

化学反应流中分子扩散的二点封闭 MCA 模型¹⁾

张子范 何国威

(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 在化学反应流的概率密度函数 (PDF) 方法中, 对流项和化学反应项都是封闭的, 但分子扩散项必须模拟. 现有的分子扩散模型都是唯象的, 需要引入外加参数, 并难以通过一些基本物理过程的检验. 本文发展了随机映射逼近 (mapping closure approximation, MCA) 方法, 解析地从控制方程导出一个封闭的分子扩散模型. 该方法考虑两点联合概率密度函数方程, 引入空间特征尺度, 因此解决了以往映射封闭方法中分子扩散速率无法确定的问题. 数值模拟表明该方法能用于预测标量扩散的速度, 以及概率密度函数和条件平均扩散等统计量.

关键词 分子扩散, 随机映射逼近, 概率密度函数, 化学反应流

引 言

湍流化学反应流包含 3 个基本的物理过程: 对流、化学反应和分子扩散. 概率密度函数方法可以准确地处理对流和化学反应过程, 但必须模拟分子扩散效应. 现有的分子扩散模型, 包括线性确定性模型、颗粒相互作用模型和朗之万方程模型都是唯象模型, 不能直接从控制方程导出^[1~3]. 更重要的是, 这些模型不能通过一些基本的物理过程的检验. 例如, 线性确定性模型不能描述从初始非高斯分布到高斯分布的弛豫过程. 最近发展的映射封闭 (mapping closure) 方法^[4~7]从控制方程出发解析地导出一个分子扩散模型. 该模型能够描述扩散过程中从非高斯到高斯的弛豫过程. 但该模型存在两个重要缺陷: (1) 不能描述非对称双脉冲分布的弛豫过程; (2) 不能给出弛豫过程的时间尺度. 第 1 个问题可以通过引入高阶项的随机映射逼近 (mapping closure approximation, MCA) 方法来解决^[8]. 本文将发展基于两点联合概率密度函数的随机映射逼近 (MCA) 方法来解决第 2 个问题.

概率密度函数方法可以准确地处理化学反应项, 故本文略去化学反应项, 只研究二维均匀各向同性湍流场中被动标量 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 的扩散

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = \Gamma \nabla^2 \varphi \quad (1)$$

其中 \mathbf{u} 为速度场, Γ 为扩散系数. 根据刘维尔定

理, $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 的概率密度函数 $f(\psi; t)$ 的输运方程为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \psi} [f \Gamma \langle \nabla^2 \varphi | \psi \rangle] = 0 \quad (2)$$

其中 $\langle \nabla^2 \varphi | \psi \rangle$ 表示标量扩散 $\nabla^2 \varphi(\mathbf{x}, t)$ 在 $\varphi(\mathbf{x}, t) = \psi$ 处的条件平均. $f(\psi; t)$ 是一点概率密度函数, 不包含流场的空间结构信息, 不能由此计算 $\langle \nabla^2 \varphi | \psi \rangle$, 因此方程 (2) 是不封闭的. 映射封闭方法假定湍流标量场 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 与标准高斯随机场 $\theta(\mathbf{x}, t)$ 之间存在一个映射 X

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = X(\theta(\mathbf{x}, t), t) \quad (3)$$

使得标量场与高斯场的概率密度函数有以下关系

$$f(\psi; t) = \frac{g(\eta)}{\partial X(\eta, t) / \partial \eta} \quad (4)$$

其中 $g(\eta)$ 是标准高斯场的概率密度函数

$$g(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\eta^2}{2}\right)$$

对映射函数 (3) 求导并应用高斯场的统计特性^[9]得到

$$\begin{aligned} \langle \nabla^2 \varphi | \psi \rangle &= \frac{\partial^2 X}{\partial \eta^2} \left\langle \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \middle| \eta \right\rangle + \frac{\partial X}{\partial \eta} \left\langle \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_k \partial x_k} \middle| \eta \right\rangle = \\ &= -2\rho''(0, t) \left(\frac{\partial^2 X}{\partial \eta^2} - \eta \frac{\partial X}{\partial \eta} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

2002-12-02 收到第 1 稿, 2004-01-13 收到修改稿.

1) 国家重点基础研究发展规划 (G1999032801, G2000077305) 和国家杰出青年科学基金 (10325211) 资助项目.

