如在超燃发动机中燃料与来流的超声速混合是一个难点. 超燃发动机燃烧室内燃料混合的困难主要在于燃烧

室气流的速度非常高, 达几千米/秒, 气流的滞留时间仅为毫秒量级, 这加剧了混合的难度. 燃料混合的不充分必然导致燃烧效率的降低, 这样发动机的效率也不高. 研究燃料标量场的输运和混合

收稿日期: 2006-09-12; 修订日期: 2006-12-18

基金项目: 国家自然科学基金(90505009)

作者简介: 孙明波(1980), 男, 河南温县人, 博士生, 主要从事为高超声速推进技术的研究.

过程对于改善混合效果进而改善燃烧具有指导意义. 目前超声速混合层的标量测量实验报道较少, 这主要是因为对于标量的高空间分辨率十分难以达到. 即便是对于中等的雷诺数, 达到能够分辨 Batchelor 尺度的分辨率水平仍然是很困难的. 典型的实验工作是 Clemens 等采用 NO-PLIF 对超声速混合层的标量混合测量^[1], 他们的实验结果表明: 对于对流马赫数 Ma_c 小于 0.6 的超声速标量混合层, 流动呈二维特征; 对于大于 0.6 的情况, 流动中出现的三维不稳定结构使得标量场呈现出三维特性. Sankaran 采用线性涡模型针对 Clemens 等的实验研究了超声速混合层的标量混合过程^[2], 其采用的无粘项差分是 MacCormack 预估-校正的显式差分格式, Menon 的数值实验^[3]表明这一格式对于标量流场间断面两侧会出现非物理的抖动, 因而计算结果比较粗糙.

本文采用高精度高分辨率的 WENO 格式, 将小尺度涡作用采用一方程亚格子模型模化, 对三维超声速混合层内的标量混合进行大涡模拟研究.

1 控制方程

经过滤的大涡模拟控制方程如下

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij})}{\partial x_j} \tag{2}$$

$$\frac{\partial (\bar{E})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{E} + P) \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial (\bar{q}_i + \tilde{q}_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial [\tilde{u}_i (\bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij})]}{\partial x_j} \tag{3}$$

此处 $\bar{\tau}_{ij} = 2\mu S_{ij}$, $\tau_{ij} = 2\mu^{sgs} S_{ij} - \frac{2}{3}\rho_k \delta_{ij}$ 且

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)$$

一方程亚格子模型对应的湍动能方程^[4]

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{k} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu^{sgs}}{\alpha} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right] + P_k - C_d \bar{\rho} \tilde{k}^{3/2} \tag{4}$$

其中 $\mu^{sgs} = C_\mu \bar{\rho} \Delta^{-1}$, $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$, $P_k = -\tau_{ij} \cdot (\partial \tilde{u}_i / \partial x_j)$, 经验常数 α_k 取 1.0. 利用 Menon 等提出的 LDKM 模型^[4] (localized dynamic K^{sgs} model), 对湍动能方程在网格滤波的基础上再进行一

次检验滤波(以 $\frown$ 表示), 最后可得到

$$C_\mu = - \frac{L_{ij} D_{ij}}{2 D_{ij} D_{ij}}$$

其中

$$L_{ij} = \overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \frac{\overline{\tilde{u}_i} \overline{\tilde{u}_j}}{\bar{\rho}} - \frac{1}{3} \bar{\rho} \left(\overline{\tilde{u}_k \tilde{u}_k} - \frac{\overline{\tilde{u}_k} \overline{\tilde{u}_k}}{\bar{\rho}} \right) \delta_{ij}$$
$$D_{ij} = \bar{\rho} \left(\overline{\frac{\tilde{u}_k \tilde{u}_k}{2 \bar{\rho}}} - \frac{\overline{\tilde{u}_k} \overline{\tilde{u}_k}}{2 \bar{\rho} \bar{\rho}} \right)^{1/2} \left(\overline{\tilde{S}_{ij}} - \frac{1}{3} \overline{\tilde{S}_{kk}} \delta_{ij} \right)$$

