文章编号:1001-246X(2010)04-0509-09

# 龙格库塔间断有限元方法在计算爆轰问题中的应用

张磊<sup>12</sup>, 袁礼<sup>1</sup>

(1. 中国科学院数学与系统科学研究院计算数学所,科学与工程计算国家重点实验室,北京 100190;2. 中国矿业大学(北京)理学院,北京 100083)

摘 要:构造求解带源项守恒律方程组的龙格库塔间断有限元 (RKDC) 方法,并分别结合源项的 Strang 分裂法 和无分裂法数值求解模型守恒律方程和反应欧拉方程.为了和有限体积型 WENO 方法进行比较,设计计算源项 的 WENO 重构格式.对一维带源项守恒律的计算表明,对于非刚性问题,RKDG 方法比有限体积型 WENO 方法 的误差更小;对于刚性问题,RKDG 方法对于间断面位置的捕捉更为精确.对于一二维爆轰波问题的计算结果 表明,RKDG 方法对爆轰波结构的分辨和爆轰波位置的捕捉能力更强. 关键词: 龙格库塔间断有限元方法;爆轰波;反应 Euler 方程;刚性源项

中图分类号: 0241.82 文献标识码: A

0 引言

在非平衡气体动力学中,爆轰问题通常被描述成无粘性的化学反应流动问题,其物理模型是一个非齐次 双曲守恒律方程组,通常被称作反应欧拉方程组(reactive Euler equations),其中非齐次项(源项)通常被解释 为由于化学反应引起的混合组分的质量变化率<sup>[1]</sup>.

最简单的反应欧拉方程组假定混合气体仅由两种组分构成:已燃气体(burnt gas)和未燃气体(unburnt gas)<sup>[2]</sup>.当混合气体达到点火温度时,未燃气体通过一个不可逆的化学反应转化为已燃气体,因此,混合气体状态可以用一个标量,即未燃气体的质量分数 Y 来表示。进一步假设混合气体各组分具有相同的比热比 γ 和气体常数 *R* 则二维反应欧拉方程组可以写成

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot f(U) = S(U) , \qquad (1)$$

其中f(U) = (F(U), G(U)),各个变量和函数的具体形式为

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho Y \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \\ \rho uY \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho uv \\ pv^2 + p \\ v(E + p) \\ \rho vY \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ w(T) \end{bmatrix},$$

式中 $\rho$  是混合气体的密度, u p 分别是沿 x y 方向的速度分量, p E T 分别是压力, 总能量, 温度. w(T) 称为 化学反应率, 通常采用 Arrhenius 模型,

$$w(T) = -K_r \rho Y \exp(-Ea/T) , \qquad (2)$$

其中 K<sub>r</sub> 是化学反应率因子 ,*Ea* 是活化能.此外混合气体的状态方程和温度分别为

$$p = (\gamma - 1) \left[ E - \rho (u^2 + v^2) / 2 - \rho Q Y \right], \qquad T = p / (\rho R) , \qquad (3)$$

其中 Q 为单位质量未燃气体发生化学反应所释放的热量.

在实际爆轰波问题中,化学反应的时间尺度远小于流体流动的时间尺度,所以非齐次方程组具有很强的 刚性,给数值求解带来很大困难.无论对源项用不用算子分裂方法,采用显格式还是隐格式,在处理间断解问

收稿日期: 2009-04-21; 修回日期: 2009-08-02

基金项目: 国家 973 计划(2005CB321703)和国家自然科学基金(10531080,10729101)资助项目

作者简介:张磊(1977-),男,北京,讲师,博士生,从事间断有限元方法及在流动计算中的应用研究.

题时,都可能得到非物理解.这是因为当源项不能用足够的空间和时间分辨率进行求解时,激波捕捉方法会 得到错误的爆轰波传播速度<sup>[3-5]</sup>.文[5]指出,当空间分辨率不够时,一个同时含有已燃气体和未燃气体的 网格中会发生虚假反应,数值爆轰波会以每个时间步一个空间步长的速度传播.文[6]也指出,计算的数值 误差极可能促成温度敏感化学反应的提早发生.因此,要获得正确的爆轰波位置,常用的解决方案是采用合 适的点火温度模型来抑制虚假反应<sup>[3]</sup>,或者采用网格自适应方法<sup>[7-10]</sup>来保证反应区域内有足够多的网格 点,或者采用高精度高分辨率方法来保证对反应区有足够高的分辨率.由于后两种途径有更好的普适性所以 受到更多的关注.

