

# 改进密度耦合的稀疏拉格朗日 FDF 方法模拟 Sandia 火焰 E

黄立航, 朱旻明, 叶桃红

(中国科学技术大学热科学和能源工程系, 安徽合肥 230027)

**摘要:** 采用稀疏拉格朗日过滤密度函数(稀疏 FDF)方法,对 Sandia 火焰 E 进行了模拟. 运用稀疏颗粒蒙特卡洛方法求解标量的 FDF 方程,采用广义多维映射条件(MMC)模型保证混合的当地性. 将现有稀疏 FDF 方法中的密度耦合方法作了改进,以颗粒上等效焓源项的条件平均值作为源项直接耦合到大涡模拟(LES)求解的等效焓输运方程中. 模拟结果表明,改进的密度耦合方法比较合理,可以减少 LES 结果的偏差,计算结果与实验结果符合得很好.

**关键词:** 大涡模拟(LES);过滤密度函数(FDF);密度耦合;多维映射条件(MMC)混合模型

**中图分类号:** TK16      **文献标识码:** A      doi: 10.3969/j.issn.0253-2778.2020.05.006

**引用格式:** 黄立航,朱旻明,叶桃红. 改进密度耦合的稀疏拉格朗日 FDF 方法模拟 Sandia 火焰 E [J]. 中国科学技术大学学报,2020,50(5):589-595,604.

HUANG Lihang, ZHU Minming, YE Taohong. Sparse-Lagrangian FDF simulation of Sandia flame E with modified density coupling[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2020,50(5):589-595,604.

## Sparse-Lagrangian FDF simulation of Sandia flame E with modified density coupling

HUANG Lihang, ZHU Minming, YE Taohong

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

**Abstract:** Sparse-Lagrangian filtered density function (FDF) simulation is performed for Sandia flame E. Sparse-Lagrangian Monte Carlo method is used to solve the scalar FDF transport equations, in which a generalized multiple mapping conditioning (MMC) model is implemented to enforce mixing localness. A modified density coupling method for Sparse-Lagrangian FDF is proposed, in which the conditional mean source term of equivalent enthalpy is fed back directly as the source term in the Eulerian equivalent enthalpy transport equation of large eddy simulation (LES). The results of Sparse-Lagrangian FDF simulation indicated that the new density coupling method is more reasonable than the previous ones in reducing the numerical errors in LES results, and that the simulation results agree well with the experimental data.

**Key words:** large eddy simulation (LES); filtered density function (FDF); density coupling; MMC mixing model

收稿日期: 2019-03-22; 修回日期: 2019-05-10

基金项目: 国家自然科学基金(91441117, 51576182)资助.

作者简介: 黄立航,男,1993年生,硕士生.研究方向:湍流燃烧数值模拟. E-mail:975561584@qq.com

通讯作者: 叶桃红,博士/副教授. E-mail:thye@ustc.edu.cn

## 0 引言

概率密度函数 (probability density function, PDF) 方法是一种能够直接求解化学反应速率的湍流燃烧模拟方法, 通常采用蒙特卡洛方法求解 PDF 的输运方程. PDF 方法的研究热点集中在小尺度混合模型中, 常见的模型有 IEM (interaction by exchange with the mean) 模型、Curl 模型、EMST (euclidean minimum spanning tree) 模型<sup>[1]</sup> 以及 MMC (multiple mapping conditioning) 模型<sup>[2]</sup>, 近几年提出的小尺度混合模型有 SPMM (shadow-position mixing model)<sup>[3]</sup>、各种衍生 MMC 模型<sup>[4-8]</sup>、分形 IEM 模型<sup>[9]</sup>、考虑差异扩散的 IEM 模型<sup>[10]</sup> 以及 PSP (parameterized scalar profiles) 模型<sup>[11]</sup> 等. PDF 方法可以和雷诺平均 (Reynolds-averaged Navier-Stokes, RANS) 方法结合, 称为 RANS/PDF 方法. PDF 方法也可与大涡模拟 (LES) 方法相结合, 称为过滤密度函数 (FDF) 方法<sup>[12]</sup>, 或者 LES/PDF 方法. 传统的 PDF/FDF 方法每个网格中需要几十个颗粒, 消耗的计算资源较大. Cleary 等<sup>[13]</sup> 提出了稀疏拉格朗日 FDF (稀疏 FDF) 方法, 颗粒数目少于 LES 网格数目, 直接减小了求解化学反应的计算量<sup>[5]</sup>.

