

湍流标量输运过程中的 Schmidt 数识别

朱 嵩¹, 刘国华², 程伟平², 黄跃飞³

(1. 广东省电力设计研究院, 广东 广州 510663; 2. 浙江大学建筑工程学院, 浙江 杭州 310058;
3. 清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084)

摘要 湍流 Schmidt 数是湍流传质过程中的关键控制参数, 为了准确识别输运过程的湍流 Schmidt 数, 提出基于 Metropolis-Hastings 算法和有限单元法的湍流 Schmidt 数识别算法。湍流求解采用稳态标准 $k-\epsilon$ 模型, 浓度场求解采用非稳态无源对流扩散方程。算例计算结果表明, 基于 Metropolis-Hastings 算法和有限单元法的参数识别算法对湍流 Schmidt 数的识别精度较高。

关键词 湍流 Schmidt 数; Metropolis-Hastings 算法; 参数识别; 标量输运

中图分类号: O242.28; O357.5⁺3 文献标识码: A 文章编号: 1006-7647(2011)03-0017-03

Identification for Schmidt number in scalar transport process of turbulent flows//ZHU Song¹, LIU Guo-hua², CHENG Wei-ping², HUANG Yue-fei³ (1. Guangdong Electric Power Design Institute, Guangzhou 510663, China; 2. College of Civil Engineering and Architecture, Hangzhou 310058, China; 3. State Key Laboratory of Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract : Turbulent Schmidt number is a key control parameter in the mass transfer process of turbulence. In order to accurately identify the turbulent Schmidt number during the transportation, a method for identifying the turbulent Schmidt number based on the Metropolis-Hastings algorithm and the finite element methods was proposed. The steady standard $k-\epsilon$ model was employed to compute the turbulent fields, and the unsteady convection-diffusion equation without sources was adopted to solve the concentration fields. The computed results of a case indicates that the proposed method based on the Metropolis-Hastings algorithm and the finite element methods has high identification precision for the turbulent Schmidt number.

Key words : turbulent Schmidt number; Metropolis-Hastings algorithm; parameter identification; scalar transport

在湍流传质和传热过程中, 浓度扩散系数和温度扩散系数不仅和流体的属性有关, 而且和流动状态密切相关。由于湍流在时间上的非定常性和空间上的各向异性, 因而浓度或温度的扩散系数是时间和空间的函数, 所以相对于物性参数, 扩散系数的取值相对较为困难。在湍流传质研究过程中, 一般引入 Schmidt 数来表达湍流的扩散能力。Schmidt 数是一个无量纲参数, 定义为动量扩散和质量扩散之比。

由于湍流 Schmidt 数和具体的湍流场有较大关系, 因而很多学者进行了大量的调查、试验和数学模型研究。Tominaga 等^[1]调查总结了射流、浊流、边界层羽流弥散和建筑物附近的流动中的湍流 Schmidt 数的经验取值, 指出湍流 Schmidt 数对预测结果具有较大的影响, 应该根据不同类型的流动具体研究。He 等^[2]采用 RANS 方法对在横流中的射流的湍流 Schmidt 数对射流混合的影响进行了研究, 认为此情

况下湍流 Schmidt 数取 0.2 能较好地符合试验数据。张晓航等^[3]对无剪切湍流混合层中被动标量的扩散进行了数值模拟, 结合烟粒子扩散风洞试验研究了不同 Schmidt 数对被动标量扩散的影响。Xu^[4]研究了高 Schmidt 数弱扩散条件下湍流中被动标量的混合, 计算中 Schmidt 数达到了 1 024, 泰勒尺度雷诺数约为 8。Duduković 等^[5]研究了湍流 Schmidt 数对降液膜的质量传输率的影响, 指出湍流雷诺数通过影响湍流谱来影响湍流 Schmidt 数, 其主要原因来源于高频和低频湍流脉动对传热传质输运的不同影响。随着雷诺数的增大, 不仅湍流强度增大, 而且湍流谱从低频向高频移动, 结果使得雷诺数对质量输运的影响不如对动量输运的影响大, 最终使得湍流的 Schmidt 数随着湍流雷诺数的增大而增大。Flesch 等^[6]通过大范围气体示踪试验获得了大气边界层的 Schmidt 数(约为 0.6)。Ojo 等^[7]采用水动力观测数

据研究了湍流扩散过程及扩散系数的确定方法。在湍流 Schmidt 数识别方面的研究较少,Guo 等^[8]采用遗传算法估计了横流中的射流的变系数 Schmidt 数,取得了较好的结果。

笔者将从概率统计的角度,采用 Metropolis-Hastings 算法对湍流标量输运的 Schmidt 数进行识别,其中湍流和浓度耦合场的求解采用有限单元法,湍流场求解采用 Boussinesq 涡黏性假设。采用 Metropolis-Hastings 算法识别流动输运参数参见文献[9-12]。

