龙格库塔间断有限元方法在化学反应流动中的应用研究

张磊

在高超声速飞行器的基础科学问题中，化学非平衡、超声速燃烧、脉冲爆轰、烧蚀防护等涉及化学反应流的问题是重要的研究对象。数值模拟是研究这些问题的主要手段。可压缩化学反应流的模拟是以数值求解含刚性源项的双曲守恒律方程组为基础的。近年来，Cockburn 等人发展的龙格库塔间断伽辽金（RKDG）有限元方法已经发展成为求解非线性双曲守恒律问题的一种有效的高精度高分辨率数值方法，其在含有间断问题的数值模拟中发挥着越来越大的作用。

本文将 RKDG 方法推广到求解带有刚性源项的双曲守恒律方程组，针对一维标量方程分析了推广的算法的数值精度和间断捕捉能力，并将其应用于模拟一维和二维矩形网格下的爆轰波问题。为了和常用的有限差分型 WENO 方法进行比较，我们设计了用 WENO 方法计算刚性源项所需的高阶重构格式。对一维带源项守恒律的计算表明，对于非刚性问题，RKDG 方法比有限差分型 WENO 方法的误差更小，而对于刚性问题，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 方法对于爆轰波结构的分辨和爆轰波位置的捕捉能力更强。除分裂法外，本文还将隐显龙格库塔（IMEXRK）方法推广到 DG 方法中，并设计了相应的限制器。

进一步，我们将推广的 RKDG 方法应用于真实非平衡化学反应流问题中，模拟这类问题主要有两个方面的困难：

第一方面是实际应用的几何复杂性，为克服此困难，我们采用了无结构三角形网格上的RKDG方法。为了保持计算过程中数值解的守恒性，采用了基于三角形重心Taylor展开的基函数。并发展了一种新的P^2元的基函数，在使用限制器防止密度和压力等变量发生下溢时，这种新的基函数比传统的基函数有更小的误差。

第二方面是求解变量数的增加及源项引起的刚性问题，这些复杂性使得求解这类问题需要很密的网格和很小的时间步长，因而计算非常耗时。为此，我们编制了 RKDG 方法的 MPI 并行程序来缩短计算时间。通过对爆轰波问题和基元反应模型问题的数值模拟，我们发现虽然流场中不同位置的刚性不同，使得基于区域分解策略的并行算法的并行效率比求解无反应问题时有所降低，但 RKDG 方法仍然具有较高的并行扩展性，不失为模拟化学反应流动的一种非常有效的方法。

关键词：龙格库塔间断有限元方法；多组分反应 Euler 方程组，基元化学反应模型，刚性源项.，爆轰波，并行计算。