并且

$$C_d = \frac{\mu \Delta}{\bar{\rho}} \frac{\overline{\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\overline{\tilde{u}_i}}{\bar{\rho}} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\overline{\tilde{u}_j}}{\bar{\rho}} \right)}{\left(\overline{\frac{\tilde{u}_k \tilde{u}_k}{2 \bar{\rho}}} - \frac{\overline{\tilde{u}_k} \overline{\tilde{u}_k}}{2 \bar{\rho} \bar{\rho}} \right)^{1/2}}$$

组分标量方程经过 Favre 平均和空间滤波后

$$\frac{\partial \bar{\gamma}_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\gamma}_m - \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{\gamma}_m}{\partial x_i} + \phi_{i,m}^{sgs} + \Theta_{i,m}^{sgs} \right) = 0 \tag{5}$$

这里 $\phi_{i,m}^{sgs}$, $\Theta_{i,m}^{sgs}$ 分别代表的是亚格子组分对流通量、亚格子扩散质量通量. 忽略掉亚格子项 $\Theta_{i,m}^{sgs}$, 通常认为

$\phi_{i,m}^{sgs} = \bar{\rho} [\tilde{u}_i \tilde{\gamma}_m - \tilde{u}_i \tilde{\gamma}_m] = -(\tilde{u}_i^{sgs} / Sc_m) (\partial \tilde{\gamma}_m / \partial x_i)$ 式中 Sc_m 是组分 m 的施密特数. 这是以将亚格子组分对流通量同组分梯度扩散相关联的封闭方法, 下文简称为组分梯度模型.

2 模拟对象和数值方法

为了将计算结果与 Clemens 和 Mungal 的实验^[1] 结果相对照, 所有条件均与 Clemens-Mungal 的实验条件相对应. 实验中的混合区长度为 500 mm, 宽度 80 mm, 展向宽 100 mm. 计算中为了方便, 取混合区的长度为 500 mm, 宽度为 80 mm, 展向 50 mm. 上下两股平行流之间的尖劈厚度 0.8 mm. 整个流场取网格 $321 \times 151 \times 41$, 尖劈上对应布置 7 个网格点, 流场网格疏密据此调整. 将流场分为 32 个区域采用 32 台微机组成的集群并行系统进行计算. 实验中上下两股气流都是空气, 为了计算上下流动的混合状况, 将上股来流认为是另一种不同成分的完全气体, 进行标记并用组分方程计算, 此时取 $Sc_m = 1.0$.

表 1 列出了上下两股来流的流动参数.

对于 LES 的误差研究表明其数值离散格式需要慎重选择. 文献[5] 的研究表明二阶精度的一类格式以及三阶精度的 WENO 格式的模拟结果

表 1 混合层实验来流参数
Table 1 Experimental conditions

Ma_c	Ma_1	Ma_2	$U_1/$ (m/s)	$U_2/$ (m/s)	$T_1/$ K	$T_2/$ K	$p_{o1}/$ kPa	$p_{o2}/$ kPa
0.62	2.0	0.4	480	130	150	252	495	75

都明显低估了湍流动能,流动的大尺度结构也因为高数值耗散而受损,五阶精度的 WENO 格式的计算结果则改善很多. 基于此本文选用五阶精度的 WENO 格式对控制方程的无粘项进行离散. (weighted essentially non oscillatory) WENO 格式通过选择性地对 ENO 重构值进行加权处理,以在光滑区满足更高阶的计算要求,而在间断区保持原有的 ENO 性质^[6]. 所有的粘性通量用二阶中心差分离散,在时间推进上采用二阶时间精度的具有 TVD 保持性质的 Runge Kutta 方法^[6]. CFL 数取为 0.5.

壁面采用无滑移绝热条件. 给定超声速入口条件,超声速出口采用三阶外推;亚声速出入口采用 Poinsett-Lele 特征值方法^[7]给出. 对应于五阶 WENO 格式,壁面附近的第一、二层网格物理量的计算模板补充值采用镜像法处理,镜像点物理量按照反射条件给出. 入口、出口的一、二层网格物理量的计算模板补充值均采用一阶外推. 为加速混合层的发展,在入口速度剖面上,叠加以-0.5~0.5 之间的伪随机数模拟的白噪声,振幅为来流对流速度的 3%. 采用并行多区网格时,区域之间的交界处为了保证 WENO 计算的精度,将各个区域向交接区域中传递三层网格物理量.