由 Cockburn 和 Shu 等人发展的龙格库塔间断有限元方法 (Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Method, RKDG) 是一类具有高精度和高分辨率的数值方法<sup>[11]</sup>,广泛地应用于水动力学,气动力学,波传播,半导体中的电荷传输等问题,在解决含有间断现象的问题中发挥着越来越重要的作用.该方法既保持了一般有限元方法和有限体积方法的优点,又克服了各自的不足.采用局部高阶插值的方法构造基函数,具有灵活处理间断和边界条件以及可显式求解的能力,克服了一般有限元方法不适于间断问题的缺点,以及一般有限体积方法必须通过扩大模板进行重构来提高精度的不足.预期 RKDG 方法所具有的单元上连续分布的高精度高分辨率逼近特性可望更好地模拟爆轰波问题.

本文应用 RKDG 方法,结合化学源项的无分裂方法及算子分裂方法,对爆轰波问题进行数值模拟,并和 有限体积型 WENO(FVWENO)方法的计算结果进行比较.由于 FVWENO 方法需要利用流动变量单元平均 值来计算源项的单元积分,本文采用 Simpson 积分公式,其积分点处的流动变量采用 WENO 重构以提高计算 精度.对带源项的一维守恒律的数值测试结果表明,RKDG 方法对于非刚性问题,计算结果的误差更小;对于 刚性问题,对爆轰波位置的捕捉能力更强.对典型的一二维爆轰波算例,包括二维不稳定爆轰波和爆轰波绕 过 90°拐角的衍射问题的数值模拟结果显示,RKDG 法仍有一定优势.

## 1 数值方法

#### 1.1 空间离散

本文的空间离散采用 RKDG 方法<sup>[11]</sup>. 设  $\Gamma_{h}$  是区域  $\Omega$  的一个有限剖分. 单元  $K \in \Gamma_{h} e$  表示多边形单元 K 的一条边界  $n_{e,k}$ 表示单元边界的外法向. V(K) 是单元上的局部有限元空间 ,取作  $P^{k}(k \ge 0)$  次多项式集 合.  $\forall t \in [0, T]$ ,在间断有限元空间

 $V_{h} = \{v_{h} \in L^{\infty}(\Omega) : v_{h} \mid_{K} \in V(K) , \forall K \in \Gamma_{h}\}$ 

中寻找近似解  $U_h(X_t)$ ,其中  $X = (x_y)$ .

首先在单元 *K* 上用试探函数 v 乘以方程(1)的两端,并用近似解  $U_h(X,t) \in V_h$  代替方程(1)的精确解 U(X,t),用  $v_h \in V_h$  代替试探函数 v 将式(1)写成变分形式,并由分部积分可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{K} U_{h}(\boldsymbol{X} \ t) v_{h}(\boldsymbol{X}) \,\mathrm{d}\Omega + \sum_{e \in \partial K} \int_{e} f(U_{h}(\boldsymbol{X} \ t)) \cdot \boldsymbol{n}_{e \ K} v_{h}(\boldsymbol{X}) \,\mathrm{d}\Gamma - \int_{K} f(U_{h}(\boldsymbol{X} \ t)) \cdot \mathrm{grad} v_{h}(\boldsymbol{X}) \,\mathrm{d}\Omega$$
$$= \int_{K} S(U_{h}(\boldsymbol{X} \ t)) v_{h}(\boldsymbol{X}) \,\mathrm{d}\Omega . \tag{4}$$

对于(4)式的后三项,采用数值积分计算,

$$\int_{e} f(U_h(X t)) \cdot \boldsymbol{n}_{e,k} v_h(X) \, \mathrm{d}\Gamma \approx \sum_{l=1}^{L} \omega_l f(U_h(X_{el} t)) \cdot \boldsymbol{n}_{e,k} v_h(X_{el}) \mid e \mid , \qquad (5)$$

$$\int_{K} f(U_{h}(X t)) \cdot \operatorname{grad} v_{h}(X) d\Omega \approx \sum_{j=1}^{M} \omega_{j} f(U_{h}(X_{Kj} t)) \cdot \operatorname{grad} v_{h}(X_{Kj}) | K| , \qquad (6)$$

$$\int_{K} S(U_{h}(X t)) v_{h}(X) d\Omega \approx \sum_{j=1}^{M} \omega_{j} S(U_{h}(X_{kj} t)) v_{h}(X_{kj}) | K|.$$
(7)

