

文章编号: 1000-8055(2010)05-1043-06

超声速化学反应流动的 LU-SGS 伪时间 迭代空间推进求解

贺旭照^{1,2}, 乐嘉陵^{1,2}, 宋文艳²

(1. 中国空气动力研究与发展中心 计算空气动力研究所, 621000 绵阳;

2. 西北工业大学 动力与能源学院, 710072 西安)

摘 要: 介绍了求解超声速多组分有限速率化学反应流动的伪时间迭代(lower upper symmetric Gauss-Seidel, LU-SGS)方法. 空间推进求解多组分抛物化(parabolized Navier Stokes, PNS)方程时, 在一个推进面上采用修正的 LU-SGS 方法迭代至收敛, 把得到的结果作为初值赋给下一个推进面. 沿推进面依次迭代直至求解完整个流场. 采用伪时间迭代 LU-SGS 方法求解化学反应 PNS 方程, 计算结果的准确性和时间迭代求解完全 Navier Stokes (N-S) 方程相当, 求解效率提高一个数量级.

关 键 词: 超声速流动; 化学反应; PNS (parabolized Navier Stokes) 方程; 空间推进;

LU-SGS (lower upper symmetric Gauss-Seidel) 方法

中图分类号: V211.3

文献标识码: A

LU-SGS pseudo-time iteration space marching method for solving supersonic chemical reaction flow

HE Xuzhao^{1,2}, LE Jialing^{1,2}, SONG Wenyan¹

(1. Computational Aerodynamics Institute,

China Aerodynamic Research and Development Center, Mianyang 621000, China;

2. School of Power and Energy,

Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: A pseudo time iteration lower-upper symmetric Gauss-Seidel (LU-SGS) method for solving supersonic multi-species chemical reaction flow was introduced. When solving parabolized Navier-Stokes (PNS) equations by space marching method, the modified LU-SGS method was used in the marching plane until reaching convergence. This plane's results were transferred to next plane and the entire flow field was solved plane by plane. Using pseudo time iteration LU-SGS method to solve the chemical reaction PNS equation, the result has the same level of accuracy compared with those obtained from Navier-Stokes (N-S) equations solved by time iteration method, and the computation efficiency is improved to an order or more.

Key words: supersonic flow; chemical reaction;

PNS (parabolized Navier-Stokes) equation; space marching;

LU-SGS (lower upper symmetric Gauss-Seidel) method

收稿日期: 2009-04-08; 修订日期: 2009-09-18

作者简介: 中国博士后科学基金(20080441188)

作者简介: 贺旭照(1977-), 男, 陕西蒲城人, 博士后, 主要从事超声速空气动力学研究. E-mail: hexuzhao@sina.com

空间推进方法适用于求解超声速流动占主导的沿主流方向无分离的流场. 采用空间推进方法求解这类流场时, 在不失求解流场准确性的情况下, 时间效率比时间迭代方法提高一个数量级以上. 空间推进方法可应用在高超飞行器气动力快速评估、可作为高效可靠的数值工具应用在高超飞行器气动优化设计中.

在国外, 空间推进方法已经成为各大气动实验室的重要研究工具^[1]. 国外具备了采用空间推进方法求解各类超声速流动的能力^[2-4], 包括超声速无化学反应流动、超声速化学反应流动等; 并把空间推进方法和时间迭代方法相结合, 完成了对超声速飞行器分区求解^[5].

在国内, 随着吸气式高超声速推进技术的深入研究, 空间推进求解超声速流动重新受到关注. 贺旭照^[6]、陈兵^[7]等人分别进行了空间推进求解超声速量热完全气体流动的研究, 并开发了相应的计算流体动力学(CFD)软件, 具备了空间推进求解超声速层流流动的能力. 超声速化学反应流动在超燃冲压发动机中普遍存在, 发展超声速化学反应流动的空间推进求解, 可以为超燃冲压发动机/尾喷管的快速评估及优化设计奠定技术基础.

空间推进求解超声速化学反应流动有以下困难: 在数值求解方面, 现有的时间迭代方法不能直接应用在每个推进面的化学反应流动的求解中,

需要基于现有时间迭代方法, 发展超声速化学反应流动的空间推进求解方法; 有限速率化学反应流动的控制方程中, 包含主流控制方程、湍流控制方程和组分控制方程, 对组分控制方程的扩散项及源项的抛物化处理, 需要仔细研究和实践. 一方面要保证控制方程的抛物化性质, 另一方面要保证控制方程抛物化处理后, 化学反应的扩散及反应规律不被破坏; 由于化学反应源项加入, 使求解在每个推进平面上的收敛变得困难.

