

文章编号: 1000-8055(2009)08-1831-06

预处理 AUSM + 格式在全速域 反应流模拟中的应用

刘 晨, 王江峰, 伍贻兆

(南京航空航天大学 航空宇航学院, 南京 210016)

摘 要: 对预处理修正的 AUSM + (advection upwind splitting method +) 格式进行了详细讨论, 并将其应用于全速域范围内的化学反应流数值模拟。基于多组分 Navier-Stokes 方程, 结合控制方程时间导数项的预处理, 采用预处理修正的 AUSM + 格式发展了一种模拟全速域范围内化学反应流的有效算法。验证算例包括超声速、亚声速以及极低速情形的化学反应流, 计算结果表明基于预处理 AUSM + 格式发展的算法能够有效地用于全速域范围内化学反应流动问题的模拟。

关 键 词: 全速域流动; 化学反应流; 预处理方法; 新型上风(AUSM +) 格式

中图分类号: V211.3

文献标识码: A

Application of preconditioned AUSM + scheme on numerical simulation of reacting flows at all speeds

LIU Chen, WANG Jiang-feng, WU Yi-zhao

(College of Aerospace Engineering,

Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: Preconditioned AUSM + (advection upwind splitting method +) scheme was discussed in details and was applied to numerical simulation of multi-component chemical reacting flows at all speeds. Based on multi-component Navier-Stokes equations with time-derivative preconditioning, an effective algorithm for simulating the reacting flows over a wide range of Mach numbers was developed using the preconditioned AUSM + scheme. Numerical experiments, including supersonic flow, subsonic flow and low speed flow, show that the algorithm can be applied efficiently to the reacting flows at all speeds.

Key words: all speeds flow; chemical flow; preconditioning;

AUSM + (advection upwind splitting method +) scheme

近年来随着 CFD (computational fluid dynamics) 技术的发展, 对化学反应流模拟的研究也得到了广泛的重视和发展。基于密度的时间推进方法已经得到了高度的发展: 高效率的隐式格式、高精度的迎风分裂格式以及高鲁棒性的全耦合技术。这些技术在应用于超声速、高超声速范围内的反应流问题时表现出很好的模拟能力^[1-2]。然而很

多反应流问题发生在低速情形, 比如工业炉、内燃机、涡轮发动机、火焰等等。对于这些低速问题, 常规的基于密度的方法由于系统的刚性问题使得计算效率急剧恶化。基于上述原因, 通常这些低速化学反应流问题都是采用基于压强的方法进行计算, 这样就避免了低速时的收敛困难问题。

然而很多实际问题都是高速/ 低速的混合问

收稿日期: 2008-08-09; 修订日期: 2008-09-21

基金项目: 国家自然科学基金(90716013)

作者简介: 刘晨(1982 -), 男, 江苏如皋人, 博士生, 主要研究方向为燃烧数值模拟。

题,比如航空发动机、火箭基组合循环飞行器(RBCC),在这些流动中某些区域流动速度较低,而其他区域流速较高,甚至存在激波,于是需要发展一种适用于全速域范围的统一算法.近年来,预处理方法(precondition)作为一种有效的统一算法得到了普遍的重视和发展^[3-5].预处理方法通过在原方程时间导数项乘以一个预处理矩阵来改变方程的特征值矩阵,减小了方程在低速时的条件数,从而很好地解决了系统的刚性问题.

另外考虑到很多实际工程问题流场的复杂性,有必要发展基于非结构网格的高效数值求解方法.本文采用预处理修正的 AUSM+(advection upwind splitting method+)格式结合 Weiss-Smith 预处理方法^[5]发展了一种基于非结构网格的全速域化学反应流场模拟算法,并利用该算法模拟了超声速、亚声速和极低速情形的化学反应流场.模拟结果表明本文发展的算法可以成功地用于模拟全速域范围内的化学反应流场.