流通量  $f(U_h(X_{el}, t)) \cdot n_{e_K}$ 采用与之相容的数值流通量  $h_{e_K}(X_{el}, t)$ 代替,数值流通量定义为  $h_{e_K}(X_{el}, t) = h^{e_K}(U_h(X_{el}^{int(K)}, t))$ ,( $U_h(X_{el}^{ext(K)}, t)$ ),为某种形式的 Riemann 解算器.  $L_M$  分别代表边积分和面积分的 Gauss 积分点个数,  $X_{el}$ 和  $X_{kj}$ 分别代表边积分和面积分的 Gauss 积分点位置<sup>[11]</sup>.这样得到半离散的数值格式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{K} U_{h}(\boldsymbol{X}|t) v_{h}(\boldsymbol{X}) \,\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega} + \sum_{e \in \partial K} \sum_{l=1}^{L} \omega_{l} \boldsymbol{h}_{e,K}(\boldsymbol{X}_{el}|t) v_{h}(\boldsymbol{X}_{el}) + e + \sum_{j=1}^{M} \omega_{j} \boldsymbol{f}(U_{h}(\boldsymbol{X}_{Kj}|t)) \cdot \operatorname{grad} v_{h}(\boldsymbol{X}_{Kj}) + K + \sum_{j=1}^{M} \omega_{j} S(U_{h}(\boldsymbol{X}_{Kj}|t)) v_{h}(\boldsymbol{X}_{Kj}) + K + .$$

$$(8)$$

为了计算方便,在单元 K 中取正交基函数(如勒让德多项式) { $\varphi_1 \ \varphi_2 \ , \cdots \ \varphi_J$ } ,则质量矩阵成为分块对角 矩阵,故有限元解表示为

$$U_h(X t) = \sum_j U_j(t) \varphi_j(X).$$
(9)

在式(8)中,取试探函数为所有基函数,得到半离散的常微分方程组

$$M_{\kappa} \frac{\mathrm{d}U_{h}(t)}{\mathrm{d}t} = F_{h}(U_{h}(t)) + S_{h}(U_{h}(t)). \qquad (10)$$

其中  $U_h(t) = (U_1(t), U_2(t), \dots, U_J(t))^T$ ,  $M_K$ 为单元 K 的质量矩阵,  $F_h(U_h(t))$ 和  $S_h(U_h(t))$ 分别为

$$F_{h}(U_{h}(t)) = -\sum_{e \in \partial K} \sum_{l=1}^{n} \omega_{l} h_{e,K}(X_{el}, t) v_{h}(X_{el}) + e + \sum_{j=1}^{n} \omega_{j} f(U_{h}(X_{Kj}, t)) \cdot \operatorname{grad} v_{h}(X_{Kj}) + K + , \quad (11)$$

$$S_{h}(U_{h}(t)) = \sum_{j=1}^{M} \omega_{j} S(U_{h}(X_{Kj}, t)) v_{h}(X_{Kj}) + K + . \quad (12)$$

1.2 无分裂方法和分裂方法

对于空间离散后得到的常微分方程组(10),如果源项的刚性不太强,可以直接采用常微分方程组的求 解方法进行时间推进.本文的无分裂方法是采用三阶强稳定保持的龙格库塔(SSPRK)方法<sup>[12]</sup>直接求解方程 组(10),该方法在空间离散取 *P*<sup>2</sup> 阶基函数时,可以保证光滑解的三阶时间和空间精度.但当源项的刚性比 较强时,通常要对流动项和化学源项分裂求解,即对于方程组(10)分别求解流动项的半离散方程

$$M_{\kappa} \frac{\mathrm{d}U_{h}(t)}{\mathrm{d}t} = F_{h}(U_{h}(t))$$
(13)

和化学源项的半离散方程

$$M_{\kappa} \frac{\mathrm{d}U_{h}(t)}{\mathrm{d}t} = S_{h}(U_{h}(t)). \qquad (14)$$

本文采用的分裂法是具有二阶时间精度的 Strang 分裂方法<sup>[13]</sup>,

$$U^{n+1} = L_{s}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)L_{F}\left(\Delta t\right)L_{s}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)U^{n} , \qquad (15)$$

其中  $L_s(\Delta t/2)$  和  $L_r(\Delta t)$  分别表示以  $\Delta t/2$  和  $\Delta t$  为时间步长求解(14) 和(13) 式的算子.

