

文章编号: 1001- 2486(2010) 03- 0001- 06

超声速燃烧流的双时间步计算方法研究*

汪洪波, 孙明波, 吴海燕, 王振国

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 发展了模拟非定常超声速燃烧流场的隐式双时间步方法。采用时间分裂法对流动和反应进行解耦处理, 流动方程组由双时间步方法求解, 内迭代过程采用 LU-SGS 方法; 反应源项方程组通过隐式二阶梯形公式求解。分析了时间分裂格式和时间步长对计算结果的影响, 结果显示: 一阶时间精度的分裂格式会略微高估化学效率, 应该采用二阶时间精度的分裂格式; 时间步长的选取对计算结果影响显著, 为了保证解耦算法的计算精度, 时间步长应足够小以能够较准确捕捉到主导各种输运过程的大尺度涡团的非定常行为。

关键词: 超声速燃烧; 双时间步法; LU-SGS; 时间分裂; 时间步长

中图分类号: V435. 12 **文献标识码:** A

Investigation of Dual Time-step Approach for Supersonic Combustion Flow

WANG Hong-bo, SUN Ming-bo, WU Hai-yan, WANG Zhen-guo

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

Abstract: A dual time-step approach was developed for simulation of unsteady supersonic combustion flow. The flow and reaction were separately calculated with a time splitting method. The flow equations were solved by the dual time-step approach with the inner iteration proceeded by a LU-SGS method. The source equations were solved by 2nd order trapezoidal formulas. The influences of the time-splitting scheme and the time step were studied. The results show that the 1st order time-splitting can slightly overestimate the chemical efficiency and a 2nd order time-splitting should be implemented. The time step has a significant effect on the results. In order to ensure the computational precision of the uncoupled method, the time step should be kept small enough so that the unsteady behaviors of the large scale vortices, which dominate the transport processes in the flow, can be captured accurately.

Key words: supersonic combustion; dual time-step approach; LU-SGS; time-splitting; time step

超声速燃烧流场由于激波、流动及燃烧之间的强烈相互作用而表现出很强的非定常特性, 对其进行细致的刻画需采用非定常计算方法。对于非定常流的计算方法, 按照时间离散格式可以分为显式和隐式两类。显式方法是以 Runge-Kutta 方法为代表的一类格式, 其优点是简单易行, 且容易实现时间高阶精度; 缺点是受稳定性限制, 时间步长小, 求解效率低。特别是对于超声速燃烧流场, 在壁面和喷流附近需要很小的网格尺度, 此时推进时间步长受全流场最小网格尺度的限制非常明显, 从而导致整体求解效率极低。相对而言, 隐式方法具有很好的稳定性, 其时间推进步长可根据物理问题来选取而不受稳定性限制, 因此求解效率很高。然而, 隐式方法的离散方程比较复杂, 很难直接求解, 实际计算中往往都会采用诸如线化、近似因子分解和显式边界处理等一些近似处理方法, 这些近似处理都会严重损失非定常计算的时间精度, 不适合直接用于要求时间精度的非定常计算。Jameson 提出的双时间步方法^[1]很好地解决了这一问题, 使非定常计算得到巨大的发展。Lin^[2]和 Shieh 等^[3]分别将双时间步方法应用无粘和粘性气动声学计算, 研究了声波传播及声源散射过程, 均得到满意的结果, 表明了该方法的有效性。邹平等^[4]应用双时间步方法对圆柱绕流及翼型表面激波摆动等问题进行了计算, 结果表明该方法具有较好的精度和较高的收敛速度。王保国等^[5]采用双时间步法计算了叶轮机非定常流动过程, 计算结果与实验结果吻合较好。

* 收稿日期: 2009- 09- 23

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50906098)

作者简介: 汪洪波(1983-), 男, 博士生。

1 流动与反应的时间分裂法

描述多组分反应流动的二维气相 Navier-Stokes 方程如下:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \zeta} = \mathbf{W} \quad (1)$$

