

# 加权紧致非线性格式在热化学非平衡流数值模拟中的应用\*

葛明明, 曾明, 赵小宇

(国防科技大学 航天科学与工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:**高精度格式因其在较低的计算资源消耗下仍能保持足够的精度而在精细流动结构的模拟中具有独特优势。将显式5阶加权紧致非线性格式(WCNS-E-5)引入二维高温非平衡流计算,进行自由流速度5.0~5.7 km/s的高焓风洞和高空条件下的圆柱非平衡流场数值模拟,得到正确的流场参数分布、壁面压力和壁面热流等结果与实验值吻合较好。计算结果表明,WCNS-E-5格式较2阶的MUSCL格式具有更好的热流网格收敛特性。分析并针对算例条件初步解决了高阶格式在刚性化学反应流模拟中的鲁棒性问题,为进一步采用高阶格式开展流场结构更加复杂的热化学非平衡流数值研究奠定了良好基础。

**关键词:**高精度格式;热化学非平衡流;数值模拟

**中图分类号:**V211.3 **文献标志码:**A **文章编号:**1001-2486(2016)05-163-07

## Applications of high-order weighted compact nonlinear scheme for thermo-chemical nonequilibrium flow

GE Mingming, ZENG Ming, ZHAO Xiaoyu

(College of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** High-order scheme has advantages in the simulations of complex flow for its good behavior of preserving high spatial resolution with lower cost than the second order methods. WCNS-E-5 (weighted compact nonlinear scheme) was applied in the simulations of thermo-chemical nonequilibrium flow around a cylinder with the freestream velocity from 5 km/s to 5.7 km/s. The distribution of correct flow field parameter was acquired, the pressure and heat flux on the surface agreed well with the experimental data. WCNS-E-5 also exhibited better performance on the grid convergence of heat flux than the second order MUSCL scheme. Results show that the present attempt to combine high order scheme with the calculations of stiff chemically reacting flow is basically successful, and it has established a good foundation for the further study.

**Key words:** high-order scheme; thermo-chemical nonequilibrium flow; numerical simulation

高温条件下的热化学非平衡现象是高超声速流场的重要特征之一,这方面的数值研究始于20世纪六七十年代。经过半个多世纪的发展,各方面都得到了较为成熟并被普遍接受的理论方法。解算器方面,国内外也发展出了较为完善、功能全面的解算器,如NASA Langley中心发展的兰利气动热力学迎风松弛算法(Langley Aerothermodynamic Upwind Relaxation Algorithm, LAURA)程序<sup>[1]</sup>, Gaitonde等发展的通用气动热力学模拟程序(General Aerothermodynamic Simulation Program, GASP)<sup>[2-3]</sup>等。不过目前高超声速热化学非平衡流模拟所采用的数值算法以2阶格式为主,这对外形较为简单的流场模拟和流动机理研究,尚可以达到精度需求。而21世纪发展的新型高超声速飞行器,外形相对复杂,飞行器流场中激波/边界层、激

波/激波相互作用等流动现象普遍存在。此时不仅存在宏观流动和微观物理化学过程的紧密耦合,还存在复杂的流动相互作用,多种效应并存且彼此制约,互相影响。激波位置、形状和强度,边界层厚度和形状都直接影响到相互作用的性质和强度,影响到流动分离的特征和分离区大小,这些又都进一步影响到流场各点的热化学状态。为深入理解存在复杂波系和相互作用的非平衡流动的内在机理,准确预测这类情况下飞行器气动力、气动热和气动物理特性,要求非平衡流的数值模拟具有更高的精度和效率。

高阶格式因其兼具高空间分辨率和计算效率的特点而在精细流动结构的模拟中具有独特优势<sup>[4]</sup>,将其应用于包含复杂流场结构的热化学非平衡流的数值模拟很有意义。近期国外应用高阶

\* 收稿日期:2016-03-21

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11572348);国防科技大学重大应用基础研究资助项目(ZDYYJCYJ20140101)

作者简介:葛明明(1991—),男,江苏南通人,博士研究生,E-mail:owen2024@sina.cn;

曾明(通信作者),女,副教授,博士,硕士生导师,E-mail:ming\_z@163.com

格式模拟化学反应流的工作主要是采用 Shu<sup>[5]</sup> 的加权本质无振荡 (Weighted Essentially Non Oscillatory, WENO) 格式。Wang<sup>[6]</sup> 发展了一个基于 5 阶 WENO 格式的高速化学非平衡流动求解器,通过对圆柱非平衡流的模拟及与 2 阶总变差减小 (Total Variation Diminishing, TVD) 格式结果的对比如验证了 WENO 求解高超声速化学非平衡流动的可行性。Lani<sup>[7]</sup> 将 5 阶、7 阶、9 阶的 WENO 格式应用于非定常三维可压缩流求解器 ADPDIS 3D,进行了高超声速热化学非平衡湍流数值模拟。Prakash<sup>[8]</sup> 采用一种空间 5 阶、时间 3 阶精度的激波装配法进行化学非平衡流计算,流场捕捉到了不同频率的扰动波叠加效果,结论指出足够高的精度对捕捉扰动的必要性。