1 控制方程

控制方程是预处理的多组元 Navier-Stokes 方程组,其守恒形式如下:

$$\Gamma \frac{\partial}{\partial t} W + \frac{\partial}{\partial x_k} E^k + \varepsilon H = \frac{\partial}{\partial x_k} E_v^k + \varepsilon H_v + S$$
 (1)

其中

$$W = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_j \\ e_t \end{bmatrix}, \begin{matrix} i = 1, \cdots, s; \\ j = 1, 2 \end{matrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} \dot{\omega} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, i = 1, \cdots, s$$

$$E^k = \begin{bmatrix} \rho_i u_k \\ \rho u_j u_k + p \delta_{jk} \\ u_k (e_t + p) \end{bmatrix}, \begin{matrix} i = 1, \cdots, s; \\ j = 1, 2; \\ k = 1, 2 \end{matrix}$$

$$E_v^k = \begin{bmatrix} \rho D_{im} \frac{\partial C_i}{\partial x_k} \\ \tau_{kj} \\ u_j \tau_{kj} + q_{x_k} \end{bmatrix}, \begin{matrix} i = 1, \cdots, s; \\ j = 1, 2; \\ k = 1, 2 \end{matrix}$$

$$H = \frac{1}{x_k} \begin{bmatrix} \rho_i u_k \\ \rho u_j u_k \\ u_k (e_t + p) \end{bmatrix}, \begin{matrix} i = 1, \cdots, s; \\ j = 1, 2; \\ k = 2 \end{matrix}$$

$$H_v = \frac{1}{x_k} \begin{bmatrix} \rho D_{im} \frac{\partial C_i}{\partial x_k} \\ \tau_{kj} \\ u_j \tau_{kj} + q_{x_k} \end{bmatrix}, \begin{matrix} i = 1, \cdots, s; \\ j = 1, 2; \\ k = 2 \end{matrix}$$

式中 W 是守恒通量; E^k 和 E_v^k 分别表示无黏及黏性通量; H 和 H_v 分别表示无黏及黏性轴对称交叉源项; ε 为控制因子, $\varepsilon = 0$ 为二维控制方程, $\varepsilon = 1$ 为轴对称控制方程; S 为化学反应源项; s 为组元个数; x_k ($k = 1, 2$) 为两个坐标分量; u_k ($k = 1, 2$) 为速度分量; τ 为黏性应力; $\dot{\omega}$ 为组元 i 的化学反应质量生成率. 组元 i 的比定压热容、焓值、质量扩散系数以及化学反应质量生成率 $\dot{\omega}$ 由 Chem Kin 库函数获得. 热流率及单位体积总能分别表示为

$$q_{x_k} = \kappa \frac{\partial T}{\partial x_k} + \sum_i^s \rho D_{im} h_i \frac{\partial C_i}{\partial x_k}$$
 (2)

$$e_t = \sum_i^s \rho_i h_i - p + \frac{1}{2} \rho \sum u_k^2$$
 (3)

式中 κ 为导热系数; p 是压强; ρ_i 和 h_i 分别为组元 i 的密度及焓值, $\rho = \sum \rho_i$; D_{im} 是组元 i 在混合气体中的质量扩散系数; 质量分数 $C_i = \frac{\rho_i}{\rho}$.

预处理矩阵采用 Weiss-Smith 矩阵^[5], 在多组元情形其具体形式如下:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \beta_1 \rho & \cdots & \beta_s \rho & \cdots & \beta_s \rho & -\rho_1 u_l & -\rho_1 v_l & \rho_1 l \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \beta_1 \rho & \cdots & \beta_s \rho & \cdots & \beta_s \rho & -\rho_1 u_l & -\rho_1 v_l & \rho_1 l \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \beta_1 \rho_s & \cdots & \beta_s \rho_s & \cdots & \beta_s \rho_s & -\rho_s u_l & -\rho_s v_l & \rho_s l \\ \beta_1 \rho u & \cdots & \beta_s \rho u & \cdots & \beta_s \rho u & -\rho u^2 l & -\rho v u l & \rho u l \\ \beta_1 \rho v & \cdots & \beta_s \rho v & \cdots & \beta_s \rho v & -\rho u v l & -\rho v^2 l & \rho v l \\ \beta_1 h & \cdots & \beta_s h & \cdots & \beta_s h & -u \rho h l & -v \rho h l & l \sum \rho_i \phi_i \end{bmatrix} \Phi + \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon} \end{bmatrix}$$
 (4)

