

基于新型非结构有限体积解耦算法的激波诱导燃烧数值模拟*

刘 瑜¹, 刘 君¹, 白晓征²

(1. 国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073; 2. 总参陆航研究所, 北京 101121)

摘要:把基于结构网格有限差分方法建立的化学非平衡流动模拟的新型解耦算法推广到基于非结构网格的有限体积法,从而可用于模拟复杂几何构型下的化学反应流动。对 H_2/Air 预混气体中激波诱导振荡燃烧的 Lehr 实验进行了数值模拟,计算得到的振荡频率与实验结果符合很好,表明计算方法具有时间和空间二阶精度。通过对不同几何外形发射体的计算发现,在其他条件相同的前提下,发射体的几何外形对激波诱导振荡燃烧的模式起决定作用。切削角小于等于 15° 时为规则模式下的高频振荡燃烧,切削角大于等于 20° 时为大扰动模式下的低频振荡燃烧。

关键词:激波诱导燃烧;解耦算法;计算流体力学;非结构网格

中图分类号:V211.3 文献标识码:A

Numerical Simulation of Shock-induced Combustion with a New Uncoupled Algorithm in Unstructured Finite Volume Method

LIU Yu¹, LIU Jun¹, BAI Xiao-Zheng²

(1. College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 40073, China;

2. Army Aviation Research Institute, General Staff of PLA, Beijing 101121, China)

Abstract: A new uncoupled algorithm of simulating chemical non-equilibrium flow originally realized by finite difference method was extended to the unstructured finite volume method, which makes the simulation of reaction flow in complex configurations possible. The H_2/Air shock-induced oscillating combustion experiment conducted by Lehr was simulated, and the computed oscillating frequencies conformed well with the ones acquired by experiment, which indicates that the present method is temporally and spatially second order accurate. It is also demonstrated that geometrical configuration plays a definitive role in the combustion regime. If the truncated angle is less or equal to 15 degrees, high frequency oscillating combustion in regular regime occurs, while if the angle is larger or equal to 20 degrees, low frequency oscillating combustion in large-disturbance regime is observed.

Key words: shock-induced combustion; uncoupled algorithm; CFD; unstructured mesh

化学非平衡流动是时间和空间上的多尺度现象,模型方程涉及空气动力学、热力学、化学动力学、计算数学等学科。化学反应生成源项引起的刚性问题(Stiffness)对计算方法有其特殊要求,模拟中求解变量多、网格量大、时间推进步长小,这些因素限制了 CFD 在非平衡流动工程问题中的应用。激波诱导燃烧是一种重要的化学非平衡流动现象。国内外对激波诱导燃烧进行了大量的数值计算, Yungster^[1], Choi^[2], Yuan^[3] 采用不同方法对 Lehr^[4] 的激波诱导燃烧实验进行了模拟。Choi^[5] 对斜激波诱导的周期性燃烧进行了数值研究,文献[6-7]中提出了一种求解非平衡流动的新型解耦算法,这种算法与一般解耦方法的区别

在于引入了中间能量和等效比热比,对非平衡流动控制方程组进行了变换,然后采用时间相关法进行解耦处理。大量应用算例表明,新型解耦算法与国内外广泛应用的点隐式方法相比,有如下特点^[8]:(1)时间为二阶精度,能用于非定常流动模拟;(2)点隐法的计算量与变量数目的二次方成正比,新型解耦算法的计算量与变量数目呈线性关系;(3)解耦后流动方程求解与量热完全气体流动方程的数值方法一致;(4)增减气体组分不需要修改程序,改变化学反应机理可以通过界面修改,非常适用于软件工程化。文献[9-10]对这种解耦算法在时间离散格式和空间离散格式进行了改进,对 Lehr 的激波诱导燃烧实验进行了

* 收稿日期:2011-04-20

基金项目:国家部委基金资助项目

作者简介:刘瑜(1984—),男,博士生。

数值模拟,并考察了化学动力学模型、网格尺寸和差分格式耗散大小对计算结果的影响,同时对不同的化学反应源项算子求解算法的计算效率进行了比较。文献[11]利用这种解耦算法,对流项采用5阶WENO格式离散,对钝头体激波诱导振荡燃烧现象进行了数值研究,表明这种解耦算法具有很好的可扩展性。