在分裂方法中,守恒律的半离散方程组(13)仍采用显式的三阶的 SSPRK 方法求解,源项的方程组(14) 采用常微分方程求解器 VODE 求解<sup>[14]</sup>.

### 1.3 有限体积型 WENO 方法

本文将比较 RKDG 方法和高精度的 FVWENO 方法<sup>[15]</sup>. 在 1.1 节介绍的空间离散中,如果基函数只取为 1 则可得到守恒律方程组(1)的有限体积方法. 在二维矩形网格上,半离散有限体积法的方程为

$$\frac{\mathrm{d}U_{h}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{F_{h}(U_{h}(t))}{\Delta x_{i}\Delta y_{j}} + \frac{1}{\Delta x_{i}\Delta y_{j}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} S(U_{h}(t)) \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y , \qquad (16)$$

式中对流项的离散采用维数分裂的基于特征变量的五阶 WENO 格式<sup>[15]</sup>.在应用无分裂方法计算时,由于 FVWENO 方法的待求变量是流动变量的网格单元平均值,如果直接用它计算(16)式中源项的积分,只有二 阶空间精度.为尽量提高精度,本文对一维问题采用四阶的 Simpson 公式来计算积分,

$$\frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S(U_h(t)) dx = \frac{1}{6} (S(U_{i-1/2}) + 4S(U_i) + S(U_{i+1/2})) , \qquad (17)$$

其中积分点的值  $U_{i\pm1/2}$ 和  $U_i$ 采用基于特征变量的五阶 WENO 重构得到. 对于  $U_i$ 的重构会产生负权,故需要 对重构结果进行处理<sup>[16]</sup>. 对于二维问题,可以采用(17)式的张量积形式,这时积分具有四阶精度,但需要重 构积分点处值  $U_{i\pm1/2,j\pm1/2}$ ,计算公式相对复杂. 为计算方便,本文采用一种具有三阶精度的二维 Simpson 积分

$$\frac{1}{\Delta x_{i}\Delta y_{i}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} S(U_{h}(t)) dx dy = \frac{1}{6} (S(U_{i-1/2}) + S(U_{i,j-1/2}) + 2S(U_{i,j}) + S(U_{i,j+1/2}) + S(U_{i+1/2,j})), \quad (18)$$

其中  $U_{i\pm1/2}$ ,由 x 方向的单元平均值重构得到 , $U_{i,j\pm1/2}$ 由 y 方向的单元平均值重构得到 , $U_{i,j}$ 采用两个方向重构 的平均值.

# 2 数值算例

#### 2.1 精度测试

第一个例子是一个带有源项的 Burgers 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2} u^2 \right) = -\mu u \left( 1 - u \right)^2 , \qquad \forall x \in \Omega , \qquad (19)$$

这个方程的解是连续的,其解析解为

$$u(x t) = \frac{\exp(\mu(x-t))}{1 + \exp(\mu(x-t))}, \qquad \forall x \in \Omega,$$
(20)

式中 $\mu$ 表示控制方程的刚性  $\mu = 0$  即为初值.为了测试算法的精度 ,取 $\mu = 1$  ,此时问题的刚性不强. 计算区间  $\Omega$  取为[-15 25],RKDG 方法中 TVB 限制器常数取为 5 ,计算到 T = 10 ,CFL 数取为 0.18. 表 1 是数值解的  $L^2$  误差及其数值精度阶 R. 可以看出 ,用 Strang 分裂方法 ,由于在时间上只有二阶精度 ,在空间步长与时间步 长同阶的情况下 ,即使采用高精度的  $P^2$  基函数 DG 方法也只能达到二阶精度. 而无分裂的  $P^2$  元 DG 和修正 FVWENOM 方法可以达到和 SSPRK 方法同阶的三阶精度 ,但没有采用高精度源项积分的 FVWENO 只达到 二阶精度. 无论是分裂方法还是无分裂方法 ,RKDG 方法在网格规模相同的情况下 ,其数值解的误差明显要 比 FVWENO 方法的小.

