双向耦合含颗粒湍流的大涡模拟模型

M. Hausmann，F. Evrard，* 和 B. van Wachem†奥托·冯·格里克大学机械过程工程系 ¨马格德堡大学 ¨大学广场 *2* 号，*39106* 马格德堡，德国（日期：2023 年 4 月 7 日）

arXiv:2304.03162v1 [physics.flu-dyn] 6 Feb 2023

摘要

本文提出了一种用于颗粒负载湍流大涡模拟（LES）的新建模框架，可捕捉颗粒相与流体相在已解析尺度和亚格子尺度上的相互作用。与绝大多数现有的亚格子尺度模型不同，所提出的框架不仅考虑亚格子尺度速度对颗粒加速度的影响，还考虑颗粒对湍流流体流动的作用。这包括颗粒对亚格子尺度的湍流调制，该作用通过建模的亚格子尺度应力张量加以考虑；同时也包括未解析颗粒运动对已解析流动尺度的影响。我们的新建模框架将一种近期提出的模型与亚格子尺度动能输运方程的求解相结合；该模型用于为已解析流体速度补充亚格子尺度分量。与相应的直接数值模拟（DNS）相比，我们发现颗粒对间距和颗粒聚集的结果吻合度很高。此外，我们还表明，所提出的建模框架能够捕捉颗粒引起的亚格子尺度动能变化。

一、引言

为了捕捉整个湍流谱中直至柯尔莫哥洛夫长度和时间尺度的颗粒-湍流相互作用，必须进行直接数值模拟（DNS）。在学术研究中，含颗粒湍流的 DNS 通常用于深入了解其背后的物理现象。然而，随着流动构型与实际应用的关联日益密切，要解析如此宽广的流动长度和时间尺度范围，计算成本会高得难以承受。单相流中一种成熟的替代方法是大涡模拟（LES），它只解析较大的流动尺度，并对小尺度主要起耗散作用的影响进行建模。对于大多数单相流应用，这种方法效果良好；但在考虑含颗粒流时，尤其是颗粒显著影响流动（双向耦合）的情况下，可能会出现严重问题。

大多数关于颗粒负载流的文献都聚焦于单向耦合，即考虑流动对颗粒统计量的影响，但不考虑其影响

*现任教于康奈尔大学西布利机械与航空航天工程学院，美国纽约州伊萨卡市，邮编 14853。

† berend.vanwachem@ovgu.de

流场中的颗粒。多项研究 [1–4] 对忽略亚格子尺度速度贡献对颗粒输运的影响进行了考察和量化。研究发现，尽管亚格子尺度速度的动能很小，但忽略亚格子尺度流体速度会显著影响颗粒的运动，进而强烈影响颗粒的优先聚集及其他统计量。

在大涡模拟的范畴内，有几类模型试图生成逼真的颗粒统计量。拉格朗日模型通常依赖于为每个单独颗粒求解一个随机微分方程（例如，参见[5–10]）。这些模型通常易于实现、计算效率高，也可应用于复杂区域。然而，它们通常包含经验参数，而且其拉格朗日特性使其无法准确预测粒子对统计。其他模型则依赖于对大涡模拟速度进行连续反卷积，并利用所得的流体速度场输运颗粒 [11, 12]。Park 等人 [13] 通过动态调整椭圆微分滤波器，扩展了对滤波速度的反卷积，使模型在动能或耗散方面与亚格子尺度模型保持一致。近似反卷积方法的主要缺点是，它们不会引入比大涡模拟更高波数的速度，而只会修改大涡模拟速度。因此，这些模型无法完整地再现直接数值模拟中的颗粒统计量。

使用大涡模拟框架预测颗粒统计量时，最有前景的结果来自能够重构亚格子尺度速度的模型。Bassenne 等人 [14] 提出了一种此类模型，该模型交替采用 Park 等人的动态近似反卷积方法，以及基于 Domaradzki 和 Loh 工作的谱外推方法 [15]。所提出的模型改进了对较宽斯托克斯数范围内颗粒聚集的预测。然而，该模型需要执行投影操作，且必须采用与直接数值模拟相当的分辨率，才能获得无散的亚格子尺度速度，因此计算成本高得令人难以接受。运动学模拟是一种成本低得多的方法，它依赖于使用截断的傅里叶级数重构亚格子尺度速度 [16–18]。运动学模拟所需的傅里叶系数经过选择，使所得速度场无散且符合给定的动能谱。尽管运动学模拟能够改进对斯托克斯数为 $St > 1.5$ 时颗粒聚集的预测，但它仅适用于空间均匀问题。考虑现有模型，目前仍不存在一种能够实现的模型。

在颗粒聚集和拉格朗日颗粒统计量的预测方面取得令人满意的改进，同时保留了实际应用所需的重要特性，例如合理的计算成本，以及不依赖影响至关重要的经验模型参数。人们已开展大量研究，以更好地理解颗粒对湍流的调制。关于受迫和衰减均匀各向同性湍流（均匀各向同性湍流）的研究表明，颗粒的存在可以通过两种方式改变总耗散 [19–23]：（i）颗粒可以从湍流中移除动能，也可以向湍流添加动能。研究表明，颗粒动能传递的方向以及动能传递发生的尺度，至少取决于三个参数：斯托克斯数、颗粒数密度和质量分数 [21]。（ii）流体耗散会受到颗粒存在的影响 [19]。类似地，根据湍流和颗粒的特征参数以及所考虑的长度尺度，流体耗散既可能增强，也可能减弱。

大涡模拟只能解析部分动能谱，因此只能直接计入解析尺度上的修正总耗散。在经典大涡模拟中，亚格子尺度上的颗粒耗散被完全忽略，而亚格子尺度流体耗散则被假定等于单相流中的流体耗散。经典大涡模拟采用为单相流设计的众多亚格子尺度模型之一（例如，参见 [24]），并使用一种流体—颗粒耦合力，而该耦合力的计算未利用颗粒位置处的亚格子尺度流体速度信息。Boivin 等人 [25], 研究了将若干单相流亚格子尺度模型应用于含颗粒流的情况，发现不同模型之间的结果差异很大。Boivin 等人还指出，在颗粒质量分数较高时，预测流体耗散所产生的建模误差变得不那么重要，因为此时颗粒耗散占主导。事实上，我们在本研究中表明，被忽略的颗粒耗散和流体耗散部分会相互补偿。Rohilla 等人 [26] 表明，将 Smagorinsky 模型或动态 Smagorinsky 模型应用于含颗粒流时，无法预测通道流中湍流崩溃（即流动转为层流）所对应的临界颗粒体积负载。他们指出，造成这一问题的主要原因之一是亚格子尺度耗散建模误差。

由于双向耦合湍流含颗粒流的复杂性，能够考虑颗粒与流体所有长度和时间尺度之间所有耦合作用的模型非常少见。Yuu 等人 [27], 尝试推导了一个代数模型，用于

亚格子尺度动能，并将其作为湍流黏度的输入。在 Pannala 和 Menon [28] 以及 Sankaran 和 Menon [29], 的研究中，他们在亚格子尺度动能演化方程中加入了一个用于考虑颗粒存在影响的源项，其方法与本文提出的方法有些相似。然而，他们的颗粒源项并未闭合，因为其中包含亚格子尺度速度，需要进行额外建模。

本文提出了一种建模框架，用于考虑在大涡模拟中通常被忽略的颗粒—湍流相互作用。该框架包含两个耦合模型：(i) 基于 Menon 及其同事的局部动态动能模型（LDKM）的亚格子尺度模型 [30, 31] ，并加入一个源项，用以考虑颗粒对亚格子尺度动能的影响；(ii) 亚格子速度模型，用于封闭颗粒运动方程，以及动量方程和亚格子尺度动能方程中的颗粒源项 [32]。第 II 节介绍本文处理含颗粒流的一般数值框架，其中包括构建亚格子尺度模型所依据的亚格子尺度动能输运方程。第 III 节概述含颗粒大涡模拟所需的闭合关系，并推导所提出的建模框架。随后，第 IV 节介绍单向和双向耦合均匀各向同性湍流的模拟设置，第 V 节则展示直接数值模拟、大涡模拟和建模大涡模拟的对比结果。最后，第 VI 节总结本文。

II. 通用数值框架

在本工作中，我们考虑一种密度为 ρ_{f} 、运动黏度为 ν_{f}且不存在重力场的不可压缩流体。该流体中含有索引为 p 、密度为 ρ_p 且体积为 V_p的颗粒。通过对纳维–斯托克斯方程（纳维–斯托克斯方程）进行体积滤波，可以对颗粒对流体的影响进行建模，而无需求解每个单独颗粒周围的详细流动情况。以下方程通常用于近似小颗粒体积分数下的滤波速度 $\boldsymbol{u}$ 和压力 p

（例如，参见 [33]）：

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) = -\frac{1}{\rho_\mathrm{f}} \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{\rho_\mathrm{f}} \sum_p g(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p|) \boldsymbol{F}_p, \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{\sigma} = \nu_\mathrm{f}(\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^\mathrm{T})$ 为黏性应力张量，$\boldsymbol{F}_p$ 为索引为 p 的颗粒的力贡献，g 为体积滤波操作的核（参见 Anderson 和 Jackson [34]），滤波器尺寸为 δ。注意，滤波仅应用于流体所占据的体积。严格来说，方程 (1) 和 (2) 的解是体积滤波量的近似值，这与实际的流体速度和压力并不等同。在模拟中，可解析的最小流动结构取决于数值网格所能承受的最小网格单元尺寸。与大涡模拟方法类似，体积滤波方法求解网格能够解析的大尺度，并对小尺度的影响进行建模。

颗粒被视为拉格朗日刚性点颗粒。颗粒位置 $\boldsymbol{x}_p$ 由方程控制

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_p}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}_p, \tag{3}$$

以及根据牛顿第二定律得到的颗粒速度

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_p}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\rho_p V_p} \boldsymbol{F}_p, \tag{4}$$

其中 $\boldsymbol{F}_p$ 是作用在颗粒上的所有力之和。多种机制会导致作用在颗粒上的不同力。Kuerten[35] 总结了可能的力贡献，以及需要考虑这些力的重要工况。

我们仅考虑颗粒显著小于柯尔莫哥洛夫长度尺度（即最小湍流结构）的情况。通过直接数值模拟解析从湍流尺度一直到柯尔莫哥洛夫长度尺度的流动。注意，直接数值模拟基于点颗粒的假设。在数值网格无法解析甚至最小流动结构的情况下，可以进行大涡模拟。大涡模拟的控制方程通过使用宽度为 Δ 的滤波器 G 再次对方程（1）和（2）进行滤波而得到，

与 $\Delta \gg \delta$ 一起:

$$\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0, \tag{5}$$

$$\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}}) = -\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}} \nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}} \sum_p \widetilde{g(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p|)} \boldsymbol{F}_p \tag{6}$$

请注意，滤波器 G 作用于已经连续的量（这是由于此前使用 g进行滤波），而 $\tilde{}$ 表示滤波算子。第二层滤波不引入任何进一步的假设。

由于颗粒远小于柯尔莫哥洛夫长度尺度（因此也远小于网格间距），源项的数值离散采用 Crowe 等人提出的颗粒源项单元（PSIC）方法 [36]:

$$\sum_p g(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p|) \boldsymbol{F}_p \approx \frac{1}{V_{\mathrm{cell}}(\boldsymbol{x})} \sum_{p \in \Omega_{\mathrm{cell}}(\boldsymbol{x})} \boldsymbol{F}_p, \tag{7}$$

and

$$\sum_p \widetilde{g(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_p|)} \boldsymbol{F}_p \approx \frac{1}{\tilde{V}_{\mathrm{cell}}(\boldsymbol{x})} \sum_{p \in \tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}(\boldsymbol{x})} \boldsymbol{F}_p, \tag{8}$$