与传统的密集 PDF/FDF 方法不同, 由于颗粒分布比网格更加稀疏, 稀疏 FDF 方法中颗粒上标量的小尺度混合不再局限在单个网格内. 为避免数值计算熄火, 采用广义 MMC 混合模型, 保证混合的当地性<sup>[1]</sup>. Cleary 等<sup>[13]</sup> 的广义 MMC 模型使用 LES 计算的过滤混合物分数插值得到颗粒的参考变量. 结合颗粒在参考变量空间与物理空间的距离来选取配对的颗粒, 并以 Curl 模型形式混合. 其中的混合时间尺度也无法直接套用传统 PDF/FDF 方法的模型. 针对稀疏 FDF 方法, Cleary 等<sup>[13-14]</sup> 与 Vo 等<sup>[15]</sup> 分别给出了不同形式的混合时间尺度模型.

与 FDF 方法相同, 稀疏 FDF 方法中, LES 方法得到速度、湍流粘性系数与混合物分数, 提供给颗粒进行蒙特卡洛计算. 在颗粒场中计算标量的输运与混合, 并且直接计算化学反应, 之后将化学反应带来的密度变化耦合到 LES 方程. 在稀疏 FDF 方法中使用的密度耦合方法能直接影响 LES 结果. 在 Ge 等<sup>[16]</sup> 使用稀疏 FDF 方法计算的 Sandia 火焰 E 结果中, LES 计算结果与实验结果偏差较大. LES 得到的混合物分数与实验值相比在中心线上衰减更快,

Barlow 等<sup>[17]</sup> 认为这与热释放率偏小有关. Ge 等使用的密度耦合方法中, 与热释放率类似的等效焓源项以负反馈的形式出现, 可能导致等效焓源项偏小.

为了缩小 LES 结果与实验结果的偏差, 本文提出了用颗粒等效焓源项的条件平均作为等效焓输运方程中源项的密度耦合方法, 并对 Sandia 火焰 E 进行稀疏 FDF 方法模拟, 验证提出的密度耦合方法.

## 1 稀疏拉格朗日 FDF 方法

稀疏拉格朗日 FDF 方法结合了 LES 方法和拉格朗日颗粒方法. LES 方法求解过滤的连续方程、动量方程及混合物分数的输运方程分别为

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

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

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial j_{f,j}}{\partial x_j} + \frac{\partial J_{f,j}}{\partial x_j} \quad (3)$$

式中,  $\bar{\rho}$  代表过滤量;  $\tilde{\rho}$  代表密度加权过滤量;  $P$  为压力;  $\rho$  为密度;  $u$  为速度;  $f$  为混合分数;  $\tau_{ij}$  与  $T_{ij}$  分别代表黏性应力张量与亚网格应力张量. 本文中亚网格应力张量采用涡粘模型, 亚网格黏性系数由拉格朗日平均的动态模型给出<sup>[18]</sup>;  $j$  与  $J$  分别代表标量的可解扩散通量与亚网格通量. 亚网格通量采用涡扩散模型, 在湍流施密特数为 1 的假定下得到亚网格扩散系数.

标量的 FDF 方程用蒙特卡洛方法求解, 通过一组随机微分方程 (stochastic differential equation, SDE) 描述颗粒的运动<sup>[12]</sup>. 颗粒运动的 SDE 包括颗粒跟随流体的运动, 以及模拟扩散过程而附加的颗粒运动, 即

$$dX_i(t) = \left[ \tilde{u}_i + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial [\bar{\rho}(D + D_i)]}{\partial x_i} \right] dt + \sqrt{2(D + D_i)} dW_i \quad (4)$$

式中,  $dX_i$  表示颗粒在  $i$  方向上的位置,  $dW_i$  表示维纳过程;  $D$  与  $D_i$  表示分子扩散系数与湍流扩散系数.

颗粒上标量  $\phi$  变化包括混合过程  $dM$ , 与化学反应源项  $dS$  这两部分,

$$d\phi(t) = dM + dS \quad (5)$$

式中,  $dM$  由广义 MMC 模型描述, 而  $dS$  不需要模型, 可以直接求积分.