式中

$$l = \gamma - 1;$$

$$\rho h = \sum p_i \phi_i + \frac{1}{l} \rho a^2 = e + p;$$

$$\phi_i = (u^2 + v^2) - \frac{1}{l} \beta_i;$$

$$\beta = \frac{\partial p}{\partial \rho} = \gamma R T - (\gamma - 1) \left[h_i - \frac{1}{2} (u^2 + v^2) \right];$$

$$\varepsilon = \min[\max(Ma^2, Ma_\infty^2), 1];$$

$$\Phi = \frac{1}{\rho a^2} \left(\frac{1}{\varepsilon} - 1 \right)$$

其中 γ 为质量热容之比, a 表示声速.

对于涉及湍流的算例,文中采用常用的 $k-\varepsilon$ 双方程湍流模型,模型具体形式参考文献[3].

文中 H_2/O_2 化学反应模拟采用 Shang^[6] 的 7 组元 7 反应机制, CH_4/O_2 化学反应采用 Smooke^[7] 的 15 组元 42 反应机制.

2 数值方法

2.1 预处理修正的 AUSM+ 格式

预处理修正的 AUSM+ 格式的具体形式为

$$F_{1/2}^c = (\rho u)_{1/2} \begin{bmatrix} Y_i \\ u \\ v \\ h \end{bmatrix}_{L/R} + \begin{bmatrix} 0 \\ p_{1/2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

其中下标 $\frac{1}{2}$ 表示单元交界面; L, R 分别表示左右单元. 如果质量通量 $(\rho u)_{1/2}$ 大于零, 向量 $(Y_i \ u \ v \ h)^T$ 取 L; 若小于零则取 R.

$$m_{1/2} = M_{(4)}^+ (Ma_L) + M_{(4)}^- (Ma_R), \quad m_{1/2}^\pm = \frac{1}{2} (m_{1/2} \pm |m_{1/2}|)$$

$$M_{(1)}^\pm = \frac{1}{2} (Ma \pm |Ma|)$$

$$M_{(4)}^\pm = \begin{cases} \pm \frac{1}{4} (Ma \pm 1)^2 \pm \frac{1}{8} (Ma^2 - 1)^2, & |Ma| < 1 \\ M_{(1)}^\pm, & |Ma| \geq 1 \end{cases}$$

$$P_{(5)}^\pm = \begin{cases} \frac{1}{4} (Ma \pm 1)^2 (2 \mp Ma) \pm \frac{3}{16} Ma (Ma^2 - 1)^2, & |Ma| < 1 \\ \left(\frac{1}{Ma} \right) M_{(1)}^\pm, & |Ma| \geq 1 \end{cases}$$

式中 M 和 P 的下标表示多项式的阶数.

2.2 数值离散及边界条件

控制方程离散采用基于非结构网格的有限体积方法. 空间离散采用预处理修正的 AUSM+ 迎风分裂格式, 时间推进采用 5 步 Runge-Kutta 方法, 并采用当地时间步长方法加速收敛. 为了解决

参数 $(\rho u)_{1/2}$ 和 $p_{1/2}$ 可表示为交界面预处理马赫数^[8]的多项式形式. 预处理马赫数定义为

$$Ma_{L/R} = \frac{1}{f_{1/2}} Ma_{L/R} = \frac{u_{L/R}}{\tilde{a}_{1/2}} \quad (6)$$

其中数值声速 $\tilde{a}_{1/2}$ 定义如下:

$$\tilde{a}_{1/2} \equiv f_{1/2} a_{1/2}$$

式中

$$f_{1/2} = \frac{\sqrt{(1 - \varepsilon_{1/2})^2 Ma_{1/2}^2 + 4\varepsilon_{1/2}}}{1 + \varepsilon_{1/2}}$$

