

文章编号: 1001-2486 (2000) 05-0019-04

## 一种新型的计算化学非平衡流动的解耦方法\*

刘君<sup>1</sup>, 张涵信<sup>2</sup>, 高树椿<sup>2</sup>

(1 国防科技大学航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073;

2 中国空气动力研究与发展中心, 四川 绵阳 621000)

**摘要:** 给出一种计算化学非平衡流动的解耦方法。利用该方法从薄层近似 N-S 方程出发, 采用 NND2M 差分格式, 数值模拟了 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 燃烧的超音速绕流场; 计算表明这种方法可以有效地解决刚性问题, 而且与现有的隐式算法相比, 具有公式推导简便, 占用内存少, 计算效率高等优点, 特别适合于多组分和多反应的情况。

**关键词:** 计算方法; 化学非平衡流动; 计算流体力学

**中图分类号:** V211      **文献标识码:** A

## A New Uncoupled Method for Numerical Simulation of Nonequilibrium flow

LIU Jun<sup>1</sup>, ZHANG Han-xin<sup>2</sup>, GAO Shu-chun<sup>2</sup>

(1 College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China;

2 China Aerodynamics Research &amp; Development Center, Mianyang 621000, China)

**Abstract:** An new uncoupled method was introduced to simulate numerically nonequilibrium flow which had the stiffness problem. The flow phenomenon of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> combustion induced by shock was simulated with the method, based on N-S equations and NND2M scheme. The results indicated that the method was simple and efficient in the application to multi-component and multi-reaction flow.

**Key words:** calculation method; nonequilibrium flow; CFD

采用数值模拟方法进行化学非平衡流动的研究存在如下困难: (1) 随着组分增加, 控制方程变得十分庞大, 要求高效率的计算方法; (2) 流场中存在多种时间尺度, 在化学反应较强烈的区域, 差别可以达到几个数量级, 采用数值计算时出现了所谓的“刚性”问题, 处理不好导致计算失败; (3) 由于化学反应速率对温度很敏感, 使得流动出现一些空间尺度较小的非线性物理现象, 需要高分辨率的差分格式。近几年随着 TVD 和 ENO 等差分格式提出和计算机条件改善, 困难主要集中于刚性问题。目前常用的方法是隐式处理, 包括全隐法<sup>[1]</sup>和点隐法<sup>[2,3]</sup>, 但数值离散工作非常繁杂; 而且如果组分和化学反应方程式有变化, 公式和程序必需从新研制, 十分不利于软件的工程化要求。

本文通过对早期解耦算法<sup>[4]</sup>改造, 提出一种新的化学非平衡流动计算方法; 从薄层近似 N-S 方程出发, 采用 NND2M 差分格式<sup>[5]</sup>, 数值模拟了利用超音速弹丸产生的激波对 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 预混气体点火燃烧形成的流场; 计算表明这种方法可以有效地解决刚性问题, 而且与现有的隐式算法相比, 具有公式推导简便, 占用内存少, 计算效率高等优点, 对于多组分和多反应的情况效果更为明显。

## 1 控制方程

包含有  $n$  种组分的三维非定常守恒型 N-S 方程可以写成:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{E} + \mathbf{E}_v)}{\partial x} + \frac{\partial(\mathbf{F} + \mathbf{F}_v)}{\partial y} + \frac{\partial(\mathbf{G} + \mathbf{G}_v)}{\partial z} = \mathbf{S} \quad (1)$$

其中  $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e, \rho_1, \dots, \rho_{n-1})^T$ ,  $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{F}$  和  $\mathbf{G}$  是对流项通量,  $\mathbf{E}_v$ 、 $\mathbf{F}_v$  和  $\mathbf{G}_v$  是扩散项通量, 源项  $\mathbf{S} = (0, \dots, 0, \sigma_1, \dots, \sigma_{n-1})^T$ ; 且有  $\sum_{i=1}^n \sigma_i = 0$  和  $\sum_{i=1}^n \rho_i = \rho$ , 其中  $\rho_i$  和  $\sigma_i$  为第  $i$  个组分