### 1.1 广义 MMC 混合模型

混合过程 dM 采用由 MMC 模型推广得到的广义 MMC 模型. 广义 MMC 模型采用 LES 计算的混合物分数插值得到颗粒的参考变量, 结合空间上的三维距离, 以 Curl 模型构造出目前使用的混合模型. 颗粒  $p$  和  $q$  之间的距离的平方  $d_{p,q}^2$  定义为

$$d_{p,q}^2 = \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\sqrt{3} d_{x_i}^{p,q}}{r_m} \right)^2 + \left( \frac{df_f^{p,q}}{f_m} \right)^2 \quad (6)$$

式中,  $r_m$  与  $f_m$  是物理空间上和混合分数空间上的特征长度, 分别用于无量纲化物理空间距离  $d_{x_i}^{p,q}$  与参考变量距离  $df_f^{p,q}$ .  $f_m$  预先给定, 一般为当量混合物分数的 1/10. 依据湍流混合层分形的特性, 厚度为  $f_m$  的标量薄层中颗粒的距离估算为

$$r_m = C_m \left( \frac{df}{dn} \frac{\Delta_L^3}{r_c^{2-D_f}} \frac{1}{f_m} \right)^{1/D_f} \quad (7)$$

式中,  $df/dn$  表示混合物分数的最大方向导数,  $r_c$  为分形的内截断尺度,  $\Delta_L^3$  则是估计的颗粒所占体积. 本文采用的模型常数  $C_m$  为 0.5, 分形维度  $D_f$  为 2.16.

按照式(6)计算颗粒之间距离的基础上, 借用 K-D 树近似选取距离近的颗粒, 进行配对混合. 颗粒的混合过程可以表述为下面的 Curl 形式:

$$\begin{aligned} \phi_a^p(t + \Delta t) &= \phi_a^p(t) + \mu [\bar{\phi}_a^{p,q}(t) - \phi_a^p(t)] \\ \phi_a^q(t + \Delta t) &= \phi_a^q(t) + \mu [\bar{\phi}_a^{p,q}(t) - \phi_a^q(t)] \end{aligned} \quad (8)$$

式中,  $\phi$  为标量;  $\bar{\phi}_a^{p,q}(t) = [\omega^p \phi_a^p(t) + \omega^q \phi_a^q(t)] / [\omega^p + \omega^q]$ , 上标  $p, q$  表示不同颗粒, 下标  $a$  区分不同标量;  $\omega$  为颗粒质量;  $\mu = 1 - \exp(-\Delta t / \tau_L^{p,q})$ ;  $t$  为时间;  $\Delta t$  为计算时间步长;  $\tau_L$  为混合的时间尺度, 通过模型确定. 配对颗粒的混合时间尺度取为这两颗粒计算值的算术平均, 即  $\tau_L^{p,q} = (\tau_L^p + \tau_L^q) / 2$ .

本文结果采用 Cleary 等的混合时间尺度模型<sup>[13]</sup>:

$$\tau_L = \frac{C_f \beta d_f^2}{2(D + D_t) \nabla \tilde{f} \cdot \nabla \tilde{f}} \quad (9)$$

这里  $C_f$  是模型常数, 参照文献<sup>[13]</sup>取 0.1;  $\beta$  参照文献<sup>[13, 16]</sup>取 3;  $d_f$  为配对颗粒在参考变量空间的距离.

### 1.2 改进的密度耦合方法

FDF 方法需通过密度耦合方法将颗粒热释放带来的密度变化反映到 LES 计算中. 通过比等效焓这一标量间接地耦合密度的方法较为常见<sup>[19]</sup>. 比等

效焓的定义为

$$h_s = \frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} RT \quad (10)$$

式中,  $\gamma_0$  为比热比;  $R$  为气体常数;  $T$  为温度. LES 求解的等效焓输运方程为:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial j_{h_s, j}}{\partial x_j} + \frac{\partial J_{h_s, j}}{\partial x_j} + \tilde{S}_{h_s} \quad (11)$$

方程中  $\tilde{S}_{h_s}$  为等效焓源项, 需要使用模型封闭.

传统密集颗粒 FDF 方法中, 采用网格内颗粒上的等效焓源项加权平均并平滑之后的值作为该网格处的等效焓源项, 返回到等效焓输运方程<sup>[20-21]</sup>. 而在稀疏颗粒方法中, 因为单个网格中颗粒少甚至没有颗粒, 直接采用这种方式会带来数值不稳定等不利影响.

