

最小均方差条件和非线性 IEM 模型的分析¹⁾

李 艺 陈义良

(中国科学技术大学热科学和能源工程系, 合肥 230027)

摘要 对最小均方差估计条件在构造混合模型中的应用作了进一步的讨论, 证明了最小均方差条件可以代替统计矩方程作为推导混合模型的约束条件; 同时得到了混合项的一个严格的展开式. 作为一般情况的一个特例, 重新得到了 NLIEM 模型. 最后利用 NLIEM 模型计算了两个基本流场, 并和 IEM 模型的计算结果作了比较, 进一步表明了 NLIEM 模型的优越性.

关键词 几率密度函数方法, 非线性 IEM 模型, 最小均方差估计

引 言

在标量的几率密度函数 (PDF) 的输运方程中化学反应源项是封闭的, 不需要模型, 所以可以计算涉及详细的化学反应机理的问题, 因此在湍流燃烧的数值模拟中, 特别是在预测污染物的排放和模拟点火熄火过程等方面有很大优势^[1]. 但是在标量 PDF 的方程里, 表征分子扩散作用的混合项需要模拟. 已有的一些模型还有各种各样的缺点^[2], 同时, 目前构造模型通常基于直觉想象, 可以用于帮助构造模型的数学方法和定量的理论结果很缺乏; 因此亟待进一步地工作.

本文作者在文献 [3] 中提出了构造非线性 IEM (NLIEM) 模型的设想以及利用最小均方差估计条件来构造模型的思路, 并在推导 NLIEM 模型过程中利用了这个条件; 最后利用 NLIEM 模型计算了一个湍流圆柱射流的扩散燃烧问题, 得到比 IEM 模型更精确的结果, 初步证明了它的优越性. 但是在文献 [3] 中没有对最小均方差条件作深入讨论, 也还没有对 NLIEM 模型作直接的检验, 因此, 本文在已有工作的基础上对最小均方差条件作了进一步的讨论, 从它出发重新推导得到了 NLIEM 模型; 然后在两个简单的流场中详细检查了 NLIEM 模型的性质. 本文的结果证明了最小均方差条件在混合模型中的应用是合理的, 同时进一步证明了 NLIEM 模型的优越性.

1 最小均方差条件的讨论

假设 φ 是一个惰性标量, 其质量扩散系数 D 以及流体密度 ρ 均为常数, 则在均匀湍流中 φ 的 PDF

的方程是

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \psi} (\langle D \nabla^2 \varphi | \psi \rangle P) = 0 \quad (1)$$

其中扩散项的条件平均值 $\langle D \nabla^2 \varphi | \psi \rangle$ 是混合项, ψ 是 φ 的相空间坐标. 在文献 [3] 中已经指出, 利用统计预报里的最小均方差估计定理可以构造混合模型. 最小均方差估计定理^[4]指出, 如果要用随机变量 Y 的平方可积函数 $f(Y)$ 近似表示随机变量 X , 使得它们的均方差 $\langle (X - f(Y))^2 \rangle$ 最小, 则 $f(Y)$ 应等于 X 在给定 Y 条件下的期望值 $\langle X | Y \rangle$. 据此, 混合项可以视为扩散项 $D \nabla^2 \varphi$ 的最小均方差估计函数, 所以可以用最小均方差估计的概念来构造混合模型.

在文献 [3] 中利用最小均方差条件以及标量均值和方差的衰变条件构造了一个由三次多项式构成的非线性 IEM 模型. 我们的进一步研究发现, 如果假设混合模型是一个如下形式的一般 N 次多项式 (为简单起见, 我们在这里假设 φ 的平均值为零), 即

$$\chi(\psi) = \sum_{i=1}^N a_i (\psi^i - \langle \varphi^i \rangle) \quad (2)$$

并且利用最小均方差条件确定待定系数 a_i , 即取 a_i 使得

$$\langle (D \nabla^2 \varphi - \chi(\varphi))^2 \rangle \quad (3)$$

取最小值, 那么可以证明利用得到的模型 $\chi(\psi)$, 在均匀湍流条件下能从式 (1) 推导出 φ 的前 $N+1$ 阶

2001-09-15 收到第一稿, 2002-04-19 收到修改稿.