本文详细分析了抛物化化学反应流动控制方程的数学性质, 给出了化学反应 P N S (parabolized Navier-Stokes) 程的伪时间 LU-SGS (lower upper symmetric Gauss Seidel) 求解方法. 开发了超声速化学反应流动的空间推进求解 CFD 软件. 采用 H₂Air 的 7 组元 8 步化学反应模型求解了两个超声速化学反应流动问题, 验证了计算方法和计算结果, 为进一步的快速评估和优化工作奠定了基础.

1 化学反应抛物化 Navier-Stokes (N-S) 方程的伪时间 LU-SGS 迭代方法

在计算坐标系内以 ξ 方向作为主流方向, 抛物化 Navier-Stokes (N-S) 方程是通过对完全 N-S 方程丢掉 ξ 方向的黏性耗散项以及对 ξ 方向的无黏通量作 Vigneron^[9] 修正得到.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial \xi} + (\omega_b - 1) \frac{\partial E^p}{\partial \xi} + \frac{\partial F}{\partial \eta} + \frac{\partial G}{\partial \zeta} = \frac{1}{Re_\infty} \left(\frac{\partial F^{*v}}{\partial \eta} + \frac{\partial G^{*v}}{\partial \zeta} \right) + S \tag{1}$$

$$E^p = \frac{|\Delta \xi|}{J} [0 \quad \xi_{sp} \quad \xi_{sp} \quad \xi_{sp} \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T \tag{2}$$

$$\omega_b = \min \left[1, \frac{\sigma_b M_\xi^2}{1 + (\gamma - 1) M_\xi^2} \right] \quad M_\xi^2 = \frac{U^2}{\gamma p / \rho} \tag{3}$$

$Q = \frac{1}{J} [\rho \rho_u \rho_v \rho_w \rho E \rho_1 \dots \rho_{ns-1} \rho_k \rho \omega]^T$ 包含了 5 个主流控制方程变量, $ns - 1$ 个组分变量和 $k - \omega$ 两方程湍流变量. ns 为反应气体组分数目.

湍流模型采用了 Kok^[10] 提出的 TNT (turbulent non turbulent) $k - \omega$ 模型. S 为化学反应和湍流控制方程的源项

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{L_\infty}{\rho_\infty V_\infty} w_1 & \dots & \frac{L_\infty}{\rho_\infty V_\infty} w_{ns-1} & \frac{P_k}{Re_\infty} - \beta_k \rho \omega_k & \frac{P_\omega}{Re_\infty} - \beta_\omega \rho \omega^2 + \alpha_\omega \frac{\rho}{\omega} \max(\omega, 0) \end{bmatrix}^T \tag{4}$$

对第 i 种组分的化学生成源项可以表示为

$$w_i = M_i \sum_{j=1}^n (\beta_j - \alpha_j) (R_j - R_{-j}) \tag{5}$$

M_i 为第 i 种组分的克摩尔质量, R_j 和 R_{-j} 分别代表以浓度表示的第 j 个基元反应的正反应和逆反应的速率. F^{*v} 和 G^{*v} 略去了所有沿 ξ 方向偏导数

项的 η 和 ζ 方向的黏性通量。

为了解决空间推进求解超声速化学反应流动的困难, 本文采用修正的 LU-SGS 迭代方法, 配合化学反应源项的点隐式处理、当地时间步法实现了对化学反应流动的空间推进求解。比较了多种化学反应源项的抛物化处理方法, 认为源项的流向偏导数采用向后一阶差分能较好的模拟化学反应流动, 且求解具有较好的收敛特性。具体采用

的数值求解方法如下文所述。

对式 (1) 的空间推进求解, 在推进平面上采用伪时间迭代 LU-SGS 方法。主流控制方程和组分控制方程耦合求解, 湍流控制方程解耦求解。对于式 (1) 在 i 平面上进行的推进求解, 在 $i-1$ 和 $i+1$ 平面上, $\Delta Q = 0$ 消除了 $A_{i\pm 1,j,k}^{\pm}$ 对迭代过程的贡献, 经过修正的 LU-SGS 方法为