3 结果和讨论

3.1 超声速混合层流动的计算结果

计算取流场特征长度和特征速度为 0.01 m 和 480 m/s,文中坐标皆以特征长度进行无量纲化. 从图 1 可以清晰的看出超声速混合层流动中拟序结构的存在. 初始阶段的混合层是极不稳定的,离开入口一定距离后开始出现 Kelvin-Helmholtz 不稳定波,其后展向涡发生了扭曲、变形,从图 1(b)可以看出,由于混合层对流马赫数 $Ma_c > 0.6$,混合层的三维效应十分显著,初始段展向涡的配对合并行为已经非常模糊. 流动到 $x = 25$ 时候,大涡结构出现破裂. 从图 2 可以看出,混合层初始段,流动在展向出现剪切,开始出现流向涡(图 2(a)和(b)). 从图 2 中还可以看到,流向涡在

初始阶段相互纠缠、拉伸,沿流向其涡量不断增加,从初期 $\omega_x = 0.002$ 发展到后期 $\omega_x = 0.1$,与展向涡处于同一量级($\omega_x = 0.2$),这进一步说明了三维复杂涡结构. 整个混合层的发展主要受大涡结构的演化所控制.

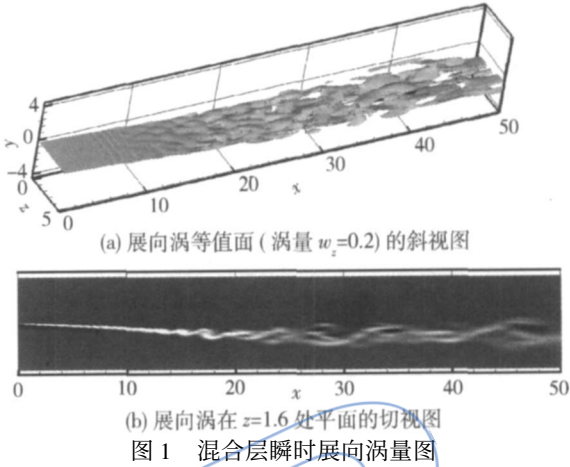


图 1 混合层瞬时展向涡量图

Fig. 1 Instantaneous spanwise vorticity

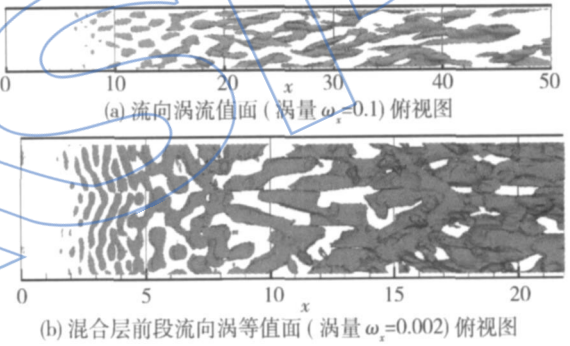
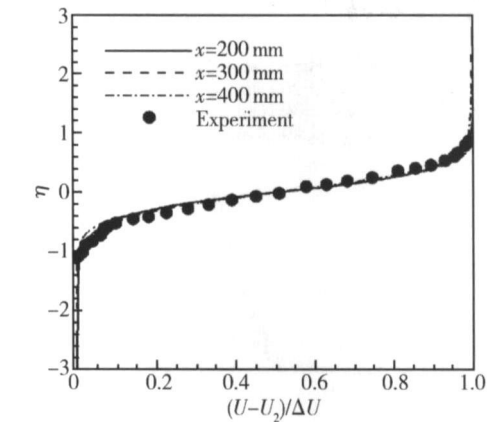