1) 华中科学技术大学煤燃烧国家重点实验室 973 课题“燃煤污染防治的基础研究”资助项目 (G1999022207).

矩的严格方程. 也就是说, 文献 [1] 中推导的非线性 IEM 模型实际上是上面这个结论的一个特殊情形.

为了证明上面的结论, 我们把式 (2) 代入式 (3) 得到

$$\left\langle (D\nabla^2\varphi - \sum_{i=1}^N a_i(\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle))^2 \right\rangle$$

该表达式是 $a_1, a_2, \dots, a_N$ 的函数, 即可以记为

$$f(a_1, a_2, \dots, a_N) = \left\langle (D\nabla^2\varphi - \sum_{i=1}^N a_i(\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle))^2 \right\rangle \quad (4)$$

最小均方差条件要求我们选取 a_i 使得 $f(a_1, a_2, \dots, a_N)$ 取最小值. $f(a_1, a_2, \dots, a_N)$ 取最小值的必要条件是 $\partial f / \partial a_k = 0 (k = 1, 2, \dots, N)$, 由此得到 N 个方程

$$\begin{aligned} \langle \varphi^k D\nabla^2\varphi \rangle - \langle \varphi^k \rangle D\nabla^2\langle\varphi\rangle = \\ \sum_{i=1}^N a_i \langle (\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle)(\varphi^k - \langle\varphi^k\rangle) \rangle \\ k = 1, 2, \dots, N \end{aligned}$$

将上式右端展开即得

$$\begin{aligned} \langle \varphi^k D\nabla^2\varphi \rangle - \langle \varphi^k \rangle D\nabla^2\langle\varphi\rangle = \\ \sum_{i=1}^N a_i \langle (\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle)\varphi^k \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

方程左边的第一项利用分部微分可以整理成

$$\langle \varphi^k D\nabla^2\varphi \rangle = D\nabla^2 \frac{\langle \varphi^{k+1} \rangle}{k+1} - k \langle \varphi^{k-1} \varepsilon \rangle$$

其中 $\varepsilon = D(\nabla\varphi)^2$ 是瞬时的标量耗散率. 在均匀湍流中平均值的梯度只能是零或常数, 因此平均值的拉普拉斯运算一定为零, 所以式 (5) 最终可以写成

$$\left. \begin{aligned} -k \langle \varphi^{k-1} \varepsilon \rangle = \sum_{i=1}^N a_i \langle (\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle)\varphi^k \rangle \\ k = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

另一方面, 以 $\chi(\psi)$ 为混合模型, 则式 (1) 可以写成

$$\frac{\partial P(\psi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \psi} (\chi(\psi)P(\psi)) = 0 \quad (7)$$

由此, 可以推导出 φ 的 n 阶矩的方程是

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_\varphi^n}{dt} = n \langle \varphi^{n-1} \chi(\varphi) \rangle = \\ n \sum_{i=1}^N a_i \langle (\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle)\varphi^{n-1} \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

其中 $\sigma_\varphi^n = \langle (\varphi - \langle\varphi\rangle)^n \rangle$ 为 φ 的 n 阶矩. 把式 (6) 代入式 (8), 最终得到以 $\chi(\psi)$ 为混合模型的 n 阶矩方程为

$$\frac{d\sigma_\varphi^n}{dt} = -n(n-1) \langle \varphi^{n-2} \varepsilon \rangle \quad (9)$$

容易证明, 从严格的式 (1) 得到的 n 阶统计矩的方程和式 (9) 完全相同, 从而证明了前面提出的结论.

我们可以从两方面对上面的结论作进一步分析. 首先, 当 $N \rightarrow \infty$ 时, 式 (2) 右边成为一个级数. 由于在前面的讨论中 N 是任意的, 所以如果利用最小方差条件确定这个级数各项的系数, 该级数作为混合模型能给出所有统计矩的严格方程. 因此, 我们得到一个推论: 通过最小均方差条件可以得到混合项的一个严格展开式, 这个展开式的系数 a_i 由式 (6) 确定.

