

文章编号: JNZZZ 0613-L0054(2013)04-0019-09

球头体激波诱导燃烧问题的移动网格计算

袁礼¹, 刘伟¹, 胡立军¹, 张磊², 李彬³

(1. LSEC & NCMIS, 中国科学院数学与系统科学研究院计算数学所, 北京 100190; 2. 中国矿业大学(北京)理学院, 北京 100083; 3. 中山大学工学院应用力学与工程系, 广州 510275)

Moving-Mesh Computation of Shock-Induced Combustion Around a Spherical Projectile

YUAN Li¹, LIU Wei¹, HU Li-jun¹, ZHANG Lei², LI Bin³

(1. LSEC and NCMIS, 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; 3. School of Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

摘要: 将移动网格法应用于非定常气体化学反应流轴对称 NS 方程的数值求解. 流场求解应用 Harten-Yee 迎风 TVD 格式、LU-SGS 方法和双时间推进技术, 网格移动采用基于 TTM 网格方程的各坐标方向独立自适应策略. 对 Lehr 实验的球头弹体激波诱导氢/氧预混合气体燃烧问题进行数值模拟. 计算了有尾部底流的定常和振荡燃烧情况, 并比较了两种化学反应机理的模拟效果. 计算结果表明, 用移动网格法可获得分辨率较好的燃烧流场, 计算的周期性振荡燃烧结构和前人的理论分析及计算结果一致, 低频振荡频率的预测值和 Lehr 试验值符合较好, 但高频振荡情况有较大差异.

关键词: 激波; 振荡燃烧; 反应机理; 底部流动; 移动网格

中图分类号: V235.21

文献标识码: A

Abstract: A moving mesh method was applied to numerical solution of the unsteady axisymmetric chemically reacting Navier-Stokes equations. Harten-Yee upwind TVD scheme, LU-SGS method, and dual-time stepping technique were used to solve the flowfield equations, meanwhile a moving mesh method based on TTM grid equation was employed to redistribute the grid points in two curvilinear coordinate directions independently. Numerical simulation was performed for Lehr's experiment on shock-induced combustion around a spherical projectile fired into premixed hydrogen/air mixture. Two steady combustion cases ($M = 3.55$ and 6.46) with the base flow included and three oscillating combustion cases ($M = 4.48$, 4.79 and 5.04) were simulated, and the effects of two reaction mechanisms were compared. The computational results showed that the moving mesh method could obtain more detailed flow structures compared with the fixed mesh. The computed flow structures are in good agreement with other calculations, and the calculated oscillatory frequencies for $M = 4.48$ and 4.79 are in agreement with Lehr's experiment, while that for $M = 5.04$ has some discrepancy.

Key words: shock; oscillating combustion; reaction mechanism; base flow; moving mesh

引言

自上世纪六十年代以来, 激波诱导燃烧现象一直引起人们持续的兴趣, 主要原因在于它是超燃冲压发动机和脉冲爆轰发动机等高超声速推进装

置中的一种燃烧模式. 激波诱导燃烧流场由于同时存在强间断、复杂的流动-化学相互作用及所形成的各种燃烧流动结构, 给数值模拟的可信度、效率和健壮性提出了较高要求. 因此, 研究和改进高速燃

收稿日期: 2013-08-09; 修回日期: 2013-08-19

基金项目: 国家自然科学基金(10972230, 11021101, 11261160486); 973计划(2010CB731505)

引用格式: 袁礼, 刘伟, 胡立军, 等. 球头体激波诱导燃烧问题的移动网格计算 [J]. 气体物理, 2013, 8(4): 19~27

Citation: Yuan L, Liu W, Hu L J, et al. Moving-mesh computation of shock-induced combustion around a spherical projectile [J]. Physics of Gases, 2013, 8(4): 19~27

烧流的数值计算方法具有重要的理论和应用意义。

激波诱导燃烧问题中常有爆轰波出现. 对后者的数值模拟有一个众所周知的困难, 即当网格尺度或计算方法精度不足以分辨小尺度反应区时, 数值平滑会使化学能提前释放, 导致爆轰波以所谓的“一时间步一网格”的虚假速度传播^[1, 2]. 人们为此开展了大量的计算方法改进研究^[3, 4]. 除了常规的采用高分辨率高精度格式、密网格以及自适应网格技术^[5]外, 也针对某些特殊情况发展了诸如修正分数步法^[6]、亚网格分辨^[7]和保正格式^[8]等技术, 从而可或多或少提高对强爆轰波的模拟精度和健壮性. 数值模拟激波诱导燃烧问题的另一个困难是既要捕获真实的物理不稳定性, 又要避免很容易产生的虚假数值波, 诸如格式离散误差、化学反应模型缺陷甚至舍入误差和并行计算的分区差异等都可导致虚假现象或者不同计算结果^[9]. 要获得可信的燃烧流计算结果, 必须用多个化学模型、计算格式和网格数进行系统的比较性模拟研究.

Lehr 的经典实验^[10]是检验数值方法和物理模型的一个很好的算例. 实验中一个弹丸高速飞入预混可燃气体中, 弹头前的弓形激波诱导预混气体发生燃烧. 对于 H_2/O_2 混合气体, 当弹丸飞行速度小于 $2 \times 10^3 \text{ m/s}$ 的临界值时, 激波和燃烧面是分开的, 流场是稳定的; 飞行速度大于此临界值但小于混合气体的 Chapman-Jouguet(CJ)爆轰速度时, 有自支持的正 CJ 爆轰波形成并向弹头前方远离; 飞行速度大于 CJ 爆轰速度时, 有相对稳定的过驱爆轰波和斜爆轰波形成. 对于 H_2/Air 混合气体, 当弹丸飞行速度远小于某一临界值时(亚爆轰速度), 分开的激波和燃烧面是稳定的; 当飞行速度增大到和 CJ 爆轰速度不相上下时(跨爆轰速度), 流场变得不稳定, 出现振荡燃烧现象; 当飞行速度大于 CJ 爆轰速度时(超爆轰速度), 流场中有爆轰波出现, 整个燃烧流看起来像是稳态的. Lehr 实验给出大量清晰的纹影照片和几个非稳态燃烧流场的振荡频率, 为检验数值算法提供了宝贵的依据.

针对 Lehr 实验已有大量数值计算研究. 如 Yungster 等^[11]和孙明波等^[12]模拟了定常结果. Matsuo 等^[13]和 Choi 等^[14]采用 TVD 格式求解反应流 Euler 方程研究振荡燃烧, 比较了几种网格尺寸和不同时间精度的效果, 数值研究了 McVey 和 Tong^[15]提出的燃烧周期性振荡机理. 刘君等^[16]用振荡燃烧算例检验了其解耦算法. 最近刘世杰等^[17]

用敏感性分析方法比较了几个反应模型, 表明采用适当反应模型和 WENO 格式可获得更符合实验的振荡频率. 本文作者^[18]曾应用移动网格法和 TVD 格式计算了定常燃烧情况, 发现在大于 512^2 网格数上计算 Mach 数 $M = 6.46$ 情形不能获得定常燃烧流场. 用几种常用高分辨率格式计算也有类似表现^[19, 20].

过去对 Lehr 实验的数值模拟研究大都采用反应流 Euler 方程. 本文采用反应流 Navier-Stokes 方程. 为了和实验照片作比较, 本文模拟了弹体底部流场. 我们以前的工作^[18]采用 Evans-Schexnayder 反应模型(Evans 机理)^[21]计算 $M = 6.46$ 情形获得不收敛的现象. 为排除这一数值现象是由某一特定反应机理所致, 本文采用两种氢气/氧气反应模型: Evans 模型^[21]和 Choi 修正的 Jachimowski 模型(MJ 机理)^[14]. Choi 对原始 Jachimowski 模型^[22]做了小改动, 消除了用文献[22]难以获得规则燃烧现象的瑕疵. 采用不同反应机理的目的是希望得到更可靠的结论.

本文将文献[18]中的有限体积 TVD 格式和移动网格法发展应用到非定常流计算. 算例包括 Lehr 实验^[10]的 $M = 3.55$ 和 6.46 两个定常燃烧情形, 以及 $M = 4.48, 4.79$ 和 5.04 三个振荡燃烧情形.

1 控制方程

包含 N 种气体组分的轴对称/直角坐标形式的化学反应流 Navier-Stokes 方程统一写为:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_N \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_N u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} \rho_1 v \\ \vdots \\ \rho_N v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} -\rho_1 V_{x1} \\ \vdots \\ -\rho_N V_{xN} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} -\rho_1 V_{y1} \\ \vdots \\ -\rho_N V_{yN} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y \end{bmatrix} -$$

$$\frac{m}{y} \begin{bmatrix} \rho_1 v \\ \vdots \\ \rho_N v \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix} + \frac{m}{y} \begin{bmatrix} -\rho_1 V_{y1} \\ \vdots \\ -\rho_N V_{yN} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} - \tau_{\theta\theta} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_N \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

其中

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{mv}{y} \right),$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{mv}{y} \right),$$

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right),$$

$$\tau_{\theta\theta} = 2\mu \frac{v}{y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{v}{y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right),$$

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{k=1}^N h_k \rho_k V_{xk},$$

$$q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{k=1}^N h_k \rho_k V_{yk}.$$

式中, ρ 、 p 、 T 分别是气体混合物的密度、压力和温度, u 、 v 分别是轴向速度和径向速度, E 是单位质量的总能量, ρ_k 、 Y_k 、 h_k 分别是化学组分 k 的分密度、质量分数和比焓, μ 和 λ 分别是混合物的动力粘性系数和热传导系数. V_{xk} 、 V_{yk} 分别是组分 k 沿 x 和 y 方向的质量扩散速度. 忽略 Soret 效应、压力梯度和外力的影响, 只计及 Fick 定律^[23], 有:

$$\rho_k V_k = -\rho D_k \nabla Y_k,$$

$$D_k = (1 - Y_k) / \sum_{j \neq k}^N X_j / D_{kj},$$

是组分 k 在混合物中的平均扩散系数. 这里采用给定组元 Schmidt 数的办法由粘性系数反算扩散系数: $Sc = \mu_k / \rho_k D_k \equiv 0.5$. ω_k 是化学反应质量生成率. m 是控制参数, $m = 1$ 表示柱坐标系下的轴对称流动, $m = 0$ 表示直角坐标系下的平面流动.

气体为热完全气体, 满足理想气体状态方程; 各个组元的热力学焓和定压比热由 Chemkin 手册^[24] 的拟合多项式给出. 本文计算中, 先生成 100~5000K 之间的比焓和定压比热 (h_k, c_{pk}) ~ T 表格, 计算中用查表法由计算的总内能插值确定温度 T .

2 数值方法

采用基于传统 TTM 网格方程的移动网格法, 其中网格控制函数由各个坐标方向的误差监控函数确定, 具体细节见 [18]. 无粘项离散采用 Harten-Yee 迎风 TVD 格式^[25]. 非定常计算是通过双时间推进实现. 采用 Shuen 等^[26] 的只考虑密度变化的简化源项 Jacobian 矩阵以简化计算. 方程(1)的物理时间用向后三点差分, 伪时间用 Euler 后差分逼近, 得:

$$V \left(\frac{\mathbf{Q}^{(m+1)} - \mathbf{Q}^{(m)}}{\Delta \tau} + \frac{3\mathbf{Q}^{(m+1)} - 4\mathbf{Q}^n + \mathbf{Q}^{n-1}}{2\Delta t} \right) = \mathbf{R}^{(m+1)}. \quad (2)$$

其中 n 为物理时间层, m 为伪时间层 (m 全取在 $n+1$ 层). 将 $\mathbf{R}^{(m+1)}$ 关于 m 伪时间层线性化后用传统的 LU-SGS 方法求解. 内迭代收敛标准为 $\varepsilon_{\text{tole}} = 10^{-4}$ 且限制迭代次数最多 11 次. 物理时间步长 Δt 是全局的, 其值和基于 CFL=1 的最小步长相当. 伪时间步长 $\Delta \tau$ 是局部的, 基于 CFL=20 确定.