Cleary 等在稀疏 FDF 方法中以 LES 计算给出的比等效焓值  $\tilde{h}_s$  与目标比等效焓值  $F(\tilde{f}; x, t)$  之差, 除以一个人为确定的弛豫时间  $\tau_{rel}$  并乘上密度, 作为等效焓输运方程(11)的等效焓源项<sup>[13]</sup>:

$$\tilde{S}_{h_s} = \rho \frac{F(\tilde{f}; x, t) - \tilde{h}_s}{\tau_{rel}} \quad (12)$$

目标比等效焓值由 LES 计算的当地混合物分数  $\tilde{f}$ , 以及由额外数据结合当地颗粒状态确定的比等效焓曲线  $F(f)$  决定. 这类似于一个负反馈过程, 弛豫时间较大, 有可能导致 LES 网格上比等效焓的值过小. 如果弛豫时间比计算时间尺度小则会造成数值振荡. 同时在文献<sup>[22]</sup>中称类似的项为弛豫项, 而非源项.

结合传统的 FDF 的密度耦合方法与 Cleary 的条件平均曲线办法, 本文对密度耦合部分进行改进. 考虑等效焓源项可能沿轴向的变化情况, 同时也为了减小程序的并行开销, 预先将整个计算域沿着轴向分为几个子区域, 各个子区域使用各自的条件平均曲线. 首先得到子区域内每个颗粒上的比等效焓源项:

$$\frac{S_{h_s, L}}{\rho} = \frac{h_{s, L}(\phi(t + \Delta t)) - h_{s, L}(\phi(t))}{\Delta t} \quad (13)$$

式中, 下标  $L$  表示颗粒上的量. 之后在每个子区域内各自将颗粒上的比等效焓源项以颗粒上的参考变量  $f_{ref, L}$  为条件, 得到条件平均曲线

$$F_S(f) = \left\langle \frac{S_{h_s, L}}{\rho} \middle| f_{ref, L}(t + \Delta t) = f \right\rangle \quad (14)$$

具体的做法是将子区域内参考变量空间分为多个区

间,计算参考变量区间内颗粒上比等效焓源项的质量加权平均值.为避免数值振荡,将同一参考变量区间内前 5 个有颗粒的时间步上的质量加权平均值进行时间平均.使用参考变量区间上离散的值,通过线性插值得到子区域内使用的条件平均曲线.依据网格上的 LES 计算的过滤混合物分数值,得到该网格处 LES 计算需要的等效焓源项,即

$$\widetilde{S_{h_s}} = \rho F_S(\tilde{f}; x, t) \quad (15)$$

最后使用该网格上的比等效焓值计算得到 LES 迭代所需的密度,完成整个密度耦合过程.

$$\rho = \frac{\gamma_0}{\gamma_0 - 1} \frac{P}{h_s} \quad (16)$$

在颗粒稀疏的情况下,新的密度耦合方法能够直接利用颗粒计算反映产生的等效焓源项,同时避免了等效焓源项大小随着人为确定的弛豫时间的改变而变化.

## 2 计算结果讨论

### 2.1 算例设置

本文计算的算例是非预混圆管射流值班火焰 Sandia 火焰 E. 进口包含三股气流,分别是中心射流、值班火焰和外部空气伴流,基本参数见表 1. 燃烧器基本几何参数与各个入口参数参照文献[23]给定.

圆柱坐标系中的计算域轴向长度为  $35D$ , 径向为  $15D$ , 周向为  $2\pi$ . 采用结构化网格划分  $500 \times 85 \times 32$ . 火焰 E 中湍流主要由于剪切产生,三个入口均给定均匀的速度.算例 LES 的初始场中,给定混合物分数全为 0,颗粒上的混合物分数也初始化为 0. LES 中全场初始比等效焓值给定与空气伴流进口的值一致.