$$LD^{-1}U\Delta Q_{ijk} = \frac{\Delta t}{V}R_{i,j,k}^n \tag{6}$$

$$D = \left[1 + \frac{\Delta t}{V}(\lambda_{\max}^A + \lambda_{\max}^B + \lambda_{\max}^C + 2\lambda_B^v + 2\lambda_C^v) \right] I \tag{7}$$

$$L = D + \Delta t^* \Omega - \frac{\Delta t}{V}(B_{i,j-1,k}^{n+1} + C_{i,j,k-1}^{n+1}) \tag{8}$$

$$U = D + \frac{\Delta t}{V}(B_{i,j+1,k}^{n+1} + C_{i,j,k+1}^{n+1}) \tag{9}$$

$$\Delta Q_{ijk} = Q_{ijk}^{n+1} - Q_{ijk}^n \tag{10}$$

$$R_{i,j,k}^n = - \left[\left(\frac{\partial \mathbf{E}^*}{\partial \xi} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \eta} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \zeta} + \mathbf{S} \right)^n - \frac{1}{Re_\infty} \left(\frac{\partial \mathbf{F}^{*v}}{\partial \eta} + \frac{\partial \mathbf{G}^{*v}}{\partial \zeta} \right)^n \right] \tag{11}$$

其中 B 和 C 为守恒变量 Q 对无黏通量 F 和 G 的偏导数, $\lambda_{\max}^A$ 为 A^* 矩阵的最大特征值

$$A^* = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial Q} + (\omega_b - 1) \frac{\partial \mathbf{E}^p}{\partial Q} = \begin{bmatrix} 0 & \xi & \xi & \xi & 0 & 0 \\ -Uu + \xi \omega_p \rho & U + \xi(u + \omega_p \rho_u) & \xi u + \xi \omega_p \rho_u & \xi u + \xi \omega_p \rho_w & \xi \omega_p \rho_E & \xi \omega_p \rho_{s1} \\ -Uv + \xi \omega_p \rho & \xi v + \xi \omega_p \rho_u & U + \xi(v + \omega_p \rho_v) & \xi v + \xi \omega_p \rho_w & \xi \omega_p \rho_E & \xi \omega_p \rho_{s1} \\ -Uw + \xi \omega_p \rho & \xi w + \xi \omega_p \rho_u & \xi w + \xi \omega_p \rho_v & U + \xi(w + \omega_p \rho_w) & \xi \omega_p \rho_E & \xi \omega_p \rho_{s1} \\ -U(H + p \rho) & \xi H + U p \rho_u & \xi H + U p \rho_v & \xi H + U p \rho_w & U(1 + p \rho_E) & U p \rho_{s1} \\ -Uc_s & c \xi & c \xi & c \xi & 0 & U \delta_{s1} \end{bmatrix} \tag{12}$$

其中下标 s 和 $s1$ 代表组分在行和列的下标。关于压力 p 的各项偏导数可以由下面的式子求得:

$$dp = p_E [d(\rho E) - u d(\rho u) - v d(\rho v) - w d(\rho w)] + \left[p_E \left(\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} - e_n \right) + \frac{T}{M_n} \right] d\rho - \sum_{s=1}^{ns-1} \left[p_E (e - e_n) + \frac{T}{M_s} - \frac{T}{M_{ns}} \right] d\theta_s \tag{13}$$

无量纲形式的 $p_E = \frac{\sum_{s=1}^{ns} \frac{\rho_s}{M_s}}{\rho c_v}$, 其中 M_s 为对应的 s 组分的分子量, $\rho_s = \rho c_s$, c_v 为无量纲的比定容热容。式 (12) 对应的特征值为

$$\begin{aligned} \lambda_{2,3}^* &= U \\ \lambda_{s1}^* &= \frac{1}{2} \cdot \left[(b+1)U \pm \sqrt{(b-1)^2 U^2 + 4\omega_b c^2} \right] \\ \lambda_{\dots}^* &= U \end{aligned} \tag{14}$$

其中 $b = \omega_b + \gamma(1 - \omega_b)$, $\gamma = 1 + p_E$ 为气体的冻

结比热比, $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$ 表示冻结声速。通过式 (14) 可以求出 $\lambda_{\max}^*$ 。

对黏性通量的线性化, 采用 Tysinger^[11] 的方法, 只保留黏性通量的最大特征值。

$$\lambda^v = \frac{s_i^2}{VR_e} \max \left\{ \frac{4}{3} \frac{\mu + \mu_i}{\rho}, \frac{K + K_i}{\rho c_v}, D_s \right\} \tag{15}$$

i 代表 B 和 C 。 μ , μ_i 和 s_B, s_C 分别是 η 和 ζ 面黏性通量的最大特征值和 $\eta \zeta$ 方向的面积, D_s 为第 s 个组分的扩散系数, μ 为动力黏性系数, K 为传热系数。