其中 $\mathbf{Q} = [\rho, \rho u, \rho v, e, \rho_1, \dots, \rho_{n-1}]$, \mathbf{E}, \mathbf{F} 对应方程在不同坐标方向的通量。

记 $e^* = e - \sum_{k=1}^N \rho_k (h_k^0(T_0) + C_{p_k}(T_0) \times T_0) = \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + \frac{p}{\gamma - 1}$, $h_k^0(T_0)$ 为生成焓。从数学形式来看, e^* 和 γ 等价于完全气体 N-S 方程中的内能和比热比^[6]。此时有

$$\gamma = \frac{p}{\sum_{k=1}^N \rho_k e_k} + 1 \quad (2)$$

通量 \mathbf{Q} 中 e 用 e^* 代替, 源项 \mathbf{W} 变为

$$\mathbf{W}^* = \left[0, 0, \dots, - \sum_{k=1}^N \omega_k h_k^0(T_0), \omega_1, \dots, \omega_{n-1} \right] \quad (3)$$

解耦方法是把原方程分解为源项和齐次方程两部分, 采用时间算子分裂, 将控制方程写成如下形式:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}^*}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathbf{F}^*}{\partial \zeta} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{d\mathbf{Q}_r}{dt} = \mathbf{W}^* \quad (5)$$

其中 $\mathbf{Q}_f = [\rho, \rho u, \rho v, e^*, \rho_1, \dots, \rho_{n-1}]$, $\mathbf{Q}_r = [e^*, \rho_1, \dots, \rho_{n-1}]$, \mathbf{Q}_f 对应的方程中密度、动量以及能量方程与完全气体 N-S 方程形式一样。在时间步长 Δt 上, 对流动方程(4)和反应方程(5)分别求解, 再将解按照一定规律组合起来, 此即解耦流动与反应的时间分裂方法。常用的分裂格式有:

一阶精度的 Gundersen 分裂:

$$Q^{n+1} = L_c(\Delta t) L_f(\Delta t) Q^n \quad (6)$$

二阶精度的 Strang 分裂:

$$Q^{n+1} = L_c\left(\frac{\Delta t}{2}\right) L_f(\Delta t) L_c\left(\frac{\Delta t}{2}\right) Q^n \quad (7)$$

其中 L_f 表示流动求解算子, L_c 表示反应求解算子, 下文将对两种格式作比较分析。

由于化学反应与流动时间尺度差异过大造成的刚性问题, 采用刘君的近似处理方法^[6]。组分 k 的方程为 $d\rho_k/dt = \omega_k$, 对 ω_k 可以整理成如下形式, $\omega_k = -a_k \rho_k + b_k$, 采用隐式的二阶梯形公式离散得: $\rho_k^{n+1} = [\rho_k^n (1 - a_k \Delta t / 2) + b_k \Delta t] / [1 + a_k \Delta t / 2]$, 系数 a_k, b_k 计算时做冻结处理。

2 基于隐式 LU-SGS 格式的双时间步方法

2.1 双时间步方法求解过程

流动部分的齐次方程组可写为以下形式:

$$J^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + R(\mathbf{Q}) = 0 \quad (8)$$

采用时间二阶精度的隐式三点后差离散, 无粘及粘性通量均采用隐式处理, 则上式可表示为:

$$J^{-1} \frac{3Q^{n+1} - 4Q^n + Q^{n-1}}{2\Delta t} + (\delta_\xi E + \delta_\eta F)^{n+1} = (\delta_\xi E_v + \delta_\eta F_v)^{n+1} \quad (9)$$

其中, δ 是无粘项差分算子, δ 是中心差分算子。在式(8)左端增加虚拟时间导数项, 并采用一阶前差处理, 同时在每一虚拟时间步对粘性通量采用显式处理, 得

$$J^{-1} \frac{Q^{p+1} - Q^p}{\Delta \tau} + J^{-1} \frac{3Q^{p+1} - 4Q^n + Q^{n-1}}{2\Delta t} + (\delta_\xi E + \delta_\eta F)^{p+1} = (\delta_\xi E_v + \delta_\eta F_v)^p \quad (10)$$