另外, 理论上已经证明, 当弛豫时间趋于无穷大之后, 混合项严格地成为 ψ 的线性函数 [5]; 而我们可以证明, 从最小均方差条件推导出的混合模型在相同的条件下也退化为线性形式, 和理论结果一致. 为此, 要利用 Sinai 和 Yakhot 证明的一个结论 [6]: 当弛豫时间趋于无穷之后, 下面的方程对任何正偶数 n 都成立 (假设 φ 的均值为 0)

$$\langle \varphi^n \rangle \langle \varepsilon \rangle = (n-1) \langle \varphi^2 \rangle \langle \varphi^{n-2} \varepsilon \rangle \quad (10)$$

用和式 (6) 中相同的方法可以证明式 (10) 对任何正整数 n 都成立. 把式 (10) 代入式 (6) 的左边, 同时把式 (6) 右边求和, 式的第一项从取和号分出得到

$$\begin{aligned} -\frac{\langle \varphi^{k+1} \rangle \langle \varepsilon \rangle}{\langle \varphi^2 \rangle} = a_1 \langle \varphi^{k+1} \rangle + \\ \sum_{i=2}^N a_i \langle (\varphi^i - \langle\varphi^i\rangle)\varphi^k \rangle, \quad k = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (11)$$

可以看出满足式 (11) 的解是

$$a_1 = -\frac{\langle \varepsilon \rangle}{\langle \varphi^2 \rangle}, \quad a_i = 0, \quad i = 2, 3, \dots, N \quad (12)$$

即这时模型退化为线性的, 且所得系数和理论结果一致 [5]. 从而得证.

前面的分析说明了利用最小均方差条件构造的模型在理论上是合理的, 最小均方差条件可以作为推导小尺度混合模型的一个有用的辅助数学工具.

2 NLIEM 模型

在上面的式 (2) 中假定了 $\langle\varphi\rangle = 0$, 对一般的情况只要用 $\varphi - \langle\varphi\rangle$ 代替 φ , 经过同样的推导则可得

到相同的结论. 作者在文献 [3] 中给出的 NLIEM 模型对应于 $N = 3$ 且 $\langle \varphi \rangle \neq 0$ 的情况, 其系数可以从式 (6) 中求得. 下面给出其颗粒方程 [1] 的形式

$$\frac{d\varphi}{dt} = a[(\varphi - \langle \varphi \rangle)^3 - \sigma_\varphi^3] - \left(a \frac{\sigma_\varphi^4}{\sigma_\varphi^2} + \frac{\langle \varepsilon_\varphi \rangle}{\sigma_\varphi^2} \right) (\varphi - \langle \varphi \rangle) \quad (13)$$

其中

$$a = \frac{\sigma_\varphi^4 / (\sigma_\varphi^2)^2 - 3(\rho_P + 1)}{\sigma_\varphi^6 / \sigma_\varphi^2 - (\sigma_\varphi^3)^2 / \sigma_\varphi^2 - (\sigma_\varphi^4)^2 / (\sigma_\varphi^2)^2} \langle \varepsilon_\varphi \rangle \quad (14)$$

ρ_P 的定义参见文献 [3], 在文献 [3] 中也给出了一个它的模型.

式 (2) 中二次项的作用主要在于模拟标量的三阶矩的变化, 也就是标量的 PDF 的对称性的变化. 在均匀湍流中, 当时间趋于无穷大时, 三阶矩弛豫到零, 即 PDF 趋于对称, 所以我们在目前的 NLIEM 模型中忽略了二次项.

这里 NLIEM 模型的推导只应用了最小均方差条件, 不需要用标量方差的控制方程作为约束条件; 而且 NLIEM 模型对四阶矩的模拟是从精确的四阶矩方程出发的; 同时在弛豫时间趋于无穷大的条件下 NLIEM 模型是和理论结果一致的. 这些结论进一步证明了文献 [3] 给出的 NLIEM 模型的合理性.

文献 [3] 在 H_2 / 空气圆柱湍流射流扩散火焰中对 NLIEM 模型作了总体检验, 得到优于 IEM 模型的结果; 本文将在两个基本的流场对它做更直接和更详细的检验, 第一个是在统计定常的均匀湍流里惰性标量的二元混合 (binary mixing) 过程 [7]; 第二个是网格湍流里由均匀横向平均梯度引起的温度脉动的发展过程 [8]. 作为比较, 同时计算了 IEM 模型的结果.