\* 收稿日期: 2000-04-01

作者简介: 刘君 (1965), 男, 副研究员。

的密度和质量生产率。若  $e_i(T)$ 、 $h_i(t)$  和  $h_i^0(T)$  表示  $i$  个组分的内能、焓和生产焓, 则总内能  $e = 0.5\rho(u^2 + v^2 + w^2) + \sum_{i=1}^n \rho_i [e_i(T) + h_i^0(Tr)]$ , 取参考温度  $Tr = 298K$ , 对一温模型有  $h_i(T) = \int_{Tr}^T C_{p_i}(T) dT + h_i^0(Tr)$ ,  $C_{p_i}$  是等效定压比热, 根据文献 [6] 中 JANNAF 表求得。  $i$  组分气体常数  $R_i$ , 微团状态方程:  $p = \sum_i R_i \rho_i T$ 。(1) 式中粘性系数、热传导系数、质量扩散系数及无量纲常数选取的详细情况见文献 [5]。

## 2 解耦算法简介

记  $e^* = e - \sum_i \rho_i h_i^0(Tr) = 0.5\rho(u^2 + v^2 + w^2) + \frac{p}{\gamma - 1}$ , 从数学形式来看  $e^*$  和  $\gamma$  等价与完全气体 N-S 方程中的内能和比热比, 通量  $U$  中  $e$  用  $e^*$  代替, 对 (1) 式进行变换, 得到的新方程组与 (1) 式比较, 能量方程中的对流项和扩散项有变化外, 源项也变为  $S^* = (0, \dots, 0 - \sum_i \sigma_i h_i^0(Tr), \sigma_1, \dots, \sigma_{n-1})^T$ 。解耦方法是把原方程分解为源项和齐次方程两部分, 分别进行求解, 写成算子形式:

$$L(\Delta t) = L_1\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \sum_{m=1}^M L_s\left(\frac{\Delta t}{M}\right) L_1\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \quad (2)$$

实际上计算源项算子  $L_s$  时仅仅涉及  $U$  中的一部分通量:  $U_1 = (e^*, \rho, \dots, \rho_{n-1})^T$ 。引入  $\gamma$ , 齐次方程部分变成通量为:  $U_2 = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e^*)^T$  和  $U_3 = (\rho_1, \dots, \rho_{n-1})^T$  两个独立的方程组。 $U_2$  对应方程与完全气体 N-S 方程形式一样,  $U_3$  对应方程更为简单。

在早期研究中采用显式算法求解源项算子, 由于存在刚性问题, 需要推进近千步才能稳定的“赶上”运动方程一步。隐式算法的缺点如前所述。为解决这一问题, 本文提出下面这种新的处理办法。

源项方程组第  $i$  个方程:  $\partial \rho_i / \partial t = \sigma_i$ , 对  $\sigma_i$  进行整理得:  $\sigma_i = -a_i \rho_i + b_i$ , 这里  $a_i$  和  $b_i$  为系数, 作冻结处理。时间方向采用二阶离散:

$$\rho_i^{n+1} = [\rho_i^n (1 - a_i \Delta t / 2) + b_i \Delta t] / (1 + a_i \Delta t) \quad (3)$$

这样一来推进步数减少到仅几步, 可以大大提高计算效率。

计算时为了准确描述物体外形, 需要将上式变化到任意系  $(\tau, \zeta, \eta, \varphi)$  下: 为提高计算效率, 进行薄层近似处理<sup>[5]</sup>。然后, 采用时间相关法把  $L_1$  分解成如下算子形式:

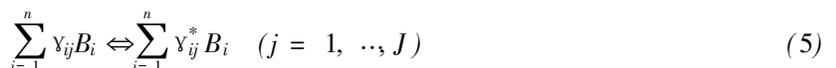
$$L_1(\Delta \tau) = L_\xi(\Delta \tau) L_\eta(\Delta \tau) L_\varphi(\Delta \tau) \quad (4)$$

$L_\xi$ 、 $L_\eta$  和  $L_\varphi$  是一维问题算子, 粘性项用中心差分格式离散, 对流项用 NND2M 差分格式<sup>[5]</sup> 离散。