其中 $Ma_{1/2}^2$ 和 $\varepsilon_{1/2}$ 均取为左右单元的代数平均值. 于是交界面马赫数 $\overline{Ma}_{L/R}$ 由下式给出

$$\overline{Ma}_L = \frac{1}{2} [(1 + \varepsilon_{1/2}) Ma_L + (1 - \varepsilon_{1/2}) Ma_R]$$

$$\overline{Ma}_R = \frac{1}{2} [(1 + \varepsilon_{1/2}) Ma_R + (1 - \varepsilon_{1/2}) Ma_L] \quad (7)$$

于是预处理修正后的 AUSM+ 格式中 $p_{1/2}$ 和 $(\rho u)_{1/2}$ 的计算公式为

$$p_{1/2} = P_{(5)}^+ (\overline{Ma}_L) p_L + P_{(5)}^- (\overline{Ma}_R) p_R \quad (8)$$

$$(\rho u)_{1/2} = a_{1/2} (\rho_L m_{1/2}^+ + \rho_R m_{1/2}^-) +$$

$$\tilde{a}_{1/2} \left[\left(\frac{1}{\varepsilon_{1/2}} - 1 \right) (p_L - p_R) \right] \left/ \left(\frac{\rho_L}{\rho} + \frac{\rho_R}{\rho} \right) \right. \times$$

$$[M_{(4)}^+ (\overline{Ma}_L) - M_{(1)}^+ (\overline{Ma}_L) -$$

$$M_{(4)}^- (\overline{Ma}_R) + M_{(1)}^- (\overline{Ma}_R)] \quad (9)$$

其中

化学反应源项导致的刚性问题, 采用化学反应特征时间的方法^[9].

计算初场由来流条件给出. 物面条件为: ①无滑移条件 $v = 0$; ②非催化壁条件 $\frac{\partial \rho / \rho}{\partial n} = 0$, n 表示物面法向. 对称边界上应用对称条件. 远场边

界在低速情形采用文献[10]建议的简化边界,即
入流: $\rho_b = \rho_\infty$; $u_b = u_\infty$; $v_b = v_\infty$; $p_b = p_{int}$
出流: $\rho_b = \rho_{int}$; $u_b = u_{int}$; $v_b = v_{int}$; $p_b = p_\infty$
其中下标 ∞ 和 int 分别表示来流值和内场值,而当速度较大时则采用基于黎曼不变量的无反射特征边界条件.

3 数值算例

3.1 Evans 超声速扩散燃烧算例

该算例用来检验算法在超声速情形下模拟化学反应流问题的能力. 该算例是 Evans 等所做的同轴射流试验,外部射流是马赫数 1.9 的空气,内部射流是马赫数 2.0 的氢气冷流. 表 1 给出了具体的试验条件.

表 1 Evans 等的试验模拟条件
Table 1 Simulation conditions for experiment of Evans

试验模拟条件	燃料	氧化剂
Y/ mm	0~3. 26	4. 76~12. 0
T/ K	251	1495
Ma	2. 0	1. 9
p/ Pa	100 000	100 000
Y _{O₂}	0	0. 241
Y _{N₂}	0	0. 478
Y _{H₂}	1. 0	0
Y _{H₂O}	0	0. 281

图 1 给出了计算得到的温度分布,图中显示出喷口下游火焰的结构,结果表明气流在离开喷嘴后自动点火进行燃烧,火焰结构在喷嘴下游保持稳定. 图 2 给出了在喷嘴下游两个不同的流向位置计算得到的 H₂, O₂, H₂O 和 N₂ 的质量分数分布与试验值的比较. 结果表明计算得到的反应阵面与对称轴的距离比试验结果稍大,而计算得到的反应区域范围则要小于试验结果,这与文献[11]一致,分析认为可能是由于忽略了湍流脉动对化学反应的影响所导致的.