3 数值结果

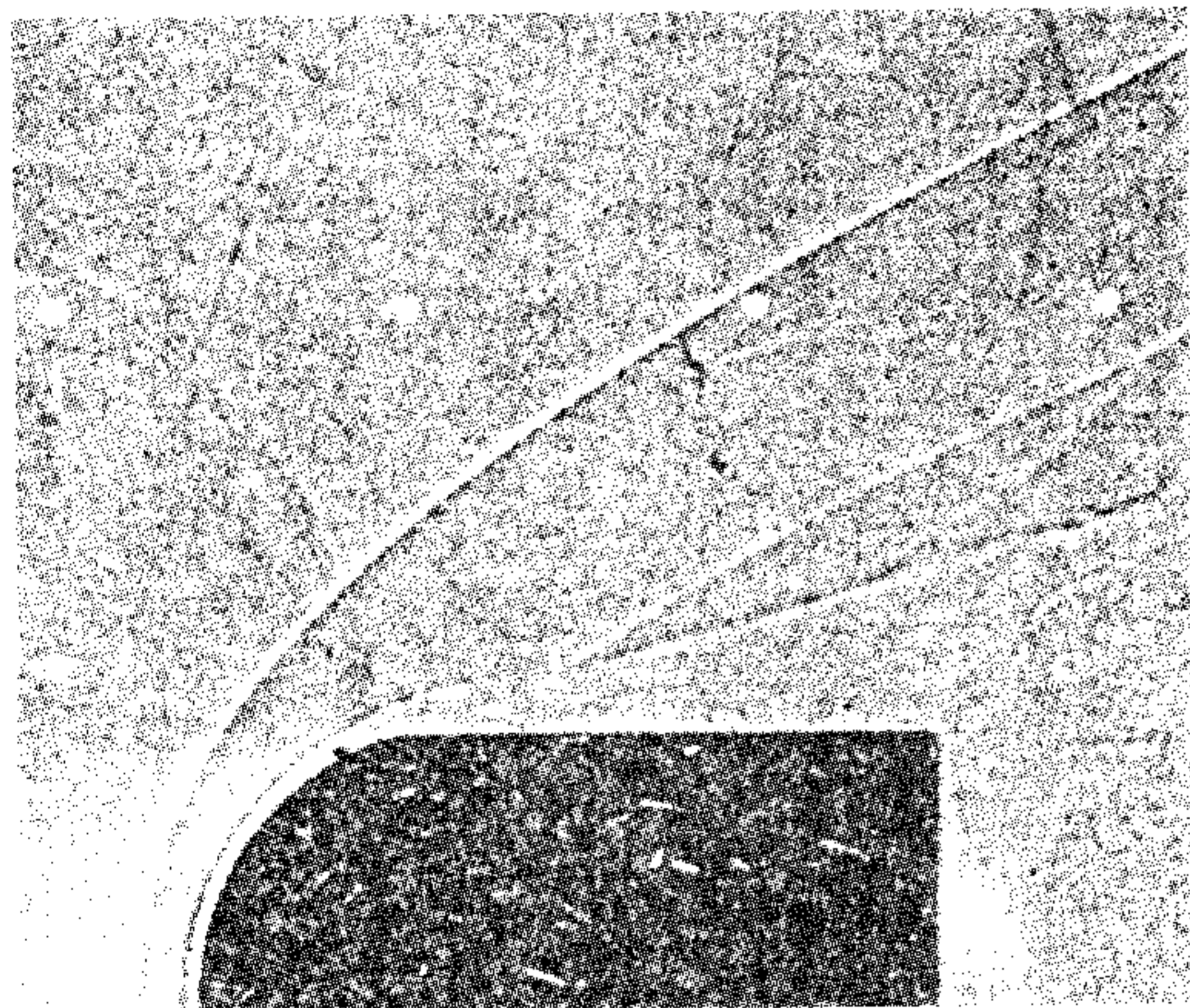
本文算例对应 Lehr 球头体激波诱导燃烧实验^[10]. 实验中一个直径为 15mm 的球柱组合体弹丸飞入等当量比的氢/氧(空气)预混合气体中诱导燃烧. 远前方温度为 293K, 压力分别为 186 mm Hg(氢/氧)和 320 mm Hg(氢/空气). 当弹丸在氢/氧混合气中的飞行速度为 1.892 km/s ($M = 3.55$)时, 激波和爆燃波分离, 流态为定常态; 当弹丸在氢/空气中的飞行速度为 2.605 km/s ($M = 6.46$)时, 激波和爆燃波部分耦合部分分离, 流态似乎仍为定常态. 当弹丸在氢/空气中飞行速度分别为 1.804 km/s ($M = 4.48$)、1.931 km/s ($M = 4.79$)和 2.029 km/s ($M = 5.04$)时, 实验得到振荡燃烧流场, 振荡频率分别为 425kHz、715kHz^[13, 14]和 1040kHz^[10]. 其中值得一提的是文献 [10] 给出 $M = 3.55$ 的圆柱侧面有向外拐的燃烧波并伴有前导弱激波形成.

计算中物面上用绝热壁、无催化、无滑移、零法向压力梯度条件, TVD 格式所需的虚单元值采用镜像法获得. 入口边界为超声速入流条件, 出口边界用零梯度外推. 在对称轴, 用对称条件. 为了模拟上述 $M = 3.55$ 的圆柱侧面弱激波, 计算区域还包含了圆柱体尾部. 所用两种化学反应模型都不计入 N_2 参与的反应, 分别有 7 组分 16 反应 (Evans 机理^[21])

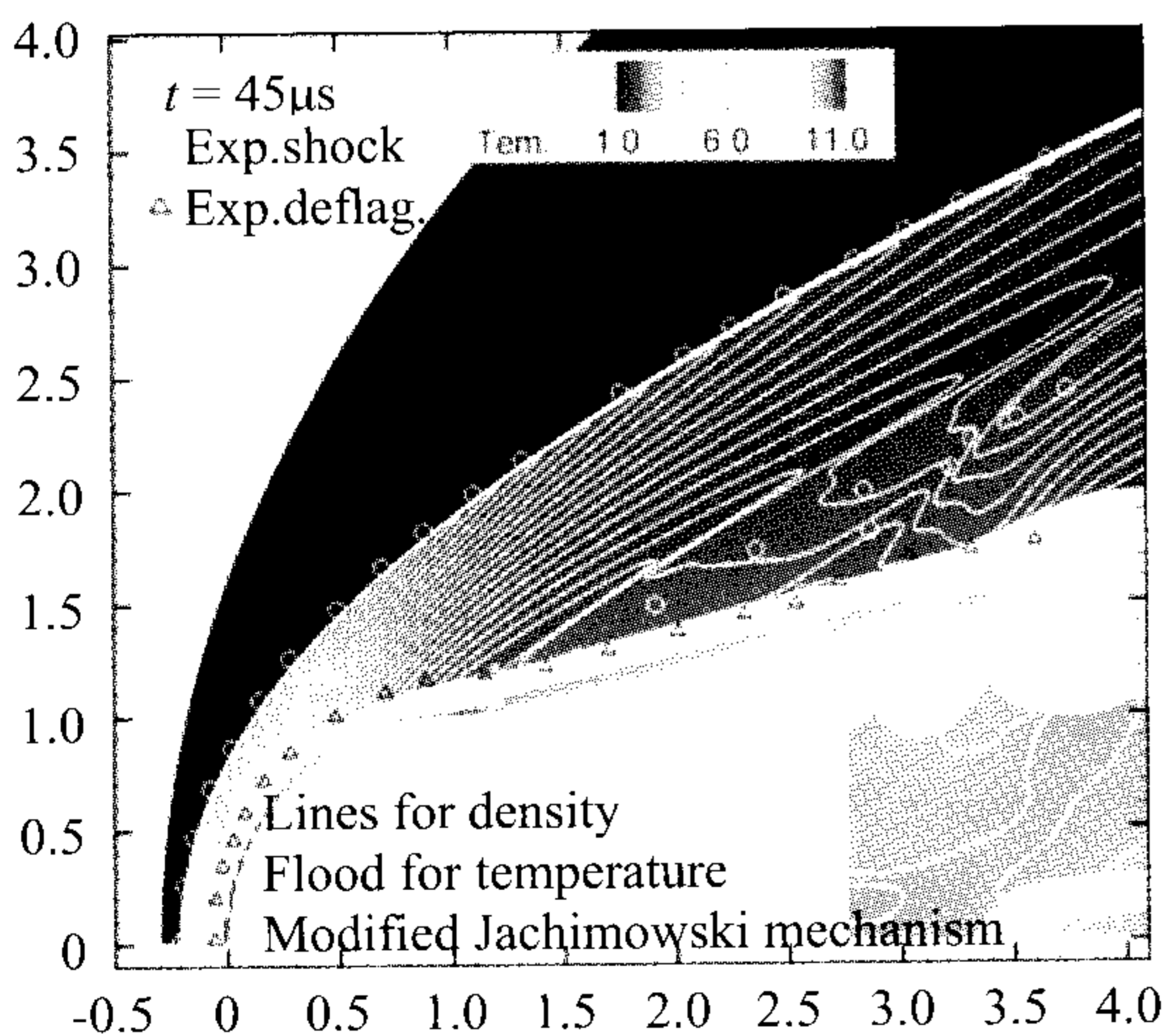
和 8 组分 19 反应(修正 Jachimowski 机理^[14]).