其中，Ω_{cell} 和 $\tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}$ 分别表示直接数值模拟和大涡模拟的计算单元，$\tilde{V}_{\mathrm{cell}} < V_{\mathrm{cell}}$ 表示它们的体积。

为模拟被核函数 G滤除的流动尺度，我们推导了亚格子尺度动能 $K_{\mathrm{sgs}} = 1/2(\widetilde{\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}} - \tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \tilde{\boldsymbol{u}})$ 的输运方程。该过程分为两步。首先，将方程（ 2 ）与速度 $\boldsymbol{u}$ 点乘，随后使用 G 进行滤波，得到

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u}}}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla \cdot \left(\widetilde{\boldsymbol{u}} \otimes \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \right) = & -\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}} \nabla \cdot (\tilde{p} \boldsymbol{u}) + \nabla (\tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{u}) - \widetilde{\nabla \boldsymbol{u}} : \boldsymbol{\sigma} \\ & - \frac{1}{\rho_{\mathrm{f}} \tilde{V}_{\mathrm{cell}}} \sum_{p \in \tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}} \boldsymbol{F}_p(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p)) \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p). \end{aligned} \tag{9}$$

右侧的最后一项通过将作用于一个颗粒的阻力与颗粒位置处的流体速度相乘，并对大涡模拟网格单元内的所有颗粒求和来实现。对大涡模拟网格单元内所有颗粒的求和取代了滤波$\widetilde{\ }$操作 $\boldsymbol{F}_p \cdot \boldsymbol{u}$。事实上，这类似于 Schumann [37], 所采用的方法，他通过对计算单元的体积进行平均来定义一组大涡模拟方程，即

可以说，这更接近于大涡模拟的数值实现，而不是空间连续的滤波操作。其次，将方程（6）与滤波速度 $\tilde{\boldsymbol{u}}$ 点乘，这导致

$$\frac{1}{2}\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t}+\frac{1}{2}\nabla\cdot(\widetilde{\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}})=-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}}\nabla\cdot(\widetilde{p}\tilde{\boldsymbol{u}})+\nabla\cdot(\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\tilde{\boldsymbol{u}})-\nabla\tilde{\boldsymbol{u}}:\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}$$
$$-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}\tilde{V}_{\mathrm{cell}}}\tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\sum_{p\in\tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}}\boldsymbol{F}_p(\boldsymbol{u}). \tag{10}$$

右端最后一项的数值实现包括对一个大涡模拟网格单元内所有颗粒所受的力求和，然后乘以当前网格单元的流体速度。

用方程（9）减去方程（10），得到关于 K_{sgs} 的方程

$$\frac{\partial K_{\mathrm{sgs}}}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_j}(\widetilde{u}_i u_j u_i-\widetilde{u_i u_j}\tilde{u}_i)=-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}}\frac{\partial}{\partial x_i}(\widetilde{pu_i}-\tilde{p}\tilde{u}_i)+\nu_{\mathrm{f}}\frac{\partial^2 K_{\mathrm{sgs}}}{\partial x_j\partial x_j}$$
$$-\nu_{\mathrm{f}}\left(\widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}-\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}\right)-\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}\tilde{V}_{\mathrm{cell}}}\left(\sum_{p\in\tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}}F_{i,p}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p))u_i(\boldsymbol{x}_p)-\tilde{u}_i\sum_{p\in\tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}}F_{i,p}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p))\right). \tag{11}$$

右端最后一项是颗粒引起的亚格子尺度动能传递的源项。该方程为模拟被 G滤除尺度上的颗粒湍流调制奠定了基础。

III. 大涡模拟框架下的建模

通过 G 进行第二次滤波操作后，可得到支配流体行为的方程；若不知道流体速度 $\boldsymbol{u}$，就无法显式求解这些方程。我们在大涡模拟框架下对这些方程进行建模。除亚格子尺度应力张量的建模外，含颗粒流还需要进一步的闭合处理，下面将先对此进行说明，再建立相应模型。

A. 所需的闭合处理

在假设含颗粒流足够稀疏、颗粒足够小，并使用核 G 进行后续滤波的条件下，流体方程可写成典型的大涡模拟形式

如下 [38]

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \tag{12}$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu_{\mathrm{f}} \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho_{\mathrm{f}} \tilde{V}_{\mathrm{cell}}} \sum_{p \in \tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}} F_{\mathrm{D},i,p}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p)), \tag{13}$$

其中我们假设只有阻力 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{D}}$ 作用于颗粒。亚格子尺度应力张量 τ_{ij} 定义为

$$\tau_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j. \tag{14}$$

对于颗粒　　力退化为阻力时，颗粒速度 $\boldsymbol{v}_p$ 由下式决定

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_p}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\rho_p V_p} \boldsymbol{F}_{\mathrm{D},p}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p)). \tag{15}$$

为求解滤波流体速度 $\tilde{\boldsymbol{u}}$ 和颗粒速度 $\boldsymbol{v}_p$，还需要进行两项建模处理：**(i)** 必须对亚格子尺度应力张量 τ_{ij} 进行封闭，以模拟未解析的亚格子尺度对已解析（滤波后）物理量的影响。需要注意的是，颗粒的存在会改变亚格子尺度速度。因此，严格来说，基于单相流亚格子尺度速度假设的亚格子尺度应力张量模型并不适用。**(ii)** 为了计算作用于颗粒的阻力，以及符号相反、反向耦合至流体的力，需要知道颗粒位置处未滤波的流体速度；而在大涡模拟中，该量是未知的。众所周知，当阻力由颗粒位置处的滤波流体速度 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{D},\ p}(\tilde{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}_p))$ [2, 3]计算得出时，颗粒的行为会有所不同。本文为这两种封闭提供了一个建模框架。

B. 亚格子尺度应力张量建模

亚格子尺度应力张量考虑了亚格子尺度速度对大涡模拟中解析速度的影响。在大涡模拟中，这个亚格子尺度应力张量需要建模。通常，建模的重点仅放在亚格子尺度对解析尺度的能量效应上，尽管湍流能量传递机制（涡量拉伸和应变自放大）具有特征性的方向依赖性 [39]。在单相湍流中，亚格子尺度模型的构建可以基于

基于这样的假设：向更小尺度传递的能量要么被黏性耗散，要么向更大尺度散射回去。然而，在颗粒负载湍流中，由于与颗粒的相互作用，还会产生额外的能量源和汇，而经典的亚格子尺度模型（针对单相流设计）并未考虑这些因素。

为考虑流体与颗粒之间的相互作用，我们对 Menon及其同事提出的局部动态动能模型（LDKM） [30, 31]进行了修改。亚格子尺度应力张量的建模基于涡黏度 ν_{k}

$$\tau_{ij} = -2\nu_{\mathrm{k}}\tilde{S}_{ij} + \frac{2}{3}K_{\mathrm{sgs}}\delta_{ij}, \tag{16}$$

˜其中 S_{ij} 是滤波后的应变率张量， δ_{ij} 是克罗内克张量。涡黏度根据亚格子尺度动能计算

$$\nu_{\mathrm{k}} = C_{\mathrm{k}}\sqrt{K_{\mathrm{sgs}}}\Delta, \tag{17}$$

其中， C_{k} 为常数。亚格子尺度动能 K_{sgs} 的演化由输运方程（11）控制。然而， K_{sgs}的输运方程中的若干项需要未滤波的流体速度。Lilly [40]提出了一个输运方程（11）的模型（不含颗粒源项），使其仅通过已知的滤波量即可求解，这构成了LDKM的基础。

$$\frac{\partial K_{\mathrm{sgs}}}{\partial t} + \tilde{u}_i\frac{\partial K_{\mathrm{sgs}}}{\partial x_i} = -\tau_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_\epsilon\frac{K_{\mathrm{sgs}}^{3/2}}{\Delta} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\nu_{\mathrm{k}}\frac{\partial K_{\mathrm{sgs}}}{\partial x_i}\right) + \Phi_{\mathrm{P}}, \tag{18}$$

其中， C_ϵ 是常数。颗粒源项 Φ_{P} 并非原始 LDKM 的一部分，而是基于第二节中的推导引入当前模型的：

$$\Phi_{\mathrm{P}} = -\frac{1}{\rho_{\mathrm{f}}\tilde{V}_{\mathrm{cell}}}\left(\sum_{p\in\tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}} F_{\mathrm{D},i,p}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p))u_i(\boldsymbol{x}_p) - \tilde{u}_i\sum_{p\in\tilde{\Omega}_{\mathrm{cell}}} F_{\mathrm{D},i,p}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_p))\right). \tag{19}$$

需要注意的是，Pannala 和 Menon [28] 以及 Sankaran 和 Menon [29] 已在亚格子尺度动能的输运方程中采用了颗粒源项的概念，但实现方式不同，且未提供严谨的推导。为区分包含颗粒源项（式 (19)）的当前模型与原始 LDKM，我们将其称为修正 LDKM（mLDKM）。常数 C_ϵ 和 C_{k} 基于尺度相似性假设进行动态计算。Leonard 应力张量定义为

$$L_{ij} = \widehat{\tilde{u}_i\tilde{u}_j} - \hat{\tilde{u}}_i\hat{\tilde{u}}_j, \tag{20}$$

ˆ 其中 ˆ表示滤波宽度为 $\Delta = 2\Delta$的滤波操作。假设 Leonard 应力张量的计算方式与亚格子尺度应力张量类似

$$L_{ij} = -2C_{\mathrm{k}}\hat{\Delta}K_{\mathrm{test}}^{1/2}\hat{\tilde{S}}_{ij} + \frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk}, \tag{21}$$

常数 C_{k} 可以动态计算自

$$C_{\mathrm{k}} = \frac{1}{2}\frac{L_{ij}\sigma_{ij}}{\sigma_{ij}\sigma_{ij}}, \tag{22}$$

with

$$\sigma_{ij} = -\hat{\Delta}K_{\mathrm{test}}^{1/2}\hat{\tilde{S}}_{ij} \tag{23}$$

and

$$K_{\mathrm{test}} = \frac{1}{2}(\widehat{\tilde{u}_i\tilde{u}_i} - \hat{\tilde{u}}_i\hat{\tilde{u}}_i) = \frac{1}{2}L_{ii}. \tag{24}$$

˜请注意，对于不可压缩流动， $\delta_{ij}S_{ij} = 0$ 。

假设尺度相似性对耗散同样成立，可得

$$C_\epsilon\frac{K_{\mathrm{test}}^{3/2}}{\hat{\Delta}} = (\nu_{\mathrm{f}} + \nu_{\mathrm{k}})\left(\widehat{\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial\hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j}\frac{\partial\hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j}\right). \tag{25}$$

由此可获得 C_ϵ 的动态值

$$C_\epsilon = \frac{\hat{\Delta}(\nu_{\mathrm{f}} + \nu_{\mathrm{k}})}{K_{\mathrm{test}}^{3/2}}\left(\widehat{\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial\hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j}\frac{\partial\hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j}\right). \tag{26}$$

不含颗粒源项的单相流原始 LDKM 具有一些优势。动态常数 C_{k} 可以为负，因此从理论上讲能够模拟反向能量级联。不过，与 Kim 等人 [41]的做法类似，为确保流动方程数值解的稳定性，涡黏度在数值上被限制为 $\nu_{\mathrm{k}} > -\nu_{\mathrm{f}}$ 。与 Germano 等人 [42],的动态模型不同，LDKM 无需沿统计均匀方向进行平均，而后者要求存在统计均匀方向。通过动态计算常数，该模型不含任何可调常数。