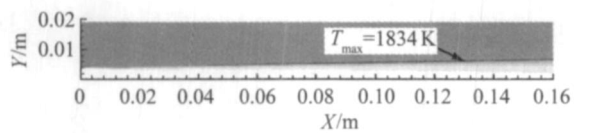


图 1 Evans 算例中的温度分布图
Fig.1 Temperature contour of Evans

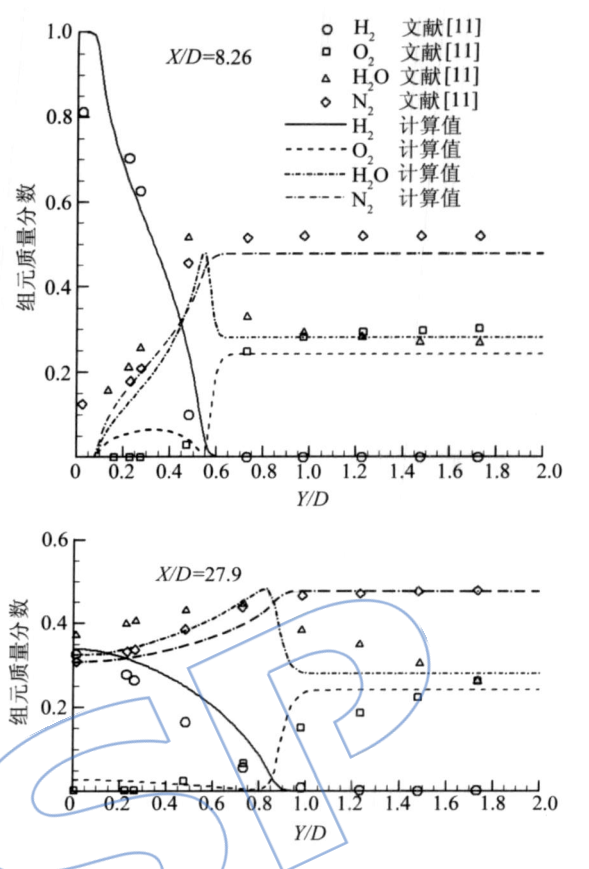


图 2 Evans 算例中的截面组分质量分数分布
Fig.2 Species mass fraction profiles of Evans

3.2 Chang 扩散燃烧算例

该算例用来检验算法模拟低亚声速情形下化学反应流问题的能力. 该算例是 Chang 等所做的带化学反应的自由剪切流试验,来流上层为燃料,下层为氧化剂,中间为点火塞,表 2 给出了具体的试验条件.

表 2 Chang 等的试验模拟条件
Table 2 Simulation conditions for experiment of Chang

试验模拟条件	氧化剂	点火塞	燃料
Y/ mm	- 80~0	0~1	1~80
T/ K	811	1250	367
U/ (m/ s)	390	140	140
p/ Pa	100 000	100 000	100 000
Y _{O₂}	0. 21	0. 21	0
Y _{N₂}	0. 79	0. 777	0. 9606
Y _{H₂}	0	0. 013	0. 0394

图 3 给出了计算得到的温度分布,从图中可以明显看出,上层氧化剂和下层燃料在中间高温

点火塞的影响下,在两层交接面发生了化学反应,并随着向下流的延伸,反应区域也相应变大.图 4 给出了沿 x 方向不同截面上的轴向速度分布,并与试验数据进行了对比.从图中可以看出在上游区域轴向速度梯度较大,数值计算结果与试验值吻合得很好;随着流动向下游方向的发展,反应区域逐渐扩大,轴向速度梯度也相对减小,计算结果与试验结果出现了一定的偏差,分析认为这是由于物理现象本身的不稳定导致的^[11],而传统的时间平均方法难以正确描述这种现象.