对无粘项采用线性化处理, 得到

$$\left[\left(\frac{J^{-1}}{\Delta\tau} + \frac{3J^{-1}}{2\Delta t} \right) I + (\delta_{\xi}A + \delta_{\eta}B) \right]^p \Delta Q^p = RHS^p \quad (11)$$

其中 $\Delta Q^p = Q^{p+1} - Q^p$, $RHS^p = - \left[J^{-1} \frac{3Q^p - 4Q^n + Q^{n-1}}{2\Delta t} + (\delta_{\xi}E + \delta_{\eta}F + \delta_{\xi}E_v + \delta_{\eta}F_v)^p \right]$ 。

当 $\Delta Q^p \rightarrow 0$ 时, 内迭代过程收敛, 令 $Q^{n+1} = Q^{p+1}$ 即得到相应时刻的非定常解。

本文采用隐式 LU-SGS 方法进行内迭代求解, 收敛判据定义如下:

$$\delta = \frac{\sum \|Q^{p+1} - Q^p\|_2}{\sum \|Q^{p+1} - Q^n\|_2} \quad (12)$$

参考文献[7]对收敛判据的研究结果, 将内迭代收敛准则取为 $\delta \leq 0.01$ 。

2.2 隐式 LU-SGS 内迭代方法

首先构造近似雅克比矩阵

$$\begin{cases} A^{\pm} = \frac{1}{2}[A \pm \rho(A)I] \\ B^{\pm} = \frac{1}{2}[B \pm \rho(B)I] \end{cases} \quad (13)$$

式中 $\rho(A) = \beta \max[|\lambda(A)|]$, 其中 $\lambda(A)$ 为矩阵特征值, β 为大于或等于 1 的常数, 用来调节计算稳定性, $\rho(B)$ 的表达式类似。采用上述近似雅克比矩阵, 则式(11)可写为

$$\left[\left(\frac{J^{-1}}{\Delta\tau} + \frac{3J^{-1}}{2\Delta t} \right) I + (\delta_{\xi}A^+ + \delta_{\xi}A^- + \delta_{\eta}B^+ + \delta_{\eta}B^-) \right] \Delta Q^p = RHS^p \quad (14)$$

将其整理为形式如下

$$[D + L + U] \Delta Q^p = RHS^p \quad (15)$$

其中

$$\begin{cases} D = \left(\frac{J^{-1}}{\Delta\tau} + \frac{3J^{-1}}{2\Delta t} \right) I + (A^+ + B^+ - A^- - B^-) \\ L = \delta_{\xi}A^+ + \delta_{\eta}B^+ - A^+ - B^+ \\ U = \delta_{\xi}A^- + \delta_{\eta}B^- + A^- + B^- \end{cases} \quad (16)$$

令 $L = D + L$, $U = D + U$, 忽略小量 $LD^{-1}U$, 则式(15)变为

$$LD^{-1}U \Delta Q^p = RHS^p \quad (17)$$

其中

$$\begin{cases} D = \rho_{AB}I \\ L = \rho_{AB}I - A_{i-1,j}^+ - B_{i,j-1}^+ \\ U = \rho_{AB}I + A_{i+1,j}^- + B_{i,j+1}^- \end{cases} \quad (18)$$

$$\rho_{AB} = \left(\frac{J^{-1}}{\Delta\tau} + \frac{3J^{-1}}{2\Delta t} \right) + \rho(A) + \rho(B) \quad (19)$$

其求解步骤为

$$\begin{cases} L \Delta Q^* = RHS^p \\ \Delta Q^{**} = D \Delta Q^* \\ U \Delta Q^p = \Delta Q^{**} \end{cases} \quad (20)$$