加权紧致非线性格式<sup>[9-11]</sup> (Weighted Compact Nonlinear Scheme, WCNS) 是邓小刚等在 20 世纪 90 年代提出的具有激波捕捉能力的高精度有限差分格式,已成功应用于低速、超声速和高超声速(量热完全气体)流场的数值模拟,在大量复杂流动问题中展示出优良性能<sup>[12-13]</sup>。国外学者 Nonomura<sup>[14]</sup> 指出,采用对称守恒网格导数算法 (Symmetrical Conservative Metric Method, SCMM) 的 WCNS 能满足几何守恒,因而在复杂网格问题中更具优势;Matsukawa<sup>[15]</sup> 评价:WCNS 既具有高的精度,又具有激波捕捉能力,形式简便,计算耗费也较少。

将显式 5 阶加权紧致非线性格式 (WCNS-E-5) 引入高超声速热化学非平衡流的数值求解,探讨高阶格式在非平衡流中应用的数值困难并采取相应措施,编制采用 WCNS-E-5 的二维热化学非平衡流计算程序。通过圆柱非平衡流场的模拟初步考察程序的有效性,并研究高阶和 2 阶格式在网格收敛性上表现的差异。为进一步采用高阶格式开展具有复杂流场结构的热化学非平衡流动数值研究奠定基础。

### 1 热化学模型与控制方程

对高温空气考虑 7 组元 (O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, N, O, NO, NO<sup>+</sup>, e<sup>-</sup>)。化学反应模型采用 Gupta 的 7 组元 6 反应模型<sup>[16]</sup>,采用 Park 的双温度模型<sup>[17]</sup> 实现化学与热力学非平衡的耦合。化学反应方程、振动松弛模型及化学反应源项和振动松弛源项的计算方法详见文献 [18-19]。

采用时间相关的二维热化学非平衡纳维斯托克斯 (Navier-Stokes, NS) 方程,求解流场的定常解。计算坐标系下的无量纲控制方程为:

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \eta} = \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial \tilde{F}_v}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{G}_v}{\partial \eta} \right) + \tilde{W} \quad (1)$$

其中: $\tilde{Q}$  为守恒变量; $\tilde{F}, \tilde{G}$  为对流通量; $\tilde{F}_v, \tilde{G}_v$  为黏性通量; $\tilde{W}$  为化学反应源项。

$$\tilde{Q} = \frac{1}{J} [\rho_i, \rho u, \rho v, E, \rho e_v]^T \quad (2)$$

式中, $\rho_i$  和  $\rho$  分别代表组元  $i$  和混合气体的密度, $E$  为单位体积总能, $e_v$  为单位质量振动能, $J$  为坐标变换雅可比行列式。

$$\tilde{F} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho_i \tilde{u} \\ \rho u \tilde{u} + p \xi_x \\ \rho v \tilde{u} + p \xi_y \\ (E+p) \tilde{u} \\ \rho e_v \tilde{u} \end{bmatrix}, \quad \tilde{G} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho_i \tilde{v} \\ \rho u \tilde{v} + p \eta_x \\ \rho v \tilde{v} + p \eta_y \\ (E+p) \tilde{v} \\ \rho e_v \tilde{v} \end{bmatrix} \quad (3)$$

$$\tilde{F}_v = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \frac{Le_i k}{Pr C_p} \frac{\partial C_i}{\partial x} \xi_x + \frac{Le_i k}{Pr C_p} \frac{\partial C_i}{\partial y} \xi_y \\ \tau_{xx} \xi_x + \tau_{xy} \xi_y \\ \tau_{xy} \xi_x + \tau_{yy} \xi_y \\ b_x \xi_x + b_y \xi_y \\ q_{xv} \xi_x + q_{yv} \xi_y \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\tilde{G}_v = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \frac{Le_i k}{Pr C_p} \frac{\partial C_i}{\partial x} \eta_x + \frac{Le_i k}{Pr C_p} \frac{\partial C_i}{\partial y} \eta_y \\ \tau_{xx} \eta_x + \tau_{xy} \eta_y \\ \tau_{xy} \eta_x + \tau_{yy} \eta_y \\ b_x \eta_x + b_y \eta_y \\ q_{xv} \eta_x + q_{yv} \eta_y \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$\tilde{W} = \frac{1}{J} [\dot{\omega}_i, 0, 0, S_v]^T \quad (6)$$

