

基于 WENO 格式的爆震波传播过程一维数值模拟

陈 灯, 何立明, 闫 莉, 罗 俊

(空军工程大学 工程学院, 陕西 西安 710038)

摘 要:用时间算子分裂法来分离普通流体流动和化学反应方程,采用有限体积加权基本无振荡格式构建了带有复杂状态方程的欧拉方程组;提出一种新的熵修正方法 EF4,并结合 Roe 平均格式来解决激波的不稳定问题和间断问题。通过对带有详细化学反应的爆震波传播过程进行了一维数值模拟,获得的爆震波稳定压力以及爆震波传播速度都和理论结果一致,结果表明, WENO 有限体积格式可以很好地模拟爆震波传播过程。

关键词:时间算子分裂法;加权基本无振荡格式;有限体积;爆震波;激波

中图分类号: V231.2⁺2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1009-3516(2008)02-0018-04

爆震燃烧是一种非稳态燃烧波以超音速在可燃预混气体中传播时产生的燃烧现象。爆震波本质上是激波后面跟着一个爆燃波^[1]。Chapman 和 Jouguet 分别独立地对爆震波提出了一个简单的理论,即 C-J 理论。C-J 理论问世半个世纪后,Zeldovich, von Neumann, Doring 分别独立提出爆震波结构模型,即所谓的 ZND 模型。随着高性能计算机的出现,使得使用高精度格式对爆震波结构进行数值模拟成为可能。北京大学的王健平和刘云峰^[2]以及西工大的王丁喜^[3]就成功的运用高精度格式对爆震波进行了数值模拟,取得了很好的结果。ENO(Essentially Non-oscillatory)格式最早是由 A. Harten 和 S. osher 在 Godunov 型格式的基础上提出来的,后来 C. W. Shu 对其进行了改进,采用 TVD Runge-Kutta 法时间离散代替小时间间隔内的求解,从而使格式的应用更加方便。加权基本无振荡格式(WENO)^[4-7]是 ENO 格式的继承,可以对控制方程进行空间插值。WENO 格式的主要目的不是在候选的插值模板中选取最光滑的插值模板来构造插值多项式,而是将所有的候选插值模板利用起来,通过加权系数 Weight 进行组合来构造插值多项式。因为最终的插值多项式中可能包含有的候选插值节点,所以 WENO 格式在 ENO 格式的基础上进一步提高了计算精度。本文将构造 WENO 有限体积格式对爆震波进行数值模拟。

1 计算方法

1.1 控制方程

爆震传播控制方程为一组带有多种热力学理想气体反应源项的欧拉方程。在 d 维笛卡尔坐标系里,这些方程组写成一个守恒方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q}(x, t) + \sum_{n=1}^d \frac{\partial}{\partial x_n} f_n(\mathbf{q}(x, t)) = s(\mathbf{q}(x, t)), \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^T \in R^d, t \in R_0^+ \quad (1)$$

令 $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x, t) \in S \subset R^M$ 表示守恒量的向量。函数 $f_n(\mathbf{q}) \in C^1(S, R^M), n = 1, 2, \dots, d$ 是流体流量, $s(\mathbf{q}) \in C^1(S, R^M)$ 是源项。对于带有 K 种成分的欧拉方程,选择下面的这种形式:

$$\mathbf{q}(x, t) = (\rho_1, \dots, \rho_k, \rho u_1, \dots, \rho u_d, \rho E)^T \quad (2)$$

第 i 个成分的密度用 ρ_i 表示, $i = 1, 2, \dots, K$ 。混合物总的密度是一种守恒量,用 $\rho = \sum_{i=1}^K \rho_i$ 表示,比率 $Y_i = \rho_i / \rho$

收稿日期:2007-07-10

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50276070)

作者简介:陈 灯(1979-),男,浙江余姚人,博士,主要从事航空宇航推进理论与工程研究;

E-mail: monkeychendeng@163.com

何立明(1959-),男,浙江上虞人,教授,博士生导师,主要从事航空动力研究。

称为质量分数,它们满足关系 $\sum_{i=1}^K Y_i = 1$ 。用 u_n 表示第 n 种成分的速度向量 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_d)^T$, 用 E 表示单位质量的总能量, 流量函数可以写成:

$$f_n(\mathbf{q}) = (\rho_1 u_n, \dots, \rho_K u_n, \rho u_1 u_n + \delta_{1n} p, \dots, \rho u_d u_n + \delta_{dn} p, u_n (\rho E + p))^T \quad (3)$$