Ν	Strang 分裂方法				无分裂方法					
	DG2	R	WENO5	R	DG2	R	WENO5	R	WENOM	R
32	7.66 × 10 <sup>-5</sup>	-	$4.79 \times 10^{-3}$	-	7.55 × 10 <sup>-5</sup>	-	4.78 × 10 <sup>-3</sup>	-	$5.25 \times 10^{-3}$	_
64	$5.29 \times 10^{-6}$	3.86	$9.62 \times 10^{-4}$	2.31	4.77 $\times$ 10 <sup>-6</sup>	3.98	9.64 × 10 <sup>-4</sup>	2.31	$5.04 \times 10^{-4}$	3.38
128	4.58 × 10 <sup>-7</sup>	3.53	$2.42 \times 10^{-4}$	1.99	$1.91 \times 10^{-7}$	4.64	$2.43 \times 10^{-4}$	1.99	$3.19 \times 10^{-5}$	3.98
256	$8.37 \times 10^{-8}$	2.45	$5.76 \times 10^{-5}$	2.07	$1.36 \times 10^{-8}$	3.81	$5.76 \times 10^{-5}$	2.07	$2.41 \times 10^{-6}$	3.72
512	1.84 $\times$ 10 <sup>-8</sup>	2.18	$1.43 \times 10^{-5}$	2.01	$1.42 \times 10^{-9}$	3.26	$1.43 \times 10^{-5}$	2.01	$2.80 \times 10^{-7}$	3.11
1024	$4.33 \times 10^{-9}$	2.09	$3.56 \times 10^{-6}$	2.00	$1.69 \times 10^{-10}$	3.07	$3.56 \times 10^{-6}$	2.00	$3.53 \times 10^{-8}$	2.99
2048	$1.05 \times 10^{-9}$	2.04	$8.90 \times 10^{-7}$	2.00	$2.09 \times 10^{-11}$	3.02	$8.90 \times 10^{-7}$	2.00	$4.46 \times 10^{-9}$	2.99

表 1 带有源项的 Burgers 方程 Table 1 Burgers equation with source term

注: DG2 表示 P<sup>2</sup> 基函数的 RKDG 方法, WENO5 表示五阶 FVWENO 方法, WENOM 表示五阶 FVWENO 方法 + 源项四阶精度积分式(17)

#### 2.2 间断计算能力测试

第二个例子是一个带有源项的对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = -\mu u \left( u - 1 \right) \left( u - \frac{1}{2} \right).$$
(21)

取初值为

$$u(x \ \beta) = \begin{pmatrix} 1 & x < x_s \\ 0 & x > x_s \end{pmatrix}$$
(22)

x,是间断的初始位置,这个例子的解析解是一个以速度1向右传播的间断解.

文 [5]指出,当网格数不够多时,计算的间断波速度变慢甚至是不动的.为了衡量方法的间断捕捉能力, 定义数值平均速度

$$U_{\text{nav}} = \frac{h}{T} \left( \sum_{j} U_{j}^{n} - \sum_{j} U_{j}^{0} \right) ,$$

其中 h为一维空间步长 ,T为计算终止时间 , $\sum_{i} U_{j}^{0}$ 和 $\sum_{i} U_{j}^{n}$ 分别是初值和 T时刻数值解的求和.

计算中取 μ = 5 000, T = 1, CFL 数取 0.1, 计算区间为 [0 2], 初始间断位置为 x<sub>s</sub> = 0.5.

从表 2 可以看出,在网格规模相同的情况下,RKDG 方法的数值平均速度比 FVWENO 的更接近于 1,说 明前者对于间断波的捕捉更为准确。而对于同一数值格式,当网格数较少时,计算的数值平均速度是不正确 的.只有当网格数足够多时,各种格式得到的数值速度才趋近于 1.无分裂的 DG2 和 WENOM 比对应的分裂 方法的结果稍微准确些,这与无分裂方法比相应的分裂方法的精度高一阶有关.