式中: $\tilde{u}, \tilde{v}$  为逆变速度; $C_i$  为组元质量分数; $Le_i$  为刘易斯数; $k, k_v, Pr, C_p$  分别为混合气体的平动/转动热传导系数、振动热传导系数、普朗特数和定压比热; $\dot{\omega}_i$  为组元  $i$  单位时间单位体积内的生成率; $S_v$  为单位时间单位体积中生成的振动能。 $\tilde{F}_v$  和  $\tilde{G}_v$  中的  $b_x, q_x, q_{xv}$  分别为:

$$b_x = u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + q_x \quad (7)$$

$$q_x = \frac{1}{Pr} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} + k_v \frac{\partial T_v}{\partial x} \right) + \sum_{i=1}^{ns} h_i \frac{Le_i k}{Pr C_p} \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (8)$$

$$q_{xv} = \frac{1}{Pr k_v} \frac{\partial T_v}{\partial x} + \sum_{s=1}^{nm} e_{v,s} \frac{Le_s k}{Pr C_p} \frac{\partial C_s}{\partial x} \quad (9)$$

式中, $ns$  为组元个数, $nm$  为分子组元个数。 $b_y, q_y, q_{yv}$  的表达式类似。

### 2 数值方法

#### 2.1 时间格式

控制方程的时间离散格式采用 Shu<sup>[20]</sup> 提出

的三阶精度具有 TVD 性质的 Runge-Kutta 方法。

$$\begin{cases} \tilde{Q}^{(1)} = \tilde{Q}^{(n)} + \Delta t RHS(U^{(n)}) \\ \tilde{Q}^{(2)} = \frac{3}{4}\tilde{Q}^{(n)} + \frac{1}{4}\tilde{Q}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t RHS(U^{(1)}) \\ \tilde{Q}^{(3)} = \frac{1}{3}\tilde{Q}^{(n)} + \frac{2}{3}\tilde{Q}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t RHS(U^{(2)}) \\ \tilde{Q}^{n+1} = \tilde{Q}^{(3)} \end{cases} \quad (10)$$

式中,  $U$  代表原始量,  $RHS(U)$  为控制方程右端项, 则:

$$RHS(U) = -\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} - \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \eta} + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial \tilde{F}_v}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{G}_v}{\partial \eta} \right) + \tilde{W} \quad (11)$$

## 2.2 对流量

根据 WCNS-E-5 对无粘通量项进行空间离散, 通量导数的计算采用六阶精度的中心差分格式。

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} \right)_i &= \frac{75}{64\Delta\xi} (\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}) - \\ &\quad \frac{25}{384\Delta\xi} (\tilde{F}_{i+3/2} - \tilde{F}_{i-3/2}) + \\ &\quad \frac{3}{640\Delta\xi} (\tilde{F}_{i+5/2} - \tilde{F}_{i-5/2}) \end{aligned} \quad (12)$$

式中  $\tilde{F}_{i\pm 1/2}$  代表在单元边界处的无粘通量。边界的差分格式以左侧为例, 1, 2 点分别采用 3 阶偏心差分和 4 阶中心差分:

$$\begin{cases} \left( \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} \right)_1 = \frac{-23\tilde{F}_{1/2} + 21\tilde{F}_{3/2} + 3\tilde{F}_{5/2} - \tilde{F}_{7/2}}{24\Delta\xi} \\ \left( \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} \right)_2 = \frac{\tilde{F}_{1/2} - 27\tilde{F}_{3/2} + 27\tilde{F}_{5/2} - \tilde{F}_{7/2}}{24\Delta\xi} \end{cases} \quad (13)$$

根据左右原始量得到通量:

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \tilde{F}(U_{i+1/2,L}, U_{i+1/2,R}) \quad (14)$$

本文尝试了多种通量格式。AUSMPW + 通量格式因其较高的计算效率与在间断和边界层内良好的分辨率被广泛运用, 对于非平衡流场热流的模拟表现较好<sup>[21]</sup>。但在计算实践中发现, 在含有强激波的算例中, WCNS-E-5 与 AUSMPW + 通量格式的组合可能导致激波附近流场出现振荡, 甚至会使计算发散。这可能是因为高分辨率格式捕捉激波时耗散不够, 引起了数值计算不稳定。而 Shu 研究<sup>[22]</sup>指出, 随着格式精度的提高, 通量格式差别对于计算结果的影响逐渐减小。故本文最后选用了耗散较大的 Steger-Warming 格式。

左右原始量利用 5 阶加权非线性插值得到。这里以左值为代表给出具体插值方法, 右值类似。

$$U_{i+1/2,L}^\omega = \sum_{k=1}^3 \omega_{Lk} U_{i+1/2,L}^k \quad (15)$$

其中

$$U_{i+1/2,L}^k = U_i + \frac{h}{2} f_{i,L}^k + \frac{h^2}{8} s_{i,L}^k \quad (16)$$

式中的  $f_{i,L}^k$  和  $s_{i,L}^k$  为区间  $[x_{i-3+k}, x_{i-2+k}, x_{i-1+k}]$  的插值模板得到的  $i$  点的 1 阶和 2 阶导数近似值。根据文献<sup>[10]</sup>, 对于非线性加权格式, 模板  $k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) 的权重系数为:

$$\omega_{Lk} = \frac{\beta_{Lk}}{\sum_{m=1}^3 \beta_{Lm}} \quad (17)$$

其中

$$\beta_{Lk} = \frac{C_{Lk}}{(\varepsilon + IS_k)^2} \quad (18)$$

式中,  $C_{Lk}$  为最优权重系数,  $IS_k$  代表模板  $k$  的光滑度量函数,  $\varepsilon$  为小量, 一般取  $10^{-6}$ 。