3.1 $M = 3.55$ ($V = 1.892$ km/s) 定常燃烧

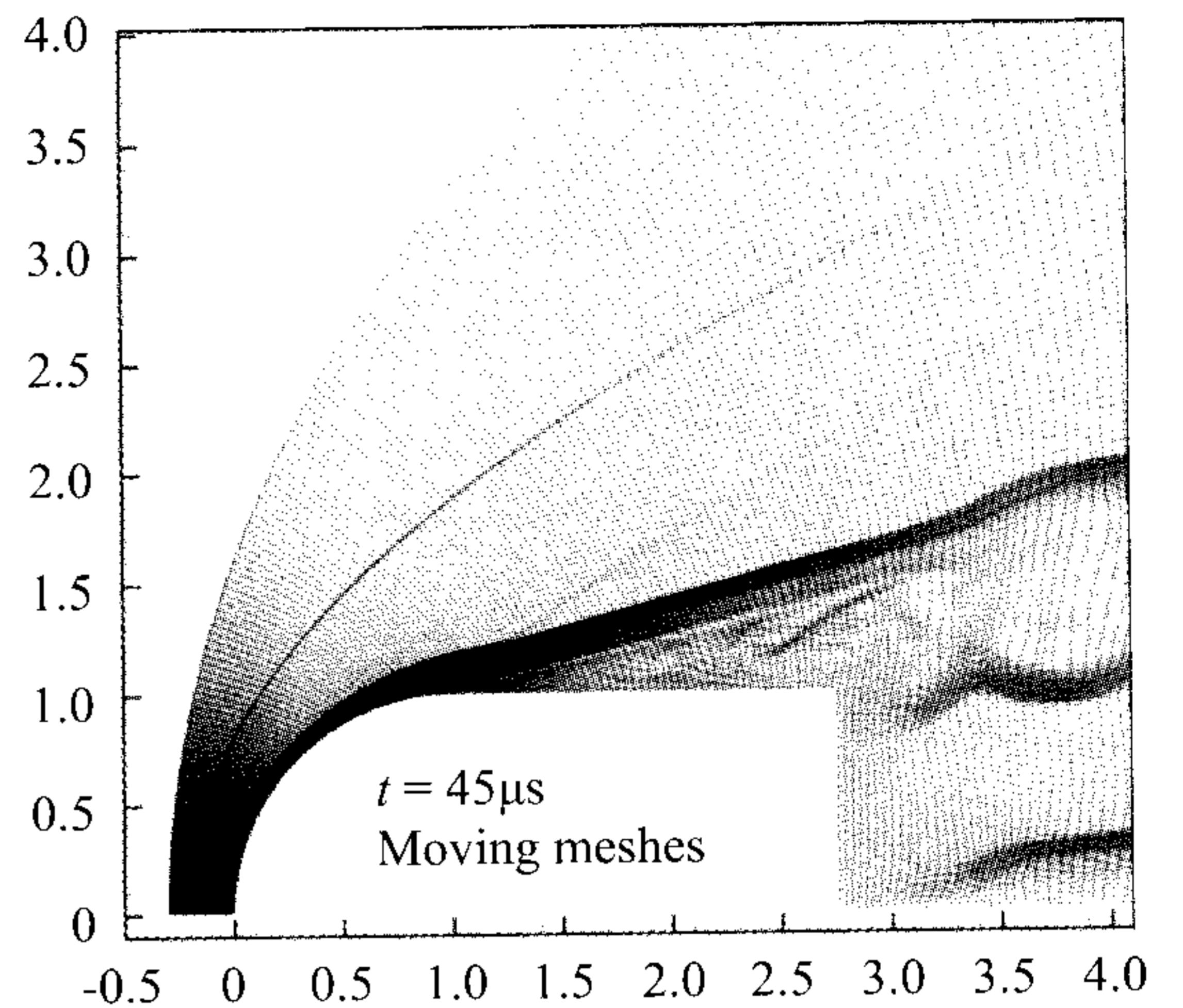
该算例对应于 Lehr 实验^[10]中弹丸在等当量比氢/氧预混气中飞行的情况. 实验显示流场是定常的, 以往的数值模拟研究也表明流场是定常的, 但没有得到实验照片中圆柱侧边向外倾斜的燃烧波及其前导激波(图 1(a)). 本文用修正 Jachimowski 机理和 477 (流向) $\times 385$ (法向)网格数和移动网格非定常程序计算流动演化过程, 发现在 $t = 45\mu\text{s}$ 时刻的流场(图 1(b))和实验照片很相似. 用 Evans 化学机理也可得到类似图案. 因此, 我们认为 Lehr 的纹影图只是定常流态还没有完全建立起来时的瞬时图像. 图 1(c)是对应的移动网格. $t = 900\mu\text{s}$ 时的定常流场和移动网格分别如图 1(d)和(e)所示. 可见激波和燃烧波是分离的, 流场相对简单.



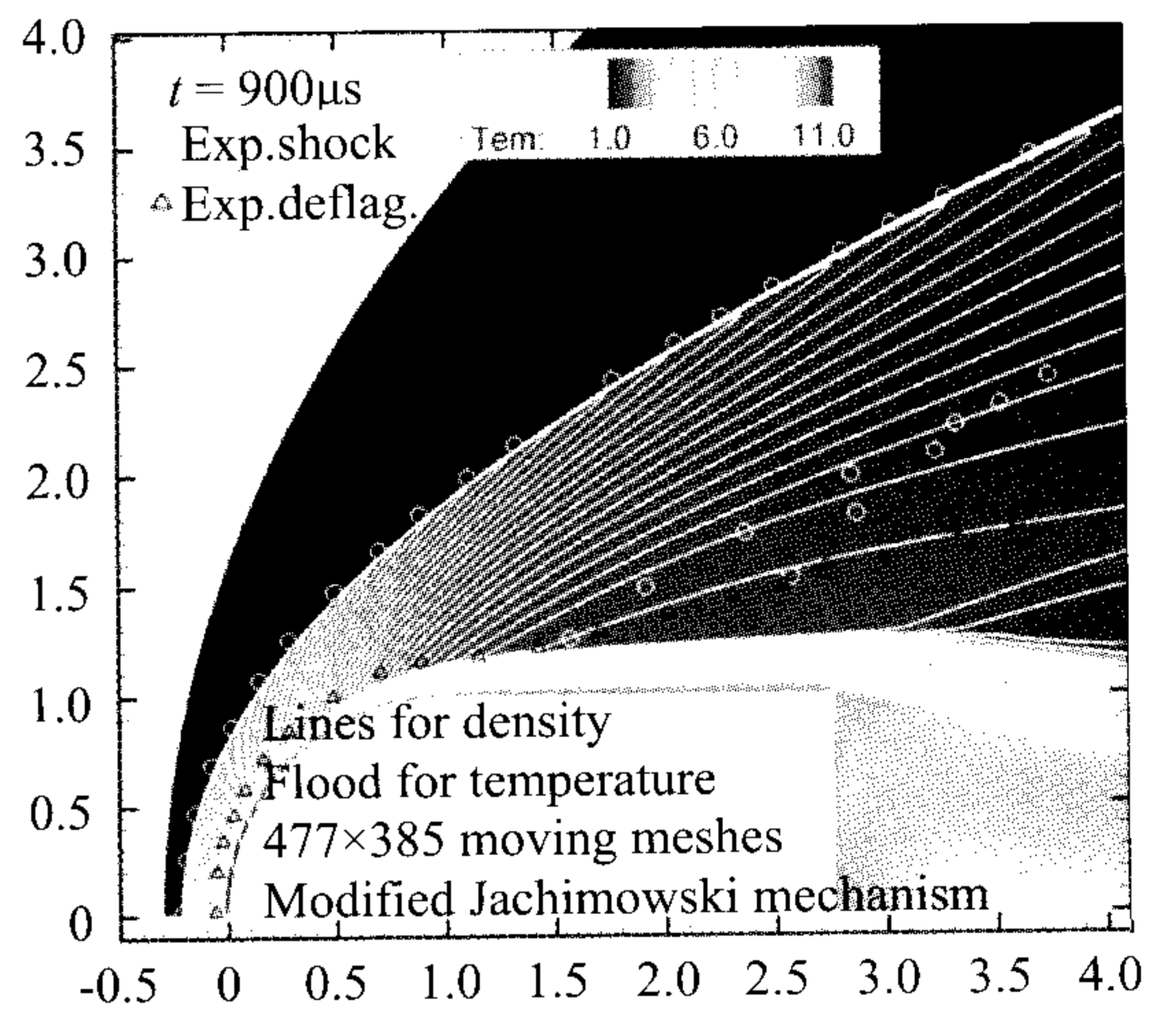
(a) Lehr 实验的纹影图



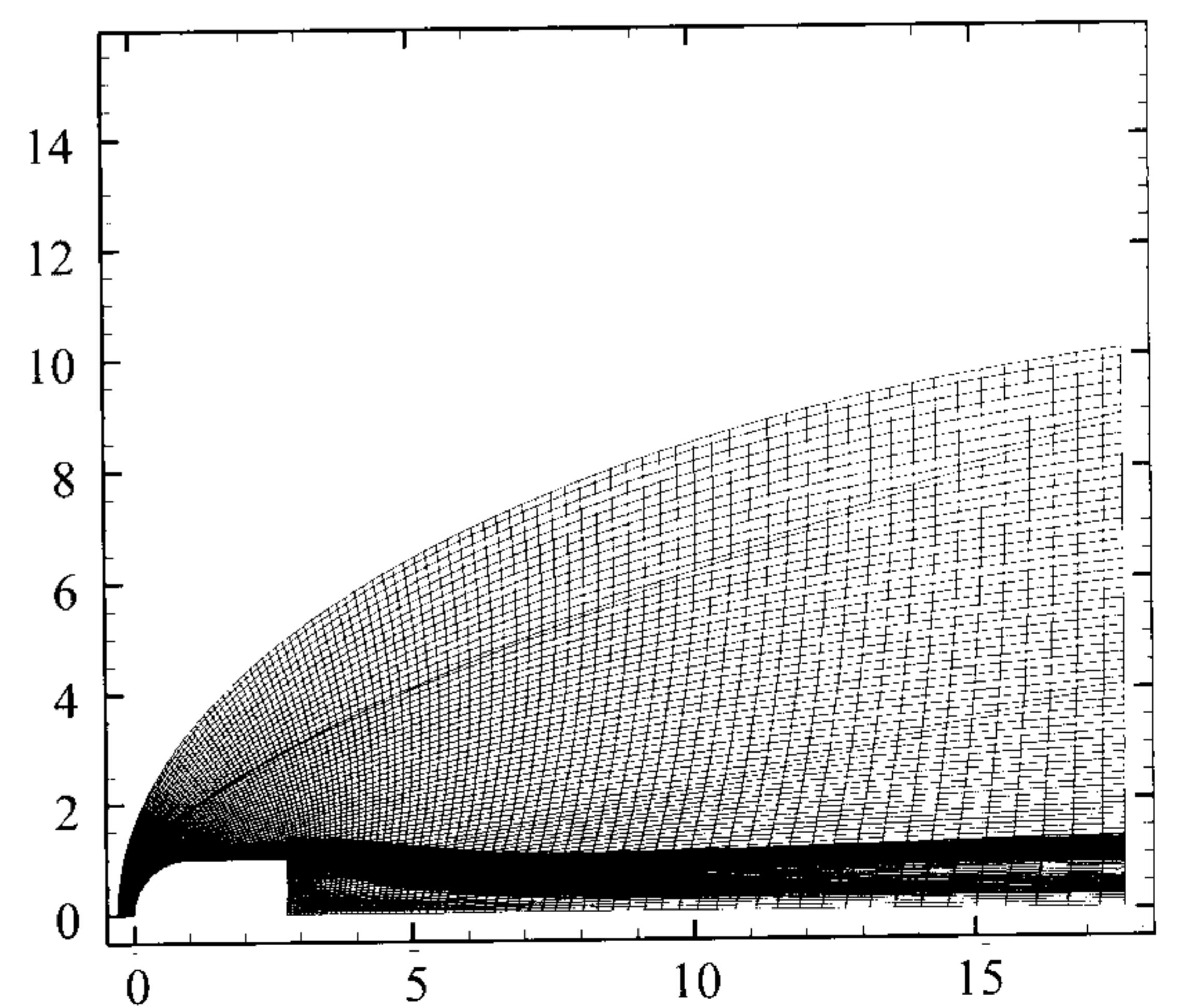
(b) 瞬时密度等值线和温度云图



(c) 瞬时自适应移动网格



(d) 定常时的密度等值线和温度云图



(e) 定常时的自适应移动网格示意图

图 1 $M = 3.55$ 时的实验和计算结果比较
Fig. 1 Comparison of experimental schlieren picture and computed density and temperature contours for the case $M = 3.55$

我们还模拟了单独半球头区域, 发现网格数从 256×256 到 1024×1024 , 以及两个反应机理都收敛到定常态. 图 2 是两个网格数的残差收敛史比较, 计算过程中需要人工点火, 否则收敛到无燃烧的流场. 我们在前对称轴中间附近 5×5 网格上施加一个时间步的人工高温 (3500K) 热斑启动燃烧, 使流场收敛到定常燃烧流态.