N	Strang 5	分裂方法	无分裂方法								
1.V	DG2	WENO5	DG2	WENO5	WENOM						
256	$5.3 \times 10^{-4}$	4.7 × 10 <sup>-4</sup>	0.710 6	4.8 $\times$ 10 <sup>-4</sup>	$4.8 \times 10^{-4}$						
512	0.724 9	$4.0 \times 10^{-2}$	0.902 9	7.8 $\times$ 10 <sup>-4</sup>	0.403 2						
1 024	0.933 2	0.814 5	0.968 9	0.809 4	0.8327						
2 048	0.987 7	0.939 8	0.995 6	0.938 7	0.942 1						

表 2 带有刚性源项的对流方程 Table 2 Linear advection equation with stiff source term

2.3 一维 ZND 爆轰波

第三个算例是一维稳定爆轰波问题. 初始时刻 ,假定爆轰波的 von Neumann 点位于 x = 0. 首先考虑一个 CJ-ZND 爆轰波情形. 未燃气体状态为

$$\rho_{\rm u} = 1.0, \quad u_{\rm u} = 0.0, \quad p_{\rm u} = 1.0,$$

状态方程(3)及 Arrhenius 模型(2)中各参数分别为  $\gamma = 1.4$ , Q = 14, Ea = 14,  $K_r = 10.37$ . 这些参数下理论解 半反应长度为 1<sup>[3]</sup>. 计算区间取为 [-40 40], 网格数 N = 400,该网格数可以分辨反应区,计算的 CFL 取为 0.18. 该问题的理论爆轰波速度为 5.441 9. 计算到时间 T = 5,此时爆轰波传播到 27.2 附近. 图 1 是计算的密 度分布的局部放大图,可以看出, RKDG 方法的解比 FVWENO 的更接近于精确解. 但是由于 RKDG 方法使用 了 TVB 型的限制器(常数 M 为 1.0),算出的 von Neumann 点比 FVWENO 的略低,而分裂方法对于解的影响 几乎看不出.

其次,我们考虑一个强爆轰情形,其未燃气体状态和前面的 CJ-ZND 爆轰波波前的相同,状态方程及 Arrhenius 模型中各参数分别为  $\gamma = 1.4$ , Q = 10, Ea = 10,  $K_r = 683.386$ . 这时半反应长度为  $0.01^{[3]}$ ,计算区 间为 [-10,110],网格数 N = 800. 该网格数对这个问题是 "under-resolved",即无法分辨反应过程中组分的 空间变化,只能捕捉爆轰波的位置. 该情形下理论强爆轰波的速度为 4.909 3,计算到时间 T = 20,此时爆轰 波传播到 98.186 附近.图 2 是密度分布的局部放大图,图中实线是用 4 000 个网格求得的理论解.可以看出 ,RKDG 方法的间断过渡网格点数虽然和 FVWENO 方法一样多,但一离开间断就更快地接近理论解,而分裂方法对于两种数值方法的影响不大.

2.4 二维不稳定爆轰波

第四个算例考虑一个初始扰动了的 CJ-ZND 爆轰波经过一段时间发展之后,它的化学反应区里具有胞格这样一种规则的结构. 初始时刻,该 ZND 爆轰波的 von Neumann 点位于 x = 0 处,右侧的未燃物状态为

$$\rho_{\rm u} = 1.0, \quad u_{\rm u} = v_{\rm u} = 0, \quad p_{\rm u} = 3.0,$$

状态方程及 Arrhenius 模型中各参数分别为  $\gamma = 1.2$ , Q = 50, Ea = 50,  $K_r = 10^4$ . 初值的周期扰动在 y 方向, 初始流动状态 $U(x, y, Q) = U_{CLEND}(x + 0.05 \cos(4\pi y))$ ,其中 $U_{CLEND}(x)$ 为在上述参数下的精确CJ-ZND解.