上述对化学非平衡流动的计算都是在结构网格上实现的。随着CFD在实际工程中的应用越来越广泛,计算区域变得越来越复杂,快速生成结构网格将变得十分困难。另外,为了捕捉到重要的流场结构,需要对局部网格进行加密。对结构网格的加密,往往也增加了不需加密区域的网格,从而增加了网格数量。非结构网格具有快速生成复杂区域网格的能力,同时由于其数据结构的特点可以很方便地实现自适应加密。因此自20世纪80年代中期以来对非结构网格算法的研究取得了长久的进展,出现了很多成熟的基于非结构网格的流场计算软件,但是采用非结构网格计算化学非平衡流动的软件还不是很多。Silva^[12]用一种非结构自适应纯三角形网格算法模拟了可燃预混气体绕尖劈流动时斜激波向斜爆轰波的转变过程。Togashi^[13]等采用非结构算法对H₂/Air爆轰进行了计算。耿继辉^[14],代淑兰^[15]对驻定在飞行弹丸上的斜爆轰流场进行了模拟。

本文把文献[6-7]中提出的新型解耦算法推广到有限体积法中,并且通过对H₂/Air预混气体中激波诱导振荡燃烧现象的模拟进行算法验证。最后研究了发射体的外形变化对激波诱导振荡燃烧的影响。

1 数值模拟方法介绍

包含有 n 种组元的轴对称守恒型 Euler 化学反应流方程组可以写成

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

其中 $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho e, \rho_1, \dots, \rho_{n-1})^T$, \mathbf{E} 、 \mathbf{F} 是对流项通量, \mathbf{Q}_f 是轴对称源项, $\mathbf{S} = (0, 0, 0, \sigma_1, \dots, \sigma_{n-1})^T$ 为化学反应源项; ρ_i 和 σ_i 分别为第 i 个组元的密度和质量生产率; 有 $\sum_{i=1}^n \sigma_i = 0$ 和 $\sum_{i=1}^n \rho_i = \rho$ 。总内能

$$\rho e = \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + \sum_{i=1}^n \rho_i [h_i^T(T) + h_i^0(Tr)] - p$$

其中 $h_i^0(Tr)$ 是第 i 个组分的生成焓, $h_i^T(T) = \int_{Tr}^T C_{pi}(s) ds$ 是组分 i 的热焓。参考温度取 $Tr =$

298K。在工程上, $C_{pi}(T)$ 通常由多项式拟合得到, 本文采用四阶多项式拟合:

$$C_{pi}(T) = R_i(A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3 + E_i T^4)$$

本文所用拟合系数见文献[9]。 R_i 是组元 i 的气体常数。混合气体状态方程为 $p = \sum_{i=1}^n \rho_i R_i T$ 。

文献[6-7]提出的解耦法与国外提出的解耦算法的差异在于首先对控制方程组进行变换, 然后再对变换后的方程组采用时间分裂法进行解耦处理。

记 $\rho e^* = \rho e - \sum_{i=1}^n \rho_i h_i^0(Tr) = \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + \frac{p}{\gamma - 1}$, 式中 e^* 和 γ 没有物理意义, 但是从数学形式来看, 等价于完全气体方程的内能和比热比。用 e^* 代替式(1)变量 \mathbf{U} 中 e 得到 \mathbf{U}^* , 从而得到新源项 $\mathbf{S}^* = (0, 0, 0, -\sum_{i=1}^n \sigma_i h_i^0(Tr), \sigma_1, \dots, \sigma_{n-1})^T$ 。

按照算子分裂法思想, 把反应流方程组分为流动和化学反应两部分:

$$\frac{\partial \mathbf{U}^*}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \alpha \mathbf{Q}_f = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}^*}{\partial t} = \mathbf{S}^* \quad (3)$$

对式(2)和(3)分别离散求解, 然后将各自的解按照一定的顺序组合起来。为保证解具有时间二阶精度, 采用 Strang 分裂^[16], 即:

$$\mathbf{U}^{*..n+1} = L_c \left(\frac{\Delta t}{2} \right) L_f(\Delta t) L_c \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \mathbf{U}^{*..n} \quad (4)$$

其中 L_f 和 L_c 分别对应于流动和化学反应部分的数值求解算子。

等效比热比 γ 是温度的函数。由 e^* 的表达式可以得到关于温度 T 的非线性方程:

$$\sum_{i=1}^n \rho_i (h_i^T - R_i T) + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) - \rho e^* = 0 \quad (5)$$