从方程 (2)~ 方程 (5) 可推导出映射函数 $X(\eta, t)$ 的控制方程^[7]

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -2\rho''(0, t)\Gamma \left(\frac{\partial^2 X}{\partial \eta^2} - \eta \frac{\partial X}{\partial \eta} \right) \quad (6)$$

其中 $\rho''(0, t) = \left. \frac{\partial^2 \rho(r, t)}{\partial r^2} \right|_{r=0}$, $\rho(r, t)$ 为高斯场的空间两点关联函数. 从式 (6) 解出映射函数 $X(\eta, t)$ 后, 由式 (4) 即可求出湍流标量场的概率密度函数.

$\rho(r, t)$ 是一个未知函数, 无法从映射函数得出, 因此方程 (6) 仍然是不封闭的. 以往的研究工作^[5]在求解映射函数 $X(\eta, t)$ 时一般是先直接数值模拟求出标量耗散, 再确定 $\rho''(0, t)$. 或者对时间作无量纲处理^[7], 从而回避了这个问题.

两点关联函数 $\rho(r, t)$ 反映了随机场的结构, $\rho''(0, t)$ 是一个与随机场耗散有关的空间特征尺度. 过去的映射封闭方法只要求映射函数满足一点概率密度函数约束方程 (4). 一点概率密度函数不反映随机场的空间结构, 因而由此出发不能确定 $\rho(r, t)$. 两点联合概率密度函数中包含了空间两点关联函数, 描述了随机场的空间结构. 本文从映射关系 (3) 出发, 确定湍流标量场与高斯型参照场之间两点联合概率密度函数的关系. 通过对两点联合概率密度函数方程的分析, 找出关联函数 $\rho(r, t)$ 的控制方程. 这样得到一个不同于以往唯象模型的, 直接从流体力学控制方程导出的, 不含任何外加参数的标量分子扩散模型.

1 基于两点联合概率密度函数的随机映射逼近

标准高斯随机场 $\theta(x, t)$ 的两点联合概率密度函数 $g(\eta_1, \eta_2; r, t)$ 为

$$g(\eta_1, \eta_2; r, t) \equiv g(\eta_1, \eta_2; \rho(r, t)) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-\rho^2}} \exp \left[-\frac{\eta_1^2 + \eta_2^2 - 2\rho\eta_1\eta_2}{2(1-\rho^2)} \right] \quad (7)$$

标准高斯场的均值为 0, 方差为 1, 关联函数 $\rho(r, t)$ 是时间 t 和空间两点距离 r 的函数. 根据映射关系 (3), 标量场 $\varphi(x, t)$ 的两点联合概率密度函数 $f(\psi_1, \psi_2; r, t)$ 与高斯场 $\theta(x, t)$ 两点联合概率密度函数 $g(\eta_1, \eta_2; r, t)$ 有如下关系

$$f(\psi_1, \psi_2; r, t) = g(\eta_1, \eta_2; r, t) \frac{\partial(X_1, X_2)}{\partial(\eta_1, \eta_2)} = g(\eta_1, \eta_2; r, t) \left/ \left(\frac{\partial X(\eta_1, t)}{\partial \eta_1} \frac{\partial X(\eta_2, t)}{\partial \eta_2} \right) \right. \quad (8)$$

其中 $X_k = X(\eta_k, t)$. 从上式可推导出两点联合概率密度函数 $f(\psi_1, \psi_2; r, t)$ 的演化方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \psi_1} \left[f \frac{\partial X_1}{\partial t} \right] + \frac{\partial}{\partial \psi_2} \left[f \frac{\partial X_2}{\partial t} \right] = \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} f \quad (9)$$

概率密度函数方法中对流项可以准确处理, 关键问题是对分子扩散项的模拟. 本文考虑标量场 $\varphi(x, t)$ 的纯扩散过程, 将控制方程 (1) 中的对流项略去可推导出标量纯扩散的两点联合概率密度函数方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \psi_1} [f \Gamma \langle \nabla^2 \varphi_1 | \psi_1, \psi_2 \rangle] + \frac{\partial}{\partial \psi_2} [f \Gamma \langle \nabla^2 \varphi_2 | \psi_1, \psi_2 \rangle] = 0 \quad (10)$$

将式 (9), 式 (10) 相减并将式 (8) 代入可得

$$\frac{\partial}{\partial \eta_1} \left(\Gamma \Delta_{1g} \frac{\partial X_1}{\partial \eta_1} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta_2} \left(\Gamma \Delta_{2g} \frac{\partial X_2}{\partial \eta_2} \right) = \frac{\partial g}{\partial t} \quad (11)$$