3 计算方法和求解的方程

我们采用 Monte Carlo 方法 [1] 求解描述上述两个问题的 PDF 方程, 即用一个有大量颗粒的系综代替 PDF, 通过求解描述每个颗粒随时间变化的颗粒方程来得到 PDF 随时间的变化. 对于第一个问题, 速度场是统计定常的, 因此只需求解标量的颗粒方程. NLIEM 模型对应的颗粒方程由式 (13) 给出; IEM 模型 [1] 的颗粒方程为

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\langle \varepsilon_\varphi \rangle}{\sigma_\varphi^2} (\varphi - \langle \varphi \rangle) \quad (15)$$

在第二个问题中温度场和速度场同时发展, 需同时求解速度和温度的颗粒方程. 它们的方程是 [9]

$$du = -\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4}C_0\right)\langle \omega \rangle u dt + (C_0 \langle \varepsilon \rangle)^{1/2} dW \quad (16)$$

$$d\theta = (\chi(\theta) - u\beta) dt \quad (17)$$

其中 u 表示平均流动方向的速度脉动, $\langle \omega \rangle \equiv \langle \varepsilon \rangle / k$, $C_0 = 2.1$, dW 表示维纳过程, θ 表示温度脉动, $\chi(\theta)$ 表示混合模型, 对 NLIEM 和 IEM 模型分别由式 (13) 和式 (15) 得到, β 是平均温度梯度. 这里 u 的模拟采用简化的 Langevin 模型 (SLM) [9].

单点的统计模型不包含时间尺度的信息, 因此标量、湍流动能耗散率以及 ρ_P 都必须模拟, 因为我们的目的是对混合模型进行研究, 所以在下面的计算中这几个量均用从同一物理问题 [7,8] 中给出的 DNS 和实验数据拟合的公式计算. 耗散率决定方差的衰减速率, ρ_P 影响扁平因子随时间的变化速率, 通过采用拟合的公式, 我们计算得到了正确的方差和扁平因子衰减速率, 而后面的比较集中在 PDF 的整体特征和超扁平因子上面.

4 计算结果和讨论

Eswaran 和 Pope [7] 对第一个算例中的流场进行了直接数值模拟 (DNS), 其结果表明, 初始双 δ 分布的 PDF 分布逐渐向高斯分布弛豫.

在均匀湍流中标量的 PDF 向高斯分布弛豫的过程是混合项模拟的一个难点, 目前除了影射封闭法之外, 其他模型的弛豫性都不好; 但是另一方面, 在文献 [10] 中发现用映射封闭法计算得到的 PDF 在混合的初期弛豫得过快. 对于 IEM 模型, 已经从理论上证明了它保持初始 PDF 的形状不变 [1], 而下面的计算结果表明 NLIEM 模型的弛豫性比 IEM 模型有相当大的改善. 图 1 和图 2 分别是 NLIEM 模型和 IEM 模型计算得到的标量 PDF 的变化情况, 其中 l/u 是湍流场的积分时间尺度, DNS 结果参见文献 [7] 的图 15. 正如理论结果预测的一样, 用 IEM 模型计算的 PDF 保持初始 PDF 双 δ 分布的形状, 初始 PDF 的两个峰逐渐向平均值靠拢, 同时峰值越来越大, 远远大于实验值; 而平均值的密度值始终最小. 而 NLIEM 的计算结果则显示出比 IEM 模型明显要好的弛豫性, 特别是发展的初期. $t = 0.42l/u$ 时的 PDF 的形状和曲线的峰值都和 DNS 结果 [7] 相当接近, 说明 NLIEM 模型正确模拟了 PDF 初期的衰变过程; 而从 $0.42l/u$ 到 $0.83l/u$ 的发展过程正确模拟了 DNS 结果中显示的概率向平均值集中的逆

扩散过程^[7]；其后，NLIEM模型的弛豫性减弱，初始PDF的两个尖峰没有完全衰减掉，和DNS结果^[7]有一定的差异，但是平均值附近的概率密度分布和DNS结果仍然相当接近。