一般情况下, 这种非线性加权方法能够很好地捕捉激波, 并在光滑区域恢复精度。但在热化学非平衡流动中, 激波附近微量组元的质量分数级可能在  $10^{-10}$  以下, 如果  $\varepsilon$  仍然取  $10^{-6}$ , 则光滑度量函数失效, 可能导致微量组元密度在激波附近剧烈振荡。因此需要减小  $\varepsilon$  的取值。但有学者<sup>[23]</sup>针对 WENO 研究指出,  $\varepsilon$  取值过小也会降低光滑区域求解精度。因此, 本文采用

$$\varepsilon = \max[10^{-26}, 10^{-6} \times \min(IS_1, IS_2, IS_3)] \quad (19)$$

这样针对间断处不同物理量的量级设定  $\varepsilon$ , 避免在间断区间影响光滑度量函数的效果, 又不至于在光滑区域过小而影响求解精度。

## 2.3 黏性通量

黏性项的差分格式与对流项的处理一致, 采用 6 阶中心差分。半节点的通量可以用 6 阶中心插值得到的原始量计算。

$$\tilde{F}_v = \tilde{F}_v(U_{i+1/2}) \quad (20)$$

式中

$$\begin{aligned} U_{i+1/2} &= \frac{150}{256} (U_i + U_{i+1}) - \\ &\quad \frac{25}{256} (U_{i-1} + U_{i+2}) + \frac{3}{256} (U_{i-2} + U_{i+3}) \end{aligned} \quad (21)$$

在非平衡流动中, 跨过激波后的化学反应使部分组元质量分数发生量级变化, 此时高阶线性插值会在激波附近产生非物理振荡, 甚至插值出

负值,导致计算失败。文献[13]提出了一种应用于完全气体条件下的非线性插值格式,它利用3个线性模板,通过构造合理的权重,来消除间断导致的振荡,并且在光滑区域理论上可达到6阶精度。本文则采用了类似2.2节中给出的对流项插值的方法,首先得到半节点的左右值,对二者取平均得到半节点的原始量,进而计算出黏性通量。算例计算实践中发现,对于非平衡流动,本文做法的鲁棒性更强。

### 3 算例与结果分析

根据上述数值方法编制了应用WCNS-E-5的二维热化学非平衡流计算程序,开展了高焓条件下的圆柱非平衡流场数值模拟,通过与实验和文献计算结果的比较,初步考察程序的有效性。

这里给出三个代表性算例。算例1为德国航空宇航中心(Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt, DLR)进行的高焓风洞(High Enthalpy shock tunnel Göttingen, HEG)圆柱绕流实验<sup>[24]</sup>,重点对比分析实验测得的和本文计算得到的壁面压力、热流分布结果。算例2为中科院力学所高焓风洞自由流条件<sup>[18]</sup>下的圆柱绕流,主要比较2阶(采用MUSCL格式,记作MUSCL2)和高阶格式的计算结果及二者关于驻点热流的网格收敛性。算例3采用与算例2自由流总焓相同的高空自由流条件,与算例1、算例2(均为高焓风洞非平衡自由流条件)不同的是,算例3的自由流中仅含N<sub>2</sub>和O<sub>2</sub>组元,跨过激波后的化学反应引起原子和离子组元的质量分数发生很大的量级变化。这对应用高阶格式计算程序的鲁棒性提出了更高要求。

#### 3.1 算例条件与计算网格

三个算例的来流参数见表1。

对于算例1,文献[25]采用了5组元(不含NO<sup>+</sup>和e<sup>-</sup>)的高温空气模型,本文将自由流的NO<sup>+</sup>质量分数设定为10<sup>-20</sup>。算例3为高空自由流条件,只含有N<sub>2</sub>和O<sub>2</sub>组元,本文将其他组元的质量分数人为设定为10<sup>-10</sup>。

算例1的圆柱半径为45 mm,算例2和算例3的均为35 mm。计算域的外边界在驻点区离开壁面0.5个半径长度。计算网格量为121×121或121×61,在壁面附近采用指数拉伸的方法加密,采用了多个不同的网格拉伸因子生成多套网格(对应壁面处网格雷诺数在1~1000范围内),以验证计算结果的网格收敛性。壁面网格雷诺数

$Re_{\Delta\eta}$ 采用式(22)计算:

$$Re_{\Delta\eta} = \frac{\rho_w V_{s,w} (\Delta\eta_1 R_n)}{\mu_w} \quad (22)$$

式中: $\Delta\eta_1$ 为驻点无量纲法向第一层网格高度; $R_n$ 为圆柱半径; $\rho_w, V_{s,w}, \mu_w$ 分别为壁面处混合气体密度、声速以及黏性系数。下面对三个算例分别给出 $Re_{\Delta\eta} = 8, 10, 8$ 的121×121网格对应的计算结果。对于算例2,还以驻点热流为代表,详细考察了计算结果的网格收敛性。