其中

$$\Delta_k = \langle \nabla^2 \varphi_k | \psi_k \rangle - \langle \nabla^2 \varphi_k | \psi_1, \psi_2 \rangle \quad (12)$$

标量扩散的条件平均值可根据映射关系 (3) 和标准高斯随机场的性质^[9] 计算出来

$$\begin{aligned} \langle \nabla^2 \varphi_k | \psi_1, \psi_2 \rangle &= \frac{\partial^2 X_k}{\partial \eta_k^2} \left\langle \frac{\partial \theta_k}{\partial x_p} \frac{\partial \theta_k}{\partial x_p} \right| \eta_k, \eta_l \rangle + \\ &\frac{\partial X_k}{\partial \eta_k} \left\langle \frac{\partial^2 \theta_k}{\partial x_p \partial x_p} \right| \eta_k, \eta_l \rangle = \\ &\frac{\partial^2 X_k}{\partial \eta_k^2} \left\{ -2\rho''(0, t) + \frac{\rho'^2(r, t)}{(1-\rho^2)^2} + \right. \\ &\left. [(\eta_l - \rho\eta_k)^2 - 1 + \rho^2] \right\} + \\ &\frac{\partial X_k}{\partial \eta_k} \frac{1}{1-\rho^2} [(\rho''(r, t) + \rho'(r, t)/r)(\eta_l - \rho\eta_k) + \\ &2\rho''(0, t)(\eta_k - \rho\eta_l)] \end{aligned} \quad (13)$$

上式中仅对下标 p 作重复求和; 当 $k=1$ 时 $l=2$, 当 $k=2$ 时 $l=1$; $\rho'(r, t) = \frac{\partial \rho(r, t)}{\partial r}$. 将式 (5), 式 (13) 代入式 (12) 可得

$$\begin{aligned} \Delta_k &= -\frac{\partial^2 X_k}{\partial \eta_k^2} \frac{\rho'^2(r, t)}{(1-\rho^2)^2} [(\eta_l - \rho\eta_k)^2 - 1 + \rho^2] - \\ &\frac{\partial X_k}{\partial \eta_k} \frac{\rho''(r, t) + \rho'(r, t)/r - 2\rho\rho''(0, t)}{1-\rho^2} (\eta_l - \rho\eta_k) \end{aligned} \quad (14)$$

对于近似高斯分布的标量场, 映射函数 $X(\eta, t)$ 近似为 η 的线性函数, 此时 $\frac{\partial^2 X}{\partial \eta^2} \approx 0$. 将式 (14) 代

入式 (11), 化简后得到高斯参照场 $\theta(\mathbf{x}, t)$ 两点关联函数 $\rho(r, t)$ 的控制方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2\Gamma[\rho''(r, t) + \rho'(r, t)/r - 2\rho\rho''(0, t)] \quad (15)$$

映射函数方程 (6) 与高斯场关联函数方程 (15) 联立成一个封闭的方程组. 映射函数 $X(\eta, t)$ 可以不依赖任何经验参数独立解出, 随后可由此计算湍流标量场的概率密度函数和其他统计量.

2 数值结果与分析

标量在均匀各向同性湍流场中扩散时, 与之对应的标准高斯场的两点关联函数有以下性质: (1) $\rho(0, t) = 1.0$; (2) $\rho(r, t) \leq 1.0$; (3) 当 $t \rightarrow +\infty$ 时标量场扩散趋于一个均匀场, 此时 $\rho(r, +\infty) \rightarrow 1.0$. 我们现对方程 (15) 作初步分析, 讨论它能否保证 $\rho(r, t)$ 满足这些性质.

将关联函数 $\rho(r, t)$ 在 $r = 0$ 附近作泰勒展开, 方程 (15) 可化为

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(r, t) = 2\Gamma\left[\frac{2}{3}\rho^{(4)}(0, t) - \rho''^2(0, t)\right]r^2 + O(r^4) \quad (16)$$

显然有

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(0, t) = 0 \quad (17)$$

$\rho(0, t)$ 的初始值 $\rho(0, 0) = 1.0$, 因此在控制方程 (15) 中 $\rho(0, t) = 1.0$ 成立.