求解这一方程, 便可得到温度 T , 从而可以确定等效比热比 γ 。

1.1 流动部分数值求解

采用非结构有限体积法求解流动部分方程, 式(2)可以改写为有限体积的形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{U}^* d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_c dS + \int_{\Omega} \mathbf{Q}_f d\Omega = 0 \quad (6)$$

对式(6)的求解采用格心有限体积方法离散, 控制体内变量采用线性重构, 因此具有二阶空间精度。用 Green-Gauss 方法近似计算控制体单

元内变量梯度,对流项离散采用 van Leer 格式,为了抑制物理量间断处可能出现的数值振荡,采用了 Venkatakrishnan 限制器。为保证时间精度,采用二阶 Runge-Kutta 方法进行时间推进。具体实施细节可见文献[9]。

1.2 化学反应部分求解

通过式(3)计算格心点的化学反应。化学非平衡流动中快反应和慢反应的特征时间尺度一般会相差好几个量级,这样使得化学反应方程式(3)存在严重的刚性问题,因而采用显式方法计算化学反应方程组是不切实际的。现在广泛使用的刚性问题常微分方程组求解器是 VODE^[17]。VODE 采用 BDF (Backward Differentiation Formula) 方法求解,可以有效解决刚性问题,具有高阶精度,被认为是刚性常微分方程组的标准算法,被广泛运用于各种刚性问题的计算中。但是, VODE 计算过程涉及矩阵运算,计算效率较低。本文采用一种拟稳态逼近方法 α -QSS^[1]。这种方法专门为计算化学反应而设计,对线性和非线性常微分方程都具有二阶精度,且具有很好的稳定性,但计算量远小于 VODE。具体实施细节见文献[9,18]。

2 激波诱导振荡燃烧的数值模拟

超声速燃烧流场具有高温、高速和参数随空间或时间变化剧烈等特征,给流场显示和参数测量带来困难,可供验证计算模拟的实验结果有限,其中 70 年代初 Lehr^[4] 采用弹道靶进行的 H_2 /Air 预混气体中激波诱导燃烧的自由飞实验,由于计算条件清楚,成为非平衡流动模拟方法的经典验证模型。

实验环境参数:温度 $T = 286K$, 压力 $p = 42663Pa$; H_2/O_2 理想配比混合气体摩尔组分比例为 $H_2 : O_2 : N_2 = 2 : 1 : 3.76$ 。声速为 $403m/s$, 可燃气体的理论爆轰速度 $D_{c_j} = 2055m/s$ 。根据实验观测,模型飞行速度 $V < D_{c_j}$, 弹头绕流场为脱体激波——预燃诱导区——燃烧阵面结构; 飞行速度 $V > D_{c_j}$, 波后温度增高加剧反应, 预燃诱导区变薄, 可能使脱体激波与燃烧阵面基本重合, 还出现激波后压力高于驻点值的 von Neumann spike 现象。这两种情况流动状态稳定, 国内外有许多人进行成功的数值模拟^[1-2]; 新型解耦算法也取得很好的效果^[19]。

当发射体模型飞行速度接近爆轰速度 $V \approx D_{c_j}$ 时, 出现了非常复杂的不稳定振荡燃烧现象, 早期对这一非定常流动现象的数值模拟十分困难, 近

年来经过对反应机理、计算方法和网格等影响因素的细致研究, 获得很大进展。但是依然被认为是检验非平衡流动模拟算法时间和空间精度的典型问题。

计算中化学动力学模型采用文献[1]中引用的 Jachimowski 反应机理(8 组分 19 反应)。采用轴对称模型计算, 网格如图 1 所示, 一种为四边形网格, 单元数为 200×200 , 另一种为三角形网格, 单元数为 60000。Lehr 在实验中发现弹丸飞行马赫数 $Ma = 4.18$ 时开始出现规则的振荡燃烧现象, 随着弹丸速度的增加, 流场的振荡频率逐渐增加, 飞行马赫数达到 $Ma = 5.10$ 时, 流场中的振荡又变得非常不明显。本文对 Lehr 实验观测到振荡燃烧的三个飞行马赫数 4.18、4.48 和 4.79 进行了模拟。