实际求解过程为一次向前扫描, 一次标量求逆和一次向后扫描。

2.3 湍流模型及空间离散格式

采用混合 RANS/LES 方法模拟湍流, RANS 采用 Menter $k-\omega$ SST 湍流模型^[8], LES 采用 Yoshizawa 一方程亚格子模型^[9], 引入一个衔接函数 F 来衔接两者的计算区域。无粘项采用五阶精度的 WENO 格式^[10]进行离散, 粘性通量采用二阶中心差分离散。

3 计算结果及分析

3.1 模拟对象

采用七组分八方程动力学模型对凹腔上游横向喷注氢燃料的二维超声速燃烧流场进行模拟,重点比较分析不同时间分裂格式和物理时间步长对结果的影响。计算网格如图1所示,凹腔深度为8mm,长深比为4,后壁倾角 45° 。采用四边形结构网格,对壁面、喷流附近及凹腔唇口等处进行了网格加密,壁面第一层网格到壁面距离为 0.03mm ($y^+ = O(1)$)。空气来流马赫数1.75,总压532kPa,总温1322K;氢气喷流缝宽0.1mm,距凹腔前缘10mm,喷流马赫数1.0,总压780kPa,总温300K。

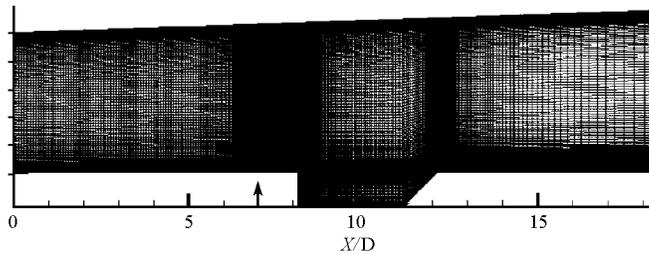


图1 计算网格示意图
Fig. 1 Schematic of computational mesh

3.2 时间分裂格式的影响

为了作相对定量的分析,引入混合效率 η_m 和化学效率 η_c ,其定义如下:

$$\eta_m = \frac{\int_{Y_{H_2,R}}^{Y_{H_2,S}} \rho u dY}{\int_{Y_{H_2}} \rho u dY}, \quad Y_{H_2,R} = \begin{cases} Y_{H_2} & Y_{H_2} \leq Y_{H_2,S} \\ Y_{H_2,S} \left(\frac{1 - Y_{H_2}}{1 - Y_{H_2,S}} \right) & Y_{H_2} > Y_{H_2,S} \end{cases} \quad (21)$$

$$\eta_c = \frac{(m\dot{n}_{H_2O,X} - m\dot{n}_{H_2O,I}) / W_{H_2O}}{m\dot{n}_2 / W_{H_2}} \quad (22)$$

式中: ρ, u 分别为气体在截面 X 处的密度和垂向速度; Y_i 为组分的质量分数; $Y_{H_2,S}$ 为组分氢在当地化学恰当比时的质量分数; $m\dot{n}_{H_2O,I}$ 及 $m\dot{n}_{H_2O,X}$ 分别为组分 H_2O 在入口截面及截面 X 处的质量流率; $m\dot{n}_2$ 为加入的燃料氢的质量流率; W_i 代表组分的摩尔质量。

为了做对比研究,本文同时采用二阶显式Runge-Kutta方法和隐式双时间步方法,针对同一燃烧流场和同一套网格进行了模拟。在本文算例中,显式Runge-Kutta方法由于受稳定性限制,时间步长只能取0.0005,而隐式双时间步方法时间步长基本不受稳定性限制,此处取为0.05。其中无量纲参考时间 $t_c = D/U$, D 为凹腔深度, U 为自由来流的速度。数值试验发现,Runge-Kutta方法时间步长非常小,因此采用一阶或二阶时间分裂格式对计算结果无明显影响;而隐式双时间步方法由于时间步长较大,此时时间分裂格式对计算结果有明显的影响。图2给出了时间平均的化学效率和混合效率沿流向的分布曲线(本文所有时均结果的时间跨度取 $10t_c$),可以发现在相同时间步长下,一阶分裂格式较之二阶分裂格式高估了化学效率,而化学速率的高估又导致产物生成增多,进而使得下游混合受阻,即下游混合效率偏低,总之会使结果误差增大,因此对于时间步长较大的双时间步方法,应该采用二阶时间分裂格式。