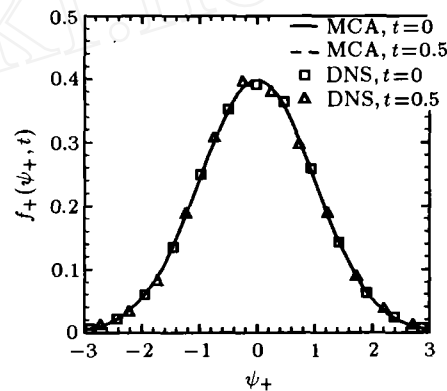
方程 (15) 右边的第 1, 第 2 项为扩散项, 函数 $\rho(r, t)$ 在扩散项作用下随时间发展趋向一个常数. $0 < \rho(r, t) \leq 1.0$ 时, 第 3 项 $-2\rho\rho''(0, t) > 0$, 它的作用是使 $\rho(r, t)$ 值增大. 当函数 $\rho(r, t)$ 趋向常数时, $\rho''(0, t) \rightarrow 0$, 此时第 3 项与扩散项均为 0, 因此 $\rho(r, t)$ 将保持为该常数值. 已证明在 $r = 0$ 处 $\rho(0, t) = 1.0$, 因此若初始时刻 $0 < \rho(r, 0) \leq 1.0$, 在湍流标量扩散过程中方程 (15) 可以保证 $\rho(r, t)$ 的值在 $0 < \rho(r, t) \leq 1.0$ 的范围内, 随时间发展最后趋向常值 1.0.

由于对两点关联函数的性质所知甚少, 以上对方程 (15) 性质的分析并不完全. 为验证方程 (6) 和方程 (15) 联立描述分子扩散过程的有效性和适用性, 对方程组进行数值求解. 数值方法采用二阶 Adams-Bashforth 方法, 方程 (6) 的计算区域为 $-5 \leq \eta \leq 5$, 方程 (15) 的计算区域为 $0 \leq r \leq \pi$, 边界上采用外插求导的处理方法. 我们将标量扩散方程 (1) 略去速度场进行数值计算, 即对随机标量场的纯扩散

过程进行直接数值模拟. 采用二阶 Adams-Bashforth 方法求解方程, 计算区域为 $0 \leq x, y \leq 2\pi$, 采用周期边界条件. 初始标量场 $\varphi(\mathbf{x}, 0)$ 取两种: 高斯场 $\theta(\mathbf{x})$ 和一种非高斯场 $\theta(\mathbf{x}) + \theta(\mathbf{x})^3$, 对应的映射函数 $X(\eta, 0)$ 分别为 η 和 $\eta + \eta^3$. 初始高斯参照场的关联函数 $\rho(r, 0)$ 由初始标量场的关联函数和映射函数确定.

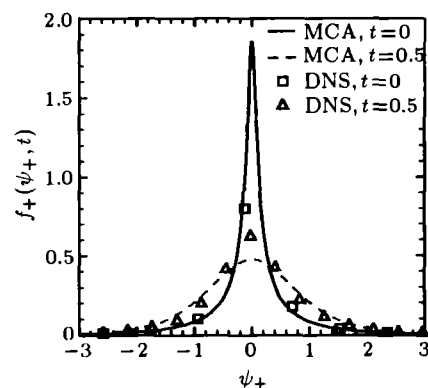
图 1 和图 2 分别表示归一化的标量概率密度函数 $f_+(\psi_+, t)$ 和条件平均扩散 $\theta_+(\psi_+, t)$ 在标量扩散过程中不同时刻的分布情况, 其中

$$\left. \begin{aligned} f_+(\psi_+, t) &= \sigma(t) \cdot f(\psi; t) \\ \theta_+(\psi_+, t) &= \theta(\psi, t) / \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(\psi, t) f(\psi; t) d\psi \right]^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (18)$$