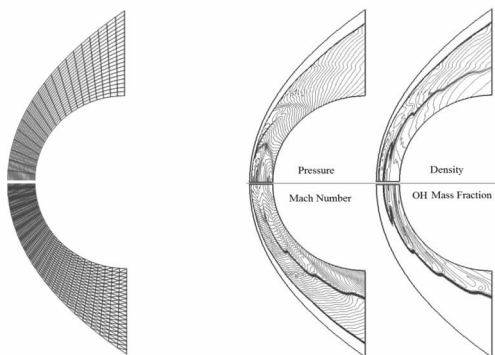


图 1 计算网格 图 2 流场等值线 ($Ma = 4.48$)
Fig.1 Computing mesh Fig.2 Mach contours

采用四边形网格, 弹丸飞行马赫数 $Ma = 4.48$ 时计算得到的流场参数等值线如图 2, 可以看到清晰的振荡燃烧结构, 振荡燃烧发生在激波和物体表面之间, 从 OH 组元密度等值线知道化学反应发生在燃烧阵面以后, 由于燃烧阵面的上下游温度和声速不同, 扰动传播特性也有所变化。

驻点流线上密度随时间的变化如图 3 示意, 显示出了规则的振荡燃烧结构。其中图 3(a) 和 (b) 分别是弹丸飞行马赫数 $Ma = 4.79$ 时采用三角形网格和四边形网格计算得到的结果, 二者基本一致, 且计算得到的振荡频率相同, 表明采用四边形网格和采用三角形网格的计算取得了一致的结果。其他飞行马赫数条件下也有同样结论。图 3(c) 是马赫数 $Ma = 4.48$, 图 3(d) 为马赫数 $Ma = 4.18$ 驻点流线上密度随时间的变化。由于振荡燃烧在有限范围内进行, 同时受流动和化学动力学过程影响, 因此振荡频率是综合反映流动特征的重要参数, 如果该参数与实验结果符合, 就认为流场模拟取得成功。计算的振荡频率和实验数据比较如表 1, 两者相差较小, 与文献[1]的计算结

果也符合得较好,表明本文所用方法具有二阶空 间和时间的精度。

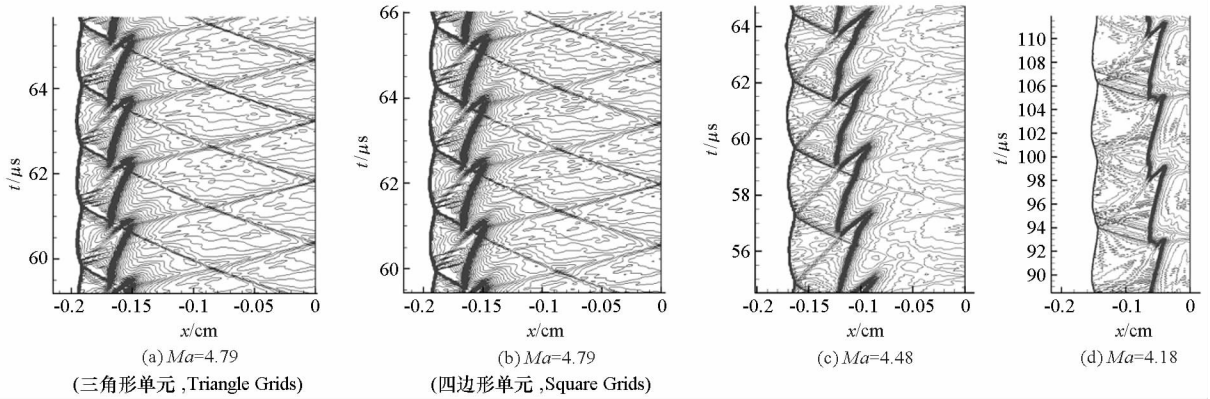


图3 驻点线上密度等值线随时间变化

Fig.3 History of density contours on stagnation line

表1 振荡频率比较(kHz)

Tab.1 Comparison of frequencies between experiment and computation (kHz)

	Lehr 实验	本文计算	文献[1]计算
$Ma = 4.79$	712	694	701
$Ma = 4.48$	425	414	431
$Ma = 4.18$	145	164	163