除了 LDKM在单相流中的理论优势外，其主要优势在于，它为以确定性方式纳入颗粒源项提供了一个框架。如果颗粒从亚格子尺度中带走动能， K_{sgs} 会降低，并且该

流体耗散（即涡黏度）降低了。然而，该模型无法考虑湍流增强或衰减发生在哪些尺度上。实际上，亚格子尺度动能的能谱分布可能发挥重要作用。

颗粒源项 Φ_{P} 在大涡模拟的范围内无法闭合，因为需要颗粒位置处的未滤波速度，而可用的只有滤波速度。因此，只有在提供适用于颗粒位置处亚格子尺度速度的合适模型时，包含颗粒源项的 mLDKM 才适用。

C. 亚格子尺度速度的近似重构

计算作用于颗粒的阻力需要知道粒子位置处的流体速度，该速度用于颗粒的运动方程，并作为作用于流体的反馈力。除了大涡模拟速度之外，还必须提供亚格子尺度速度。我们将亚格子尺度速度近似为截断的傅里叶级数展开

$$\boldsymbol{u}' = \sum_{m=0}^{N_{\mathrm{m}}-1} \left(\boldsymbol{A}_m(t) \cos(\boldsymbol{k}_m \cdot \boldsymbol{x}) + \boldsymbol{B}_m(t) \sin(\boldsymbol{k}_m \cdot \boldsymbol{x}) \right), \tag{27}$$

其中，$\boldsymbol{A}_m(t)$和 $\boldsymbol{B}_m(t)$是随时间变化的系数，N_{m} 是模态数，$\boldsymbol{k}_m$ 是波矢。对于整个域使用相似的系数时，亚格子尺度速度在统计上是均匀的。为了克服全局统计均匀性的限制，定义了统计均匀子域 $\Omega_{\mathrm{domain}} \in \Omega$，这些子域分别拥有一组独特的系数 $\boldsymbol{A}_m(t)$ 和 $\boldsymbol{B}_m(t)$。LES 中已知的量可以在该子域上进行平均

$$\langle \phi \rangle_{\mathrm{domain}} = \frac{1}{V_{\mathrm{domain}}} \int_{\Omega_{\mathrm{domain}}} \phi \mathrm{d}V, \tag{28}$$

其中，V_{domain} 表示子域的体积。我们利用 Lavel 等人[43] 的研究成果，他们指出，控制方程中亚格子尺度速度的非线性项对动能谱和间歇性的影响，可以用额外的黏度替代，而该黏度可通过重整化群获得 [44]

$$\nu_{\mathrm{t}}'(k) = \left(\nu_{\mathrm{f}}^2 + C_\nu \int_k^\infty q^{-2} E(q) \mathrm{d}q \right)^{1/2} - \nu_{\mathrm{f}}, \tag{29}$$

其中，流体动能谱为 E，解析常数为 $C_\nu = 2/5$。可以推导出一个用于求得初步系数集合的方程 $A^*_{m,\ i}$ 和 $B^*_{m,\ i}$ [32]

$$\frac{A^*_{m,i} - A^n_{m,i}}{\Delta t} + \langle \tilde{u}^n_j \rangle_{\text{domain}} \left(k_{m,j} B^n_{m,i} + \frac{\partial A^n_{m,i}}{\partial x_j} \right) + A^n_{m,j} \langle \frac{\partial \tilde{u}^n_i}{\partial x_j} \rangle_{\text{domain}} = (\nu_\text{f} + \nu'_\text{t}) \left(-|\boldsymbol{k}_m|^2 A^n_{m,i} + \frac{\partial^2 A^n_{m,i}}{\partial x_j \partial x_j} + 2k_{m,j} \frac{\partial B^n_{m,i}}{\partial x_j} \right) + f_{m,i}, \tag{30}$$

$$\frac{B^*_{m,i} - B^n_{m,i}}{\Delta t} + \langle \tilde{u}^n_j \rangle_{\text{domain}} \left(\frac{\partial B^n_{m,i}}{\partial x_j} - k_{m,j} A^n_{m,i} \right) + B^n_{m,j} \langle \frac{\partial \tilde{u}^n_i}{\partial x_j} \rangle_{\text{domain}} = (\nu_\text{f} + \nu'_\text{t}) \left(-|\boldsymbol{k}_m|^2 B^n_{m,i} + \frac{\partial^2 B^n_{m,i}}{\partial x_j \partial x_j} - 2k_{m,j} \frac{\partial A^n_{m,i}}{\partial x_j} \right) + g_{m,i}. \tag{31}$$

注意，不对指标 m 进行求和。指标 n 表示时间层，而$f_{m,i}$ 和$g_{m,i}$ 是用于维持所需亚格子尺度动能的强迫项。通过随后对初步系数应用投影操作，使系数满足无散条件

$$\boldsymbol{A}^{n+1}_m(t) = \boldsymbol{A}^*_m(t) - \boldsymbol{k}_m \frac{\boldsymbol{k}_m \cdot \boldsymbol{A}^*_m(t)}{|\boldsymbol{k}_m|^2}, \tag{32}$$

$$\boldsymbol{B}^{n+1}_m(t) = \boldsymbol{B}^*_m(t) - \boldsymbol{k}_m \frac{\boldsymbol{k}_m \cdot \boldsymbol{B}^*_m(t)}{|\boldsymbol{k}_m|^2}. \tag{33}$$

由于采用离散化的空间导数，系数的解基本上只涉及显式的代数运算，因此数值解的计算成本相当低。数值实验表明，求解系数$A_{m,i}$ 和$B_{m,i}$ 所需的计算时间与大涡模拟 [32]处于同一数量级。

每个子域都具有一组不同的系数，因此需要在子域之间对系数进行插值。Hausmann 等人 [32]提出了一种系数插值方法，使子域之间的亚格子尺度速度场无散。

D. 流体相与颗粒相之间的耦合

在含颗粒大涡模拟中，至少有三种效应未被考虑或考虑得不充分：（i）颗粒受到阻力加速，而这需要颗粒位置处的流体速度。改用滤波流体速度会导致颗粒出现不同的聚集和拉格朗日统计量 [2, 3]，（ii）颗粒对大涡模拟中已解析尺度的影响是不完整的，因为反馈力仅根据滤波速度计算

而不是未滤波速度，（iii）经典大涡模拟中未考虑颗粒对亚格子尺度的影响。与单相流相比，修正后的亚格子尺度速度会改变亚格子尺度应力张量（即亚格子尺度流体速度所导致的耗散）。

图1对比了经典大涡模拟的流程与新提出的建模框架，后者将 mLDKM 与亚格子尺度速度模型结合起来。我们将后者称为建模大涡模拟。在经典大涡模拟中，通过求解滤波纳维–斯托克斯方程，得到滤波流体速度 $\tilde{\boldsymbol{u}}$；方程中的亚格子尺度应力张量由一种常用于单相流的亚格子尺度模型预测。需要注意的是，单相流亚格子尺度模型并未纳入流体–颗粒耦合力的信息。耦合力根据颗粒位置处的滤波速度计算，并用于求得颗粒加速度以及流体动量方程中的源项。

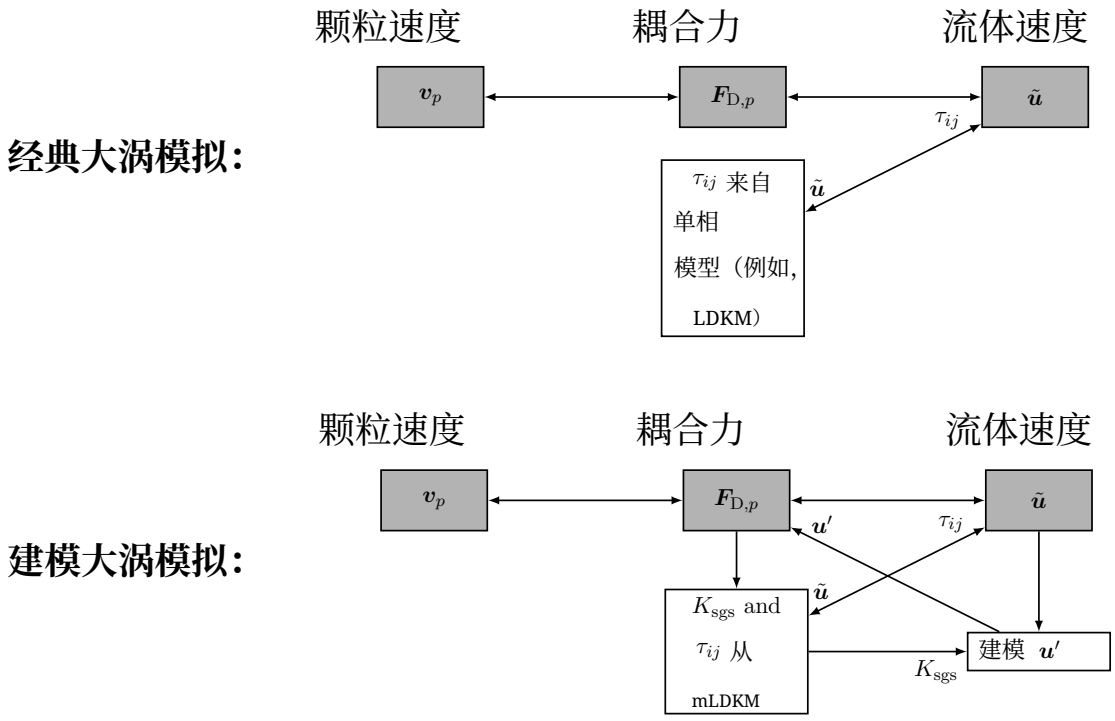


图1. 经典大涡模拟（上）与建模大涡模拟（下）中建模相互作用的可视化。

建模大涡模拟表现出流体相与颗粒相之间更强的耦合。以滤波流体速度和耦合力作为输入，mLDKM 返回一个

亚格子尺度应力张量的预测用于求解滤波纳维–斯托克斯方程，以及亚格子尺度动能的预测；后者作为生成的亚格子尺度速度的目标动能。利用建模的亚格子尺度速度计算耦合力时，考虑了所有湍流长度和时间尺度，直至柯尔莫哥洛夫尺度。这使得能够更现实地预测颗粒速度、滤波纳维–斯托克斯方程中的动量源项以及 mLDKM 中的动能源项。因此，亚格子尺度应力张量和建模的亚格子尺度速度包含了颗粒在未解析尺度上对湍流进行调制的信息。从理论上讲，建模大涡模拟涵盖了流体与颗粒之间发生的所有相互作用。

在第V A节中，我们还研究了采用建模大涡模拟的单向耦合模拟。在这种情况下，图1中从耦合力指向颗粒速度以外任何对象的所有箭头均消失。此时，mLDKM退化为原始的LDKM，也可以替换为任何为单相流开发的亚格子尺度模型。作为亚格子尺度速度建模所需输入的亚格子尺度动能，也可以通过Yoshizawa [45] 的模型或Moin等人 [46]的动态模型进行估算。

IV. 模拟

新提出的建模通过对含颗粒湍流进行直接数值模拟和大涡模拟得到验证与确认。对于所有模拟情形，均考虑均匀各向同性湍流。首先，通过比较建模大涡模拟中的颗粒统计量与同一统计稳态湍流单向耦合情形的直接数值模拟中的颗粒统计量，对颗粒位置处亚格子尺度速度的模型进行评估。在第二种情形中，研究颗粒对流体的反馈力。这需要采用第IIID节所述的完整建模框架，并通过比较双向耦合含颗粒衰减湍流的建模大涡模拟与直接数值模拟对其进行评估。后续各节将详细介绍模拟的实现和配置。