表1 来流参数

Tab. 1 Parameters of freestream

算例	1	2	3
速度/(m/s)	5659	4990	5530
密度/(kg/m <sup>3</sup> )	$1.57 \times 10^{-3}$	$6.73 \times 10^{-4}$	$6.73 \times 10^{-4}$
平动温度/K	901	436	436
振动温度/K	901	3210	436
壁温/K	300	300	300
组元质量分数			
O <sub>2</sub>	0.223 8	0.146	$1.0 \times 10^{-10}$
NO	0.007 13	0.065	0.235
N	0.010 26	0.044	$1.0 \times 10^{-10}$
N <sub>2</sub>	$6.5 \times 10^{-7}$	$8.4 \times 10^{-9}$	$1.0 \times 10^{-10}$
NO <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{-20}$	$5.4 \times 10^{-7}$	$1.0 \times 10^{-10}$
N <sub>2</sub>	0.754 3	0.744	0.765

计算中除5阶的WCNS-E-5外,还采用了2阶的MUSCL格式,对比分析二者结果。通量格式为Steger-Warming格式,熵修正系数取0.05, MUSCL2格式中采用minmod限制器。三个算例均设为等壁温(300 K)、全催化壁条件。

#### 3.2 算例1

将本文计算结果分别与文献[24]实验测量结果及文献[25]计算进行对比,文献[25]是应用GASP程序<sup>[2]</sup>,采用2阶的MUSCL格式,通量格式为AUSMPW+格式,使用minmod限制器,网格量为161×151。从表面压力分布看,本文结果、文献[25]的数值结果均与实验<sup>[24]</sup>测量值吻合很好。从表面热流分布(如图1所示)看,本文的WCNS-E-5与2阶MUSCL格式结果基本一致,较文献[25]的数值结果更加接近实验<sup>[24]</sup>值。另外,本文的5阶和2阶格式热流结果在驻点区存在一定差异,2阶格式得到的热流分布曲线的光滑性不如5阶格式。

#### 3.3 算例2

图2分别给出了本文采用2阶和5阶格式得到的流场压力、温度和O, NO<sup>+</sup>组元质量分数分

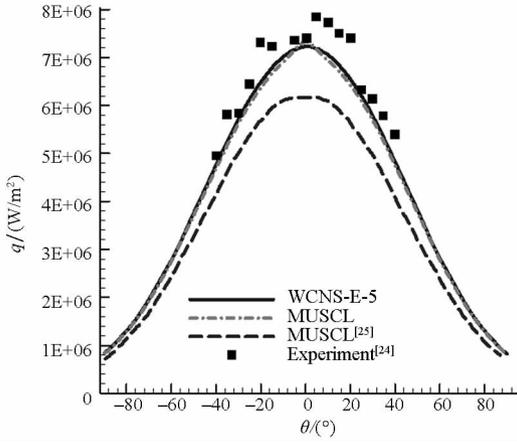


图1 算例1壁面热流分布

Fig. 1 Surface heat flux distribution for case 1

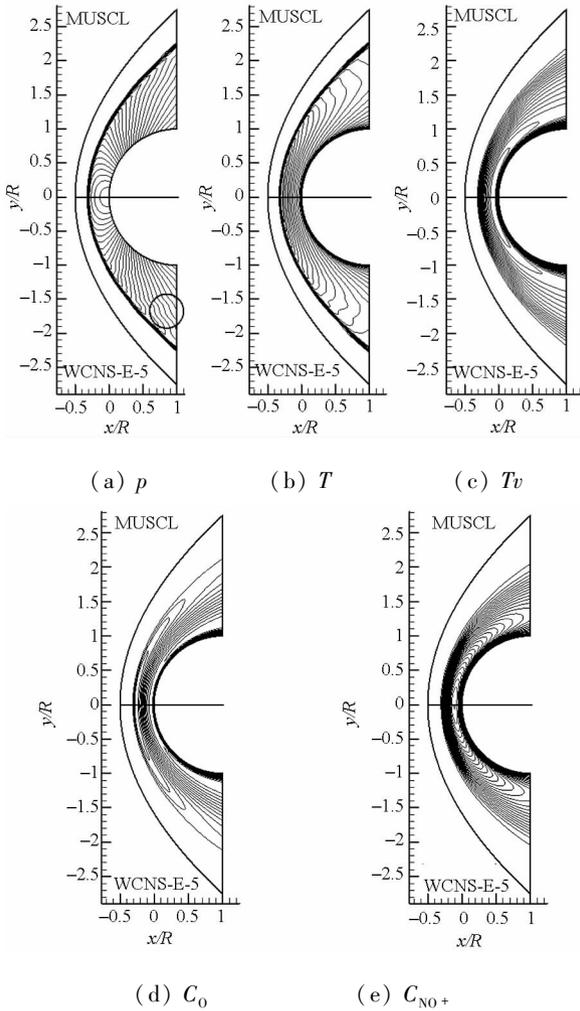


图2 算例2流场参数分布

Fig. 2 Flow field parameters distribution for case 2

布,图中上半部分为2阶格式结果,下半部分为5阶格式结果。在此算例条件下,两种格式的结果基本一致。注意到5阶格式得到的流场压力等值线在图中标出的位置存在抖动,这一现象在文献[26]的量热完全气体流场结果中也存在,是由于激波与网格走向不一致造成的,文献[26]通过