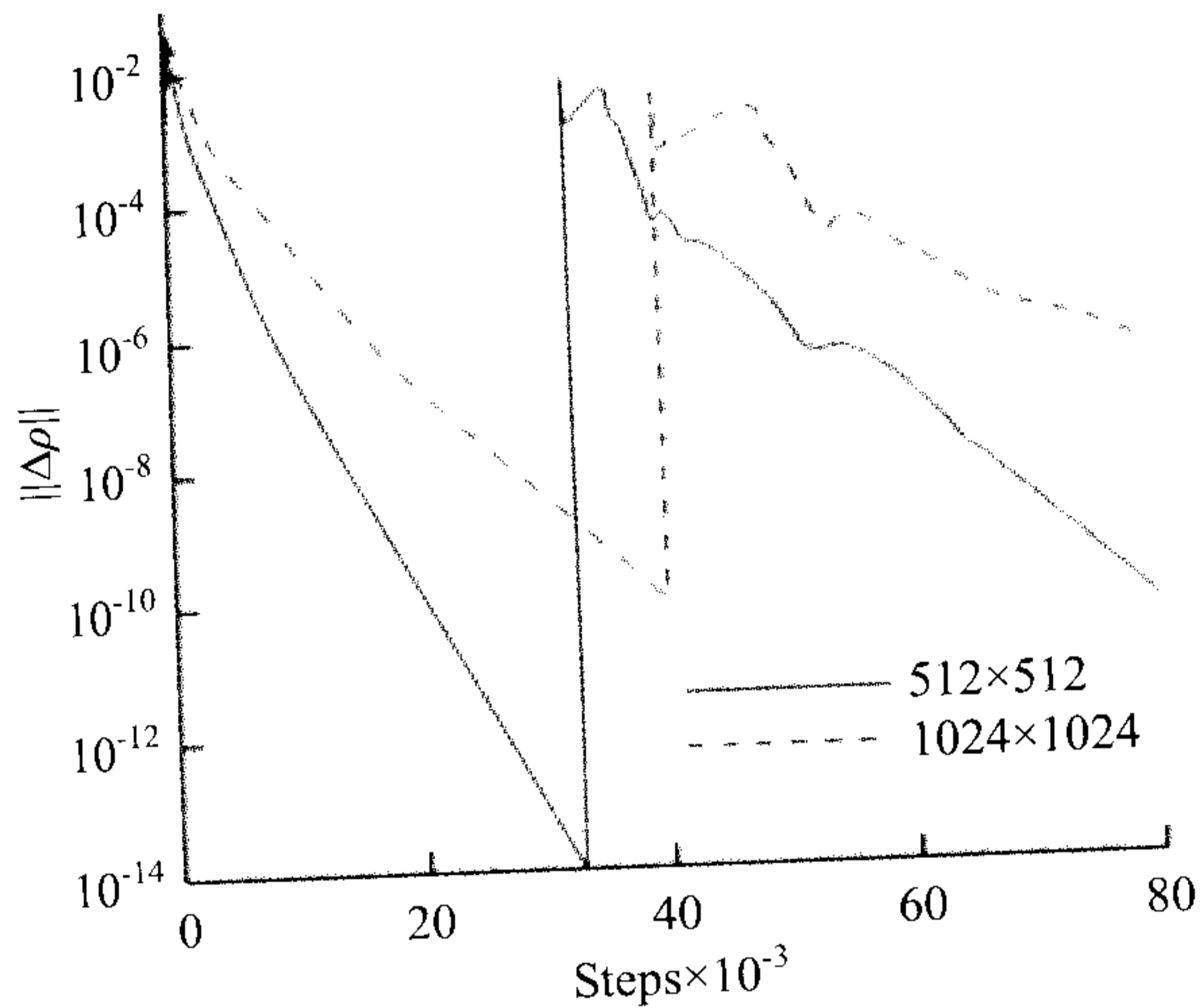


图 2 $M=3.55$ 的残差收敛史
Fig. 2 Residual history for $M=3.55$

3.2 $M=6.46$ ($V=2.605\text{ km/s}$) “定常”燃烧

该算例对应于 Lehr 实验^[10]中弹丸在等当量比氢/空气混合气中以超爆轰速度飞行的情况. 早期的数值模拟研究使用较少网格, 都获得定常燃烧流场. 在文献[19, 20]中我们发现用 LU-SGS 方法配合几种常用高分辨率格式, 采用 Evans 化学机理, 在粗网格上能得到定常流场, 但在密网格上得不到定常流场. 本文用两种化学机理, 计算单独半球头体区域, 收敛情况如表 1 所示. MJ 机理在 2048^2 网格上也不收敛, 再次显示模拟这个“定常”情况的特殊困难.

表 1 不同化学机理对 $M=6.46$ 的计算收敛性影响
Table 1 Effects of various reaction mechanisms on iterative convergence of $M=6.46$ case

化学机理	512^2	1024^2	2048^2
Evans 机理	收敛	不收敛	不收敛
MJ 机理	收敛	收敛	不收敛

3.3 $M=4.48$ ($V=1.804\text{ km/s}$) 振荡燃烧

Lehr 文章^[10]没有给出此工况, 该算例最初见于 Choi^[14], 最近刘等^[17]用 WENO 格式计算单独球头区域, 用网格数取 201 (流向) \times 251 (法向) 获得基本上

网格无关的结果. 本文用较低精度的 TVD 格式, 故取 256×320 网格数. 前人数值计算的前驻点压力振荡频率一般都能和实验值 (425kHz) 一致. 本文用 MJ 机理能得到周期性较好的振荡燃烧流态, 计算的振荡频率为 428kHz , 也接近实验值. 所得前对称轴驻点压力随时间变化如图 3 所示, 其中 MJ 机理所得的周期行为和文献[14]的一致, 但 Evans 机理则只得到定常流态. 图 3 的时间变化曲线比文献[14]和文献[17]的更光滑, 周期性更有规律. 这可能和本文用了 minmod 限制器和 TVD 格式有关, 其较大的数值耗散保证了了解的单调性, 不过也可能和采用 NS 方程有关. 而[14]选了陡化间断参数的 MUSCL 限制器, [17]用了 WENO 格式, 其流场分辨率虽然更高, 但周期的规律性较差.

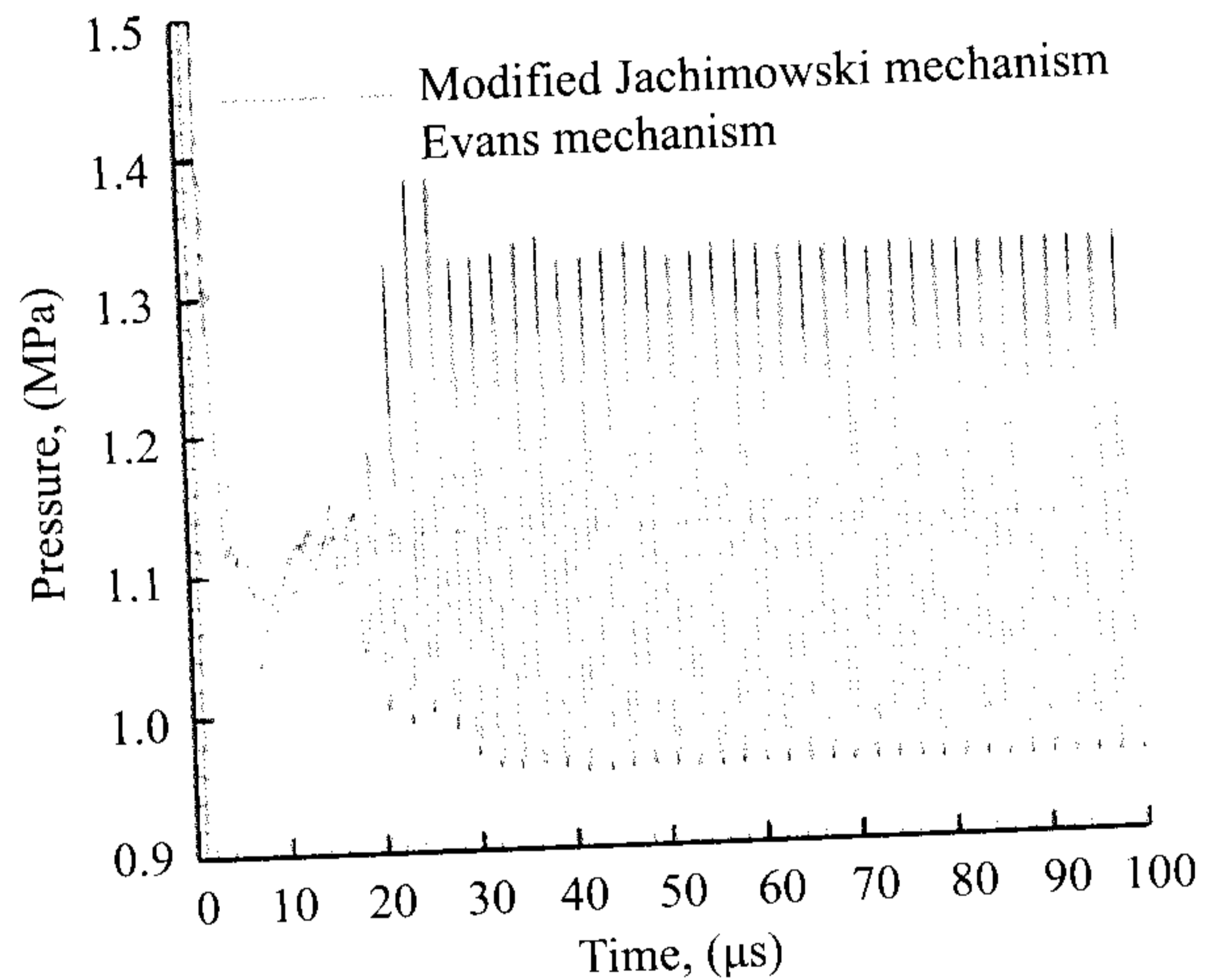
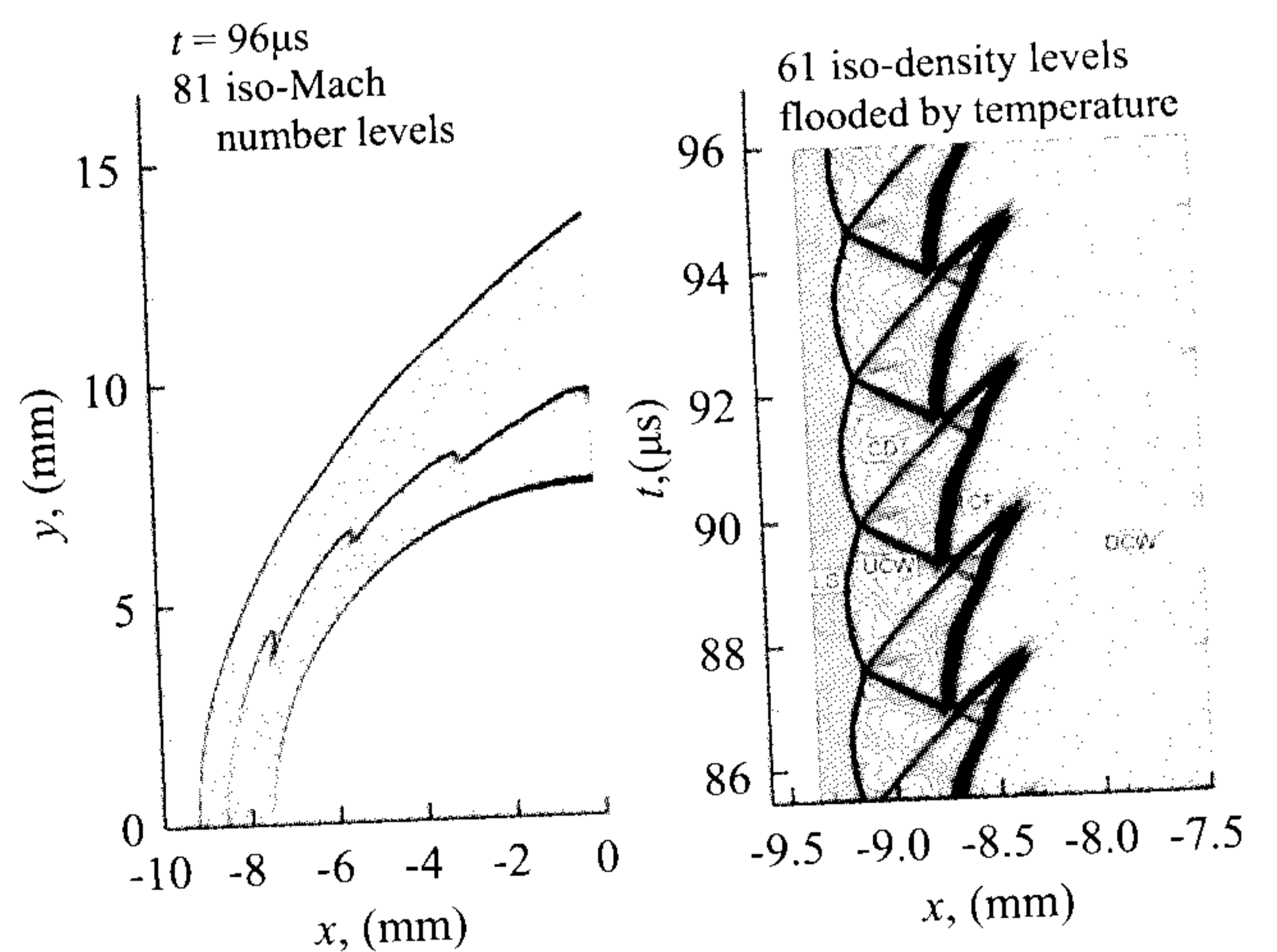
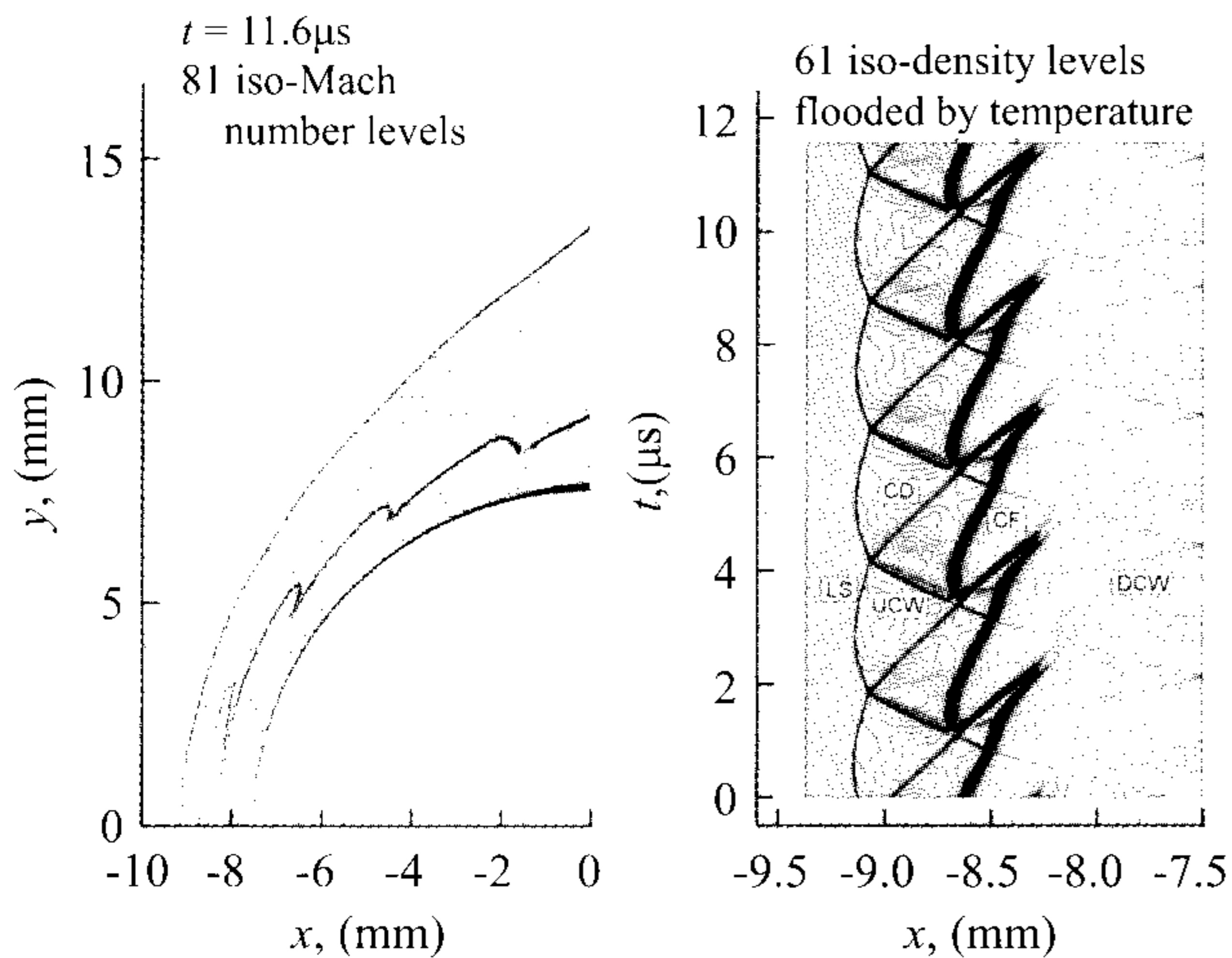