A. 求解控制方程

采用在时空上均为二阶精度的有限体积法求解纳维–斯托克斯方程[47]。连续性方程与动量方程通过动量

加权插值 [48]耦合。因此，数值上存在两个不同的速度场：单元中心速度可准确满足动量平衡，而面中心速度则可守恒质量。

通过在动量方程中加入源项 [49]向流动提供能量，以维持统计稳态湍流。强迫的一个重要特性是，可将人工源项限制在有限范围的波数内，$k \in [k_{\mathrm{start}}, k_{\mathrm{end}}]$。对于含颗粒流，这一点至关重要，可避免强迫直接影响颗粒行为。

采用Verlet格式 [50]求解颗粒运动方程（3）和（4）。作用于拉格朗日颗粒 p 的阻力由下式计算：

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{D},p} = C_{\mathrm{D}} \frac{\rho_{\mathrm{f}}}{8} \pi d_p^2 |\boldsymbol{u}_{\mathrm{rel}}| \boldsymbol{u}_{\mathrm{rel}}, \tag{34}$$

其中阻力系数由Schiller-Naumann关联式 [51]给出。

$$C_{\mathrm{D}} = \frac{24}{Re_p}(1 + 0.15 Re_p^{0.687}), \tag{35}$$

颗粒雷诺数为 $Re_p = |\boldsymbol{u}_{\mathrm{rel}}| d_p / \nu_{\mathrm{f}}$。相对速度 $\boldsymbol{u}_{\mathrm{rel}}$ 定义为颗粒位置处的流体速度与颗粒速度$\boldsymbol{u}_{\mathrm{rel}} = \boldsymbol{u}$（$\boldsymbol{x}_p$）之间的差值 $- \boldsymbol{v}$。

为获得颗粒位置处的流体速度，需要从笛卡尔网格进行插值。插值格式的一个重要特性是，插值得到的速度必须无散。本研究采用一种从面中心速度（以高精度满足连续性方程）向颗粒位置进行无散插值的方法 [52]。

在双向耦合模拟的情况下，Crowe 等人的 PSIC方法 [36] 被采用。

B. 模拟设置

1. 单相流设置

本文的研究包含两种不同的流动类型：(i)受迫均匀各向同性湍流的单向耦合模拟，以及 (ii) 衰减均匀各向同性湍流的双向耦合模拟。两种模拟的计算域

各种类型均为各方向采用周期性边界条件的立方体，边长为 L。时间量均相对于参考时间 $T_{\mathrm{ref}} = L/\sqrt{2/3\langle K\rangle}$ 给出，其中 $\langle K\rangle$ 是流体的平均动能。

单相流模拟的设置总结于表I中。给定值对应于不含颗粒时流动的统计稳态（衰减之前）。双向耦合模拟还要经历一个双向耦合强迫时段，以获得统计稳态，然后关闭强迫。表中的符号分别对应于泰勒雷诺数 Re_λ、基于积分长度尺度的湍流雷诺数 Re_l、柯尔莫哥洛夫时间尺度τ_η、泰勒微尺度 λ以及纵向积分长度尺度 l_{11}。

DNS在由 $N^3 = 256^3$ 网格单元组成的网格上进行，这使最大可分辨波数 $k_{\max}$ 与柯尔莫哥洛夫长度尺度的乘积为$k_{\max}\eta = 1.37$。大涡模拟在具有 $N^3 = 32^3$ 个单元的网格上求解。

表I。均匀各向同性湍流模拟配置的单相流流动参数。

参数	值
Re_λ	75
Re_l	205
η/L	0.0017
$\tau_\eta/T_{\mathrm{ref}}$	0.0075
λ/L	0.029
l_{11}/L	0.079
$k_{\mathrm{start}}L/2\pi$	3
$k_{\mathrm{end}}L/2\pi$	6

2. 单向耦合情况下的颗粒设置

在单向耦合情形中，将五种不同斯托克斯数的颗粒 $St = \tau_p/\tau_\eta$ 引入先前定义的流动设置中。斯托克斯数基于统计稳定单相流的柯尔莫哥洛夫时间尺度。由于在单向耦合模拟中，流动不会受到颗粒的任何反馈，

之前定义的流动参数不变。

颗粒弛豫时间 $\tau_p = \rho_p d_p^2/(18\rho_\mathrm{f}\nu_\mathrm{f})$、各模拟中的颗粒数量 N_p以及颗粒直径与网格间距之比 $d_p/\Delta h$ 总结于表 II 中。

模拟运行超过 $150\tau_\eta$ 后才评估统计量，以获得与初始条件无关的收敛统计量。

表 II. 单向耦合情况下的颗粒构型。

参数	St05	St1	St2	St4	St8
τ_p/T_ref	0.0037	0.0075	0.015	0.03	0.06
N_p	480115	480115	480115	480115	480115
$d_p/\Delta h$	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2

3. 双向耦合情形的颗粒设置

进行了两种模拟配置，其中包括两种不同斯托克斯数的双向耦合颗粒。两种配置均以一段强迫湍流开始，直到含颗粒湍流达到统计稳态（至少 $150\tau_\eta$）。湍流衰减以及统计量的跟踪在该强迫阶段之后开始。请注意，柯尔莫哥洛夫时间尺度以及由此得到的斯托克斯数均基于统计稳态的单相流湍流。两种双向耦合模拟中与颗粒相关的参数总结于表 III。

表 III. 双向耦合情形的颗粒构型。

参数	St2	St8
τ_p/T_ref	0.015	0.060
N_p	45830011	12057066
$d_p/\Delta h$	0.1	0.1
ϕ	1.0	1.0

4. 建模框架的参数

除了直接数值模拟和经典大涡模拟外，我们还采用所提出的大涡模拟建模框架进行了模拟。对于该建模框架中的 mLDKM 部分，无需指定可调模型参数。然而，亚格子尺度速度模型需要选择一些参数。Hausmann 等人 [32], 表明，亚格子尺度速度的统计量对这些参数的取值相对不敏感。

统计均匀子域的数量 N_{domain} 取决于亚格子尺度速度统计量发生变化时所对应的特征长度尺度。根据经验，我们建议每个方向上的子域尺寸约为一个大涡模拟网格单元尺寸的四倍。请注意，在以往的研究中，子域数量并未对速度统计量产生显著影响。

另一个参数与子域之间的插值有关，目的是获得无散速度场。插值核为 [32]

$$W(r) = 1 - \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{-\alpha r}}, \tag{36}$$

其中， r 是到相应子域边界的距离， α 是决定受插值影响区域厚度的参数。通常，插值的影响区域应尽可能小，以使未受插值影响的区域尽可能大。然而，影响区域也不应过小，否则颗粒会将子域边界处的亚格子尺度速度感知为不连续。我们通过经验发现，对于所研究的情形， $\alpha = 40/\Delta h_{\mathrm{domain}}$ 效果良好，其中 $\Delta h_{\mathrm{domain}}$ 是子域的宽度。附录 VI 表明，即使在较大范围内改变参数 α ，颗粒的聚集也不会受到显著影响。

需要设定的剩余参数是级数展开方程（27）中的模态数 N_m 。与子域数类似，先前的研究已表明，只要 $N_{\mathrm{m}} = \mathcal{O}(10^2)$， N_{m} 对速度统计量的影响可以忽略不计。本研究中对 N_{m} 的具体选择主要基于负载均衡方面的考虑。本研究中的参数值汇总于表 IV。

表 IV. 亚格子尺度速度模型的参数。

参数	值
N_{domain}	8
α	$40/\Delta h_{\mathrm{domain}}$
N_{m}	108

V. 结果与讨论

A. 单向耦合配置

本节研究了第IVB 2节中描述的配置。下文中，如果颗粒根据颗粒位置处的大涡模拟速度与建模的亚网格尺度速度之和所确定的阻力进行推进，则将其称为增强型大涡模拟。

在增强型大涡模拟、经典大涡模拟和直接数值模拟中评估粒子对弥散。粒子对弥散定义为粒子对之间距离的系综平均值随时间的变化，其中粒子对由两个初始间距为柯尔莫哥洛夫长度尺度的颗粒组成

$$\langle\delta\rangle(t) = \langle|\boldsymbol{x}_{p0}(t) - \boldsymbol{x}_{p1}(t)|\rangle, \tag{37}$$

其中， $\boldsymbol{x}_{p0}(t)$ 和 $\boldsymbol{x}_{p1}(t)$ 是属于一对颗粒的颗粒位置，而

$\langle\delta\rangle(t=0) = \eta.$

图 2 展示了单向耦合情况下，五种不同斯托克斯数对应的直接数值模拟、经典大涡模拟和增强型大涡模拟中的粒子对弥散。可以观察到，对于所有考察的斯托克斯数，粒子对都会在短时间内保持聚集，随后迅速弥散。最终，平均间距达到稳态，约为半个计算域的尺寸，这表明粒子对达到了完全周期性立方域中可能出现的最大间距。斯托克斯数较大时，粒子对彼此靠近的时间更短，因为惯性较大的颗粒更容易具有不同的速度。由于缺少亚格子尺度速度扫掠颗粒的作用，经典大涡模拟预测的粒子对弥散速度远慢于直接数值模拟中的情况。

进入大尺度速度不同的区域。所有研究的斯托克斯数下都观察到了这一效应，但对于较大的斯托克斯数，该效应略为显著。

在增强型大涡模拟中，预测的粒子对弥散结果几乎与直接数值模拟的结果重合。增强型大涡模拟表现出色的一个重要原因是，颗粒位置处的亚格子尺度速度是根据空间连续速度场计算得出的。因此，彼此非常接近的两个颗粒也会感受到相似的亚格子尺度速度。拉格朗日模型则并非如此（例如，参见 [5, 6, 9]），这类模型通常为每个颗粒单独求解一个演化方程。拉格朗日模型在粒子对弥散方面的表现通常较差 [53]。

一项在实际应用中非常重要的性质，是颗粒形成团簇的程度。颗粒聚集可用径向分布函数定量描述，其定义如下：

$$g(r) = \left\langle \frac{N_{\mathrm{p},i}(r)/\Delta V_i(r)}{N_\mathrm{p}/V} \right\rangle, \tag{38}$$

其中，$N_{\mathrm{p},\,i}(r)$ 是以原颗粒所在位置为中心、半径为 r 的球壳内的颗粒数，$V_i(r)$ 是该球壳的体积。径向分布函数以颗粒总数 N_p 和计算域总体积 V 归一化。$g > 1$ 的取值表示存在颗粒聚集，而 $g = 1$ 则表示颗粒均匀分布。

[{"id": 0, "output": "在图 3 中展示了径向分布函数。聚集在 $St \approx 1$ 处达到最大值。对于较小和较大的斯托克斯数，聚集程度都会降低。经典大涡模拟会低估 $St = 0.5$ 和 $St = 1$ 对应的聚集程度，而会高估斯托克斯数为 $St = 2$、$St = 4$ 和 $St = 8$ 时的聚集程度。此前的研究中也观察到了这一现象 [2, 14, 17]。这意味着，建模的亚网格尺度速度必须增强较小 St 对应的聚集，并增强较大 St 对应的弥散。需要注意的是，相比于增强颗粒聚集，增强颗粒弥散要容易得多。事实上，速度场的应变与旋转之间的关系对于正确预测颗粒聚集至关重要[54, 55]。"}]

对于斯托克斯数为 $St = 2$、$St = 4$ 和 $St = 8$ 的情况，增强型大涡模拟得到的颗粒聚集几乎与直接数值模拟预测的结果一致。即使斯托克斯数较小，增强型大涡模拟也能改善对颗粒聚集的预测。当 $St = 0.5$ 时，颗粒聚集显著增强，但与直接数值模拟的结果并不完全一致。