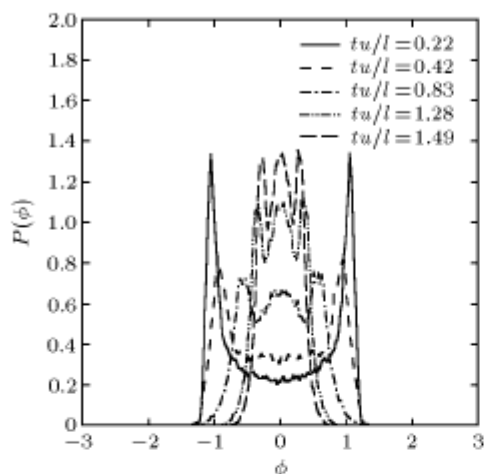


图1 用NLIEM模型计算的PDF

Fig.1 PDF's calculated with NLIEM model

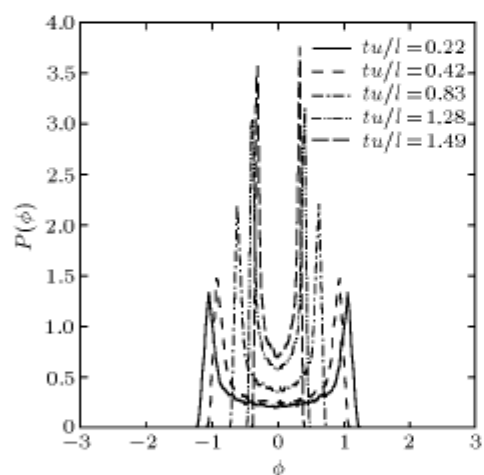


图2 用IEM模型计算的PDF

Fig.2 PDF's calculated with IEM model

图3和图4给出了相同条件下用两个模型计算得到的无量纲混合速率 $D(\varphi) \equiv \langle \chi(\varphi) | \varphi \rangle / (\varepsilon_\varphi / \sigma_\varphi)$ 的发展过程，其中图3和图4分别是 $t = 0.42l/u$, $0.83l/u$, $1.28l/u$, $1.49l/u$ 时两个模型结果的比较。因为在文献[7]中没有计算混合速率，我们将把计算结果和文献[10]中的DNS结果进行比较。文献[10]中的DNS结果表明，在混合初期，混合速率是一个接近三次函数的非线性函数，且在平均值附近的梯度比IEM模型预测的大，在混合后期，混合速率趋向线性分布，斜率趋向于IEM模型预测的值。从图3和图4给出的两个模型的计算结果的比较可以看到NLIEM模型的计算结果正确地反映了DNS结果

预期的发展趋势。因为我们的计算是根据文献[7]中DNS的条件进行的，而文献[10]没有给出其中引用的DNS结果的详细计算条件，所以在混合速率的计算结果方面目前我们只能作定性的比较，有待作进一步的定量比较。