优化网格来消除。

2阶和5阶格式得到的驻点线上组元质量分数分布总体吻合,只有  $C_{NO+}$  在激波附近和过激波后的峰值存在微小差别,如图3所示。

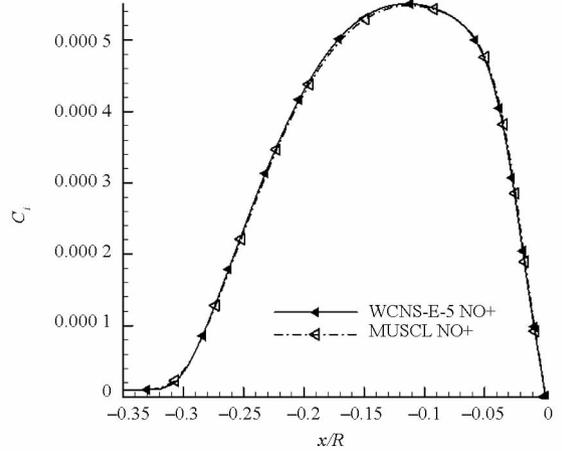


图3 算例2驻点线上组元 NO+ 质量分数分布

Fig. 3  $NO^+$  mass fraction distribution along the stagnation line for case 2

下面对比分析5阶WCNS-E-5和2阶MUSCL格式在热流计算的网格收敛性上的表现。图4给出了二者得到的驻点热流随  $Re_{\Delta\eta}$  的变化曲线。在5%的误差范围内,5阶格式在  $Re_{\Delta\eta}$  达到300左右基本收敛,而2阶格式则要求  $Re_{\Delta\eta}$  低至60。

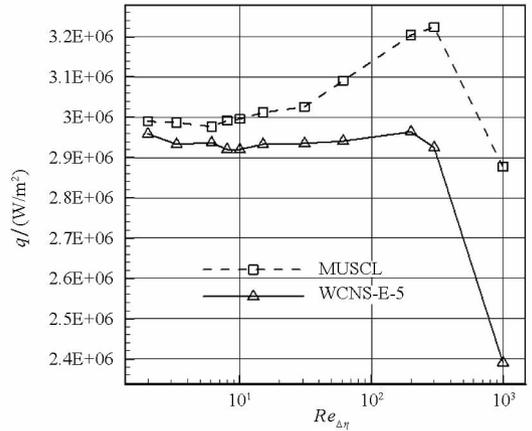


图4 算例2驻点热流网格收敛性曲线

Fig. 4 Grid convergence curve of the heat flux at stagnation point for case 2

可见同样精度要求下高阶格式对网格密度要求明显降低,因此可提高计算效率。图5给出了5阶格式采用  $121 \times 61$  (网格雷诺数  $Re_{\Delta\eta} = 90$ ),  $121 \times 61$  ( $Re_{\Delta\eta} = 60$ ) 和2阶格式采用  $121 \times 121$  ( $Re_{\Delta\eta} = 30$ ) 网格的残差收敛曲线。5阶格式可比2阶格式减少网格量,从而减少每个时间步的计算时间;壁面附近网格也可更疏,这样能显著加大每个时间步推进的  $\Delta t$ ,因此得到定常结果需要的

时间推进步数大大减少。虽然网格量相同时 5 阶格式的单步计算时间比 2 阶格式长(该算例条件下高 22%),但残差达到  $10^{-12}$  量级时 5 阶格式采用  $Re_{\Delta\eta} = 90$  网格的总计算时间仅为 2 阶格式采用  $Re_{\Delta\eta} = 30$  网格的 22.5%。