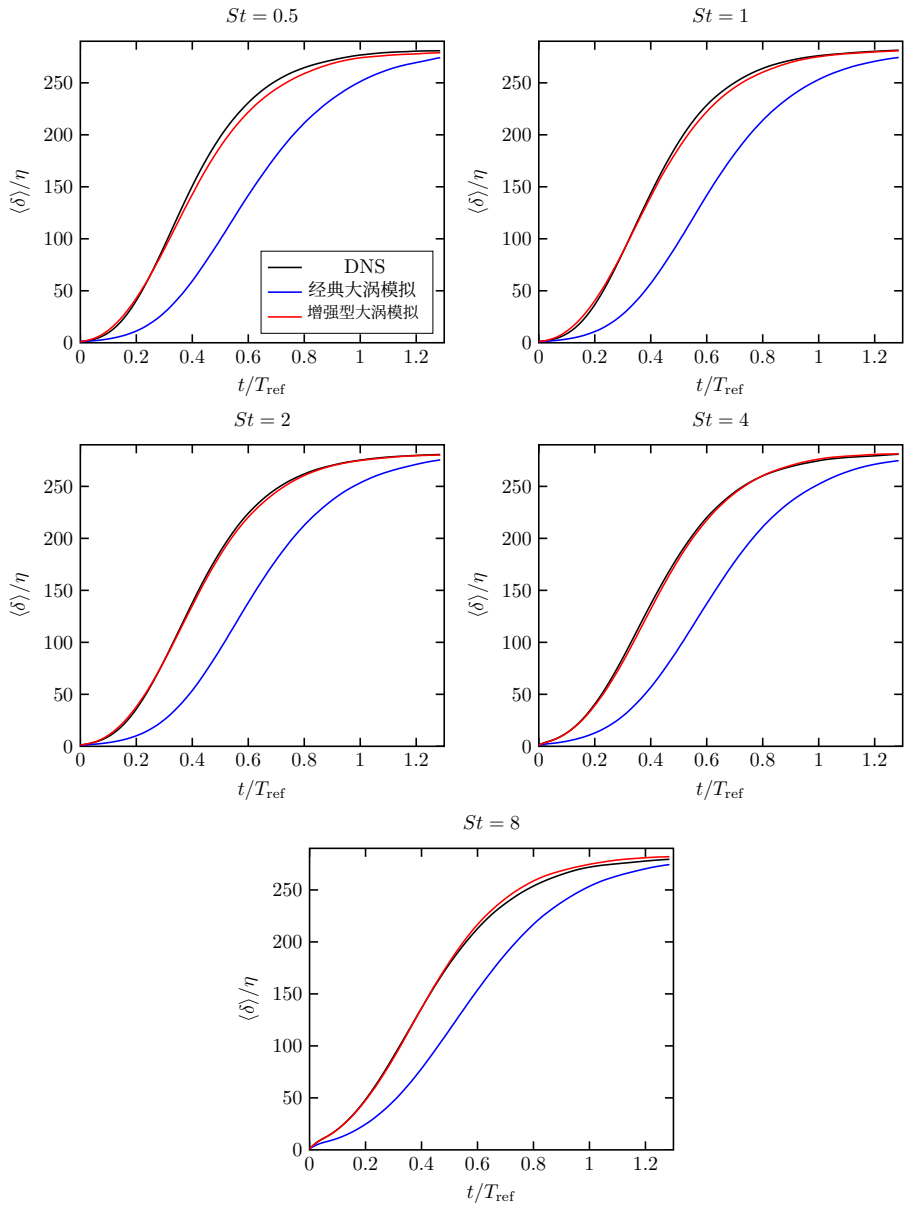


图2. 表I所列流动参数下，受迫均匀各向同性湍流中不同斯托克斯数对应的单向耦合模拟的粒子对弥散。结果分别展示了直接数值模拟、经典大涡模拟和增强型大涡模拟。

对于斯托克斯数为 $St = 1$ 的颗粒，增强型大涡模拟的结果与直接数值模拟吻合良好。

我们之前的研究 [32] 表明，与经典大涡模拟相比，增强型大涡模拟显著改善了速度梯度张量第二不变量的概率分布函数（概率密度函数），这解释了该模型提高.....的能力。

小斯托克斯数颗粒的聚集。

动能　　经典大涡模拟相对于直接数值模拟动能的

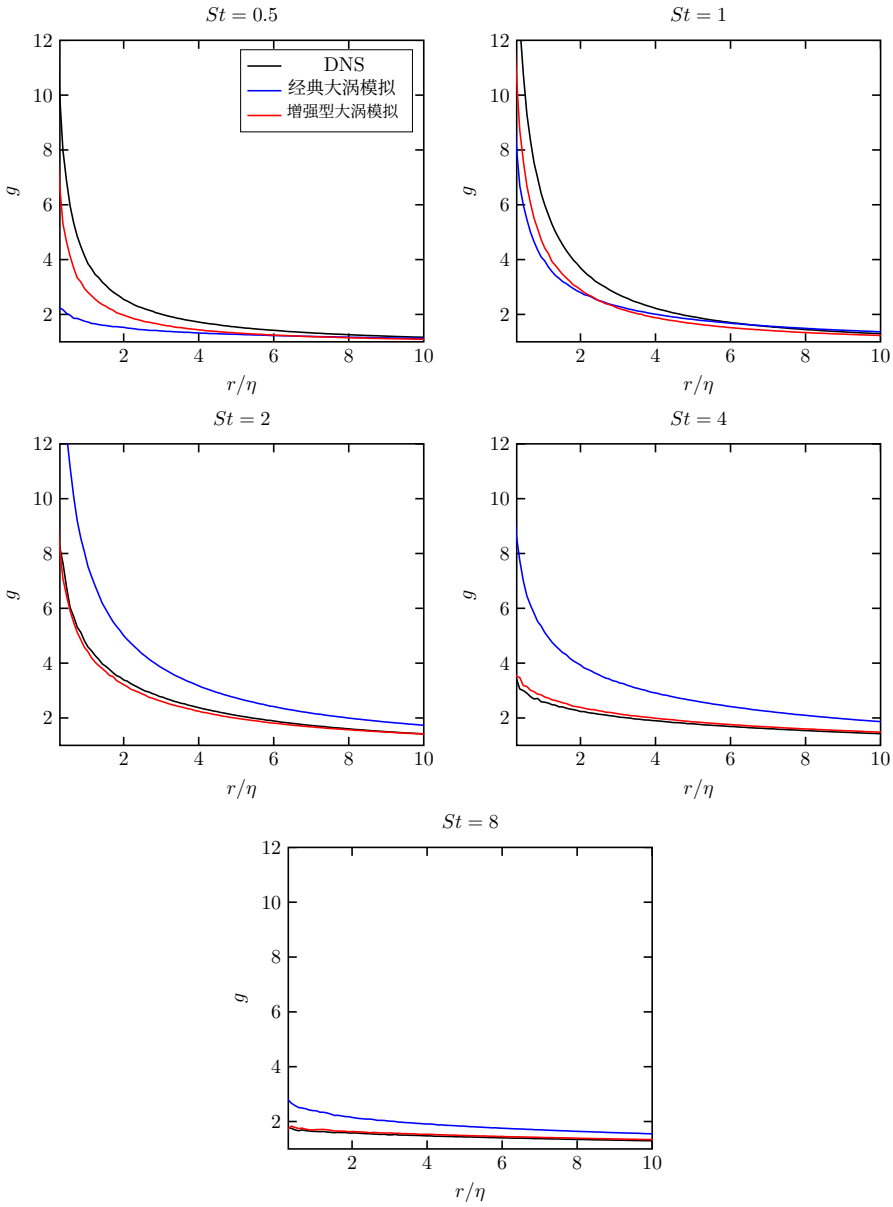


图3. 在表I所列流动参数下，受迫均匀各向同性湍流中不同斯托克斯数的单向耦合模拟的径向分布函数。图中展示了直接数值模拟、经典大涡模拟和增强型大涡模拟的结果。

$K_{\mathrm{LES}}/K_{\mathrm{DNS}} \approx 0.83$。结合估算的亚格子尺度动能，可得（$K_{\mathrm{LES}} + K_{\mathrm{sgs}}$）$/K_{\mathrm{DNS}} \approx 1.07$。增强型大涡模拟的总动能高估了直接数值模拟的动能，这一事实对于理解以下内容非常重要-

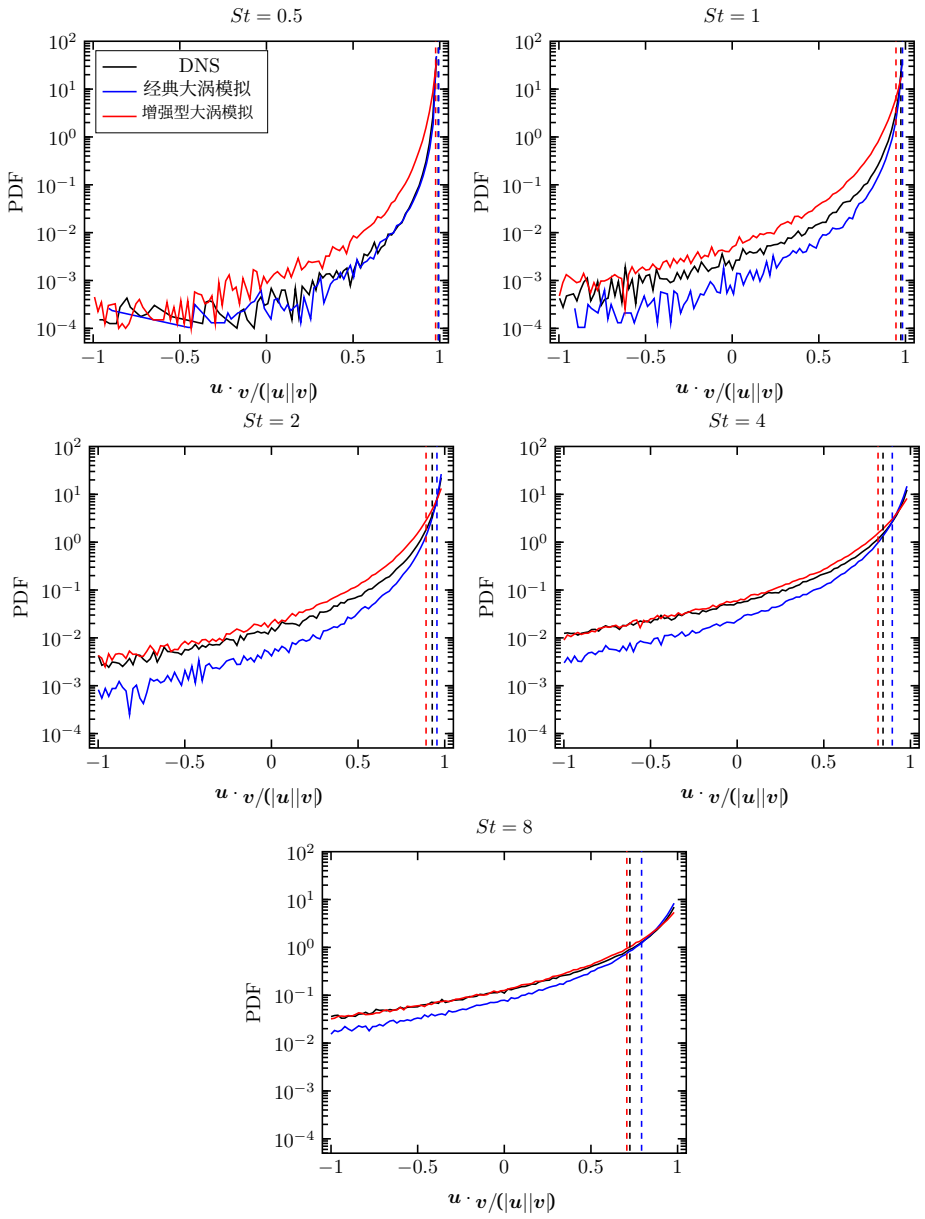


图4.在流动参数如表I所示的受迫均匀各向同性湍流中，对于不同斯托克斯数的单向耦合模拟，颗粒位置处的流体速度与颗粒速度之间夹角余弦的概率密度函数。结果分别展示了直接数值模拟、经典大涡模拟和增强型大涡模拟。竖线表示相应的平均值。