3 几何外形对不稳定燃烧的影响

本节主要考虑发射体的外形对诱导燃烧的影响,按一定角度将 Lehr 实验中发射体前端的球头

切除一部分。来流马赫数为 $Ma = 4.48$ 。

当切下球冠的球心角为 0° (即为球头), 5° 、 10° 、 15° 时,计算结果在燃烧阵面上形成规则的振荡燃烧结构,但是激波面是光滑的。图4给出了马赫数等值线图。这种振荡模式称为规则模式^[20] (regular regime)。但当切下球冠的球心角为 20° 和 25° 时,燃烧阵面上的振荡结构变得十分明显,同时激波面也出现了扭曲。图5给出了不同时刻时的马赫数等值线图。这种振荡模式称为大扰动模式^[21] (large-disturbance regime)。

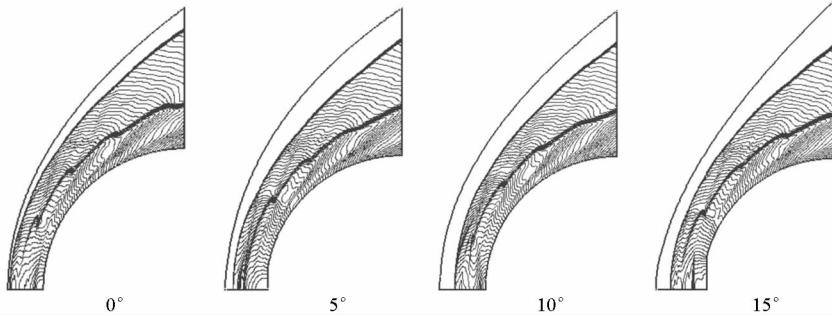


图4 马赫数等值线图

Fig.4 Mach contours

图6(a) ~ (c)给出了规则振荡模式下驻点流线上密度随时间的变化关系。图6(d) ~ (e)给出了大扰动振荡模式下驻点流线上密度随时间的变化关系。

计算由不同外形发射体得到的激波诱导振荡燃烧的频率如表2所示。可以看出当切削角度小于或等于 15° 时的规则振荡模态属于高频振荡,而切削角度为 20° 和 25° 时的大扰动振荡模态为低频振荡。

在其他条件相同的前提下,头部外形的改变使不稳定燃烧的模态从规则模态转变到大扰动模态。而头部外形的改变主要影响到脱体激波的强

度。由此可以推断,脱体激波强度可能是决定激波诱导不稳定燃烧模态的重要参数。

表2 不同切削角下计算得到的振荡频率(kHz)

Tab.2 Frequencies at different truncated angles

角度	频率(kHz)
0°	414
5°	418
10°	403
15°	402
20°	75
25°	71

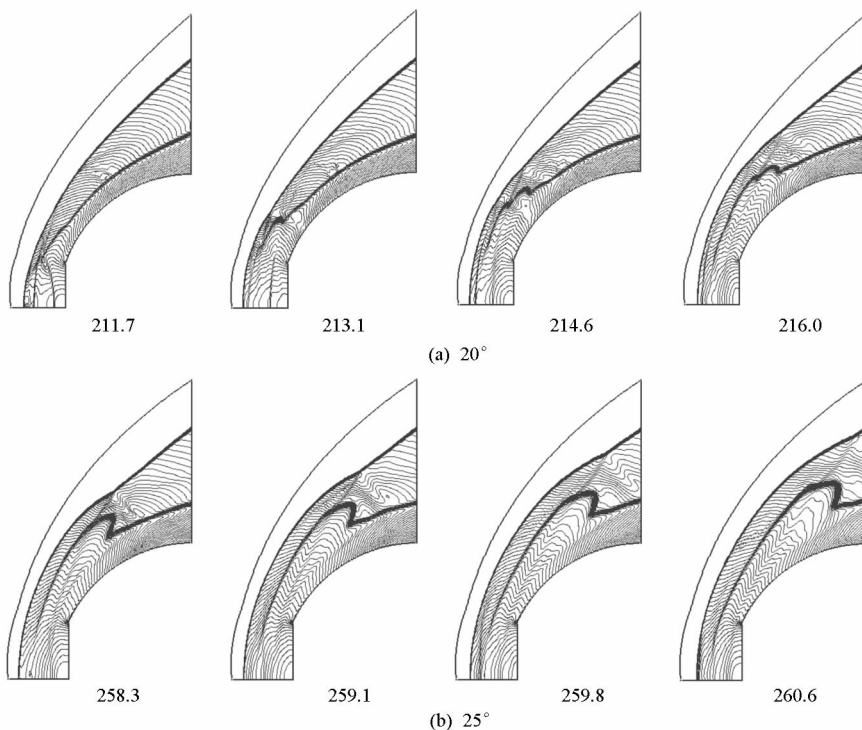


图5 大扰动模式不同时刻的马赫数等值线图(时间单位: μs)