图 3 $M=4.48$ 时前驻点的压力随时间变化过程
Fig. 3 Time history of stagnation point pressure at $M=4.48$



(a) 256×320 固定网格



(b) 256×320 移动网格

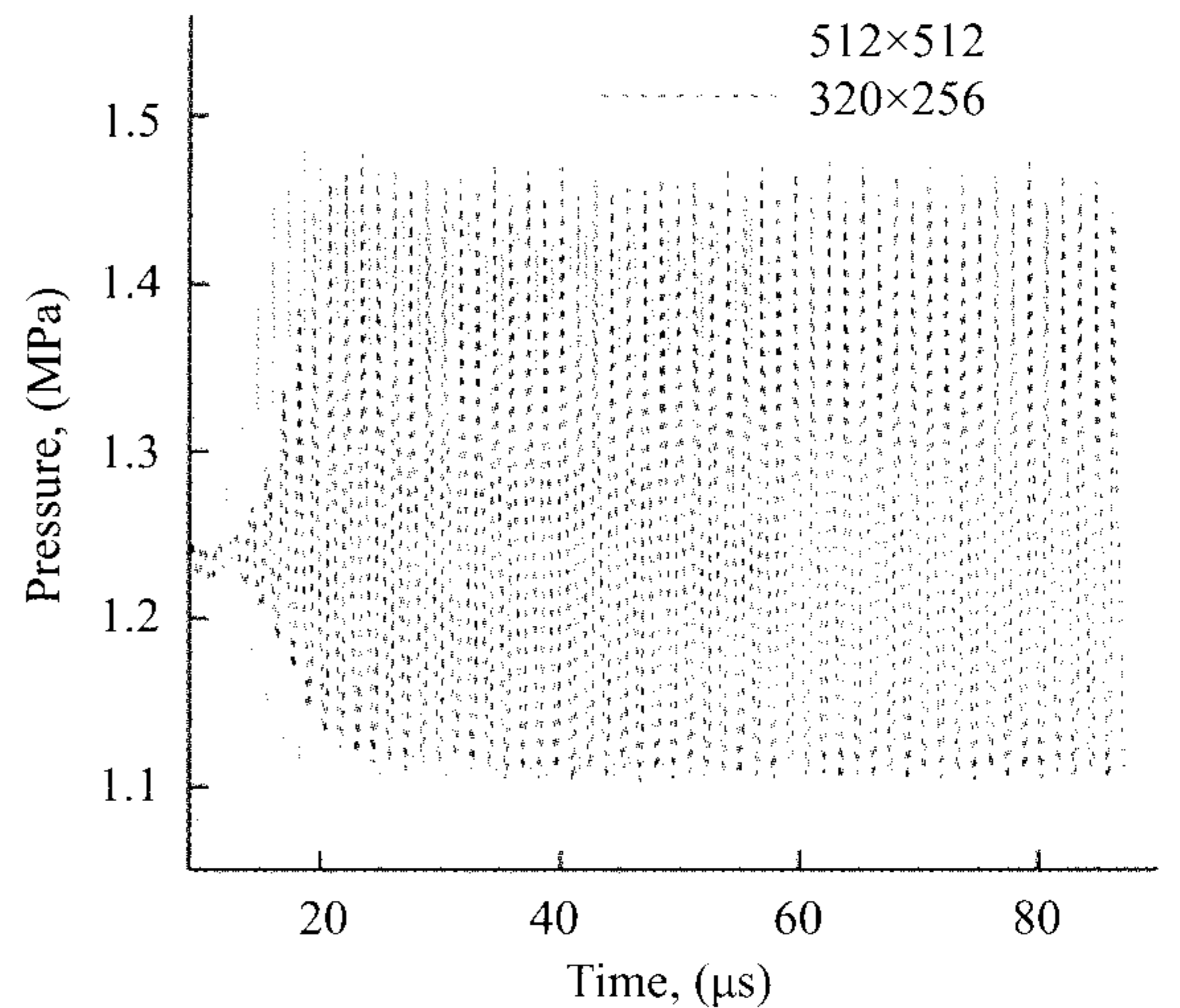
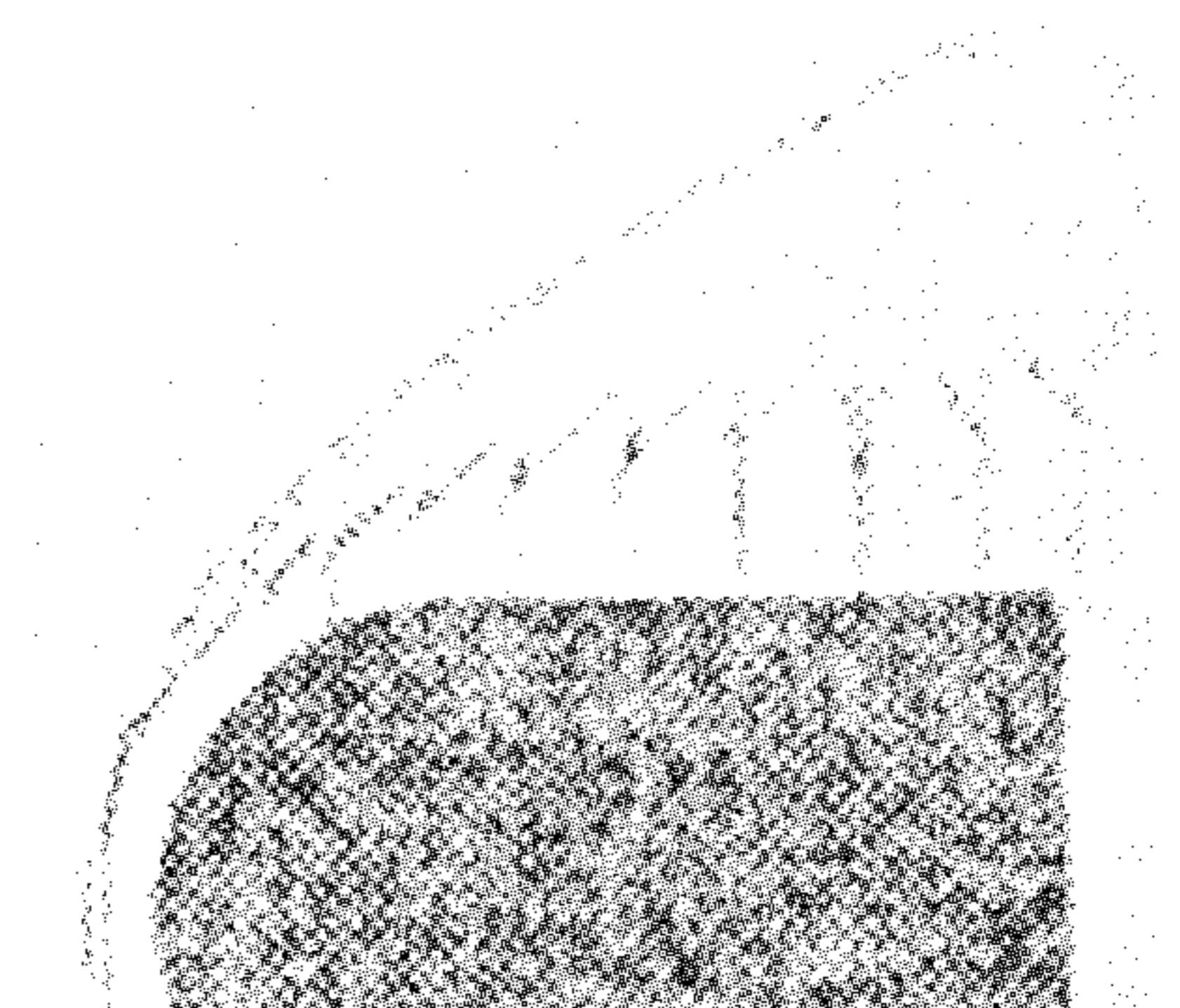
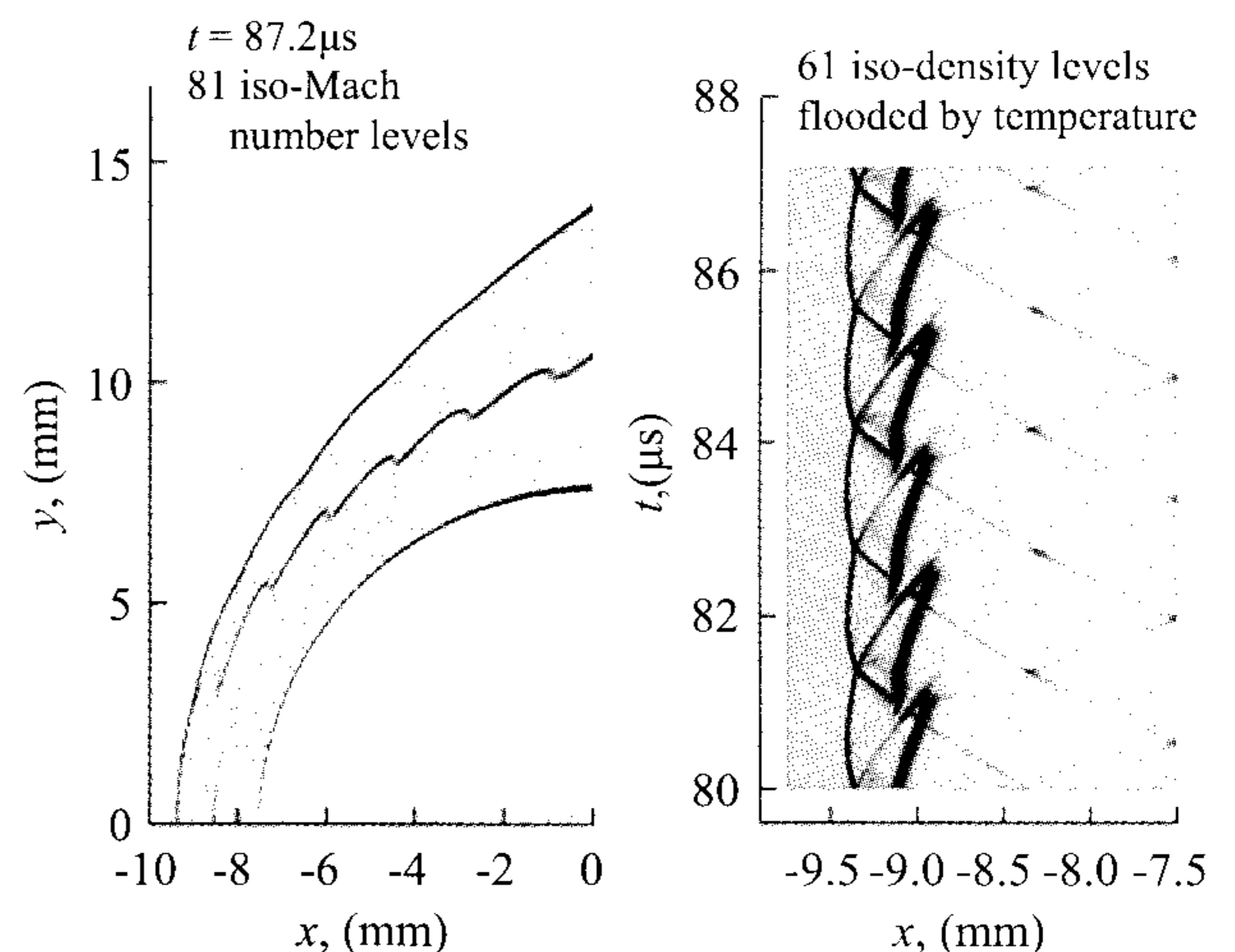
图4 $M = 4.48$ 时的 Mach 数分布及前驻点线上密度随时间的变化过程, 右图的灰度由深到浅表示温度由低到高. LS-前导激波, CD-接触间断, UCW-上行压缩波, DCW-下行压缩波, CF-燃烧面