本文与以前的解耦算法<sup>[4]</sup> 主要不同在于: (1) 引入变量  $\gamma$  处理能量方程, 这样一来“冻结”运动方程求解源项变化时, 保持不变只有速度, 其它物理参数, 如温度压力等, 随着化学反应中组分而变化; 这种处理方法充分反映了反应特征时间远小于运动特征时间这一现象的本质, 因此具有较强的物理背景。(2) 源项求解采用半隐方法, 很好的解决了非平衡流动模拟时遇到的刚性问题, 极大的提高了计算效率。(3) 方程组中组分的增减不需要重新推导离散方程, 应用起来十分方便; 同时可充分利用求解完全气体 N-S 方程的程序和经验, 这对缩短软件的研制周期和提高适应性是十分重要的。

## 3 计算过程简述

对于  $n$  种组分参与  $J$  个反应, 其化学反应方程式写成一般形式:



其中  $\nu_{ij}$  和  $\nu_{ij}^*$  分别为第  $i$  组分在第  $j$  个反应中反应物和生成物的化学计量系数, 采用文献 [1] 化学动力学反应模型, 第  $i$  组分的质量生成率:

$$\sigma_i = M_i \sum_{j=1}^J (\nu_{ij}^* - \nu_{ij}) Q_j \quad (6)$$

式中  $M_i$  为  $i$  组分的摩尔质量分子数数,  $Q_j = k_{fj} \prod_{i=1}^n X_i^{Y_{ij}} - k_{bj} \prod_{i=1}^n X_i^{Y_{ij}^*}$ ,  $k_{fj}$  和  $k_{bj}$  为正反应和逆反应速率常数,  $X_i = \rho/M_i$ 。详细情况参阅文献 [1] 和 [5]。

考虑到:  $e_i = h_i - R_i T$ , 则

$$e^* = \sum_{i=1}^n \rho h_i(T) - \sum_{i=1}^n \rho R_i T + 0.5 \rho (u^2 + v^2 + w^2) \quad (7)$$

运动方程算子 (4) 在时间方向推进  $\Delta t$ , 求出新的  $U_2$  和  $U_3$ , 对上式采用二分法进行迭代, 可以求得温度  $T$ 。由于冻结化学反应时流场内温度随时间变化较小, 一般 3 迭代可以满足收敛判据:  $|T^{m+1} - T^m|/T^{m+1} \leq 10^{-3}$ 。这一温度作为求解源项算子的初场, 用 (3) 式计算在  $\Delta t$  时间内化学反应引起的组分密度和能量变化; 对于下面的算例仅用  $M=4$  可以保持计算稳定。继续采用上式求  $T$ ; 然后用下式得到中间变量:

$$\gamma = \frac{\rho}{\sum_{i=1}^n \rho e_i} + 1 \quad (8)$$

按照 (2) 式的对称算子形式依此进行迭代求解, 直到满足流场收敛条件。

### 4 算例及分析

计算的物理模型与文献 [3] 和 [7] 算例相同: 摩尔组分为  $2H_2 + O_2 + 3.76N_2$  静止的混合气体, 温度  $T = 286K$ , 压力  $p = 320mmHg$ ; 球半径  $r = 7.5cm$  的球-柱组合体弹头, 以  $v = 2605m/s$  速度飞行。由于弹头激波点燃预混气体, 提高底部压力, 在一定条件下可以使弹头加速; 这是超级大炮、超燃加速器等应用背景的机理研究。

选取相对坐标如图 1, 原点设在球心。进口边界固定来流物理参数不变, 出口边界采用零梯度外推, 物面速度无滑移和绝热条件, 轴线上法向速度为零。模拟的是轴对称问题, 在周向作相应的处理。

图 2~ 图 4 是计算得到的沿轴线上物理参数分布, 图中也与目前应用广泛的点隐算法比较, 文献 [3] 无粘流计算和文献 [7] 粘性流计算, 三者较为一致。本文与文献 [7] 采用相同的计算条件 (包括控制方程、网格、差分格式等方面) 对上述算例计算, 在壁面压力和压力、温度、密度和组分等值线图方面进行较为细致的比较, 符合较好; 但是达到同样的收敛标准, 本文的计算时间约为文献 [7] 的 70%。