1 数学模型

湍流计算采用稳态标准 $k-\epsilon$ 模型,浓度场计算采用非稳态对流扩散方程,控制方程如下:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\eta \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u_i u_j} \right) \tag{2}$$

$$\begin{aligned} \rho u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\eta + \frac{\eta_1}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \\ & \eta_1 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \rho \epsilon \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} \rho u_k \frac{\partial \epsilon}{\partial x_k} = & \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\eta + \frac{\eta_1}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_k} \right] + \\ & \frac{c_1}{k} \eta_1 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - c_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k} \end{aligned} \tag{4}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_t \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \tag{5}$$

$$Sc = \frac{\nu_t}{D_t} \tag{6}$$

式中: u_i 为流速; x_i, x_j, x_k 分别为 i, j, k 方向的空间坐标; ρ 为密度; p 为压强; η 为流体动力黏度; η_1 为湍流运动黏度; k 为湍动能; ϵ 为耗散率; c 为浓度; ν_t 为湍流运动黏度; D_t 为湍流扩散系数; Sc 为湍流 Schmidt 数; $c_1, c_2, \sigma_k, \sigma_\epsilon$ 为 $k-\epsilon$ 模型系数。

2 参数识别算法

Metropolis-Hastings 算法是由 Metropolis 提出并由 Hastings 发展完善起来的一种概率抽样算法,属于马尔科夫链蒙特卡罗方法的一种。它是一种随机优化算法,通过随机游走的方式在 Metropolis-Hastings 准则下获得未知参数的样本,在对后验样本统计的基础上获得未知参数的估计值。结合湍流 Schmidt 数识别,提出参数识别算法如下:

第 1 步:构造正态分布似然函数作为湍流 Schmidt 数随机优化的目标函数。

第 2 步:在先验范围内随机产生湍流 Schmidt 数的初始值。

第 3 步:采用有限单元法和标准 $k-\epsilon$ 模型计算当前湍流 Schmidt 数 Sc_{now} 的似然函数值 L_{now} 。

第 4 步:对当前湍流 Schmidt 数进行一个无偏扰动,获得湍流 Schmidt 数新的测试值 Sc_{test} ,计算在测试值时的似然函数值 L_{test} 。

第 5 步:如果 L_{test} 大于 L_{now} ,那么用 Sc_{test} 取代 Sc_{now} 。

第 6 步:如果 L_{test} 小于 L_{now} ,那么产生 1 个 $[0, 1]$ 区间的均匀分布的随机数 m ,如果 m 小于 L_{test} 和 L_{now} 的比值,那么亦用 Sc_{test} 取代 Sc_{now} 。

第 7 步:返回第 4 步,反复迭代直到预定的次数。

第 8 步:对所有随机产生的样本进行统计以获得湍流 Schmidt 数的估计值。

3 算例研究

3.1 流动正问题的参数设置

取一个扩散器内的二维湍流扩散为算例。如图 1 所示,具有一定浓度的流体从左边界流入、右边界流出,边界条件设置见表 1。进口流速为 0.1 m/s ,进口浓度为 1 mol/m^3 ,瞬态计算总时间为 20 s ,时间步长为 0.1 s ,运动黏度为 $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ 。共剖分了 2 307 个二次拉格朗日型三角形单元。

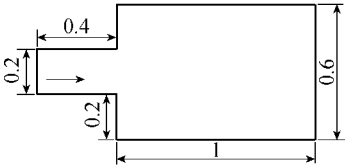


图 1 二维湍流扩散流动计算域(单位:m)

表 1 边界条件设置

边界位置	流场边界条件	浓度场边界条件
进口	给定流速、湍流动能、湍流耗散率	给定浓度
出口	压力出口,流动充分发展	对流通量
其他	无滑移	不可穿过

以下取不同的湍流 Schmidt 数进行非稳态的浓度场计算。计算发现,不同湍流 Schmidt 数对标量场的时空分布有较大的影响。在相同的射流场内,当湍流 Schmidt 数较小时,射流浓度分散性较大,对流作用较弱;当湍流 Schmidt 数较大时,射流浓度较为集中,扩散作用较弱。由此可以看出标量场对湍流 Schmidt 数的敏感性较强,因而湍流 Schmidt 数具备良好的可识别性条件。

3.2 参数识别

假设算例中湍流 Schmidt 数的真值为 0.4。测

点布置在对称轴上距离进口 0.9 m 处。计算 $t = 7\text{ s}$, 7.5 s , 8 s , 8.5 s , 9 s , 9.5 s , 10 s 等 7 个时刻的浓度数据 $c_{\text{测}} (i = 1, 2, \dots, 7)$, 用其作为反演的测量数据 (由于文中没有实测数据, 因而用湍流 Schmidt 数真值的有限元模拟计算结果作为反演的测量数据)。假设湍流 Schmidt 数的先验范围为 0.1 ~ 0.9, 湍流 Schmidt 数的初始迭代点在先验范围内随机产生。Metropolis-Hastings 随机游走的步长为 5% 的先验范围, 即为 0.04。测量噪声假定为白噪声 $N(0, \sigma^2)$, $\sigma = 0.01$ 。记有限元数值计算浓度为抽象函数 $c_i = f(Sc)$, 文中构造的似然函数如下: $L(Sc) = \exp\left[-\frac{(c_i - c_{\text{测}i})^2}{2\sigma^2}\right]$ 。Metropolis-Hastings 迭代共 500 次, 湍流 Schmidt 数的迭代过程如图 2 所示, 后验概率分布如图 3 所示。