式中, $n = 1, 2, \dots, d$ 。(p 为流体压力, δ_{jn} 表示 Kronecker - Symbol)。假设所有的成分都是满足热力学平衡的理想气体。在这种假设下, 温度 T 可以用来计算所有成分的分压力 $p_i = RT\rho_i/W_i$, R 表示通用的常量, W_i 是分子量。依据道尔顿定律, 总的压力可以表示为

$$p = \sum_{i=1}^K p_i = RT \sum_{i=1}^K \frac{\rho_i}{W_i} \quad (4)$$

本文通过 time - operator 分裂法把方程分离为普通流体流动和化学反应方程:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q}(x, t) + \sum_{n=1}^d \frac{\partial}{\partial x_n} f_n(\mathbf{q}(x, t)) = 0 \quad (5a) \quad \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q}(x, t) = s(\mathbf{q}(x, t)) \quad (5b)$$

对方程(5a) 采用 WENO 格式来求解; 而方程(5b) 将用 3 阶 TVD 格式的 Runge - Kutta 法进行时间离散, 化学反应采用 CHEMKIN II 库^[8] 进行求解。

1.2 WENO 有限体积格式方法

不失一般性, 考虑 $n = 2$ 的情况。记 $f = (f_1(\mathbf{q}), f_2(\mathbf{q}))$, $x = (x_1, x_2)$ 对式(5a) 在单元 Ω_l 上积分, 并由 Green 公式得

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Omega_l} \mathbf{q} dx \right) = - \sum_{k=1}^3 \int_{\Gamma_{lk}} f \cdot \mathbf{n}_k ds \quad (6)$$

式中: $\int_{\Gamma_{lk}}$ 表示 Ω_l 的第 k 条边, \mathbf{n}_k 为 Γ_{lk} 的单位外法向。

对式(6) 积分可以得到 $\int_{\Gamma_{lk}} f \cdot \mathbf{n}_k ds \approx \int_{\Gamma_{lk}} \sum_{i=1}^p \omega_i f(\mathbf{q}(G_i, t)) \cdot \mathbf{n}_k$, G_i 为 Gauss 点。设 R_{lq} 为单元 Ω_l 所构造的高阶插值多项式在 G_i 点处的值, R_{rq} 为与 Ω_l 共边的单元上高阶插值多项式在 G_i 点处的值, 这样得出离散后的有限体积格式为

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{q}^l = - \frac{1}{|\Omega_l|} \sum_{k=1}^3 |\Gamma_{lk}| \left(\sum_{i=1}^p \omega_i h(R_{lq}, R_{rq}) \right) \equiv L(\bar{q}^l) \quad (7)$$

$h(R_{lq}, R_{rq})$ 为黎曼问题的解, 在 WENO 格式中, 设定 $f_{1, i+\frac{1}{2}, j} = \sum_a \omega_a h(R_{lq, i+\frac{1}{2}, j}, R_{rq, i+\frac{1}{2}, j})$, $f_{2, i+\frac{1}{2}, j} = \sum_a \omega_a h(R_{lq, i+\frac{1}{2}, j}, R_{rq, i+\frac{1}{2}, j})$ 。

1.3 黎曼问题

在解决黎曼问题的时候, 为了避免激波不稳定问题, 通常采取熵修正的方法, 最通常的方法为

$$EF3: |\bar{\lambda}_m| = \begin{cases} |\lambda_m(\hat{q})|, & \text{if } |\lambda_m(\hat{q})| \geq 2\eta, \\ |\lambda_m(\hat{q})|^2 / 4\eta + \eta, & \end{cases} \quad (8)$$

本文提出用如下方法来解决:

$$EF4: |\bar{\lambda}_m| = \left\{ \begin{array}{l} |\lambda_m(\hat{q})|, \text{ if } |\lambda_m(\hat{q})| \geq 2\eta, \\ a^2 (|\lambda_m(\hat{q})|^2 / 4\eta + \eta) + (1 - a^2) |\lambda_m(\hat{q})| \end{array} \right\} \quad (9)$$

式中, $\eta = \eta(q_L, q_R) = \frac{1}{2} \max(|\lambda_m(q_L) - \lambda_m(q_R)|)$ 。

当 $a = 1$ 时, 就是上面的式(8), 当 $a = 0$ 时, 就相当于 Harten - Hyman 修正。本文在初始温度为 1 000 K, 初始压力为一个大气压, CFL = 0.85 的条件下, 模拟了在不同修正系数下一维爆震波稳定时的压力, 结果如图 1 所示。从图中可以很明显地看出当 $a = 0.5$ 时, 修正效果最好。在考虑爆震模拟的时候, 一般都是用欧拉方程, 没有考虑粘性, 通过熵修正方法, 更贴近于实际情况。