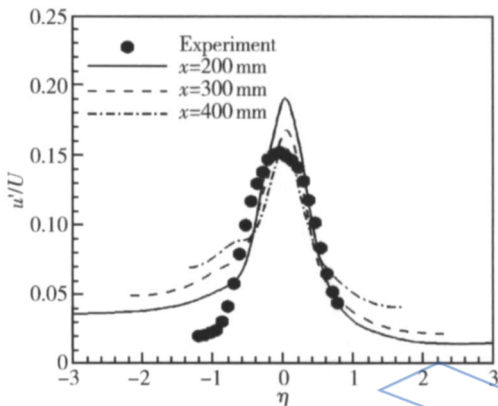
图 2 混合层瞬时流向涡量图

Fig. 2 Instantaneous streamwise vorticity

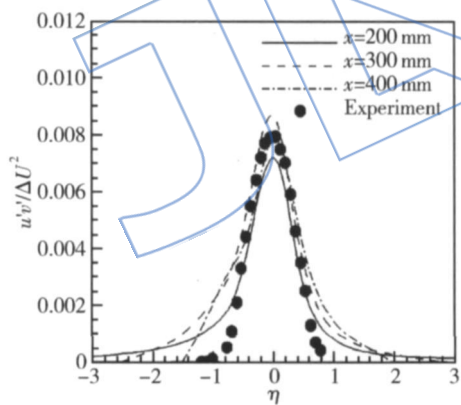
图 3(a) 给出的流向时均速度剖面 and 实验结果相符的很好. 这里流向速度通过 $(u - U_2)/(U_1 - U_2)$ 标准化, U_1 和 U_2 分别是上下平行流中的超声速来流速度和亚声速来流速度. 横向坐标通过 $\eta = (y - Y_c)/\delta$ 标准化, Y_c 是指当 $(u - U_2)/(U_1 - U_2)$ 为 0.5 时的横向位置. δ 是混合层的厚度,定义为 $(u - U_2)/(U_1 - U_2)$ 分别为 0.95 和 0.05 时两者之间的距离. 可以看出不同流向位置处的速度剖面通过上述标准化的定义符合的很好,这表明混合层发展具有自相似性. 图 3(b) 比较了流向速度脉动的 RMS(均方根)剖面. 可以看出, RMS 剖面在中心流动区域计算结果较好,自由流动区域中的速度脉动强度的计算结果却偏大了. Geogiadis 等人对超声速混合层的计算也发现了这种情况^[8]. 图 3(c) 给出了 Reynolds 应力的 RMS 时均剖面,可以看到剖面峰值与实验结果相符的很好,这是



(a) 时均流向速度剖面图



(b) 流向速度脉动强度分布图



(c) 雷诺应力 $\overline{u'v'}$ 分布图

图 3 流向时均速度与速度脉动分布图

Fig.3 Profiles of mean and RMS axial velocity

由于计算得到的横向脉动速度在中心流动区域偏低造成的. 从 Sankaran 进一步的计算结果^[9]来看, 流向速度脉动和 Reynolds 应力的 RMS 分布计算结果同展向宽度以及展向网格量有关.

3.2 超声速混合层标量混合的计算结果

图 4 给出了的标量场的某时刻的等值面图, 可以看出其空间分布与图 1 具有很大的相似性, 在混合层的初段, 标量的等值面存在的细小扰动

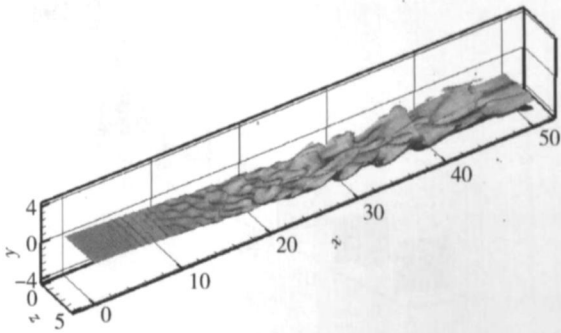


图 4 标量等值面 $\tilde{y}_m = 0.5$ 的斜视图

Fig. 4 Oblique view, isosurface of scalar structures ($\tilde{y}_m = 0.5$)

正是由初段的 Kelvin-Helmholtz 不稳定波引起的, 随后展向涡和流向涡的相互卷吸、缠绕、拉伸等行为带动着标量混合过程, 标量场的空间分布正对应于混合层大尺度涡的空间结构.

图 5~ 图 7 给出了时间间隔为 4.8 (= 100 μ s) 的标量场的俯视图以及剖面图. 同时从图 5~ 图 7 可以看出, 标量场的空间分布具有明显的三维特征, 由图 5 可以看到在展向上出现了标量等值面发生了扭曲、变形, 标量场形成了复杂的絮状结构, 这些絮状结构一方面沿流向快速的平行移动, 同时在展向和法向出现倾斜和变形(见图 6、图 7). 这种三维的絮状结构是流场复杂涡结构的演化造成的, 通过标量交界面上的相互贯穿可以加速标量混合过程.