以下结果。

图 4 显示了颗粒速度与颗粒位置处的流体速度之间夹角余弦的概率密度函数，以及其平均值。对于所有考虑的斯托克斯数，最可能出现的情况都是流体速度与.....方向一致的情况。

颗粒速度。然而，随着斯托克斯数增大，流体速度与颗粒速度之间夹角较大的概率也会增加。除 $St = 0.5$ 外，经典大涡模拟总是过度预测流体速度与颗粒速度的对齐程度。尤其是在斯托克斯数较高时，颗粒过重，无法跟随亚格子尺度速度脉动，而这些脉动通常频率较高、幅值较小。在经典大涡模拟中，这些脉动缺失。增强型大涡模拟提供了亚格子尺度脉动，这解释了其对速度对齐程度的概率密度函数和均值预测有所改善。对于斯托克斯数 $St = 0.5$ 和 $St = 1$，增强型大涡模拟过度预测了流体速度与颗粒速度夹角的偏差，因此经典大涡模拟的结果反而更接近直接数值模拟。不过，对于较小的斯托克斯数，与直接数值模拟结果的总体偏差非常小。对于 $St = 0.5$ 和 $St = 1$，偏差的一种可能原因是增强型大涡模拟的动能过高。因此，斯托克斯数较小的颗粒无法像直接数值模拟和经典大涡模拟中的情况那样跟随速度脉动。对于较高的斯托克斯数，速度之间的偏差更显著，而较高的亚格子尺度动能所产生的影响较小。

从单向耦合模拟的结果可以得出结论：加入亚格子尺度速度，能够显著改善均匀各向同性湍流中不同斯托克斯数范围内的颗粒统计量。尤其值得指出的是，对于 $St \leq 1$ 和 $St > 1$ 这两种定性上不同的情况，采用建模的亚格子尺度速度都能改善聚集现象。

B. 双向耦合配置

本节将考虑颗粒对湍流的影响，从而能够评估完整的建模框架，其中包括亚格子尺度速度的建模，并将其与mLDKM（此前称为建模大涡模拟）相结合。

在图5中，绘出了$St = 2$ 情况下，DNS、经典大涡模拟和建模大涡模拟在厚度为 η 的切片中的颗粒投影。位置取自强迫阶段结束时。此时，颗粒的统计量已达到稳态。DNS和经典大涡模拟形成的团簇形状存在显著差异——

经典大涡模拟形成的团簇粗大得多，也更加明显。建模大涡模拟额外引入的亚格子尺度速度将经典大涡模拟中的大团簇打散为尺寸较小、密度也较低的团簇。



(a) (b) (c)

图5. 流动参数如表I所示的均匀各向同性湍流（HIT）中， $St = 2$ 条件下双向耦合模拟的粒子位置。结果取自最后一个强迫时间步。粒子位置投影自厚度等于柯尔莫哥洛夫长度尺度 η的切片。(a) 显示直接数值模拟（DNS）中的颗粒，(b) 显示经典大涡模拟中的颗粒，(c) 显示建模大涡模拟中的颗粒。

图6分别展示了 $St = 2$和 $St = 8$条件下双向耦合模拟的动能谱。由于与颗粒的相互作用，直接数值模拟（DNS）所得结果明显偏离单相湍流的惯性区斜率。除DNS结果外，图中还展示了经典大涡模拟和建模大涡模拟的结果。大涡模拟网格解析出的动能谱与建模的亚格子尺度速度的动能谱分别显示。经典大涡模拟高估了亚格子尺度流体耗散，导致其谱在接近截断波数处明显偏离DNS谱。由于建模大涡模拟考虑了颗粒耗散导致的亚格子尺度流体耗散降低，因此在两个斯托克斯数下，其谱都更接近DNS谱。

建模的亚格子尺度速度的动能谱与直接数值模拟的谱吻合良好，但在两种情况下，其形状都有所偏差。对于 $St = 2$ 和 $St = 8$ ，建模的亚格子尺度动能谱形状非常相似，尽管两种直接数值模拟谱的形状截然不同。亚格子尺度速度模型不会接收到任何有关颗粒存在的信息，能量信息除外

。因此，建模的亚格子尺度动能谱是一个经过平移的谱，与单相流谱 [32]吻合得非常好。

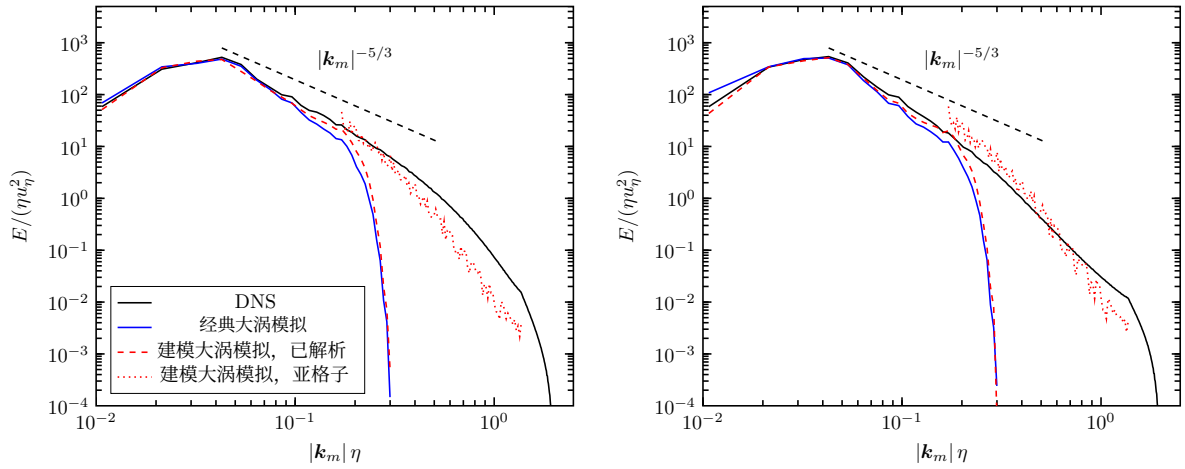


图6. 双向耦合模拟的动能谱，其中 $St = 2$ (a) 和 $St = 8$(b) 为均匀各向同性湍流，流动参数见表I。结果取自最后一个强迫时间步。比较了直接数值模拟、经典大涡模拟和建模大涡模拟。建模大涡模拟的谱分为两部分：由大涡模拟网格解析的部分，以及通过建模得到的亚格子尺度贡献。

经典大涡模拟未能充分考虑相间动能传递，因为它忽略了亚格子尺度速度与颗粒之间的相互作用，以及未解析的颗粒运动与已解析流动尺度之间的相互作用。对于较小的颗粒雷诺数，动能传递与流体速度和斯托克斯阻力的乘积成正比，$\boldsymbol{u}\cdot(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u})/\tau_p$，该乘积针对本文的各个算例绘于图7中。负值表示动能从流体中移除，正值则表示颗粒向流体中添加了动能。需要注意的是，正如Xu等人 [56],所示，在点颗粒模拟中，从流体中移除的能量不一定等于添加到颗粒中的动能。

图7中的概率密度函数显示，两种斯托克斯数的平均值均为负值，这表明颗粒平均会从流体中带走能量。 $St = 8$ 的概率密度函数比分布 $St = 2$ 更宽，且绝对平均值更大。对于两种斯托克斯数，经典大涡模拟均低估了直接数值模拟平均值的绝对值。随着

在所提出的建模大涡模拟中，颗粒带走的动能有所增加，这在定性上与直接数值模拟相对于经典大涡模拟的表现相似。在经典大涡模拟中，与直接数值模拟相比，颗粒速度往往更趋向于与局部流体速度对齐，这是因为缺少颗粒无法跟随的小涡旋。采用所提出的建模方法后，会产生小尺度速度结构，从而增加绝对能量传递。然而，对于两个斯托克斯数，建模大涡模拟对概率密度函数宽度的预测都略微偏高。

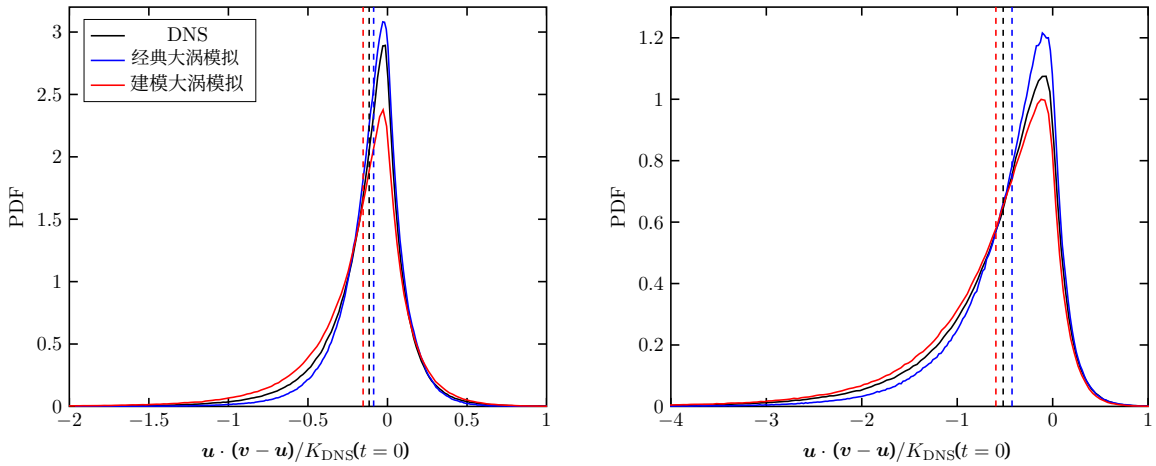
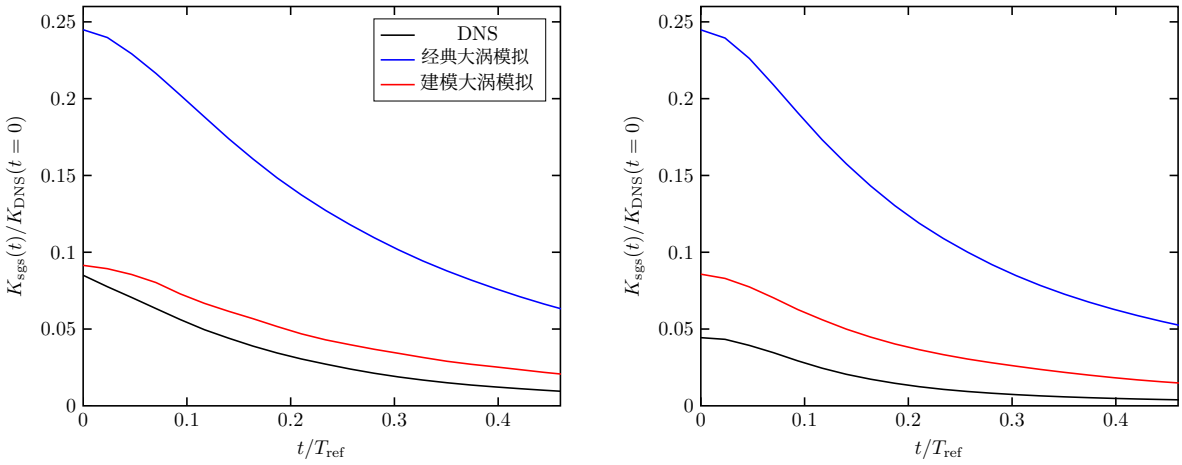