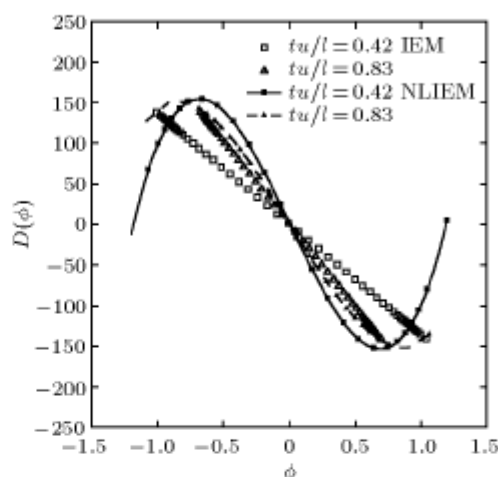


图3 初期混合速率比较

Fig.3 The comparison of initial mixing rate

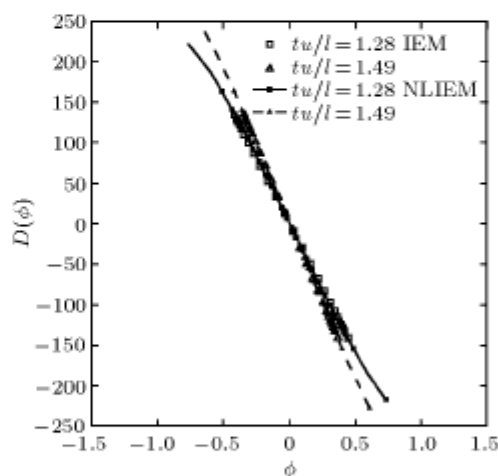


图4 后期混合速率比较

Fig.4 The comparison of later mixing rate

Jayesh 和 Warhaft^[8]对第二个算例中的流场作了详细的测量，其主要特点是在整个发展过程温度的PDF都有明显的指数型尾巴^[8]；温度的扁平因子和超扁平因子趋向于4和20，而不是高斯分布的3和15。图5和图6给出了根据NLIEM和IEM模型计算的PDF的发展过程，其中实线是高斯分布。比较两个图可以看到在 $x/M = 36.4$ 和 $x/M = 62.2$ 处NLIEM计算的PDF的指数尾巴很明显（在单对数坐标系里表现为直线），而IEM模型计算的指数尾巴已经明显减弱。其后，NLIEM模型计算的PDF

的指数尾虽然也逐渐减弱,但是仍比 IEM 模型的结果更接近实验结果^[8]. 这从图 7 给出超扁平因子 F_6

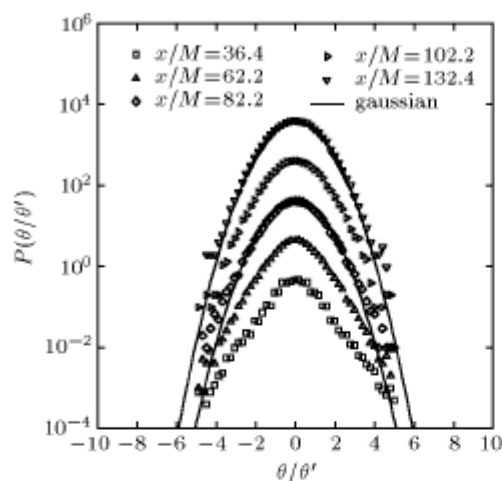


图 5 NLIEM 模型计算的 PDF

Fig.5 PDF's calculated with NLIEM model

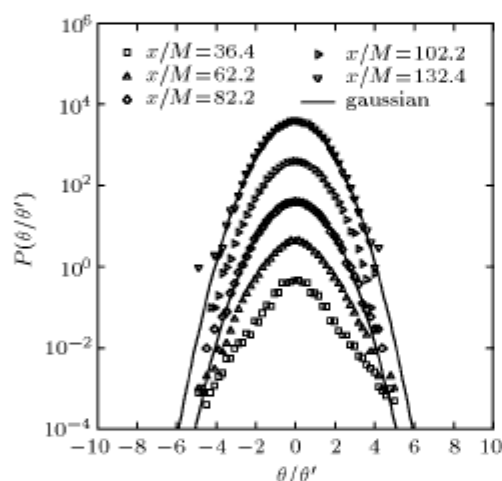


图 6 IEM 模型计算的 PDF

Fig.6 PDF's calculated with IEM model

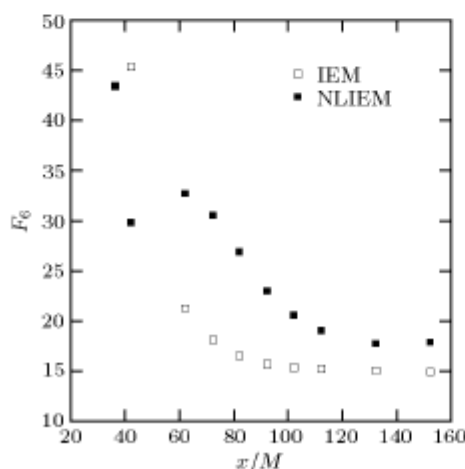


图 7 F_6 的计算结果

Fig.7 The result of F_6

的计算结果也可以得到证明. 超扁平因子的定义为: $F_6 \equiv \sigma_\varphi^6 / (\sigma_\varphi^2)^3$. 从图中看到, IEM 模型计算给出的超扁平因子 F_6 趋近于 15, 而 NLIEM 模型计算的则趋向 18, 更接近实验测得的 20^[8].