3.3 时间步长的影响

应用双时间步方法进行非定常计算的主要目的就是要提高计算的效率,克服显式方法求解效率太低的问题。该方法发挥作用的关键就是其时间步长基本不受稳定性限制,可以通过增大时间步长来提高非定常求解的效率。然而随着时间步长的增大,流场求解误差会增大,结果精度会降低。特别是对于燃烧流场的计算,当采用解耦型计算方法时,时间步长的大小还会直接影响解耦方法的计算误差,并对最终结果产生明显的影响。

图3所示为采用二阶时间分裂格式时不同时间步长的计算结果。看图发现,时间步长取0.1时,双

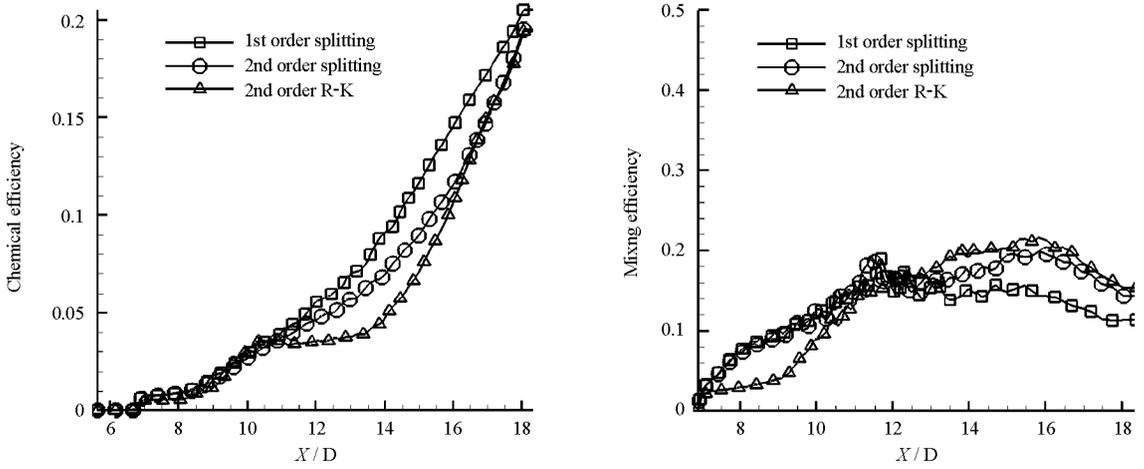


图2 时均化学效率和混合效率

Fig. 2 Time-averaged chemical efficiency and mixing efficiency

时间步方法的计算结果明显地高估了化学效率, 并使混合效率的分布也出现很大偏差; 而时间步长取 0.05 的双时间步方法可以获得与显式 Runge-Kutta 方法比较一致的计算结果。图 4 所示为瞬时及时均温度云图, 其中前四幅为瞬时结果, 最后一幅为时均结果。可以看出, 步长取 0.1 的结果所预测的凹腔剪切层中较早地卷起了大尺度的展向涡, 这会高估燃料的前期混合, 从而显著地高估混合层内的反应强度, 使混合层内出现了持续的高温燃烧区; 而从较小时间步长的双时间步方法及 Runge-Kutta 方法的计算结果来看, 在所研究的流向距离内, 喷流并未被完全点燃, 此时高温反应区仅仅集中在凹腔内部及出口附近区域。