Fig. 4 Mach number distributions and temporal variations of density along stagnation line at $M = 4.48$. The deep-to light grey scale in the right indicates temperature varies from low to high. LS-leading shock, CD-contact discontinuity, UCW-forward compression wave, DCW-backward compression wave, CF-combustion front

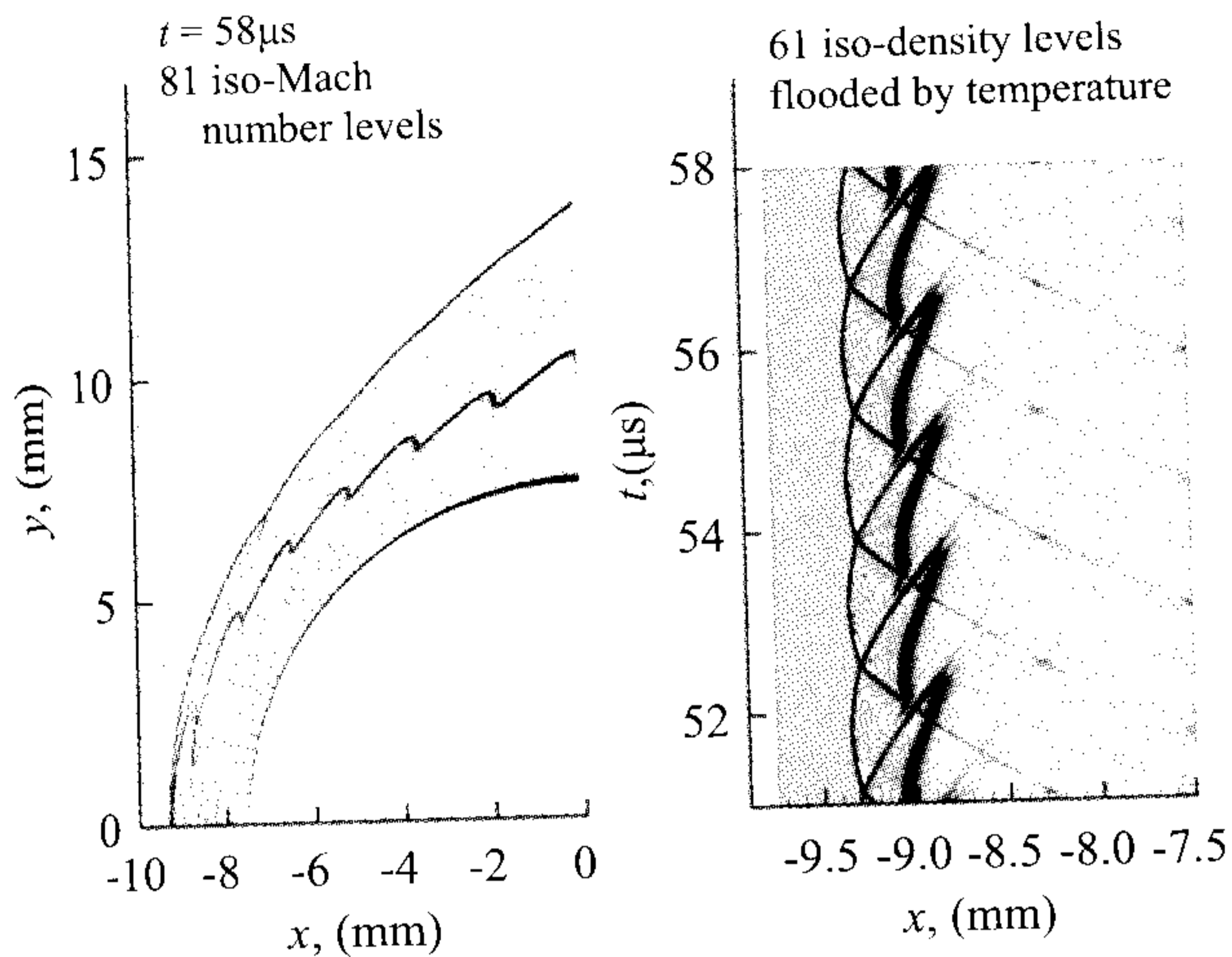
某一时刻的 Mach 数等值线和前对称轴上密度随时间变化过程如图 4 所示. 在一个周期内, 由前导激波诱导的爆燃区膨胀产生上行压缩波(UCW)和下行压缩波(DCW), 上行压缩波和前导激波(LS)相互作用, 强化前导激波, 并反射回来弱波; 下行压缩波向下游传播到物面后反射回来并受新产生爆燃区的强化影响, 和前导激波相互作用生成接触间断(CD), 新爆燃区再次向上下游分别发出压缩波. 这一过程, 与文献[15]的振荡机理, 以及以前模拟结果等^[13, 14, 17]都符合. 图 4(b)移动网格的 DCW 压缩波和燃烧面比图 4(a)固定网格的更清晰, 显示了用移动网格的好处.

3.4 $M = 4.79$ ($V = 1.931$ km/s) 振荡燃烧

Lehr 文章^[10]没有给出此工况, 该算例最初出自 Matsuo^[13]. 本文分别取 256×320 和 512×512 固定网格, 所得前对称轴驻点压力随时间变化如图 5 所示, 可见周期规则性比[17]的更好. 计算的振荡频率为 714 kHz, 很接近[13,14,17]等所给的实验值 712 kHz. 图 6 给出了[13]引述的实验图片、本文计算的瞬时流场 Mach 数分布和前对称轴上密度随时间变化历程. 可见密网格对接触间断和燃烧波的分辨率更好.