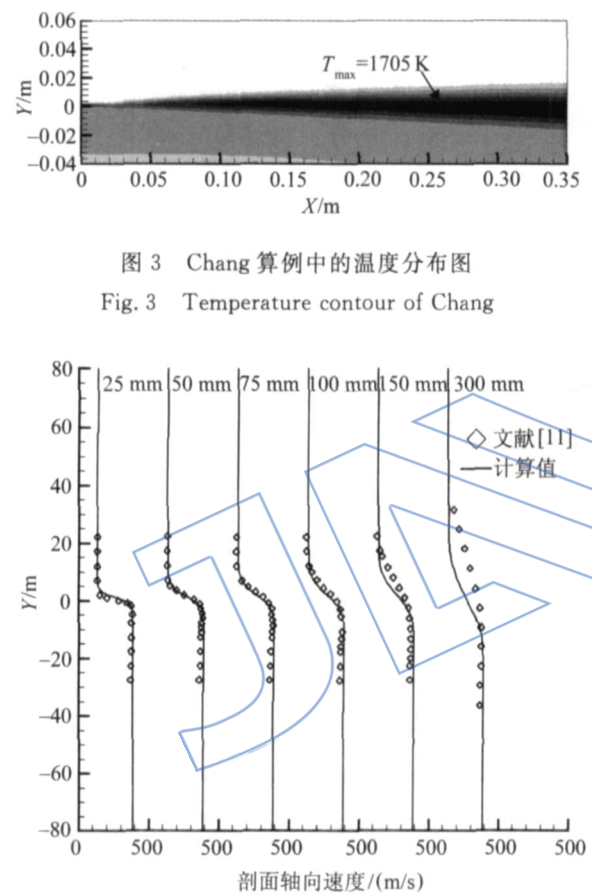


图 3 Chang 算例中的温度分布图
Fig. 3 Temperature contour of Chang

图 4 Chang 算例中的截面轴向速度分布
Fig. 4 Axial velocity profiles of Chang

3.3 Mitchell 扩散火焰算例

为了检验本文发展的算法在极低速情形下模拟化学反应流问题的能力,这里模拟了 Mitchell 等所做的甲烷/空气轴对称层流扩散火焰试验^[12],该试验中包含了两股同轴射流,外部射流是速度为 9.88 cm/s 的空气射流,内部射流是速度为 4.5 cm/s 的甲烷射流.表 3 给出了具体的试验条件.

试验中发现火焰温度峰值为 2 000 K.图 5 给出了计算得到的温度分布图,其中温度峰值为

表 3 Mitchell 等的试验模拟条件
Table 3 Simulation conditions for experiment of Mitchell

试验模拟条件	燃料	氧化剂
Y/mm	0~6.35	6.35~25.4
T/K	300	300
$U/(\text{cm/s})$	4.5	9.88
p/Pa	100 000	100 000
Y_{O_2}	0	0.21
Y_{N_2}	0	0.79
Y_{CH_4}	1.0	0

2093 K,该结果与试验值吻合得较好.图 6 给出了喷嘴下游 1.2 cm 处截面上计算得到的温度径向分布与试验值的比较.从图中可以看出计算结果与试验值分布的形状和峰值吻合得都较好,但在火焰核心区域计算得到的温度明显要高于试验值,而且核心区域的范围也要大于试验值,分析认为应该这是由于计算时忽略了辐射因素的影响.

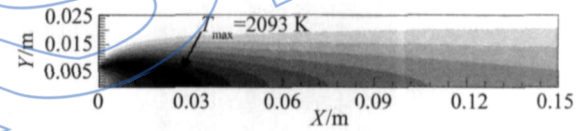


图 5 Mitchell 算例中的温度分布
Fig. 5 Temperature contour of Mitchell

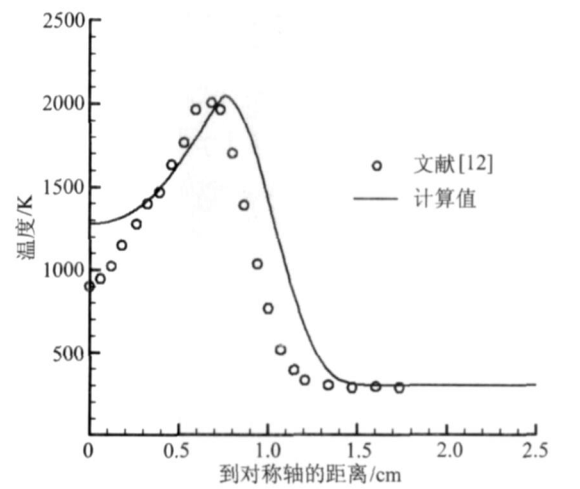


图 6 Mitchell 算例中的截面温度分布
Fig. 6 Temperature profile of Mitchell

图 7 给出了 1.2 cm 截面处各组元的摩尔分数分布,各种组元的摩尔分数分布与试验值吻合得都较好.从该图中可以看出甲烷向燃烧区域扩

散,并且迅速燃烧消耗掉; CO_2 、 CO 的径向分布范围要大于试验结果,这与图6中计算得到的火焰核心区域偏大是一致的,应该是由于计算时忽略了辐射因素的影响所导致的;而 CO 的存在表明在火焰核心区域中甲烷的燃烧并不完全。