LES 求解中采用有限差分法离散控制方程,动量方程的时间与空间离散均为二阶格式,标量方程的空间离散使用三阶 WENO(weighted essentially non-oscillatory)格式.蒙特卡洛方法中,SDE 方程采用弱一阶显式求解,颗粒上的参考变量以及速度由 LES 计算过滤值三阶插值得到.初始场与各个入口的颗粒按照大约 8 个网格一个颗粒(1L/8E)的比例设定.参照文献[16],广义 MMC 模型中计算参数  $f_m$  选定为  $f_m = 0.03$ . LES 计算的时间步长由 CFL=0.2 控制,蒙特卡洛方法使用与 LES 相同的时间步长.密度耦合的分区划分与并行分区一致,沿轴向划分 24 个子区域,每个子区域轴向长度约为  $1.5D$ . 甲烷燃烧的化学反应机理采用 17 组分 73 基元反应的 sk17 骨架机理[24],采用 dvoid 直接积

分[25].由初始状态先计算大约 10 个流体通过时间;然后计算相同时长的统计数值,分别得到 LES 计算的混合物分数的统计结果,以及颗粒上计算的混合物分数、组分质量分数和温度的统计结果;最后用瞬时颗粒上的参考变量、混合物分数与温度数据,得到散点图与条件平均图.

表 1 Sandia 火焰 E 三股气流进口基本参数

Tab. 1 Basic parameters of three inlets of Sandia flame E

各个进口的状态	中心射流	值班火焰	空气伴流
流速/(m/s)	74.4	17.1	0.9
入口尺寸	内径 7.2mm(D)	内径 18.2mm	30cm×30cm
温度/K	294	1880	291
混合物分数	1	0.27	0
组分	体积分数 25%甲烷与 75%空气	当量比 0.77 的 甲烷空气混 合燃烧产物	空气

### 2.2 结果分析

图 1 为使用改进密度耦合方法在稀疏 FDF 程序中,由 LES 计算的过滤混合物分数插值得到的颗粒上的参考变量与颗粒上通过广义 MMC 模型计算的混合物分数的散点图.散点的参考变量与混合物分数明显成正相关,大致分布在图的对角线附近.这代表颗粒与 LES 计算得到的混合物分数一致性较好.图中散点仅在两端稍微偏离对角线位置.文献[1]认为两者的偏差是由于稀疏颗粒带来的轴向扩散导致.而作者认为这也可能是由于混合的时间尺度在剪切层外的估计值偏大导致的.

图 2 为三个截面上由实验、LES 以及颗粒统计得到的混合物分数平均值与均方根分布图.可以看到 LES 平均值与实验结果平均值间的偏差相比文献[16]中的结果明显减小.这是因为改进的密度耦合方法中等效焓的源项比之前的方法更为合理.图中出现了颗粒计算的混合物分数平均值相比 LES 结果在混合层靠近中心侧偏大,在另一侧则偏小的现象.这与图 1 的散点图中两端偏离线性相关的现象有关.在文献[16]中亦出现类似的情况.图 2 中三个截面上混合物分数的均方根分布图,尽管大小稍有偏差,但峰值位置基本与实验一致.颗粒计算的均方根与 LES 计算的并不一致,可能是由于颗粒混合时间尺度模型的估计存在偏差.

图 3 为颗粒上的混合物分数-温度的散点图与实验结果的比较.在上游  $x = 7.5D$ ,计算得到的散点基本分布在反应平衡位置,说明基本没有局部熄



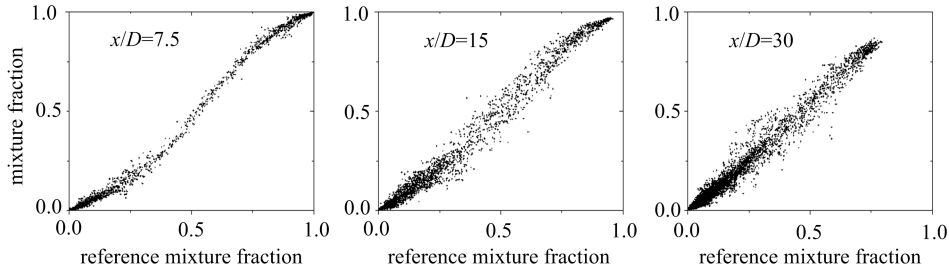
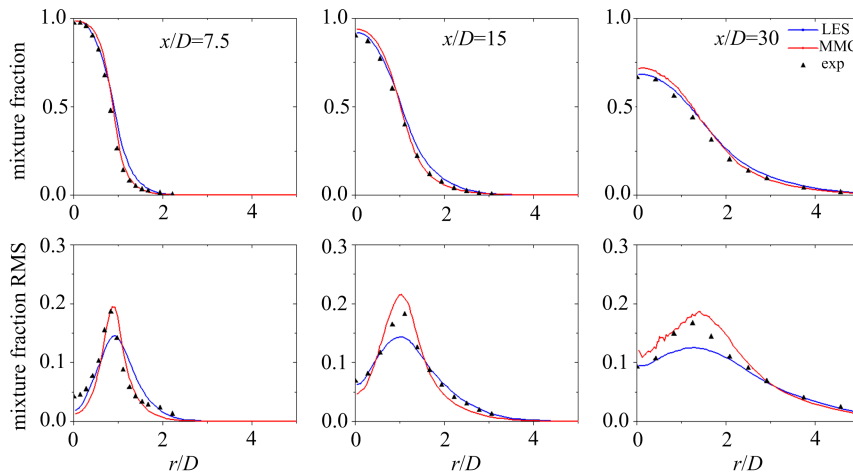