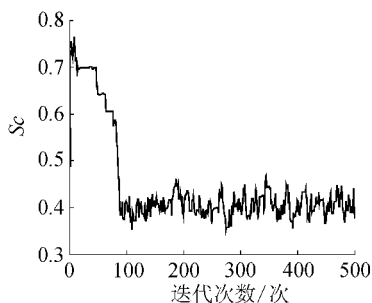


图 2 湍流 Schmidt 数的迭代过程

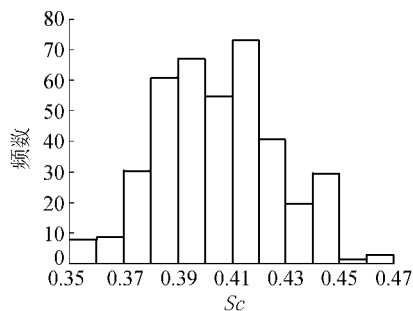


图 3 湍流 Schmidt 数的后验概率直方图

从图 2 中可以看出, 马尔科夫链随机游走经历过一个初始化阶段 (迭代大约 100 次) 后进入了统计收敛域, 表明计算参数的选取是合理的。为了验证计算结果的正确性, 对迭代 100 次以后的 400 个抽样样本进行统计, 样本均值为 0.404 98, 均值的估计误差为 1.245%, 标准差为 0.021 99, 均值 95% 置信区间为 [0.402 82, 0.407 15]。由此可以看出基于 Metropolis-Hastings 算法和有限单元法的参数识别方法识别精度较高。此外, 从图 3 中可以看出, 湍流 Schmidt 数后验分布具有较好的正态分布性质, 其可识别性和识别精度都较高。

4 结 语

为了对湍流输运过程中的关键控制参数进行识别, 提出基于 Metropolis-Hastings 算法和有限单元法的参数识别方法, 湍流计算采用标准 $k-\epsilon$ 模型, 标量场计算采用非稳态对流扩散方程。算例计算结果表明本文提出的算法能对湍流 Schmidt 数进行可靠的识别。

参考文献:

- [1] TOMINAGA Y, STATHOPOULOS T. Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flow field[J]. Atmospheric Environment, 2007, 41(37): 8091-8099.
- [2] HE Guang-bin, GUO Yan-hu, HSU A T. The effect of Schmidt number on turbulent scalar mixing in a jet-in-crossflow[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1999, 42: 3727-3738.
- [3] 张晓航, 许春晓, 张兆顺. Sc 数对湍流被动标量扩散的影响[J]. 工程力学, 2004, 21(3): 36-39.
- [4] XU Shu-yi. Turbulent mixing of passive scalars at high Schmidt number[D]. Georgia: Georgia Institute of Technology, 2005.
- [5] DUDUKOVIĆ A, PJANOVIC R. Effect of turbulent Schmidt number on mass-transfer rates to falling liquid films[J]. Ind Eng Chem Res, 1999, 38: 2503-2504.
- [6] FLESCH T K, PRUEGER J H, HATFIELD J L. Turbulent Schmidt number from a tracer experiment[J]. Agricultural and Forest Meteorology, 2002, 111(4): 299-307.
- [7] OJO T O, BONNER J S, PAGE C. Studies on turbulent diffusion processes and evaluation of diffusivity values from hydrodynamic observations in Corpus Christi Bay[J]. Continental Shelf Research, 2006, 26(20): 2629-2644.
- [8] GUO Yan-hu, HE Guang-bin, HSU A T. Application of genetic algorithms to the development of a variable Schmidt number model for jet-in-crossflows[J]. International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow, 2001, 11(8): 744-761.
- [9] 朱嵩, 毛根海, 刘国华, 等. 利用贝叶斯推理估计二维含源对流扩散方程参数[J]. 四川大学学报: 工程科学版, 2008, 40(2): 38-43.
- [10] 朱嵩. 基于贝叶斯推理的环境水力学反问题研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2008.
- [11] 朱嵩, 刘国华, 王立忠, 等. 水动力-水质耦合模型污染源识别的贝叶斯方法[J]. 四川大学学报: 工程科学版, 2009, 41(5): 1-6.
- [12] 朱嵩, 毛根海, 刘国华, 等. 改进 MCMC 方法及应用[J]. 水利学报, 2009, 40(8): 1019-1023.

(收稿日期: 2010-06-22 编辑: 骆超)