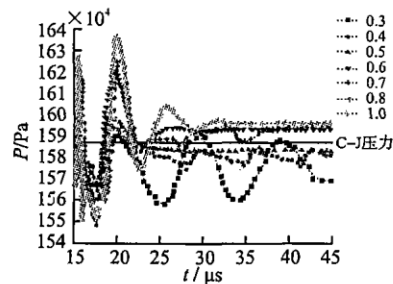


图 1 不同修正系数下的压力变化图

Fig. 1 The pressure at different correcting coefficient

本文用黎曼问题来验证 WENO 有限体积格式解无源项欧拉方程的有效性。黎曼初始值如表 1 所示。

计算区域长度 10 cm,左右两端都是出口边界;采用理想气体 O_2 ;采用均匀网格,网格精度为 0.5 mm;CCFL = 0.85;所有计算在 80 μs 停止。计算结果如图 2 所示。

结果显示,WENO 有限体积格式结合 EF4 可以很好地解决精度,激波不稳定以及值的间断问题。

表 1 黎曼问题初始值

x/cm	$x < 3$	$x > 3$
$\rho/(kg \cdot m^{-3})$	1.1	0.25
$u_1/(m \cdot s^{-1})$	270	170
p/Pa	110 000	25 000
YO_2	1.0	0
YH_2O	0	1.0

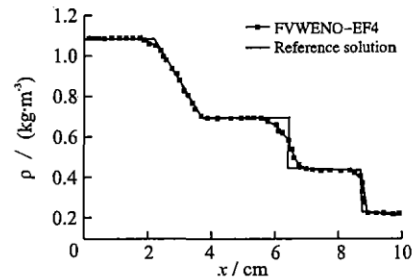


图 2 用 WENO 有限体积格式解决黎曼问题的密度分布图

Fig. 2 The density distribute of Riemann problem with finite volume WENO

2 一维模拟结果和分析

2.1 模型建立

流场的初始条件为:紧靠左端为 1 cm 的高温高压区域,温度和压力分别为 2 086 K 和一个大气压(高压是相对于其它部分压力而言);其余部分温度和压力分别为 298 K 和 6.67 kPa,这种方式叫做直接起爆。流场的边界条件为:计算区域的左端,上下两面都采用无粘绝热壁面,右端(开口端)出口,计算区域为 50 cm \times 30 cm,如图 3 所示。

2.2 结果与分析

下面在初始温度为 298 K,初始压力为 6.67 kPa 条件下,对 $H_2/O_2/Ar$ 混合物(摩尔比 2:1:7)一维的化学动力学过程进行求解,压力和温度随时间的变化情况如图 4 所示。

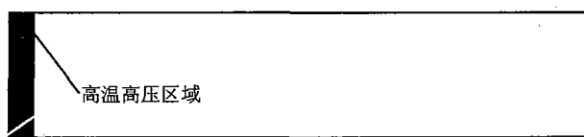


图 3 计算区域

Fig. 3 Compute domain

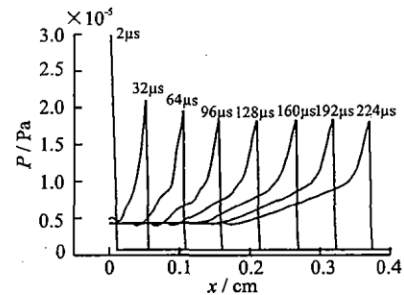


图 4 网格步长为 0.1 mm 时压力在 x 方向的变化情况

Fig. 4 Pressure value at x with 0.1mm step

图 4 给出了不同时刻爆震管内压力沿 x 方向的分布情况,描述了一个强爆震燃烧衰减到稳定自持爆震燃烧的过程。由图 4 可知,在 64 μs 之后,捕获的爆震波峰值基本稳定,其值为 1.80 个大气压左右;图中除了第一对相邻曲线之间时间间隔为 30 μs ,其它相邻曲线的时间间隔都相等,且等于 32 μs 。由图 4 可知,在 64 μs 之后,相邻曲线之间的距离变化很小,所以爆震波的传播速度在整个时间内变化也很小,平均爆震波传播速度为 1 627.4 m/s,与利用 CEA 计算得到的爆震燃烧波的传播速度 1 617 m/s^[8-10] 非常接近。此外,在计算中发现,网格步长越大,其计算所得到的爆震燃烧波的传播速度也大。对应于网格步长为 0.1 mm,0.15 mm,0.2 mm 和 0.4 mm,其相应的计算所得到的爆震燃烧波的传播速度分别为 1 621.8 m/s,1 627.2 m/s,1 635.6 m/s 和 1 640.8 m/s。