5 结 论

本文详细讨论了最小均方差条件和混合模型的关系, 证明了如果假设多项式形式的混合模型, 从最小均方差条件可以导出严格的统计矩方程, 同时证明了在极限情况下最小均方差条件和已有理论结果是一致的, 因此最小均方差条件可以作为构造模型的一个有用的辅助数学工具. 此外, 本文讨论了文献[3]中用最小均方差条件得出的 NLIEM 模型和 IEM 模型在两个基本的流场的详细计算结果, 通过与实验和 DNS 结果比较证明了 NLIEM 模型计算的标量混合速率和高阶统计矩都比 IEM 模型更准确, 模拟的 PDF 弛豫性更好. 在湍流射流扩散火焰计算结果^[3]的基础上, 这些结果进一步说明 NLIEM 模型的优越性.

参 考 文 献

- 1 Pope SB. PDF method for reactive flows. *Prog Energy Combust Sci*, 1985, 11: 119~192
- 2 Dopazo C. Recent developments in PDF methods. In: Libby PA, Williams FA eds. *Turbulent Reactive Flows*. London: Academic Press, 1994, 375~474
- 3 李艺, 陈义良. 基于最小均方差估计的非线性 IEM 模型. *工程热物理学报*, 2002, 23(2): 261~264 (Li Yi, Chen Yiliang. A nonlinear IEM model based on least mean square estimation. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2001, 23(2): 261~264(in Chinese))
- 4 方兆本, 缪柏其. 随机过程. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1992 (Fang Zhaoben, Miu Baiqi. *Stochastic Process*. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 1992(in Chinese))
- 5 Valino I, Dopazo C, Ros J. Quasistationary probability density functions in the turbulent mixing of a scalar field. *Phys Rev Lett*, 1994, 72: 3518~3521
- 6 Sinai YG, Yakhot V. Limiting probability distributions of a passive scalar in a random velocity field. *Phys Rev Lett*, 1989, 63: 1962~1964
- 7 Eswaran V, Pope SB. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Phys Fluids*, 1988, 31: 506~520
- 8 Jayesh, Warhaft Z. Probability distribution, conditional dissipation, and transport of passive temperature in grid-generated turbulence. *Phys Fluids*, 1992, 4: 2292~2307

- 9 Pope SB, Chen YL. The velocity-dissipation probability density function model for turbulent flows. *Phys Fluids*, 1990, 2: 1437~1449
- 10 Miller RS, Frankel SH, Madnia CK, et al. Johnson-

Edgeworth translation for probability modeling of binary scalar mixing in turbulent flows. *Combust Sci Tech*, 1992, 91: 21~52

FURTHER ANALYSIS OF OPTIMAL MEAN SQUARE ESTIMATION AND NONLINEAR IEM MODEL¹⁾

Li Yi Chen Yiliang

(Department of Thermal Science and Energy Engineering, USTC, Hefei 230027, China)

Abstract In this paper the implication of the Optimal Mean Square Estimation (OMSE) condition on the mixing model is further discussed. It is proved that the OMSE condition can replace the moment equations as the constraints facilitating the modeling of mixing term, and that an exact expansion of the mixing term can be deduced by solely using OMSE condition, which is proved consistent with the exact results of Valino et al. in the long relaxation time limit. The nonlinear IEM (NLIEM) model is deduced as a result of a general formula. Finally, two basic flow fields are calculated with NLIEM model, the first of which is the binary mixing of a passive scalar in a homogeneous stationary velocity field and the second is the evolution of passive temperature fluctuation in a grid turbulence with a constant mean transverse temperature gradient imposed. The results are compared with those calculated with IEM model based on the DNS and experimental data. It is found that in the first problem the initial relaxation of the PDF observed in the DNS data is accurately predicted with NLIEM model but very bad with IEM, although both of them predict correctly the final relaxation to Gaussian PDF. In the second problem, the exponential tails observed in the PDF's of temperature fluctuation are reproduced more notably with NLIEM than IEM model and the super flatness of the PDF predicted with NLIEM model relaxes to around 18 which is more close to the experimental value 20 than 15, the value predicted with IEM model.

Key words probability density function method, nonlinear IEM model, optimal mean square estimation

Received 15 September 2001, revised 19 April 2002.

1) The project supported by the State Key Laboratory of Huazhong University of Science and Technology 973 project (G1999022207).