图 1  $x/D=7.5, 15, 30$  处参考变量-混合物分数散点图

Fig. 1 Scatter plots of instantaneous reference mixture fraction versus mixture fraction at  $x/D=7.5, 15, 30$



实线是计算结果(蓝线是 LES 结果, 红线是颗粒场得到的值); 符号是实验值

图 2  $x/D=7.5, 15, 30$  处混合物分数平均值(mixture fraction)与均方根(mixture fraction RMS)沿径向分布

Fig. 2 Radial profiles of the average and rms of mixture fraction at  $x/D=7.5, 15, 30$

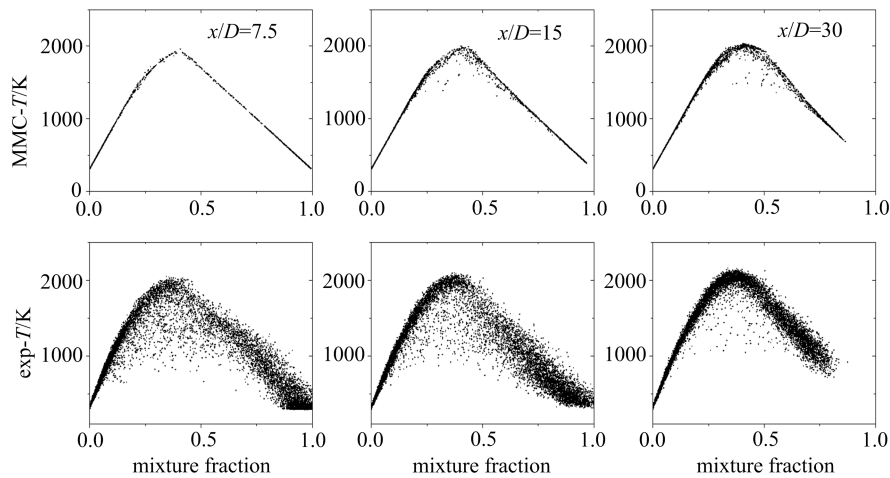


图 3  $x/D=7.5, 15, 30$  处混合物分数-温度的计算结果(MMC-T)与实验结果(exp-T)的散点图

Fig. 3 Scatter plots of temperature versus mixture fraction at  $x/D=7.5, 15, 30$ , top figures show simulation results and bottom figures are for experimental data

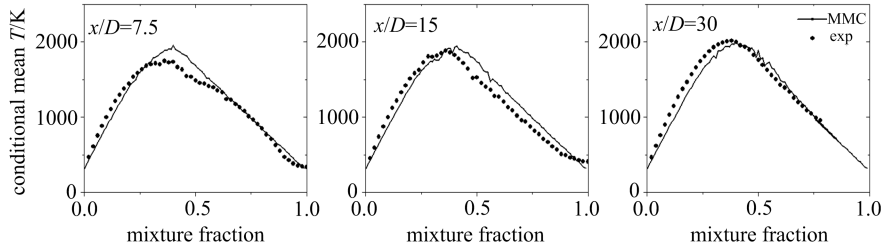
火现象. 到下游处在  $x=15D$  和  $30D$ , 计算的散点有少量偏离平衡位置, 显示出局部熄火的存在. 与实