图5 $M = 4.79$ 时前驻点压力随时间变化过程Fig. 5 Time history of stagnation point pressure at $M = 4.79$ (a) $M=4.79$ Lehr 实验照片^[13]

(b) 256×320 固定网格



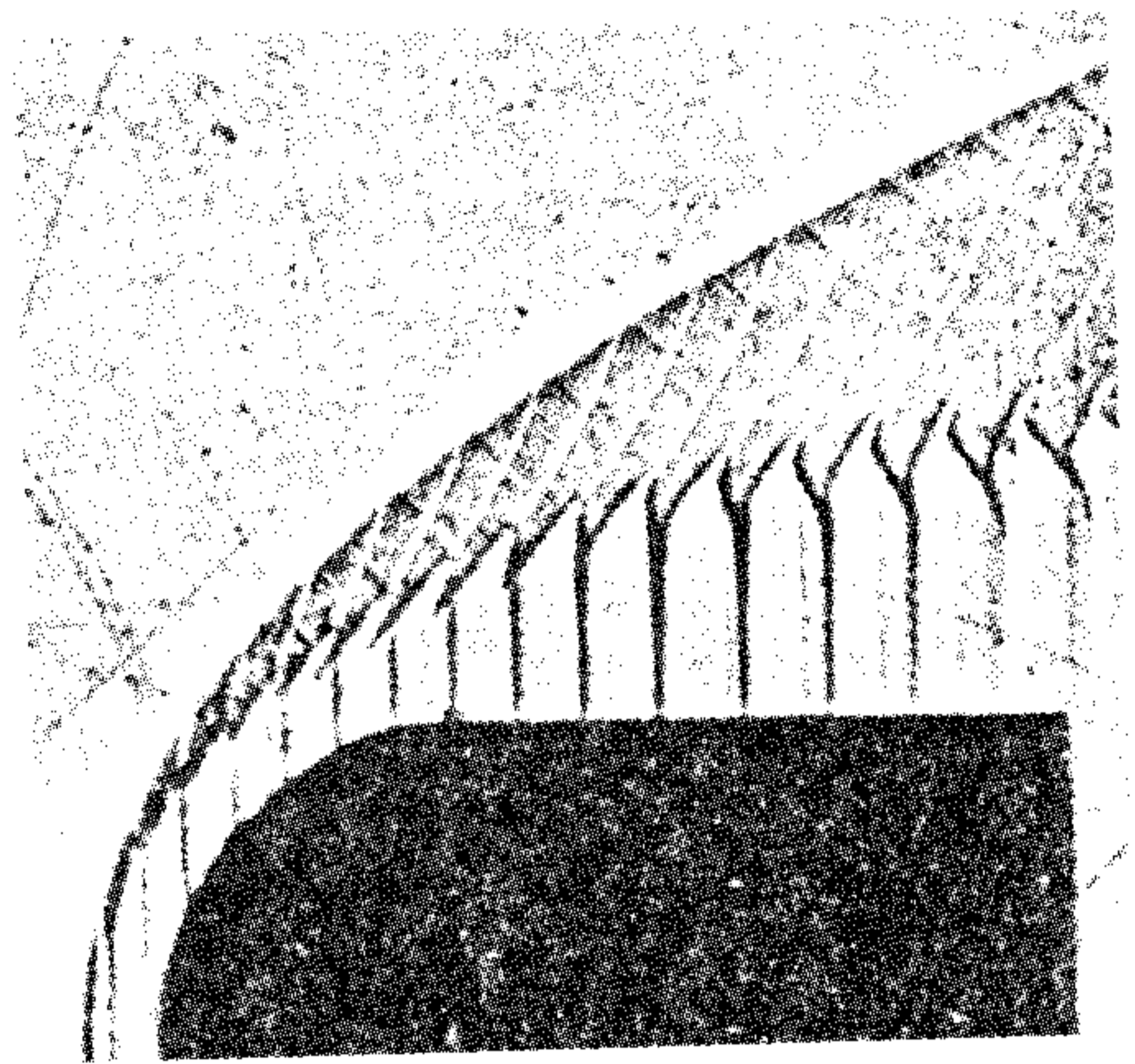
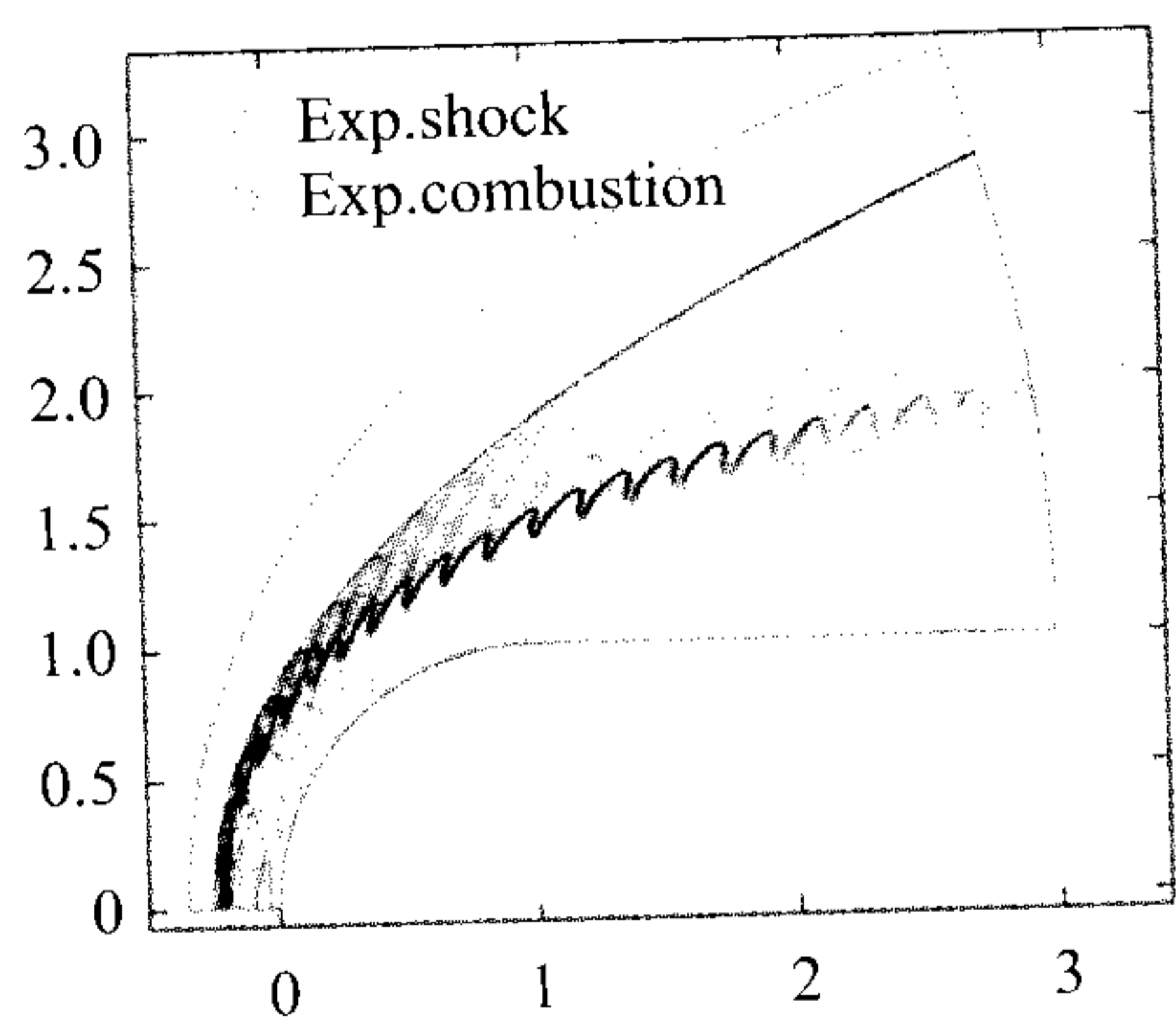
(c) 512×512 固定网格

图 6 $M = 4.79$ 时的 Mach 数分布及前驻点线上密度随时间的变化过程Fig. 6 Mach number distribution and temporal variation of density along stagnation line at $M = 4.79$

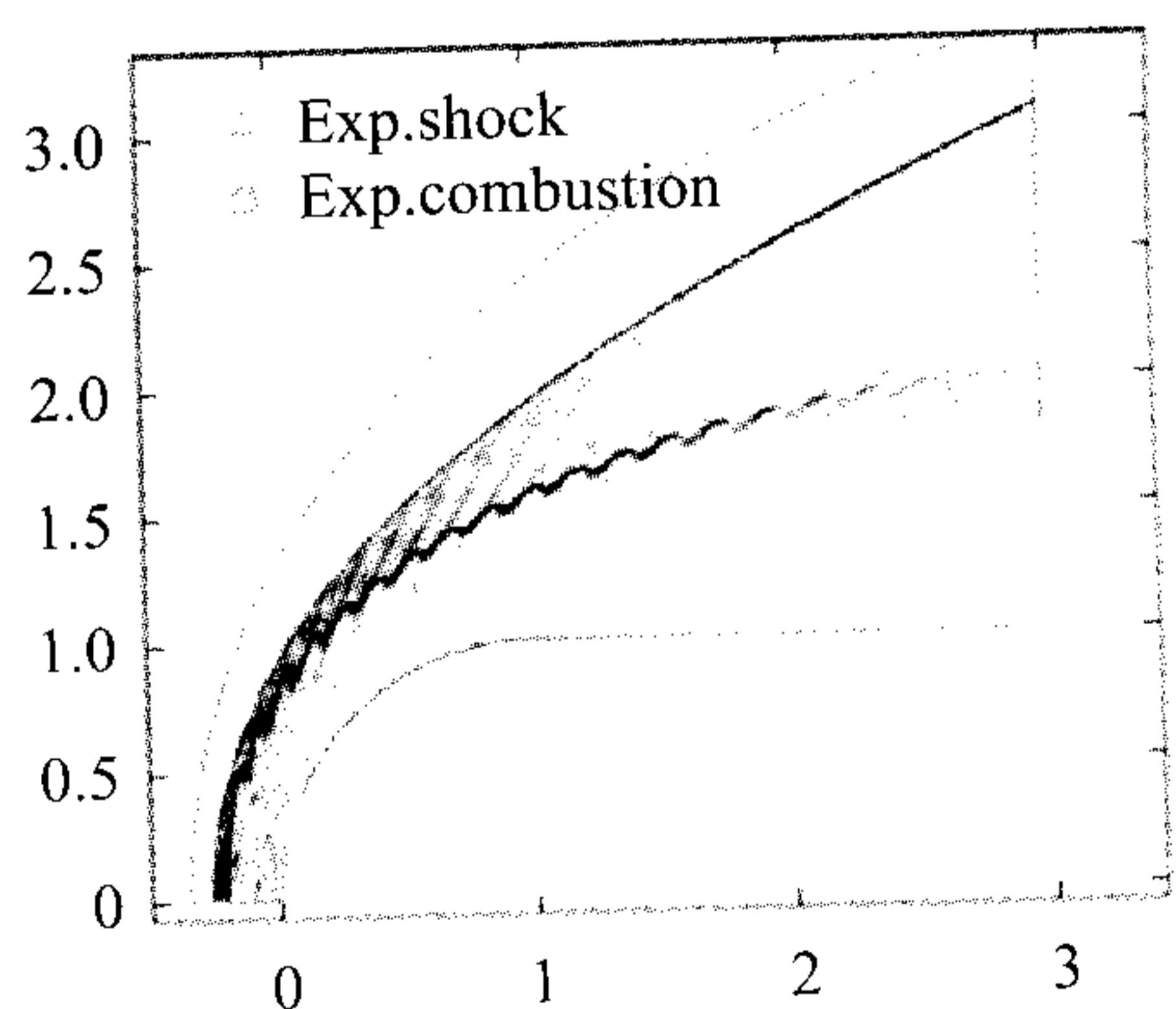
3.5 $M = 5.04$ ($V = 2.035$ km/s) 振荡燃烧

Lehr 实验照片显示 $M = 5.04$ 工况有规则的高频振荡燃烧波及相关的压缩波和头激波相互作用的纹影照片(图 7(a)), 并测得振荡频率为 1.04 MHz. Lehr 给出的来流速度为 2.029 km/s. 我们按照 $M = 5.04$ 和等当量比质量分数计算的来流速度为 2.035 km/s. 用此速度计算, 在计算开始阶段有比较规则的振荡燃烧, 但时间一长燃烧波要么变得混乱, 要么就和激波耦合在一起, 散失了规则性. 计算分别取 512×512 和 1024×1024 两种固定网格数, 并比较两种计算历程. 第一种历程是先以 $\Delta t = 6.0$ ns 走 60 μ s, 然后以 $\Delta t = 1.5$ ns 走 60 μ s, 终止于 120 μ s. 第二种历程是全程以时间步长 $\Delta t = 1.5$ ns 走 120 μ s. 图 7(b)、7(c)分别为用第一种历程在 1024×1024 和 512×512 网格上的结果, 图 7(d)为用第二种历程在 512×512 网格上结果. 可见图 7(b)和 7(c)比较规整, 和实验可以定性一致, 计算的振荡频率为 1.17 MHz. 而图 7(d)中燃烧面和激波耦合在一起, 完全没有规则性. 我们猜想可能是流场从非物理的直匀流发展到振荡燃烧流过程中, 在前对称轴附近, 用第二种历程, 由于小时间步长能分辨出更细致的波结构, 这其中既有物理波也有数值波, 它们一起和化学燃烧反应相互作用, 使得燃烧波和头激波耦合在一起. 而用第一种历程, 初始采用大时间步长计算时, 数值耗散较大, 小尺度燃烧效应被数值耗散抹平, 前导激波基本不受干扰, 整个流场结果反而更符合实验过程. 然而计算时间一长, 数值波发展后期还是