Fig. 5 Mach contours of large disturbance regime at different time (time units: μs)

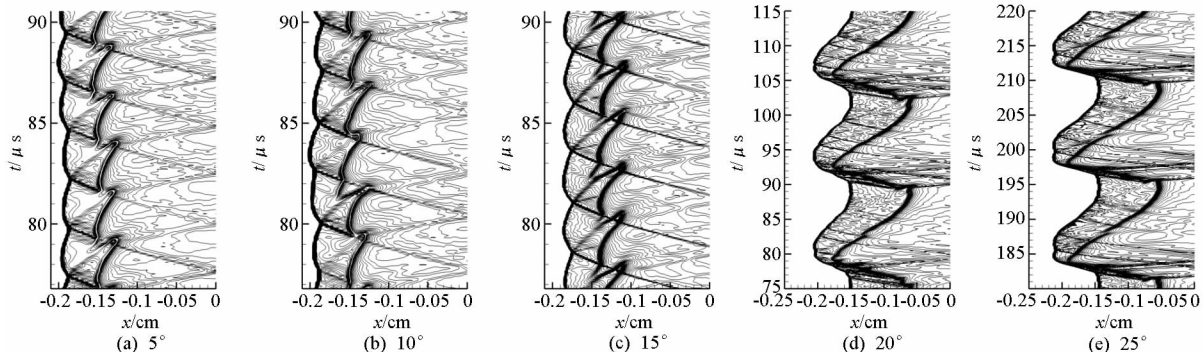


图6 驻点流线上密度随时间的变化

Fig. 6 History of density contours on stagnation line

4 结论

把文献[6-7]中建立在有限差分法基础上的解耦算法推广到非结构有限体积法,通过模拟激波诱导振荡燃烧现象,分辨出清晰的流场振荡燃烧结构,计算得到的振荡频率与实验结果基本一致,表明这种解耦算法同样适用于非结构网格的计算。通过改变发射体的外形,研究了激波诱导的非定常燃烧现象,结果表明几何构型对燃烧模态起决定性作用。如果截取的角度小于 15° ,发生规则高频振荡燃烧,如果截取角度大于或等于 20° ,将发生低频大扰动模态燃烧。由于非结构网格在建模复杂几何构型上的优势,本文提出的基于非结构网格的解耦算法为将来应用于高超

声速非平衡流动的研究打下了基础。

参考文献:

[1] Yungster S, Radhakrishnan K. A Fully Implicit Time Accurate Method For Hypersonic Combustion : Application to Shock-induced Combustion Instability[R]. AIAA - 94 - 2965, 1994.

[2] Choi J Y. Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock - Induced Combustion, Part 1 and Part 2[J]. AIAA Journal, 2000, 38(7) : 1179 - 1195.

[3] Yuan L, Tang T. Resolving the Shock-induced Combustion by An Adaptive Mesh Redistribution Method [J]. Journal of Computational Physics, 2007, 224: 587 - 600.

[4] Lehr H F. Experiments on Shock-induced Combustion [J]. Astronautica Acta, 1972, 17; 589 - 597.

[5] Choi J Y, Jeung I S, Roh T S. Periodical Oscillation of Combustion Induced by Oblique Shock Wave [R]. AIAA - 2002 - 3717, 2002.