Fig. 1 Detailed view of CJ-ZND detonation wave



物理区域为[-0.2 2.8]×[0,1]分别采用 300×100 和 600×200 的网格进行计算,CFL 数取 0.18,上下边 界采用反射边界条件. 左右边界分别采用入流和出流边界条件. 图 3,4 分别是 P<sup>2</sup> 元 RKDG 方法和五阶 WENO 方法结合 Strang 分裂法在细网格上的结果. 这个问题的半反应区长度近似等于 2.85×10<sup>-2</sup>. 根据文 [18],为了能够比较准确的模拟三波点的横向移动,有限体积法在半反应区需要设置大约 20 个网格点. 对 于 600×200 的网格,半反应区大约有 6 个网格点,由于所用的网格足够密,两种方法的结果差别在等值线上 看不出. 在两种方法得到的图中,都可以清楚地看到三波点沿着爆轰波阵面的横向移动<sup>[19]</sup>. 如果采用较小规 模的 300×100 网格,在半反应区最多分布 3 个网格点,两种方法都会得到错误的爆轰波位置和阵面形状,且 互不相同,如图 5 所示.

2.5 CJ-ZND 爆轰波绕过 90°拐角的衍射现氛

第五个算例为一个 CJ-ZND 爆轰波绕过一个 90°的拐角,计算区域为 [0,120]×[0,120],其中 [0,15]× [0,60]是一固壁,初始时刻一向右传播的 CJ-ZND 爆轰波位于固壁上面 x = 14 处. 右侧的未燃气体状态为  $\rho_u$ 



Fig. 3 2D unstable detonation wave by  $P^2$  RKDG with Strang split on 600 × 200 meshes



图 4 600 × 200 网格上用五阶 FVWENO 结合 Strang 分裂模拟二维不稳定爆轰波结果 Fig. 4 2D unstable detonation wave by fifth order FVWENO with Strang split on 600 × 200 meshes





= 1.0,  $u_u = v_u = 0.0$ ,  $p_u = 1.0$ , 状态方程及 Arrhenius 模型中的参数分别为  $\gamma = 1.4$ , Q = 25, Ea = 35,  $K_r = 120$ , 计算到时间 T = 12, CFL 数取 0.18, 计算网格分别为 240 × 240 和 480 × 480. 上下边界和壁面采用反射 边界条件, 左右边界分别采用入流和出流边界条件.

当爆轰波传播到拐角后,支撑爆轰波燃烧的激波在壁面附近的强度减弱,温度降低,沿着绕射激波,激波 后面的温度将会明显地降低到比相应 ZND 波的温度低,这时化学反应将会停止<sup>[20]</sup>.随着未反应激波垂直于 竖直墙的表面继续往前传播,紧跟其后的流体温度将会上升,并依赖于活化能的强度,如果波后温度相对于 活化能足够高,燃料可被重新点燃,燃烧波被重新激发,并在远处与水平向右传播的爆轰波相连接.图6(a) ~(d)分别是用 *P*<sup>2</sup> 阶 RKDG 和五阶 WENO 结合 Strang 分裂得到的结果.粗网格上的分辨率比较差,燃烧波 和激波的分离情况较模糊,特别是 FVWENO 方法在粗网格上的激波绕过拐角后跑得稍快.可以清楚的看到 爆轰波绕过拐角后燃烧波和前导激波分离的现象. 我们将 FVWENO 在 960 × 960 网格上的计算结果作为更 准确的参考解,并取 x = 25 的截面进行了比较(见图 7),发现在 480 × 480 网格上,RKDG 的结果和参考解的 符合程度要略好于 FVWENO 的结果。



Fig. 6 CJ-ZND detonation wave passing a 90° corner

# 3 结论

本文采用龙格库塔间断有限元方法对带有源项的 守恒律方程组进行了数值求解并和有限体积型 WENO 方法进行了比较.数值结果表明,间断有限元方法不仅 在光滑的区域具有较高精度,而且具有非常好的间断 捕捉能力,因而可以更好的模拟爆轰波的 ZND 结构. 即使对于强刚性问题,由于 RKDG 法在单元内通过选 取适当的基函数提高数值精度,能够在较少的网格数 下得到正确的爆轰波位置,克服了一般有限体积方法 在求解刚性问题时由于网格分辨率不够而产生虚假反 应的现象,而且由于 RKDG 方法不要求近似解的全局 连续性,因此非常易于实现自适应和并行计算,有望成 为模拟复杂化学反应流动的一种有效方法.