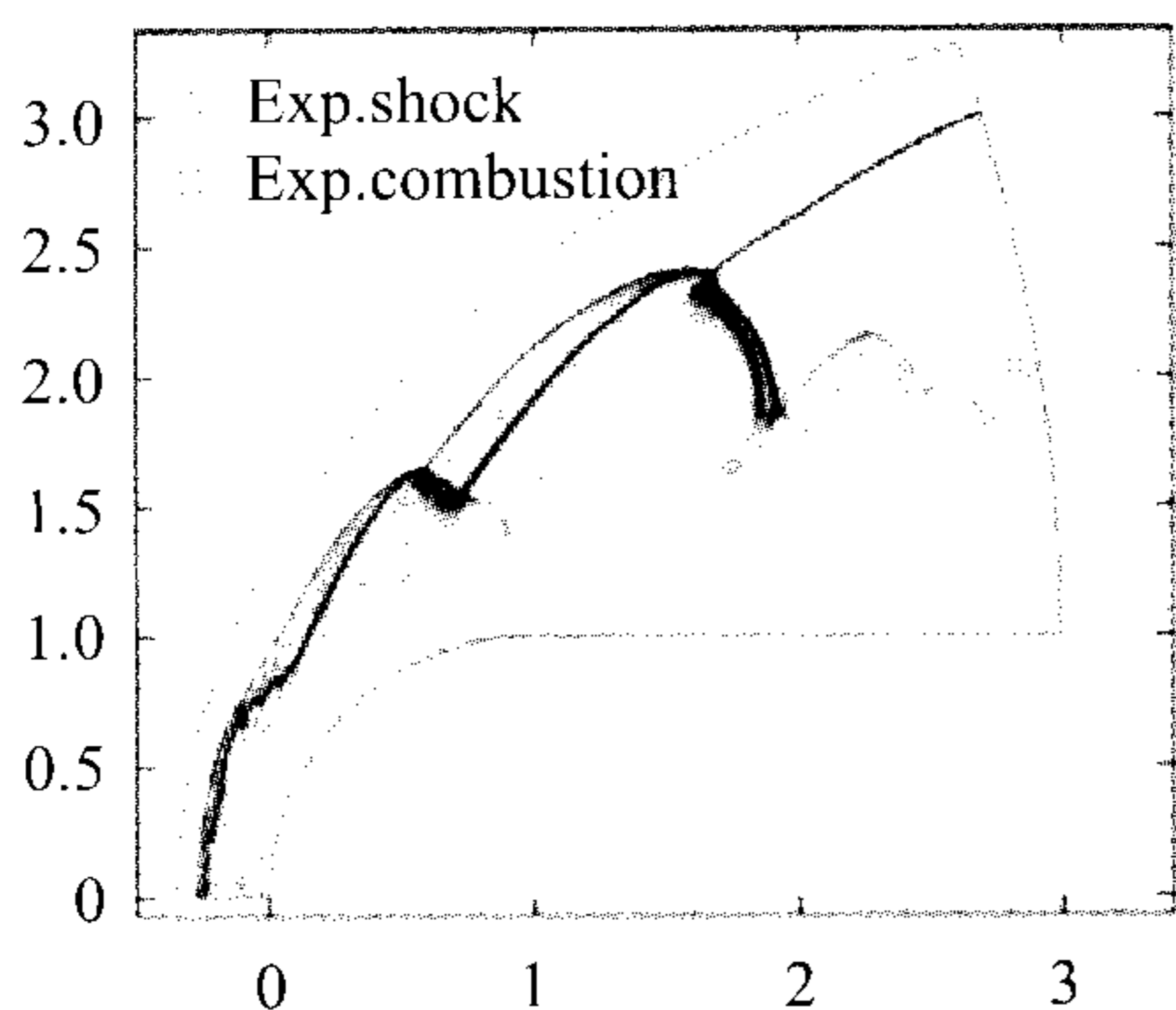
要破坏规则的燃烧结构. 这个算例显示了数值模拟高速燃烧流问题的一个挑战, 即如何控制数值误差和高放热反应的耦合效应, 如同 Yee 等^[3]指出的模拟刚性爆轰波问题有一些“反直觉”的困难一样. 如何改进计算的可信度是今后需要加强研究的问题.

(a) Lehr 实验的纹影图, $M = 5.04$ 

(b) 1024×1024 meshes. 61 iso-density lined



(c) 512×512 meshes. 61 iso-density lined



(d) 512×512 meshes. 61 iso-density lined fixed time step 1.5 ns all the time

图7 $M = 5.04$ 时的密度等值线分布, (b)和(c)是先用 $\Delta t = 6.0\text{ns}$ 后用 $\Delta t = 1.5\text{ns}$ 的结果, (d)是全程都用 $\Delta t = 1.5\text{ns}$ 的结果

Fig. 7 Density distributions at $M = 5.04$. (b) and (c) are obtained with $\Delta t = 6.0\text{ns}$ and $\Delta t = 1.5\text{ns}$ in turn, while (d) is obtained with fixed time step $\Delta t = 1.5\text{ns}$

4 结论

将基于 TTM 网格方程的移动网格法应用于数值求解轴对称化学反应流 NS 方程, 计算了 Lehr 实验的 H_2/O_2 和 H_2/Air 预混气体绕球头体的激波诱导燃烧问题. 主要结论如下:

(1) 模拟了有底部流场的 $M = 3.55$ 情况, 获得了流场未达到定常态前在圆柱侧边向外倾斜的燃烧波及其前导小激波的流场结构, 与 Lehr 实验照片接近. 而当流场达到定常态时只有一个脱体激波和一个爆燃波;

(2) 分别用 $M = 4.48$ 和 4.79 振荡燃烧情况检验了两种化学反应模型, 其中 Evans 模型只得到定常流态因而不适用于模拟这类问题, 修正 Jachimowski 模型可得到规则振荡燃烧. 验证了前人的燃烧振荡机制, 所得振荡频率和实验值比较符合.

(3) 对 $M = 5.04$ 的高频振荡燃烧做了模拟, 发现流场仅在一定的时间阶段呈现如 Lehr 实验所显示的规则振荡燃烧状态, 稍后就变成燃烧波和激波大范围耦合的不规则结果. 这表明模拟激波诱导燃烧问题有一些微妙的困难, 如何抑制数值误差和放热反应的耦合放大效应值得今后关注.

参考文献 (References)

- [1] Collella P, Majda A, Roytburd V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves [J]. *SIAM Journal Scientific and Statistical Computing*, 1986, 7(4): 1059~1080
- [2] LeVeque R, Yee H C. A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms [J]. *Journal Computer Physics*, 1990, 86: 187~210
- [3] Yee H C, Kotov D V, Wang W, et al. Spurious behavior of shock-capturing methods by the fractional step approach: problems containing stiff source terms and discontinuities [J]. *Journal Computer Physics*, 2013, 241: 266~291
- [4] Tosatto L, Vigeveno L. Numerical solution of under-resolved detonations [J]. *Journal Computer Physics*, 2008, 227: 2317~2343
- [5] Ziegler J L, Deiterding R, Shepherd J E, et al. An adaptive high-order hybrid scheme for compressive, viscous flows with detailed chemistry [J]. *Journal Computer Physics*, 2011, 230: 7598~7630
- [6] Helzel C, LeVeque R, Warneke G. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves [J]. *SIAM Journal Scientific and Statistical Computing*, 1999, 22: 1489~1510
- [7] Wang W, Shu C W, Yee H C, et al. High order finite difference methods with subcell resolution for advection equations with stiff source terms [J]. *Journal Computer Physics*, 2012, 231: 190~214
- [8] Wang C, Zhang X X, Shu C W, et al. Robust high order discontinuous Galerkin schemes for two-dimensional gaseous detonations [J]. *Journal Computer Physics*, 2012, 231: 653~665
- [9] Poinot T, Garcia M, Senoner J M, et al. Numerical and physical instabilities in massively parallel LES of reacting flows [J]. *Journal Scientific Computing*, 2011, 49: 78~93
- [10] Lehr H F. Experiments on shock-induced combustion [J]. *Astronomy Acta*, 1972, 17: 589~597
- [11] Yungster S, Eberhardt S, Bruckner A. Numerical simulation of hypervelocity projectiles in detonable gases [J]. *AIAA Journal*, 1991, 29: 187~199
- [12] 孙明波, 梁剑寒, 王振国. 非平衡流解耦方法及其计算激波诱导燃烧的应用验证 [J]. *航空动力学报*, 2008, 23(11): 2055~2061
- [13] Matsuo A, Fujii K, Fujiwara T. Flow features of shock-induced combustion around projectile travelling at hypervelocities [J]. *AIAA Journal*, 1995, 33: 1056~1063
- [14] Choi J Y, Jeung I S, Yoon Y B. Computational fluid dynamics algorithms for unsteady shock-induced combustion, part I: validation [J]. *AIAA Journal*, 2000, 38(7): 1179~1187

- [15] McVey J B, Toong T Y. Mechanisms of instabilities of exothermic hypersonic blunt-body flow [J]. *Combustion Science and Technology*, 1971, 3: 63~76
- [16] 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
- [17] 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): 597~606
- [18] Yuan L, Tang T. Resolving the shock-induced combustion by an adaptive mesh redistribution method [J]. *Journal Computer Physics*, 2007, 224: 587-600
- [19] 袁礼, 李彬. 几种高分辨率格式在计算定常超声速燃烧流动中的比较 [J]. 气体物理, 2011, 6(4): 41~52
- [20] Li B, Yuan L. Convergence issues in using high-resolution schemes and lower-upper symmetric Gauss-Seidel method for steady shock-induced combustion problems [J]. *International Journal of Numerical Methods Fluids*, 2013, 71: 1422~1437
- [21] Evans J S, Schexnayder C J. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames [J]. *AIAA Journal*, 1980, 18(2): 188~193
- [22] Jachimowski C J. An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion [R]. NASA Technical Paper 2791, 1988
- [23] Poinso T, Veynante D. Theoretical and numerical combustion [M]. PA, USA: RT Edwards Incorporated, 2001
- [24] Kee R J, Rupley F M, Meeks E, et al. A FORTRAN chemical kinetics package for the analysis of gas phase chemical and plasma kinetics [R]. UC-405 SAND96-8216, 1996
- [25] Yee H C. A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods [R]. NASA TM 101088, 1989
- [26] Shuen J, Yoon S. Numerical study of chemically reacting flows using a lower-upper symmetric successive overrelaxation scheme [J]. *AIAA Journal*, 1989, 27: 1752~1760

作者简介:

袁 礼(1963-) 男, 重庆永川, 工学博士, 中国科学院数学与系统科学研究院研究员, 主要从事化学反应流和多介质流数值模拟方法的研究. 通信地址: 北京市中关村东路 55 号计算数学所(100190), E-mail: lyuan@lsec.cc.ac.cn.