验相比, 计算反映出来的局部熄火现象比较微弱. 图 4 是将图 3 中散点处理后得到的在混合分数空间的

条件平均的温度分布,可以看到,由于火焰 E 的局部熄火并不强烈,计算得到的条件平均值与实验值符合很好.除了  $7.5D$  处实验结果稍有局部熄火而计算值没有较好地计算出来外,大致都在反应平衡位置处.图 5 为三个截面上由颗粒统计得到的温度平均值的分布.计算结果与实验值总体偏差不大,计算的每个截面上温度的峰值比较准确,仅在  $x = 30D$  处偏差稍为明显.这可能是由于  $\beta$  取为常数 3 使得下游处混合时间尺度偏大,导致颗粒的混合物

分数在参考变量上的方差较大,使得计算的径向分布温度平均值比实验值稍小.

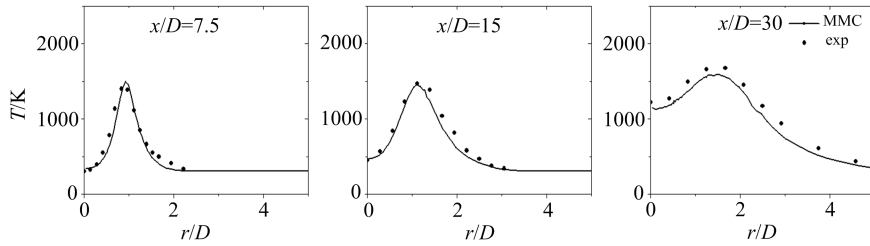
图 6 为由颗粒统计得到的三个截面上平均组分质量分数沿径向的分布.可以看到  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  这三个组分质量分数的计算值与实验值大体上接近,预测的峰值位置也较为准确.此外,组分质量分数的偏差与计算的混合物分数偏差表现出一定的相关性,可能是由于上游颗粒计算时数值扩散累积引起下游的偏差.



圆点为实验值,实线为计算值

图 4  $x/D=7.5, 15, 30$  处混合物分数-温度条件平均值

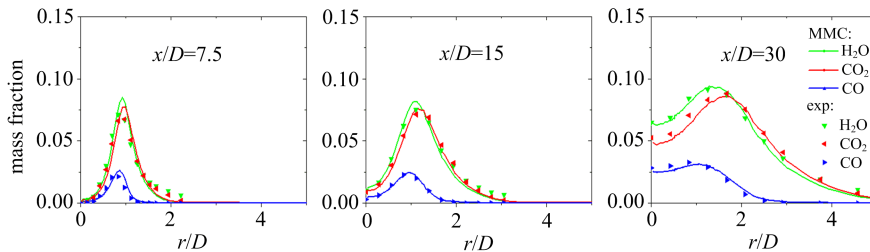
Fig. 4 Profiles of conditional mean temperature versus mixture fraction at  $x/D=7.5, 15, 30$



圆点为实验值,实线为计算值

图 5  $x/D=7.5, 15, 30$  处温度平均值沿径向分布

Fig. 5 Radial profiles of the average temperature at  $x/D=7.5, 15, 30$



圆点为实验值,实线为计算值

图 6  $x/D=7.5, 15, 30$  处  $H_2O, CO_2, CO$  质量分数平均值沿径向分布

Fig. 6 Radial profiles of the average mass fraction of  $H_2O, CO_2$  and  $CO$  at  $x/D=7.5, 15, 30$

### 3 结论

本文采用稀疏拉格朗日 FDF 方法模拟有轻微局部熄火现象的 Sandia 火焰 E. 考虑到稀疏 FDF 方

法中密度耦合方法能够直接影响 LES 的计算结果,于是本文提出了改进的密度耦合方法,将颗粒上等效焓源项的条件平均值作为源项直接耦合到 LES 求解的等效焓输运方程中.相比于先前需要给定弛

豫时间的负反馈形式密度耦合方法,改进的密度耦合方法能够给出更合理的等效焓源项.

Sandia 火焰 E 模拟结果中,混合物分数、组分质量分数以及温度均得到与实验比较接近的结果.相比于文献[16]中 LES 与实验仅是拓扑相似的结果,本文中 LES 计算的混合物分数结果与实验结果更为接近.但 Sandia 火焰 E 的局部熄火现象没有很好地得到模拟,下一步工作是在稀疏拉格朗日 FDF 方法的框架下寻找一个更为合理的时间尺度模型.