#### 参考文献:

- [1] Tosatto L, Vigevano L. Numerical solution of under-resolved detonations [J]. J Comput Phys, 2008, 227: 2317 2343.
- [2] Helzel C, LeVeque R, Warneke G. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves [J]. SIAM J Sci Comput, 1999, 22: 1489 - 1510.
- [3] Berkenbosch A C. Capturing detonation waves for reactive Euler equations [D]. PhD thesis. Ednd-hoven, The Netherlands:

Technische Universiteit Eindhoven. 1995.

- [4] Colella P, Majda A, Roytburd V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves [J]. SIAM J Sci Stat Comput, 1986, 7: 1059 - 1080.
- [5] LeVeque R J, Yee H C. A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source term [J]. J Comput Phys, 1990, 86: 187 - 210.
- [6] Oran E S, Boris J P. Numerical simulation of reactive flow [M]. New York: Elsevier , 1987: Chap. 13.
- [7] Yuan L, Tang T. Resolving the shock-induced combustion by an adaptive mesh redistribution method [J]. J Comput Phys, 2007, 224: 587-600.
- [8] Azarenok B, Tang T. Second-order Godunov scheme for reactive flow calculations on moving meshes [J]. J Comput Phys, 2005, 206: 48 - 80.
- [9] Deiterding R. Parallel adaptive simulation of multi-dimensional detonation structures [D]. PhD thesis. Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Sep. 2003.
- [10] Liu G Z, Zhang S D. High order hybrid central-WENO AMR method for gaseous detonation [J]. Chinese J Comput Phys, 2008, 25(4):387-395.
- [11] Cockburn B. Discontinuous Galerkin methods for convection-dominated problem [M] //Barth T J, Deconinck H. High-Order Methods for Computational Physics, Vol. 9, LNCSE. Berlin:Springer, 1999: 69 - 224.
- [12] Gottlieb S, Shu C W, Tadmor E. Strong stability-preserving high-order time discretization methods [J]. SIAM Review, 2001, 43: 89 - 112.
- [13] LeVeque R J. Finite volumn methods for hyperbolic problems [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- [14] 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.
- [15] Shu C W. High order ENO and WENO schemes [M] //Barth T J, Deconinck H. High-order methods for computational physics, Vol. 9, LNCSE. Berlin:Springer, 1999: 439 - 582.
- [16] Shi J, Hu C Q, Shu C W. A technique of treating negative weights in WENO schemes [J]. J Comput Phys, 2002, 175: 108 - 127.
- [17] Bao W, Jin S. The random projection method for stiff detonation capturing [J]. SIAM J Sci Comput, 2001 22: 1000 1026.
- [18] Chen G X. Adaptive moving unstructured mesh methods and their applications in CFD [D]. PhD thesis. Beijing: Peking University. 2008.
- [19] Lian Y S, Xu K. A gas-kinetic scheme for multimaterial flows and its application in chemical reac-tions [J]. J Comput Phys, 2000, 163: 349 - 375.
- [20] Hu Z M, Mou Q H, Zhang D L, Jiang Z L. Numerical simulation of gaseous detonation wave propagation through bends with a detailed chemical reaction model [J]. Chinese J Comput Phys, 2004 21(5):408-414.

# Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Method for Detonation Waves

ZHANG Lei<sup>12</sup>, YUAN Li<sup>1</sup>

(1. LSEC and Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing,

Academy of Mathematics and Systems Science , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100190 , China;

2. School of Science, China University of Mining and Technology (Beijing), Beijing 100083, China)

**Abstract**: A Runge-Kutta discontinuous Galerkin (RKDG) method for conservation law with source term is shown. The method is implemented with Strang split or unsplit methods, and is applied to solve one-dimensional conservation law with source term as well as one and two-dimensional detonation wave problems. In order to compare with the fifth-order finite volume WENO method, a special reconstruction method is proposd to calculate integration of the source term with high-order spatial accuracy. Numerical tests in one dimension show that the RKDG method has smaller errors than WENO method for nonstiff problems and is more accurate in capturing position of discontinuity in stiff problems. Numerical simulations of detonation waves demonstrate that the RKDG method is more effcient in resolving detailed structure of detonation waves and location of detonation front.

Key words: Runge-Kutta discontinuous Galerkin method; detonation wave; reactive Euler equations; stiff source term

**Received date**: 2009 - 04 - 21; **Revised date**: 2009 - 08 - 02