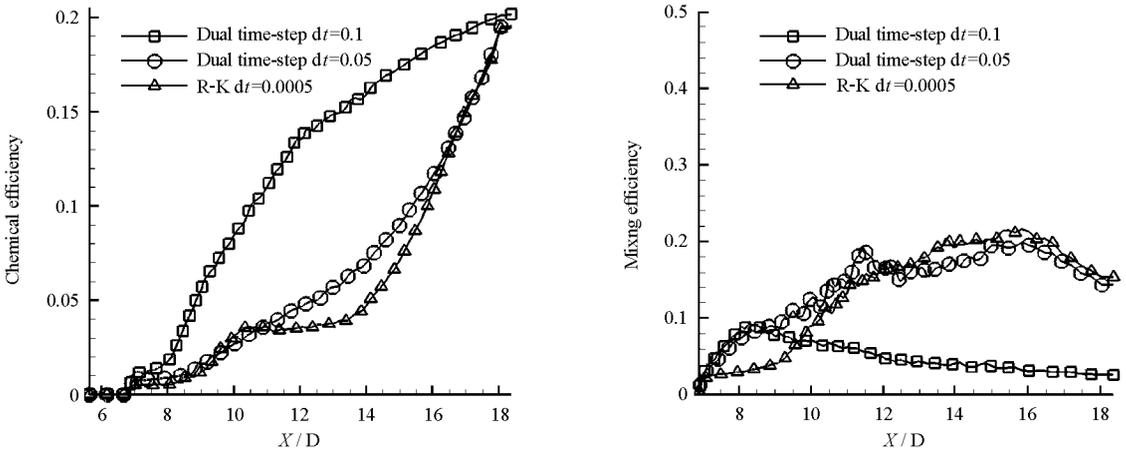


图3 时均化学效率和混合效率

Fig. 3 Time-averaged chemical efficiency and mixing efficiency

从物理意义分析, 燃烧流是由流动和燃烧两个过程耦合而成的。其中, 燃烧是一个在反应区释放和聚集能量的过程, 而流动是一个通过对流、扩散等作用耗散反应区能量的过程。本来两个过程是同时进行的, 但是为了数值求解的方便, 解耦算法人为地将其分离开来, 使两者在时间上交替进行。可以设想, 如果交替的时间步长足够小(远远小于流动及反应的最小特征时间), 则解耦算法的计算过程就非常逼近真实物理过程, 此时计算结果具有较高的精度, 如本文中的 Runge-Kutta 方法。当采用双时间步方法时, 为了保证求解的效率, 时间步长一般取得比较大, 然而其取值不能太大, 否则会使解耦算法的计算误差明显增大, 并可能导致结果失真。这样就在计算效率与精度之间形成了一对相互制约的矛盾。解决矛盾的关键就在于能在保证必要精度的前提下, 选取尽可能大的时间步长, 从而提高计算效率。具体问题需要作具体分析。对于本文计算的非预混超声速燃烧流场, 其质量、动量及能量的输运过程主要是由大尺度结构的运动所主导的, 因而计算必须能够较准确地刻画出这些大尺度的非定常行为, 才能保证结

果的精度。以凹腔的深度 D 为无量纲参考长度, 流场中大尺度涡团的空间尺度主要分布为 $0.1D \sim 1.0D$, 时间步长 0.1 的计算可能因为无法捕捉到其中较小尺度的涡团运动, 即未能模拟出这部分涡团的输运行为, 所以使结果误差较大。其具体的影响机理涉及到湍流输运及化学动力学等过程的相互耦合, 因此需要更深一步的详细分析, 在此从略。