(a) 初始场 $\theta(\mathbf{x})$ 为高斯分布

(a) Initial field $\theta(\mathbf{x})$ is Gaussian



(b) 初始场为 $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$

(b) Initial field is $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$

图 1 随机标量场的概率密度函数

Fig.1 Probability density function of scalar field

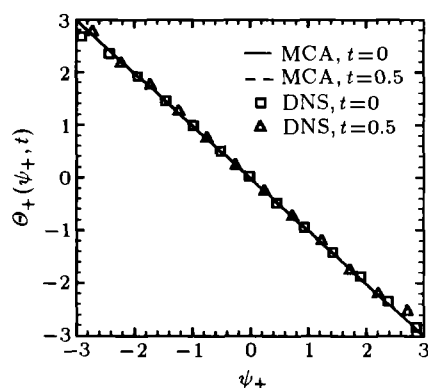
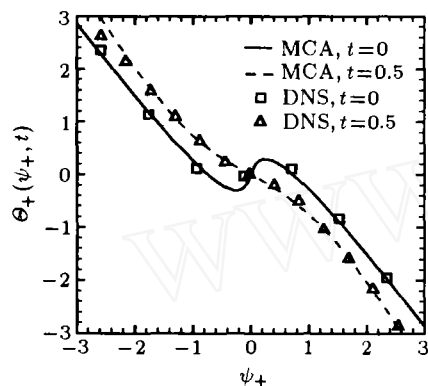
(a) 初始场 $\theta(\mathbf{x})$ 为高斯分布(a) Initial field $\theta(\mathbf{x})$ is Gaussian(b) 初始场为 $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$ (b) Initial field is $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$

图 2 随机标量场的条件平均扩散

Fig.2 Conditional average diffusion of scalar field

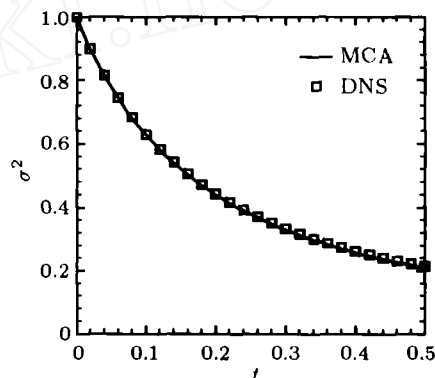
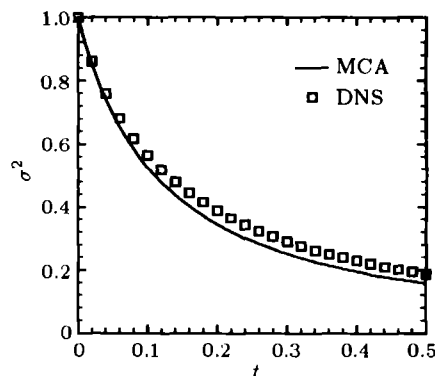
式中, $\psi_+ = \frac{\psi - \langle \varphi \rangle}{\sigma(t)}$. 初始高斯分布的标量场在扩散过程中始终是高斯分布, 其条件平均扩散呈线性分布. 从概率密度函数和条件平均扩散的分布可以看出, 初始非高斯分布的随机标量场在扩散下趋于高斯分布. 随机映射逼近方法的计算与直接数值模拟符合得很好. 这表明对于均匀各向同性的湍流标量场, 存在一个映射 X , 将标准高斯场映射成一个随机场结构 (包括 $f_+(\psi_+, t)$ 和 $\theta_+(\psi_+, t)$ 等) 与其一致的随机场, 即映射封闭方法的假设 (3) 在某阶近似的意义上成立.

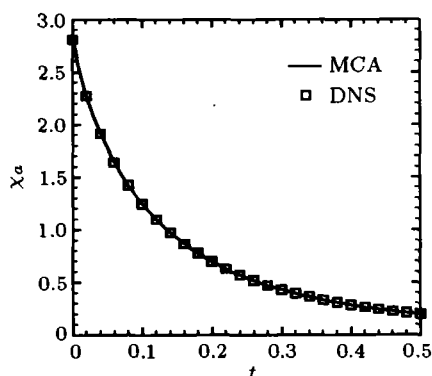
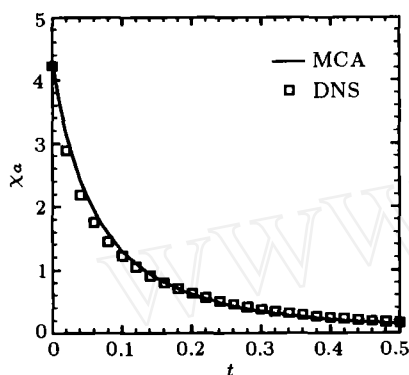
图 3 和图 4 分别是标量场 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 的脉动均方差 $\sigma^2(t)$ 和平均耗散 $\chi_a(t)$ 随时间 t 的变化, 这里

$$\sigma^2(t) = \langle (\varphi(\mathbf{x}, t) - \langle \varphi \rangle)^2 \rangle$$

$$\chi_a(t) = \left\langle \Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right\rangle$$

σ^2 和 χ_a 分别代表了标量场随机脉动的强度和衰减速度. 扩散使初始随机的标量场趋向均匀分布, σ^2 和 χ_a 不断减小. 在初始高斯分布下随机映射逼近方法与直接数值模拟所得结果完全一致. 在初始非高斯分布下也符合得较好, 两者略有差别. 从中我们可以得到两点结论: 1) 本文由随机映射逼近方法推导出的方程 (6) 与方程 (15) 完全封闭, 其中不含任何经验参数. 数值结果显示本文基于两点概率密度函数由随机映射逼近方法推导出的分子扩散模型能够准确地计算标量扩散过程中随机脉动的衰减速率, 这表明该模型较好地反映了真实的物理过程. 2) 本模型准确地描述了高斯分布标量场的扩散, 对偏离高斯分布的标量场的计算有一定误差. 这是由于方程 (15) 的推导中采用了近似高斯分布假设.