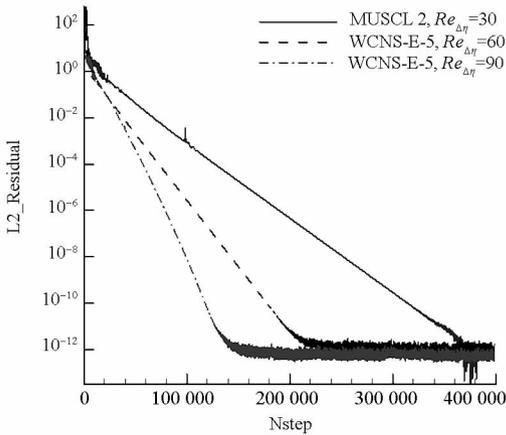


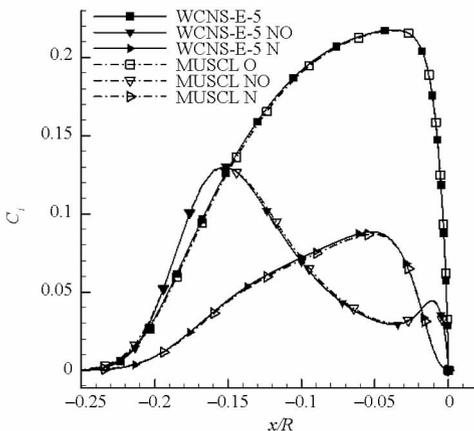
图 5 算例 2 密度残差收敛曲线

Fig. 5 Convergence histories of density residuals for case 2

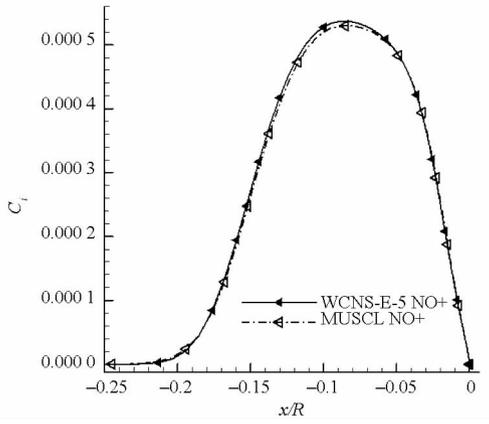
### 3.4 算例 3

与算例 2 类似,5 阶和 2 阶格式得到的压力和温度分布没有差异。图 6 给出了两种格式得到的驻点线组元质量分数分布。与算例 2 不同的是,两种格式得到的微量组元分布在激波附近有细小差别,峰值也略有不同。这是因为高空来流条件下微量组元跨过激波变化更大,而高阶格式在同样网格下对梯度的分辨精度更高,能够更好地捕捉梯度。以图 6(b) 给出的  $C_{NO+}$  分布为例,5 阶格式曲线上升的起始位置略滞后于 2 阶格式,而峰值则比 2 阶格式稍高。其实两种格式结果差异的这个特点在其他参数分布上也有体现,但由于相对差值很小,表现不明显。

5 阶和 2 阶格式在热流计算的网格收敛性上表现与算例 2 类似。采用  $Re_{\Delta\eta}$  等于 320,160,80,



(a)  $C_0, C_N, C_{NO}$



(b)  $C_{NO+}$

图 6 算例 3 驻点线组元质量分数分布

Fig. 6 Species mass fraction distribution along the stagnation line for case 3

40,20,8 的  $121 \times 121$  网格的计算结果表明,5 阶格式在  $Re_{\Delta\eta}$  低于 160 后驻点热流结果的变化就在 2% 以内,而 2 阶格式需要  $Re_{\Delta\eta}$  低至 40。

## 4 结论

将显式五阶加权紧致非线性格式 WCNS-E-5 引入非平衡流的数值求解,针对高阶格式在化学反应流应用中的鲁棒性问题采取措施,编制了采用 WCNS-E-5 格式的二维热化学非平衡流计算程序,开展了高焓条件下的圆柱流场模拟。得到以下结论:

1) 关于非线性加权插值方法的改进(即针对间断处不同物理量的量级设定权重系数计算中的小量),确保了微量化学组元在间断区的光滑度量函数效果;黏性项插值计算中借鉴对流项非线性插值方法,解决了激波附近组元质量分数量级变化引起的插值振荡问题。

2) 在高焓风洞条件下的圆柱绕流计算中,5 阶 WCNS-E-5 格式结果优于 2 阶的 MUSCL 格式。HEG 风洞算例中本文结果比文献计算结果更接近实验值,5 阶格式得到的热流分布曲线比 2 阶格式光滑。根据驻点热流考察的网格收敛性,5 阶格式也明显优于 2 阶格式。

3) 高空自由流条件下,跨过激波后的化学反应使来流中微量组元质量分数发生量级变化。算例结果表明,5 阶格式对组元梯度的捕捉比 2 阶格式精细,在热流计算的网格收敛性上也有明显优势。

4) 在同样精度要求下,采用 5 阶格式可比 2 阶格式减少网格量,并且显著放宽对壁面附近网格密度的要求,从而可加大每个时间步推进的

$\Delta t$ 。虽然同样网格量时5阶格式单步计算时间更长,但得到定常结果需要的总计算时间减少。在本文算例2中可降至2阶格式的1/4。

5) 未来还需在多方面努力,包括较宽范围速度高度条件下流场激波附近网格的调试,组元连续方程和振动能方程的特殊处理,进一步将高阶格式应用于存在复杂干扰现象的热化学非平衡流数值模拟,发挥高阶格式在捕捉精细流场结构方面的优势。