- [6] 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]. 绵阳:中国空气动力研究与发展中心, 1993.
- [7] 刘君. 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): 19-22.
- [8] 刘君, 周松柏, 徐春光. 超声速流动中燃烧现象的数值模拟方法及应用[M]. 长沙:国防科技大学出版社, 2008.
- [9] 刘瑜. 化学非平衡流的计算方法研究及其在激波诱导燃烧现象模拟中的应用[D]. 长沙:国防科学技术大学, 2008.
- [10] 刘君, 刘瑜, 周松柏. 基于新型解耦算法的激波诱导燃烧过程数值模拟[J]. 力学学报, 2010, 42(3): 572-578.
- [11] 刘世杰, 孙明波, 林志勇, 等. 钝头体激波诱导振荡燃烧现象的数值模拟[J]. 力学学报, 2010, 42(4): 597-605.
- [12] Silva L F F d, Azevedo J L F, Korzenowski H. Unstructured Adaptive Grid Flow Simulations of Inert and Reactive Gas Mixtures[J]. Journal of computational physics, 2000, 160: 522-540.
- [13] Togashi F, Lohner R, Tsuboi N. Numerical Simulation of H_2 /air Detonation Using Unstructured Mesh [J]. Shock Waves, 2009, 19: 151-162.
- [14] 耿继辉, 许厚谦. 驻定在飞行弹丸上的斜爆轰波数值计算[J]. 弹道学报, 2003, 15(3): 60-64.
- [15] 代淑兰, 许厚谦. 高速飞行弹丸诱导的三维爆轰波数值模拟[J]. 推进技术, 2007, 28(2): 132-134.
- [16] Leveque R J. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems[M]. Cambridge University, 2002.
- [17] Brown P N, Byrne G D, Hindmarsh A C. VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver[J]. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1989, 10: 1038-1051.
- [18] Mott D R, Oran E S, Leer B V. A Quasi Steady-state Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations [J]. Journal of Computational Physics, 2000, 164: 407-428.
- [19] 刘君. 非平衡流计算方法及其模拟激波诱导振荡燃烧现象[J]. 空气动力学报, 2003, 21(1): 53-57.
- [20] McVey J B, Toong T Y. Mechanism of Instability of Exothermic Hypersonic Blunt-body Flows [J]. Combustion Science and Technology, 1971, 3: 63-76.
- [21] Matsuo A, Fujii K. Computational Study of Unsteady Computation Around Projectiles with Emphasis on the Large-disturbance Oscillation[R]. AIAA-94-0764, 1994.

(上接第 138 页)

参考文献:

- [1] Bitterly J G. Flywheel Technology Past, Present, and 21st Century Projections[J]. IEEE AES Systems Magazine, 1998(8): 13-16.
- [2] 吴刚, 刘昆, 张育林. 磁悬浮飞轮技术及其应用研究[J]. 宇航学报, 2005, 26(3): 385-390.
- [3] Apkarian P, Gahinet P, Becker G. H_∞ Control of Linear Parameter-varying Systems: A design Example [J]. Automatica. 1995, 31(9): 1251-1261.
- [4] Packard A. Gain Scheduling Via Linear Fractional Transformations[J]. Systems and Control Letters, 1994, 22(2): 79-92.
- [5] Apkarian P, Gahinet P. A Convex Characterization of Gain-scheduled H_∞ Controllers [J]. IEEE Transactions on Automatic Control, 1995, 40(5): 853-864.
- [6] Montagner V F, Oliveira R C L F, Peres P L D, et al. Linear Matrix Inequality Characterisation for H_∞ and H_2 Guaranteed Cost Gain-scheduling Quadratic Stabilisation of Linear Time-varying Polytopic Systems [J]. IET Control Theory Appl., 2007, 1(6): 1726-1735.
- [7] Jetto L, Orsini V. LMI Conditions for the Stability of Linear Uncertain Polynomially Time-varying Systems [J]. IEEE Transactions on Automatic Control, 2009, 54(7): 1705-1709.
- [8] Matsumura F, Namerikawa T, Hagiwara K, et al. Application of Gain Scheduled H_∞ Robust Controllers to a Magnetic Bearing [J]. IEEE Transactions on Control Systems Technology, 1996, 4(5): 484-493.
- [9] 张剖, 赵雷, 赵鸿宾. 磁轴承-转子系统低阶变增益鲁棒控制器设计[J]. 机械工程学报, 2005, 41(9): 198-201.
- [10] 韩辅君, 房建成, 刘刚. 磁轴承-转子系统磁轴承系统变增益 H_∞ 控制器设计[J]. 系统工程与电子技术, 2008, 30(9): 1748-1751.
- [11] Lu B, Choi H, Buckner G D, et al. Linear Parameter-varying Techniques for Control of a Magnetic Bearing System [J]. Control Engineering Practice, 2008(16): 1161-1172.
- [12] 吴刚. 混合磁轴承飞轮系统设计与控制方法研究[D]. 长沙:国防科技大学, 2006.