(a) 初始场 $\theta(\mathbf{x})$ 为高斯分布(a) Initial field $\theta(\mathbf{x})$ is Gaussian(b) 初始场为 $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$ (b) Initial field is $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$ 图 3 随机标量场的均方差 σ^2 随时间 t 的变化Fig.3 Evolution of scalar variance σ^2 with time

(a) 初始场 $\theta(\mathbf{x})$ 为高斯分布(a) Initial field $\theta(\mathbf{x})$ is Gaussian(b) 初始场为 $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$ (b) Initial field is $\theta(\mathbf{x}) + \theta^3(\mathbf{x})$ 图 4 随机标量场的耗散 χ_a 随时间 t 的变化Fig.4 Evolution of scalar dissipation χ_a with time

3 结 论

虽然以往的映射封闭方法^[4~6]能解析地推导出湍流化学反应流中的分子扩散模型, 但该方法不能

确定扩散或耗散速度, 因而是封闭的. 本文从两点联合概率密度函数出发, 发展了称之为随机映射逼近的方法. 应用该方法可以解析地导出分子扩散的封闭模型, 其中不含任何经验参数. 数值计算结果表明, 该方法能准确地模拟高斯场的分子扩散过程, 对非高斯场也能较好地适用, 包括对扩散速度和概率密度函数时间演化的计算.

参 考 文 献

- 1 Pope SB. PDF methods for turbulent reactive flows. *Prog Energy Combust Sci*, 1985, 11: 119~192
- 2 Pope SB, Chen YL. The velocity-dissipation probability density function model for turbulent flows. *Phys Fluids A*, 1990, 2: 1437~1449
- 3 陈义良. 湍流燃烧中的概率密度函数方法. 力学进展, 1990, 20(4): 478~487 (Chen Yiliang. PDF methods in turbulent combustion. *Advance in Mechanics*, 1990, 20(4): 478~487 (in Chinese))
- 4 Kraichnan RH. Closures for probability distributions. *Bull Amer Phys Soc*, 1989, 34: 2298
- 5 Chen H, Chen S, Kraichnan RH. Probability distribution of a stochastically advected scalar field. *Phys Rev Letter*, 1989, 63: 2657~2660
- 6 Kraichnan RH. Models of intermittency in hydrodynamic turbulence. *Phys Rev Letter*, 1990, 65: 575~578
- 7 Pope SB. Mapping closure for turbulent mixing and reaction. *Theoret Comput Fluid Dynamics*, 1991, 2: 255~270
- 8 He Guowei, Rubinstein R. Mapping closure approximation to conditional dissipation rate for turbulent scalar mixing. ICASE Report, No. 2000-48
- 9 Panchev S. Random Functions and Turbulence. Oxford: Pergamon Press, 1971

A MCA MODEL FOR MOLECULAR DIFFUSION IN TURBULENT REACTIVE FLOWS¹⁾

Zhang Zifan He Guowei

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

Abstract In the PDF approach of turbulent reactive flows, the convection and reaction terms are closed but the molecular diffusion term is unclosed. The currently existing models for the molecular diffusion are either empirical or introduced via external parameters, and it has been verified that they are not valid for such physical processes as the diffusion process. In this paper, a stochastically mapping approximation approach is developed to model the effect of molecular diffusion. A length scale is introduced by a two-point joint probability density function, to account for the evolutions of the conditional diffusion. Numerical simulation shows that the approach is able to predict the evolution of the variances, dissipation rates, conditional diffusion and PDFs in the diffusion process.

Key words molecular diffusion, mapping closure approximation, probability density function, turbulent reactive flows

Received 2 December 2002, revised 13 January 2004.

1) The project supported by the Special Funds of Major State Basic Research Projects (G1999032801, G2000077305) and the National Distinguished Youth's Science Foundation of China (10325211).