## 参考文献 (References)

- [1] Cheatwood F M, Gnoffo P A. User's manual for the langley aerothermodynamic upwind relaxation algorithm (LAURA) [R]. NASA TM-4674, 1996.
- [2] Knight D, Longo L, Drikakis D, et al. Assessment of CFD capability for prediction of hypersonic shock in interactions [J]. Progress in Aerospace Sciences, 2012, S48/49(2): 8-26.
- [3] Olynick D, Tam T. Trajectory based validation of the shuttle heating environment [C]//Proceedings of 31st Thermophysics Conference, AIAA 96-1891, 1996.
- [4] Wang Z J, Fidkowski K, Abgrall R, et al. High-order CFD methods: current status and perspective [J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2013, 72(8): 811-845.
- [5] Jiang G S, Shu C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 126(1): 202-228.
- [6] Wang X W, Zhong X L. Nonequilibrium and reactive high-speed flow simulations with a fifth-order WENO scheme [C]//Proceedings of 39th AIAA Fluid Dynamics Conference, AIAA 2009-4041, 2009.
- [7] Lani A, Sjogreen B, Yee H C, et al. High-order simulation of hypersonic nonequilibrium flows on overset grids [M]//Center for Turbulence Research Annual Research Briefs, 2010.
- [8] Prakash A, Parsons N, Wang X, et al. High-order shock-fitting methods for direct numerical simulation of hypersonic flow with chemical and thermal nonequilibrium [J]. Journal of Computational Physics, 2011, 230(23): 8474-8507.
- [9] Deng X, Maekawa H. Compact high-order accurate nonlinear schemes [J]. Journal of Computational Physics, 1997, 130(1): 77-91.
- [10] Deng X G, Mao M L. Weighted compact high-order nonlinear schemes for the Euler equations [C]//Proceedings of 13th Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA 97-1941, 1997.
- [11] Deng X G, Zhang H X. Developing high-order weighted compact nonlinear schemes [J]. Journal of Computational Physics, 2000, 165(1): 22-44.
- [12] Deng X G, Wang G X, Tu G H, et al. Applications of high-order weighted compact nonlinear scheme for complex transonic flows [C]//Proceedings of 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace, AIAA 2011-364, 2011.
- [13] Liu H Y, Deng X G, Mao M L, et al. High order nonlinear schemes for viscous terms and the application to complex conformation problems [C]//Proceedings of 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace, AIAA 2011-369, 2011.
- [14] Nonomura T, Iizuka N, Fujii K. Free-stream and vortex preservation properties of high-order WENO and WCNS on curvilinear grids [J]. Computers and Fluids, 2010, 39(2): 197-214.
- [15] Matsukawa Y. Implicit large eddy simulation of a supersonic flat-plate boundary layer flow by weighted compact nonlinear scheme [J]. International Journal of Computational Fluid Dynamics, 2011, 25(2): 47-57.
- [16] Gupta R N, Yos J M, Thompson R A. Review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K [R]. NASA RP-1232, 1990.
- [17] Park C. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles [C]//Proceedings of 19th Thermophysics Conference, AIAA 1984-1730, 1984.
- [18] 曾明. 高焓风洞流场测量的数值重建和非平衡效应的数值分析[D]. 北京:中国科学院力学研究所, 2007.  
ZENG Ming. Numerical rebuilding of free-stream measurement and analysis of nonequilibrium effects in high-enthalpy tunnel [D]. Beijing: Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 2007. (in Chinese)
- [19] Zeng M, Xu D, Liu J. Novel method to calculate vibrational thermal conduction in hypersonic nonequilibrium flow [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2016, 30(1): 12-24.
- [20] Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes [J]. Journal of Computational Physics, 1988, 77(2): 493-471.
- [21] 柳军. 热化学非平衡流及其辐射现象的实验和数值计算研究[D]. 长沙:国防科学技术大学, 2004.  
LIU Jun. Experimental and numerical research on thermochemical nonequilibrium flow with radiation phenomenon [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2004. (in Chinese)
- [22] Shu C W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws [R]. NASA/CR-97-206253, 1997: 19-26
- [23] 侯中喜. 超声速复杂流场并行数值分析及高阶格式研究[D]. 长沙:国防科学技术大学, 2000.  
HOU Zhongxi. Parallel numerical analysis of hypersonic complex flow and research of high-order schemes [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2000. (in Chinese)
- [24] Karl S, Martinez-Schramm J, Hannemann K. High enthalpy cylinder flow in HEG: a basis for CFD validation [C]//Proceedings of 33rd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, AIAA 2003-4252, 2003.
- [25] Knight D, Longo J, Drikakis D, et al. Assessment of CFD capability for prediction of hypersonic shock interactions [J]. Progress in Aerospace Sciences, 2012, 48/49: 8-26.
- [26] 董义道. WCNS 高阶格式在典型流动状态下的应用研究[D]. 长沙:国防科学技术大学, 2014.  
DONG Yidao. Application research of weighted compact high-order nonlinear schemes in some typical flow conditions [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2014. (in Chinese)