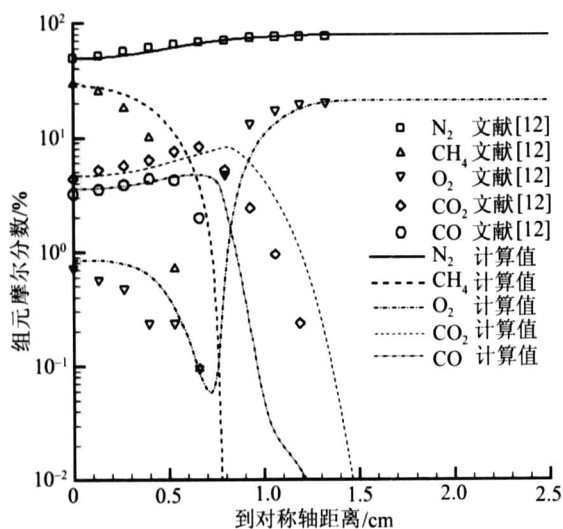


图7 Mitchell算例中的截面组元摩尔分数分布

Fig. 7 Species mole fraction profiles of Mitchell

4 结论

本文对预处理修正的AUSM+格式进行了细致讨论,并结合Weiss-Smith预处理方法发展了一种用于模拟全速域范围内的化学反应流问题的算法.文中分别针对超声速、亚声速和极低速情形下的化学反应流场与试验结果进行了对比验证.结果表明,本文发展的算法可以有效地应用于全速域范围内的化学反应流问题的数值模拟,该算法不仅能够很好地模拟高速情形的化学反应流场,而且对于低速化学反应流场的模拟也可以保持相当的数值精度和收敛效率.

参考文献:

- [1] Yungster S, Eberhardt S, Bruckner A P. Numerical simulation of hypervelocity projectiles in detonable gases[J]. AIAA Journal, 1991, 29(2):187-199.
- [2] WANG Jiangfeng, WU Yizhao. Parallelized upwind flux splitting scheme for supersonic reacting flows on unstructured hybrid meshes[J]. Transactions of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2007, 24(3):218-224.
- [3] Venkateswaran S, Deshpande M, Merkle C L. The application of preconditioning to reacting flow computations[R]. AIAA 1995-1673-CP, 1995.
- [4] WU Junxiao, TANG Lin, Luke E A, et al. A low Mach number preconditioning scheme of the reactive Roe flux[R]. AIAA 2003-307, 2003.
- [5] Weiss J M, Smith W A. Preconditioning applied to variable and constant density time-accurate flows on unstructured meshes[R]. AIAA 94-2009, 1994.
- [6] Shang H M, Chen Y S, Liaw P, et al. Investigation of chemical kinetics integration algorithms for reacting flows[R]. AIAA 95-0806, 1995.
- [7] Smooke M D, Mitchell R E, Keyes D E. Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames[J]. Combustion Science and Technology, 1989, 67:85-122.
- [8] Edwards J R, Liou M S. Low-diffusion flux-splitting methods for flows at all speeds[J]. AIAA Journal, 1998, 36(9):1610-1617.
- [9] Vos J B, Leyland P, Kemenade V V, et al. NSMB handbook 4.5[M]. [S.l.]:Dept. of Aeronautics KTH, CERFACS, 1999:70-71.
- [10] Turkel E, Fitterman A, Van Leer B. Preconditioning and the limit to the incompressible flow equations[R]. Hampton: NASA-CR-191500, 1993.
- [11] Edwards J R, Christopher J R. Preconditioned multigrid methods for two-dimensional combustion calculations at all speeds[J]. AIAA Journal, 1998, 36(2):185-192.
- [12] Mitchell R E, Sarofim A F, Clomburg L A. Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flames[J]. Combustion and Flame, 1980, 37:227-244.