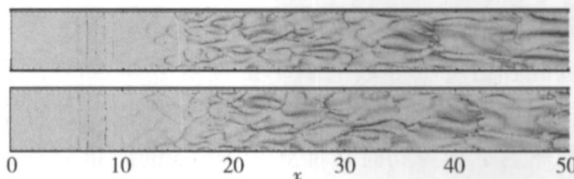


图 5 标量等值面($\tilde{y}_m = 0.5$) 俯视图
(两幅图时间间隔 $\Delta t = 4.8$)

Fig. 5 Top view, isosurface of scalar structures ($\tilde{y}_m = 0.5$) with timestep $\Delta t = 4.8$

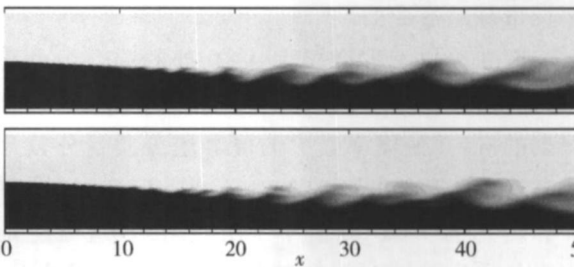


图 6 标量等值面在平面 $z = 1.6$ 的切视图
(两幅图时间间隔 $\Delta t = 4.8$)

Fig. 6 Slices at $z = 1.6$, contours of scalar structures with timestep $\Delta t = 4.8$

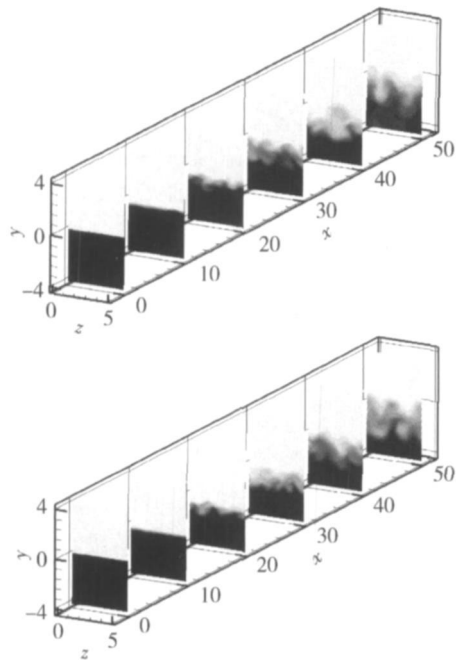


图 7 标量等值面在平面 $x=10, 20, 30, 40, 50$ 的切视图(两幅图时间间隔 $\Delta t=4.8$)

Fig.7 Oblique view of axial slices at $x=10, 20, 30, 40, 50$, contours of scalar with timestep $\Delta t=4.8$

图 8 给出了不同流向位置处混合物组分质量分数 ξ 时均的和脉动 RMS 时均分布. 注意此处横向坐标通过 $\eta=(y-Y_c)/\delta$ 标准化, Y_c 是指当为 $\xi=0.5$ 时的横向位置, δ 是混合物混合层的厚度, 定义为 ξ 分别为 0.95 和 0.05 时两者之间的距离. 实验的混合物质量分数 RMS 平均结果是通过混合物质量分数的概率密度函数(PDF)计算得到的, 本文将瞬时数据在一长时段上进行集总然后平均得到时均和脉动 RMS 的质量分数分布. 从图 8 可以看出数值计算结果和实验结果相符的较好. 平均的混合物分数在超声速流动一侧的计算值要比实验值小一些. 同时可以看到组分质量分数的 RMS 明显比实验值要偏大, 这可能是由亚格子组分扩散通量采取梯度扩散封闭高估了标量脉动造成的.

图 9 给出了混合层中 $\eta=0$ 处的混合组分质量分数的 PDF 分布. 在不同的流向位置下, 计算得到的 $\eta=0$ 处概率最大的混合组分质量分数为 0.5, 这和实验结果给出的 0.4 有一定差异, 同时计算得到的 PDF 峰值小于实验结果, 这可能是由组分梯度扩散封闭的扩散本质特征造成的^[9]. 一般认为组分梯度模型的各向同性特征对于小尺度标量场的计算存在困难, 这种模化方法同样不能够模拟拟序结构中存在的逆梯度扩散过程. 进一步的工作需要改进标量混合的亚格子模型.