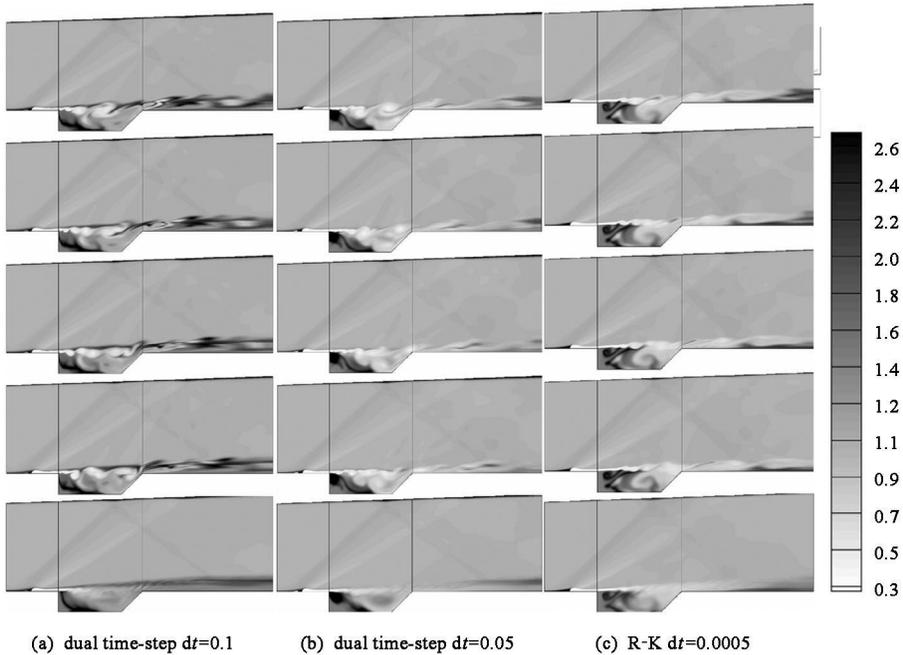


图4 瞬时及时均温度场

Fig. 4 Instantaneous and time-averaged temperature fields

4 结论

本文发展了用于模拟非定常超声速燃烧流场的隐式双时间步方法。采用时间分裂法对流动和反应进行解耦处理, 流动方程组由双时间步方法求解, 内迭代过程采用 LU-SGS 方法; 反应源项方程组通过隐式二阶梯形公式求解。针对凹腔上游横向喷注氢燃料的二维超声速燃烧流场, 比较分析了不同时间分裂格式和时间步长选取对计算结果的影响, 研究发现: 一阶时间精度的分裂格式会略微高估化学反应速率, 应该采用二阶时间精度的分裂格式; 时间步长的选取对计算结果影响很大, 为了保证解耦算法的计算精度, 时间步长应足够小以能够较准确捕捉到主导质量、动量及能量输运过程的大尺度涡团的非定常行为。

参考文献:

- [1] Jameson A. Time Dependent Calculations Using Multigrid with Applications to Unsteady Flows Past Airfoils and Wings [R]. AIAA Paper 91-1596, 1991.
- [2] Lin W H. Applications of Dual-time Stepping and Finite-volume Schemes in Computational Aeroacoustics [R]. AIAA Paper 2006-2472, 2006.
- [3] Shieh C M, Morris P J. High-order Accurate Dual Time-stepping Algorithm for Viscous Aeroacoustic Simulations [R]. AIAA Paper 98-2361, 1998.
- [4] 邹正平, 徐力平. 双重时间步方法在非定常流场模拟中的应用 [J]. 航空学报, 2000, 21(4): 317-321.
- [5] 王保国, 刘淑艳, 张雅, 等. 双时间步长加权 ENO-强紧致高分辨率格式及在叶轮机械非定常流动中的应用 [J]. 航空动力学报, 2005, 20(4): 534-539.
- [6] 刘君, 张涵信, 高树椿. 一种新型的计算化学非平衡流动的解耦方法 [J]. 国防科技大学学报, 2000, 22(5): 19-23.
- [7] 赵海洋, 刘伟, 任兵. 双时间隐式方法求解非定常绕流的相关问题 [J]. 国防科技大学学报, 2005, 27(3): 25-29.
- [8] Menter F R. Two Equation Eddy Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications [J]. AIAA Journal, 1994, 32(8): 1589-1605.
- [9] Yoshizawa A, Honiuti K. Statistically Derived Subgrid Scale Kinetic Energy Model for Large-eddy Simulation of Turbulent Flows [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1985, 54: 2834-2839.
- [10] Jiang G, Shu C W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes [J]. Journal of Computational Physics, 1996, 126: 917-923.