图7. 双向耦合模拟中流体与颗粒之间动能传递的概率密度函数，其中均匀各向同性湍流的 $St = 2$ (a) 和 $St = 8$ (b) 流动参数见表I。结果取自最后一个受迫时间步。竖线表示相应的平均值。

经典大涡模拟中被忽略的第二种效应，是颗粒对湍流的调制导致亚格子尺度动能降低。图 8 展示了亚格子尺度动能随时间的变化。直接数值模拟的亚格子尺度动能通过从直接数值模拟的动能中减去谱锐滤波直接数值模拟的动能来计算。大涡模拟的动能分别由 LDKM 和 mLKDM 中的输运方程求得。可以观察到，对于两个斯托克斯数，经典大涡模拟预测的亚格子尺度动能都远高于直接数值模拟。由于亚格子尺度动能输运方程中的源项 Φ_{P} ，建模大涡模拟的亚格子尺度动能显著较小。A

更高的亚格子尺度动能会产生更高的涡黏度，从而带来更多的亚格子尺度耗散。经典大涡模拟高估了亚格子尺度速度的动能，因为没有考虑高波数下的颗粒耗散。mLDKM 的亚格子尺度动能方程中的附加源项考虑了颗粒对亚格子尺度量的影响，这解释了其结果为何有所改善。



(a) (b)

图8. 在表I所列流动参数下，对衰减均匀各向同性湍流的双向耦合模拟中， $St = 2$ (a) 和 $St = 8$ (b) 对应的亚格子尺度动能随时间的归一化变化。比较了直接数值模拟、经典大涡模拟以及包含颗粒源项的建模大涡模拟结果。

可以观察到，在所研究的配置中，经典大涡模拟忽略的效应作用方向相反。经典大涡模拟低估了颗粒造成的耗散，却高估了亚格子尺度速度的耗散。因此，这两种误差至少部分相互抵消，总体上可能使模拟结果与直接数值模拟的总动能较为吻合。然而，所提出的建模大涡模拟分别考虑了每种效应（即颗粒耗散增加和流体耗散减少），并不依赖误差补偿。

图9展示了双向耦合模拟中， $St = 2$ 和 $St = 8$对应的归一化动能随时间的变化。除了谱锐滤波直接数值模拟（FDNS）和经典大涡模拟外，还绘出了建模大涡模拟的结果。为了研究颗粒源项 Φ_P 对亚格子尺度动能输运方程（18）的影响，图中还展示了包含该源项的建模大涡模拟（建模大涡模拟-mLDKM）

以及不含源项的情况（建模大涡模拟-LDKM）。

对于 $St = 2$ 的大涡模拟，建模大涡模拟-mLDKM和建模大涡模拟-LDKM预测的流体动能衰减速度均比直接数值模拟慢。对于 $St = 8$，这三种大涡模拟情形与直接数值模拟之间的偏差要小得多。两种斯托克斯数下，各大涡模拟情形之间的偏差都相对较小。不过，建模大涡模拟-LDKM的动能始终低于建模大涡模拟-mLDKM的动能。

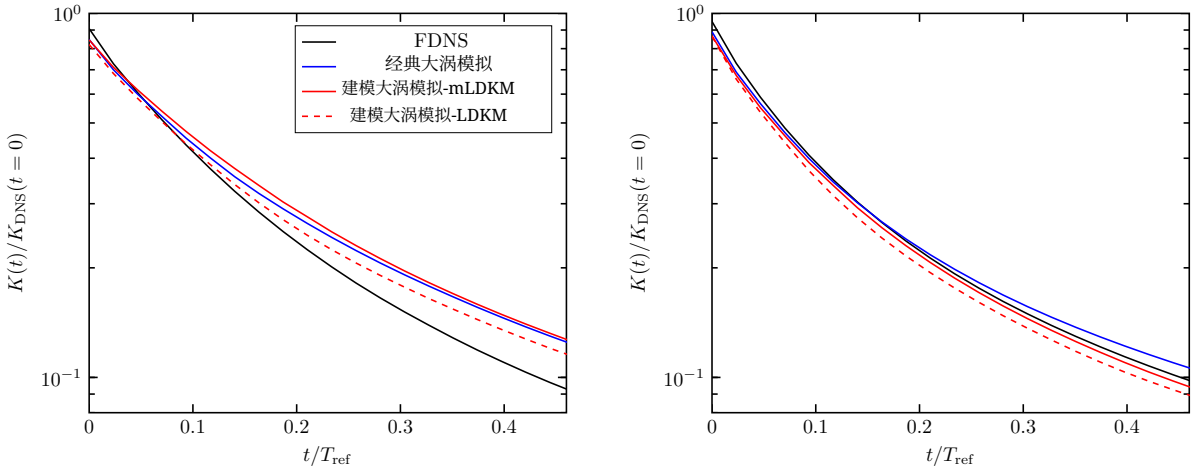


图9. 衰减均匀各向同性湍流中，流动参数如表I所示的双向耦合模拟的归一化动能随时间的变化，其中 $St = 2$(a)和 $St = 8$(b)。比较了FDNS、经典大涡模拟（LES-LDKM）、含颗粒源项的建模大涡模拟（建模大涡模拟-mLDKM）以及不含颗粒源项的建模大涡模拟（建模大涡模拟-LDKM）。

文献中已知，对于不显著小于1的斯托克斯数，含颗粒流中的总耗散会增加 [19–21, 23], ，这同样适用于本研究所考察的斯托克斯数。总耗散由颗粒和流体的耗散共同构成，就像在单相流中一样。在大涡模拟中，颗粒耗散和流体耗散都必须进行建模。正如已经指出的，在当前情况下，这两种贡献的符号相反。以下事实清楚地表明了这一点：不含颗粒源项 Φ_{P} 的建模大涡模拟会增加总耗散。在这种情况下，与经典大涡模拟的区别在于，双向耦合力是使用由大涡模拟速度和建模的亚格子尺度组成的总流体速度计算的。

速度，这导致相较于经典大涡模拟更高的耗散。颗粒产生的耗散给出了一个负的源项 Φ_{P}，从而降低了亚格子尺度动能。这就是为什么建模大涡模拟-mLDKM 的总耗散小于建模大涡模拟-LDKM 的总耗散。

需要注意的是，这两种效应——颗粒导致的耗散增加和流体耗散降低——至少在定性上与文献中的结果一致，也是人们所期望的。由于这两种效应的作用方向相反，尽管经典大涡模拟未考虑其中任何一种效应，但其结果与直接数值模拟仍然具有可接受的一致性。

VI. 结论

本文提出了一种在大涡模拟框架下预测双向耦合含颗粒流行为的新模型。该模型考虑了经典大涡模拟含颗粒流时未能捕捉的相互作用，具体包括：(i) 由于缺失亚格子尺度流体速度而产生的颗粒运动预测；(ii) 颗粒对已解析流动尺度的影响；以及 (iii) 颗粒对亚格子尺度的影响。所提出的建模框架由两个部分组成：一个用于亚格子尺度动能的建模输运方程，其中包含一个源项，用于考虑颗粒对亚格子尺度动能的改变；以及一个亚格子尺度速度模型，该模型用于封闭颗粒运动方程和亚格子尺度动能输运方程中的源项。两个模型组件通过直接将输运方程得到的亚格子尺度动能用作亚格子尺度速度模型的输入而进一步耦合，从而使该模型也能够考虑颗粒对亚格子尺度湍流的调制作用。

开展了单向耦合模拟，用于评估在计算作用于颗粒的力时缺失亚格子尺度速度所产生的孤立影响，以及使用增强型大涡模拟对其进行建模的效果。采用建模的亚格子尺度速度后，在较宽的斯托克斯数范围内，颗粒对扩散和优先聚集均能得到高精度预测，同时仍能保持对大涡模拟而言合理的计算成本。即使对于小斯托克斯数这一复杂情况，聚集也得到了显著改善。此外，还开展了衰减均匀各向同性湍流的双向耦合模拟，该模拟.....

需要对颗粒造成的湍流调制进行建模。与经典大涡模拟相比，该耦合框架在反馈力中考虑了建模的亚网格尺度速度，因此颗粒耗散增加。由于 mLDKM 预测的亚网格动能考虑了颗粒造成的湍流调制，亚网格尺度流体耗散相较于经典大涡模拟有所降低。这两种效应都与直接数值模拟中观察到的物理现象一致。因此，我们发现，采用这种新提出的建模方法得到的动能谱与直接数值模拟中观察到的谱非常吻合。

最后，需要指出的是，所提出的建模策略具备用于模拟非均匀流和各向异性流的先决条件，因为亚格子尺度增强是在由统计均匀子域组成的网格上构建的，从而能够得到空间变化统计量。鉴于此，当前建模框架有望提升大涡模拟含颗粒湍流在广泛应用中的能力。

致谢

本研究由德国研究联合会（DFG）资助——项目编号457509672。

[1] V. Armenio、U. Piomelli和V. Fiorotto，亚格子尺度对颗粒运动的影响，《流体物理》**11**，3030（1999年）。[2] B. Ray和 L.R.Collins，纳维–斯托克斯湍流中进行滤波与不进行滤波时惯性颗粒的优先聚集和相对速度统计，《流体力学杂志》**680**，488（2011年）。[3] P. Fede和 O.Simonin，亚格子流体湍流对重质碰撞颗粒统计量影响的数值研究，《流体物理》**18**，045103（2006年）。[4] B. Rosa和 J. Pozorski，亚格子流体湍流对受重力作用的惯性颗粒的影响，《湍流杂志》**18**，634（2017年）。

[5] P. Fede、O. Simonin、P.Villedieu 和 K.D.Squires，惯性颗粒轨迹上湍流亚格子流体速度的随机建模，载于夏季项目论文集（2006）第247页。[6] M. Bini 和W.P. Jones，湍流流动中的颗粒加速度：用于间歇性的一类非线性随机模型，《流体物理》**19**，035104（2007）。[7] A. S. Berrouk、D. Laurence、J. J.Riley 和D.E. Stock，高雷诺数管流大涡模拟中基于亚格子运动的惯性颗粒弥散随机建模，《湍流杂志》**8**，N50（2007）。[8] B. Shotorban和F. Mashayek，大涡模拟中颗粒运动的随机模型，《湍流杂志》**7**，N18（2006）。[9] J.Pozorski和S.Apte，各向同性湍流中的滤波颗粒追踪与亚格子尺度弥散的随机建模，《国际多相流杂志》**35**，118（2009）。[10] M.Knorps和J.Pozorski，非均匀湍流大涡模拟中亚格子尺度颗粒弥散的随机建模，《流体物理》**33**，043323（2021）。[11] J.G.M. Kuerten，含颗粒通道流中的亚格子建模，《流体物理》**18**，025108（2006）。[12] B.Shotorban 和F. Mashayek，通过近似反卷积对颗粒亚格子尺度效应进行建模，《流体物理》**17**，081701（2005）。[13] G. I. Park、M.Bassenne、J. Urzay 和 P.Moin，用于含颗粒湍流大涡模拟的简单动态亚格子尺度模型，《物理流体》**2**，10.1103/PhysRevFluids.2.044301（2017）。[14] M.Bassenne、M. Esmaily、D.Livescu、P.Moin和 J. Urzay，用于含颗粒湍流中优先聚集的动态频谱增强亚格子尺度模型，《国际多相流杂志》**116**，270（2019）。[15] J. A.Domaradzki和K.-C. Loh，物理空间表示中的亚格子尺度估计模型，《流体物理》**11**，2330（1999年）。[16] B.Ray和L. R.Collins，湍流大涡模拟中高惯性颗粒聚集的亚格子模型，《湍流杂志》**15**，366（2014）。[17] Z.Zhou、S. Wang、X.Yang 和G.Jin，各向同性湍流流动大涡模拟中惯性颗粒碰撞相关统计量的结构型亚格子尺度模型，《流体物理》**32**，095103（2020）。