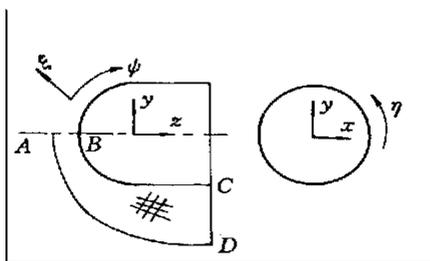


图 1 计算区域及座标选取  
Fig. 1 Physical model

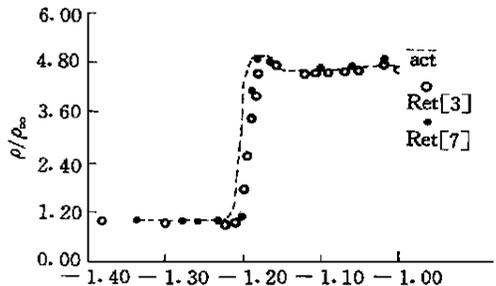


图 2 轴线上密度分布  
Fig. 2 The density distriultions on axis

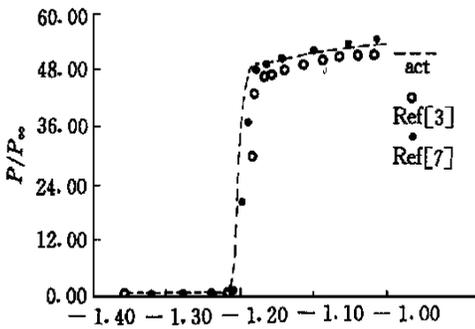


图3 轴线上压力分布

Fig.3 The pressure distributions on axis

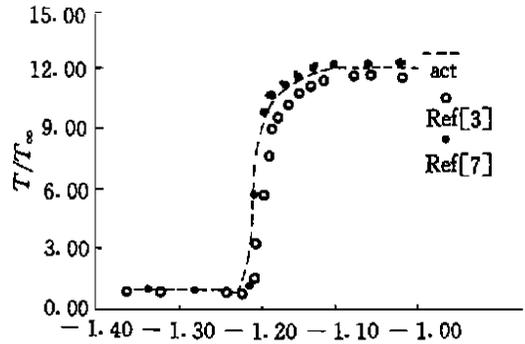


图4 轴线上温度分布

Fig.4 The temperature distribution on axis

**致谢:** 在完成本文的整个过程中, 得到文献 [7] 作者陈坚强博士的真诚相助, 在此表示真挚的感谢!

### 参考文献:

- [1] Wilson G J, MacCormack R W. Modeling supersonic combustion using a fully-implicit numerical method [R]. AIAA paper 90-2307.
- [2] Yeneriz M A. Comparison of calculation and experiment for a lateral jet from a hypersonic biconic vehicle [R]. AIAA paper 84-2548.
- [3] Yungster S, Eberhardt S, Bruckner A P. Numerical simulation of hypervelocity projectiles in detonable gases [J]. AIAA J., 1991, 29: 187-199.
- [4] Cambier J L, Adelman H. & Meness G P. Numerical simulation of an oblique detonation wave engine [R]. AIAA paper 88-63.
- [5] 刘君. 超音速完全气体和  $H_2/O_2$  燃烧非平衡气体的复杂喷流流场数值模拟 [D]. 中国空气动力研究与发展中心工学博士学位论文, 1993.
- [6] Esch D D, Siripong A, Pike R W. A technical report on thermodynamic properties in polynomial form for carbon, hydrogen, nitrogen and oxygen systems from 300K to 15000K [R]. NASE RFT-TR-70-3, 1970.
- [7] 陈坚强, 张涵信, 高树椿.  $H_2/O_2$  燃烧的超音速非平衡流数值模拟 [J]. 宇航学报, 15 (2), 1994.