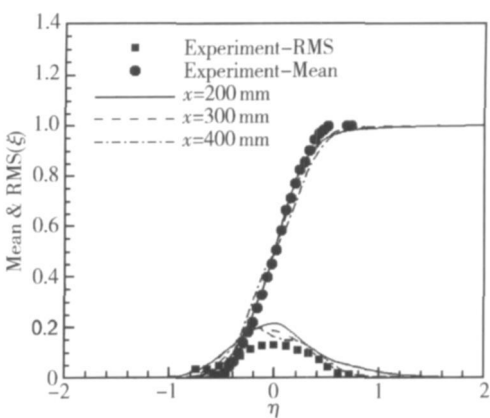


图 8 标量质量分数的时均及脉动强度分布

Fig. 8 Mean and RMS of scalar mass fraction

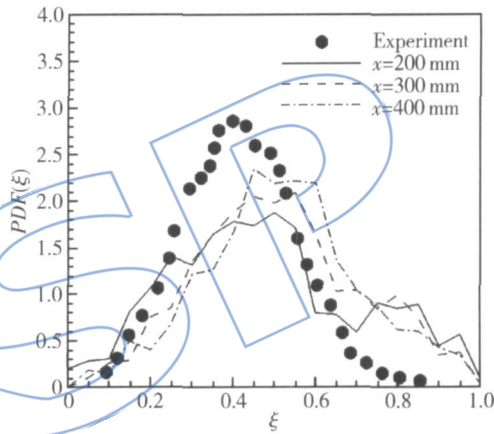


图 9 标量质量分数的概率密度分布

Fig.9 PDF of the scalar mass fraction

4 结 论

本文对对三维超声速混合层内的标量混合过程进行大涡模拟, 控制方程对流项采用五阶精度的 WENO 格式求解, 小尺度涡的作用采用一方程 LDKM 亚格子模型模拟. 组分方程的亚格子组分对流通量采用梯度扩散封闭. 模拟得到了混合层流场大尺度拟序结构以及标量场的演化过程, 研究表明标量混合过程受混合层内涡系演化所控制, 标量场具有明显的三维特征. 模拟得到的速度、组分及其脉动的统计时均结果和实验结果相符的较好. 组分质量分数的概率密度函数与实验结果差异比较明显, 这可能是由组分梯度模型的扩散本质特征造成的. 对于标量混合过程更精确的预测需要建立更为合适的模型, 这是下一步研究的重点.

致谢: 国防科技大学航天与材料工程学院侯中喜副教授提供了本研究所用的五阶 WENO 格式, 在此表示感谢!

参考文献:

- [1] Clemens N T, Mungal M G. Large scale structure and entrainment in the supersonic mixing layer[J]. Journal of Fluid Mechanics[J], 1995, 284: 171-216.
- [2] Sankaran V, Genin F, Menon S. A sub-grid mixing model for large eddy simulation of supersonic combustion[R]. AIAA 2004-0801.
- [3] Menon S, Fryxell B. Simulations of strong shock shear layer interactions in complex domains[R]. CCL Report 2004-015, Computational Combustion Laboratory, Georgia Institute of Technology, 2004.
- [4] Menon S, Yeung P K, Kim W W. Effect of sub-grid models on the computed interscale energy transfer in isotropic turbulence [J]. Computers and Fluids, 1996, 25(2): 165-180.
- [5] Blin L, Hadjadj A, Vervisch L. Large eddy simulations of compressible turbulent flows[R]. AIAA 99-0787.
- [6] Shu C W. High order ENO and WENO schemes for computational fluid dynamics, in high order methods for computational physics[M] // Barth T J, Deconinck H. Lecture notes in computational science and engineering. Volume 9. [S. l.]: Springer-Verlag, 1999: 439-582.
- [7] Poinso T, Lele S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flow[J]. Journal of Computational Physics, 1992, 101(2): 104-129.
- [8] Georgiadis N J, Alexander J I D, Reshotko E. Hybrid Reynolds averaged Navier-Stokes/ large eddy simulations of supersonic turbulent mixing[J]. AIAA Journal, 2003, 41(2): 218-229.
- [9] Sankaran V, Menon S. LES of scalar mixing in supersonic shear layers[J]. Proceedings of the combustion Institute, 2004, 30(2): 2835-2842.