3 结论

本文构造的有限体积 WENO 格式很好的模拟了一维爆震波的传播过程,提出的 EF4 熵修正方法具有很

好的灵活性,在初始条件 $T = 298\text{K}$, $P = 6.67\text{kPa}$ 时,对于 $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}$ 混合物(摩尔比 2:1:7),最适合的修正系数为 $\alpha = 0.5$,结合 Roe 平均,可以很好地解决激波不稳定和间断问题,获得的爆震波速度和理论值接近,研究表明:有限体积 WENO 格式可以在一维空间中成功地对爆震波进行模拟,由于本文的控制方程是建立在 d 维笛卡尔坐标系下,所以结论同样适用于 d 维空间。

参考文献:

- [1] Strehlow R A. Gas Phase Detonations: Recent Developments[J]. *Combustion Flame*, 1969,12(2): 539 - 548.
- [2] 王丁喜,严传俊. 爆震燃烧波在管内传播过程的二维数值模拟[J]. *机械科学与技术*, 2006,4(4):460 - 464.
WANG Dingxi, YAN Chuanjun. 2D Numerical Simulation of the Transmission of Detonation Waves Inside a Tube [J]. *Mechanical Science and Technology*, 2006,4(4):460 - 464. (in Chinese)
- [3] 刘云峰,王健平. 有限谱 ENO 格式在爆轰波数值模拟中的应用[J]. *爆炸与冲击*, 2003,7(4):343 - 348.
LIU Yunfeng, Wang Jianping. Numerical Simulation of Detonation Wave with Finite Spectral ENO Scheme[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2003,7(4):343 - 348. (in Chinese)
- [4] Kim Hyungwon. Numerical Simulation of Transient Combustion Process in Pulse Detonation Engine[R]. AIAA, 2000.
- [5] Schwer D A. Numerical Study of Unsteadiness in Non - reacting and Reacting Mixing Layer[D]. The Pennsylvania State University, 2000.
- [6] Jiang C S, Shu C W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes [J]. *Comput Phys*, 1996,126:202 - 228.
- [7] Oran E S, Weber J W, Stefaniw E I, et al. A Numerical Study of a 2D $\text{H}_2 - \text{O}_2 - \text{Ar}$ Detonation Using a Detailed Chemical Reaction Model[J]. *Combustion and Flame*, 1998,113:147 - 163.
- [8] Deiterding R. Numerical Structure Analysis of Regular Hydrogen - Oxygen Detonations: The Fall 2003 Meeting of the Western States Section[C]. Los Angeles: The Combustion Institute, 2003.
- [9] 陈永刚,何立明,康 强,等. 基于特征线的脉冲爆震发动机性能估算与结构参数设计[J]. *空军工程大学学报:自然科学版*, 2005,6(3):1 - 4.
CHEN Yonggang, HE Liming, KANG Qiang, et al. Characteristic - Based Performance Calculation and Structural Parameters Design of Pulse Detonation Engine[J]. *Journal of Air Force University: Natural Edition*, 2005,6(3):1 - 4. (in Chinese)
- [10] 胡 杰,黄长强,和黎伟. 脉冲火箭弹模型仿真[J]. *空军工程大学学报:自然科学版*, 2007,8(2):26 - 29.
HU Jie, HUANG Changqiang, HE Liwei. A Simulation of the Theory of Rockets Using Impulse Correction[J]. *Journal of Air Force Engineering University: Natural Edition*, 2007,8(2):26 - 29. (in Chinese)

(编辑:田新华,徐楠楠)

One Dimensional Numerical Study of Detonation Wave with WENO Scheme

CHEN Deng, HE Li - ming, YAN Li, LUO Jun

(Engineering Institute, Air Force Engineering University, Xi'an 710038, China)

Abstract: Using time operator splitting technique and weighted essentially non - oscillatory (WENO) schemes to simulate detonation with detailed chemical reaction, a time operator splitting technique is employed to decouple hydro - dynamic transport and chemical reaction, and finite volume WENO scheme is constructed for the homogeneous Euler equations with complex equation of state. And a new entropy correction method EF4 is proposed to solve the problem of the shock instability in combination with Rose scheme. The obtained front pressure and velocity of detonation waves are in good agreement with the theoretic results, the results show that the WENO finite volume scheme can be used to simulate the transmitting process of the detonation wave perfectly.

Key words: time operator splitting; WENO scheme; finite volume; detonation wave; shock wave