**致谢** 本文的数值计算得到了中国科学技术大学超级计算中心的计算支持和帮助.

#### 参考文献(References)

- [1] SUBRAMANIAM S, POPE S B. A mixing model for turbulent reactive flows based on Euclidean minimum spanning trees[J]. *Combustion and Flame*, 1998, 115: 487-514.
- [2] KLIMENKO A Y, POPE S B. The modeling of turbulent reactive flows based on multiple mapping conditioning[J]. *Physics of Fluids*, 2003, 15: 1907-1925.
- [3] POPE S B. A model for turbulent mixing based on shadow-position conditioning[J]. *Physics of Fluids*, 2013, 25: 110803.
- [4] GALINDO S, SALEHI F, CLEARY M J, et al. MMC-LES simulations of turbulent piloted flames with varying levels of inlet inhomogeneity[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36: 1759-1766.
- [5] SUNDARAM B, KLIMENKO A Y, CLEARY M J, et al. A direct approach to generalised multiple mapping conditioning for selected turbulent diffusion flame cases[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2016, 20(4): 735-764.
- [6] DEVAUD C B, STANKOVIC I, MERCI B. Deterministic Multiple Mapping Conditioning (MMC) applied to a turbulent flame in Large Eddy Simulation (LES)[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34: 1213-1221.
- [7] WANDEL A P, LINDSTEDT R P. Hybrid multiple mapping conditioning modeling of local extinction[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34: 1365-1372.
- [8] SUNDARAM B, KLIMENKO A Y, CLEARY M J, et al. Prediction of NO<sub>x</sub> in premixed high-pressure lean methane flames with a MMC-partially stirred reactor[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, 35: 1517-1525.
- [9] SHETTY A, CHANDY A J, FRANKEL S H. A new fractal interaction by exchange with the mean mixing model for large eddy simulation/filtered mass density function applied to a multiscale three-stream turbulent jet[J]. *Physics of Fluids*, 2010, 22: 025102.
- [10] MCDERMOTT R, POPE S B. A particle formulation for treating differential diffusion in filtered density function methods [J]. *Journal of Computational Physics*, 2007, 226: 947-993.
- [11] MEYER D W, JENNY P. A mixing model for turbulent flows based on parameterized scalar profiles [J]. *Physics of Fluids*, 2006, 18: 035105.
- [12] JABERI F A, COLUCCI P J, JAMES S, et al. Filtered mass density function for large-eddy simulation of turbulent reacting flows [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1999, 401: 85-121.
- [13] CLEARY M J, KLIMENKO A Y. A detailed quantitative analysis of sparse-lagrangian filtered density function simulations in constant and variable density reacting jet flows[J]. *Physics of Fluids*, 2011, 23: 115102.
- [14] CLEARY M J, KLIMENKO A Y, JANICKA J, et al. A sparse-lagrangian multiple mapping conditioning model for turbulent diffusion flames[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32: 1499-1507.
- [15] VO S, STEIN O T, KRONENBURG A, et al. Assessment of mixing time scales for a sparse particle method [J]. *Combustion and Flame*, 2017, 179: 280-299.
- [16] GE Y, CLEARY M J, KLIMENKO A Y. Sparse-lagrangian FDF simulations of sandia flame E with density coupling[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33: 1401-1409.
- [17] BARLOW R S, FRANK J H, KARPETIS A N, et al. Piloted methane/air jet flames; transport effects and aspects of scalar structure [J]. *Combustion and Flame*, 2005, 143: 433-449.
- [18] MENEVEAU C, LUND T S, CABOT W H. A Lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1996, 319: 353-385.
- [19] MURADOGLU M, POPE S P, CAUGHEY D A. The hybrid method for the PDF equations of turbulent reactive flows: consistency conditions and correction algorithms[J]. *Journal of Computational Physics*, 2001, 172: 841-878.
- [20] RAMAN V, PITSCH H. A consistent LES/filtered-density function formulation for the simulation of turbulent flames with detailed chemistry [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2007, 31: 1711-1719.
- [21] RAMAN V, PITSCH H. Hybrid large-eddy simulation/Lagrangian filtered-density-function approach for simulating turbulent combustion [J]. *Combustion and Flame*, 2005, 143: 56-78.