[18] S. Murray、M. F. Lightstone 和 S. Tullis，《流体物理》**28**，033302（2016），《运动学模拟含颗粒湍流中的单颗粒拉格朗日统计量和结构统计量》。[19] G. Mallouppas、W. George 和 B. van Wachem，《均匀各向同性强迫湍流中完全耦合的颗粒与流体运动的耗散和尺度间传递》，《国际传热与流体流动杂志》**67**，74（2017）。[20] A. Ferrante 和 S. Elghobashi，《关于各向同性湍流中双向耦合的物理机制》，《流体物理》**15**，315（2003）。[21] R. Letournel、F. Laurent、M. Massot 和 A. Vi´e，《亚科尔莫戈罗夫尺度颗粒对均匀各向同性湍流的调制：颗粒场非均匀性的影响》，《国际多相流杂志》**125**，103233（2020）。[22] M. Boivin、O. Simonin 和 K. D. Squires，《各向同性湍流中颗粒对湍流调制的直接数值模拟》，《流体力学杂志》**375**，235（1998）。[23] M. Nabavi、M. Di Renzo 和 J. Kim，《优先聚集的惯性颗粒对湍流相间、跨尺度动量传递的调制》，《物理评论：流体》**7**，044305（2022），出版方：美国物理学会。[24] P. Sagaut，《不可压缩流动的大涡模拟》，第3版（Springer，2005）。[25] M. Boivin、O. Simonin 和 K. D. Squires，《利用大涡模拟预测双向耦合气固流》，《流体物理》**12**，2080（2000）。[26] N. Rohilla、P. Muramulla 和 P. S. Goswami，《大涡模拟在捕捉含颗粒通道流湍流衰减方面的适用性》，《物理评论：流体》**7**，024302（2022）。[27] S. Yuu、T. Ueno 和 T. Umekage，《采用亚格子尺度耦合大涡模拟对高雷诺数狭缝喷嘴气固两相射流进行数值模拟》，《化学工程科学》**56**，4293（2001）。[28] S. Pannala 和 S. Menon，《关于两相流的 LEM/LES 方法》，载于第*35*届联合推进会议及展览会（美国航空航天学会，美国加利福尼亚州洛杉矶，1999年）。[29] V. Sankaran 和 S. Menon †，《旋流中的喷雾燃烧大涡模拟》，《湍流杂志》**3**，N11（2002）。[30] W.-W. Kim 和 S. Menon，《用于湍流大涡模拟的非定常不可压缩 Navier–Stokes 求解器》，《国际流体数值方法杂志》**31**，983

（1999年）。[31] S.Menon、P.-K.Yeung 和W.-W. Kim，《亚各子模型对各向同性湍流中计算所得跨尺度能量传递的影响》，Computers &Fluids **25**，165（1996）。[32] M. Hausmann、F.Evrard和 B. vanWachem，《一种用于湍流流动大涡模拟的亚格子尺度速度增强的高效模型》，《流体物理》**34**，115135（2022）。[33] M. Maxey，《颗粒流和浓悬浮液的模拟方法》，Annual Review of Fluid Mechanics **49**，171（2017）。[34] T. B.Anderson和 R. O. Y. Jackson，《流化床的流体力学描述，I》，EC Fundamentals **6**，524（1967）。[35] J.G. M. Kuerten，《颗粒负载湍流的点颗粒直接数值模拟和大涡模拟——现状综述》，Flow, Turbulence and Combustion**97**，689（2016）。[36] C. T. Crowe、M.P.Sharma 和 D. E. Stock，《气液滴流动的颗粒源单元（PSI-CELL）模型》，Journal of Fluids Engineering **99**，325（1977）。[37] U. Schumann，《平面通道和环隙中湍流有限差分模拟的亚格子尺度模型》，Journal of Computational Physics **18**，376（1975）。[38] G.Mallouppas 和 B. van Wachem，《湍流颗粒负载通道流的大涡模拟》，International Journal of Multiphase Flow **54**，65（2013）。[39] P. L. Johnson，《涡量拉伸和应变自放大在湍流能量级联中的作用》，《流体力学杂志》**922**，A3（2021）。[40] D. K. Lilly，《数值模拟实验中小尺度湍流的表示》，载于《*IBM*环境科学科学计算研讨会论文集》。美国纽约州约克敦。美国国家大气研究中心，*NCAR*手稿；编号*281*。（1966），第195–210页。[41] W.-W. Kim、S. Menon、W.-W.Kim和 S. Menon，《局部动态亚格子尺度模型在湍流壁面约束流动中的应用》，载于第*35*届航空航天科学会议暨展览会（美国航空航天学会，美国内华达州里诺，1997年）。[42] M.Germano、U. Piomelli、P. Moin 和 W. H. Cabot，《动态亚格子尺度涡黏度模型》，Physics of FluidsA **3**，1760（1991）。[43] J.-P. Laval、B.Dubrulle 和 S. Nazarenko，《三维湍流中的非局部性和间歇性》，Physics ofFluids **13**，1995（2001）。

[44] V. M. Canuto 和 M. S. Dubovikov，《湍流动力学模型。I. 一般形式体系》，《流体物理》**8**，571（1996）。[45] A. Yoshizawa，《可压缩湍流剪切流的统计理论及其在亚格子建模中的应用》，《流体物理》**29**，2152（1986）。[46] P. Moin、K. Squires、W. Cabot 和 S. Lee，《可压缩湍流与标量输运的动态亚格子尺度模型》，《流体物理》A：流体动力学**3**，2746（1991）。[47]F. Denner、F. Evrard 和 B. van Wachem，《适用于任意速度下不可压缩流体、理想气体和真实气体流动的守恒有限体积框架与基于压力的算法》，《计算物理学杂志》**409**，109348（2020）。[48] P. Bartholomew、F. Denner、M. Abdol-Azis、A. Marquis 和 B. van Wachem，《用于同位变量排列的动量加权插值的统一表述》，《计算物理学杂志》**375**，177（2018）。[49] G. Mallouppas、W. K. George 和 B. van Wachem，《维持含颗粒均匀各向同性湍流的新强迫方案》，《流体物理》**25**，10.1063/1.4818553（2013）。[50] L. Verlet，《经典流体的计算机“实验”。I. Lennard-Jones 分子的热力学性质》，《物理评论》**159**，98（1967）。.[51] L. Schiller 和 A. Naumann，《关于重力选矿的基本计算》，《德国工程师协会杂志》**77**，318（1933）。[52] G. T´oth 和 P. Roe，《保持散度与旋度的延拓和限制公式》，《计算物理学杂志》**180**，736（2002）。[53] C. Marchioli，《湍流分散流的大涡模拟：建模方法综述》，《力学学报》**228**，741（2017）。[54] M. R. Maxey，《均匀湍流和随机流场中气溶胶颗粒的重力沉降》，《流体力学杂志》**174**，441（1987）。[55] L. Brandt 和 F. Coletti，《含颗粒湍流：进展与展望》，《流体力学年度评论》**54**，159（2022）。[56] Y. Xu 和 S. Subramaniam，《含颗粒湍流中相间湍流动能传递的一致性建模》，《流体物理》**19**，085101（2007）。

附录

图10显示了在不同斯托克斯数下，针对在子域之间插值模型亚格子尺度速度时参数 α 变化的单向耦合模拟的径向分布函数。参数 α 分别相对于本研究中采用的值 $\alpha = 40$ 缩小和增大一倍。可以观察到，即使在这一相对宽泛的参数范围内，径向分布函数也几乎完全重合。因此，在所考虑的取值范围内，颗粒聚集基本上与 α 无关。

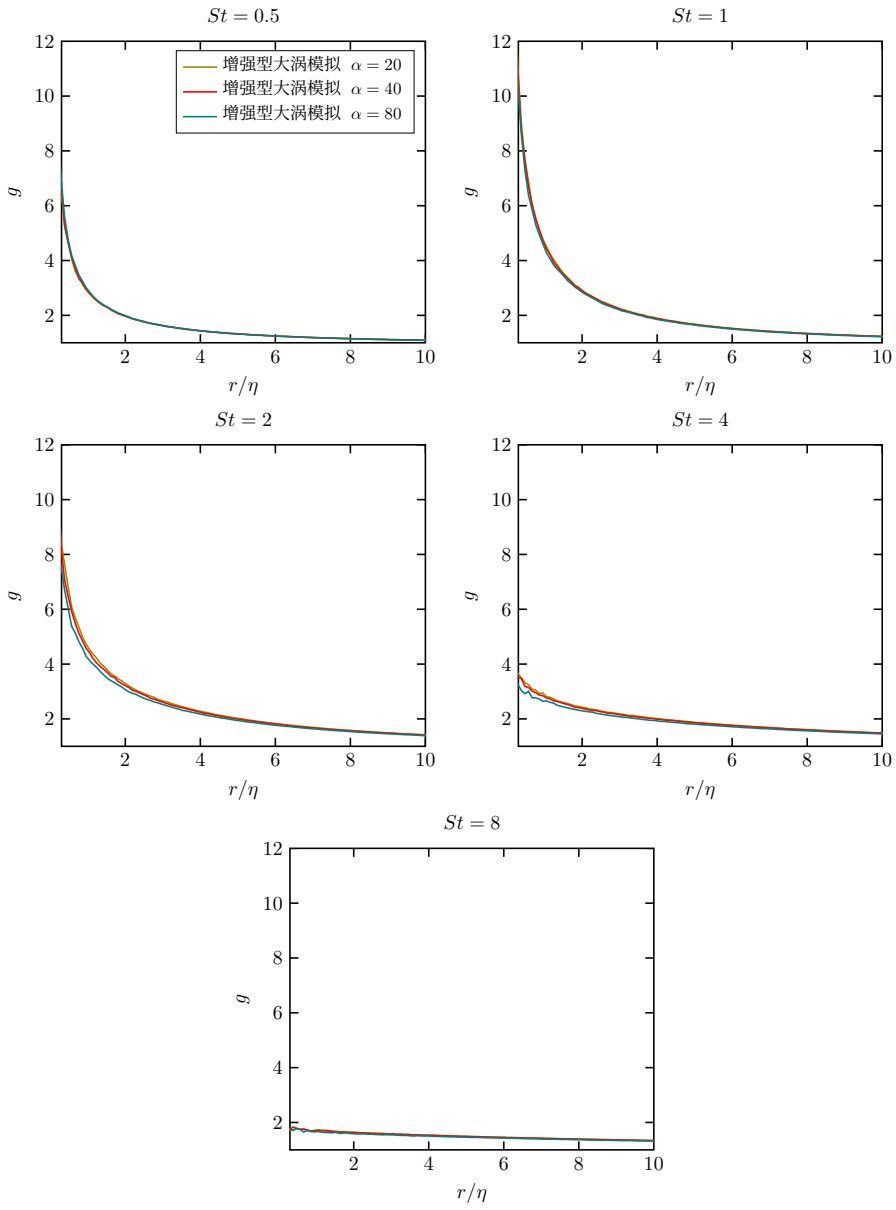


图10. 在流动参数如表I所示的受迫均匀各向同性湍流中，不同斯托克斯数以及不同厚度常数下，子域之间亚格子尺度速度插值的单向耦合模拟径向分布函数 α 。