对化学反应源项的线性化, 采用 Imlay^[12] 的对角隐式方法.

$$\Omega = \frac{\partial S}{\partial Q} = \text{diag} \left\{ \sqrt{\sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\partial w_i}{\partial \rho} \right)^2} \right\} \quad (16)$$

这样就得到了在一个推进平面上的伪时间迭代方法. 应用上述方法, 在一个推进面上时间迭代求解, 直至收敛, 把得到的计算结果作为初值赋给下一个推进面, 计算在下一个推进面上进行至收敛, 循环迭代直至求解完整个流场. 在一个区域的初始推进面上, 给定自由来流值. 湍流方程的求解方法和主流相同.

2 超声速化学反应流的空间推进求解

2.1 二维超声速氢/空气燃烧的推进求解

这个实验主要用来验证多组分有限速率化学反应气体的数值模拟方法, 计算模型来自 Burrows 的实验^[13]. 实验模型见图 1. 氢气从下壁面顺流平行喷入. 计算区域布置两块网格, 网格数为 151 × 81+ 121 × 141, 网格在壁面加密大约在 10⁻⁵ m 左右. 边界条件: 给定来流值, 下壁面为等温壁, 壁温 298 K, 上壁面为绝热壁.

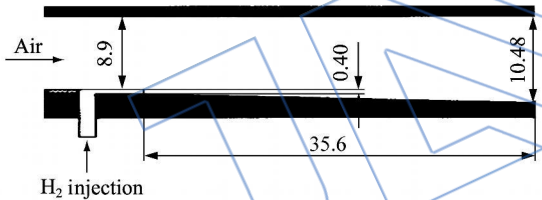


图 1 实验模型的示意图 (单位: cm)
Fig 1 Experimental model (unit: cm)

化学模型采用 Evans^[14] 的氢/空气的 7 组分 8 方程模型. 来流条件在表 1 中列出.

表 1 来流气体条件
Table 1 Inflow conditions

	氢气喷流	空气来流
Mach 数	1. 0	2. 44
压强/ Pa	101325	101325
温度/ K	254	1 260
H ₂ 质量分数	1. 0	0
H ₂ O 质量分数	0	0. 256
O ₂ 质量分数	0	0. 258
N ₂ 质量分数	0	0. 486
湍流强度/ %	10	10

图 2 给出了反应产物 H₂O 摩尔组分云图的空间推进结果, 从云图中可以清楚的看到化学反应发生在来流和氢气的扩散交界面上. 图 3 为出口截面摩尔组分沿法向分布的空间推进结果、时间迭代结果和实验测量值的比较. 图 4 为出口截面总温分布和实验测量值的比较. 从计算的结果看, 空间推进方法和时间迭代方法在求解这个问题中有相当的精度, 与实验测量结果在峰值区域略有差别, 这可能是由于化学反应机理不能完全重现实验状态. 图 5 为空间推进方法的时间收敛历程与时间迭代方法的收敛历程的比较, 图中显

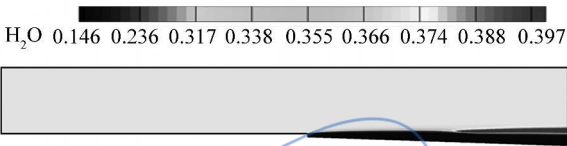


图 2 流场中 H₂O 摩尔组分分布云图
Fig. 2 H₂O mole fraction in flow field

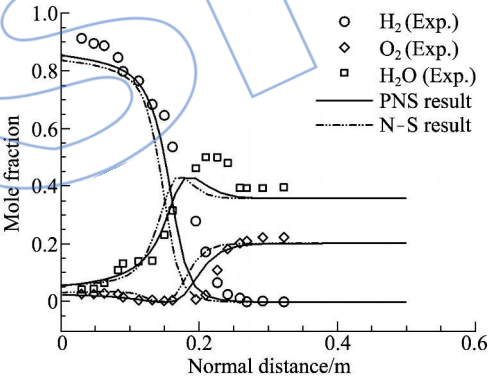


图 3 组分在出口截面浓度的比较
Fig. 3 Species mole fraction density in exit plane

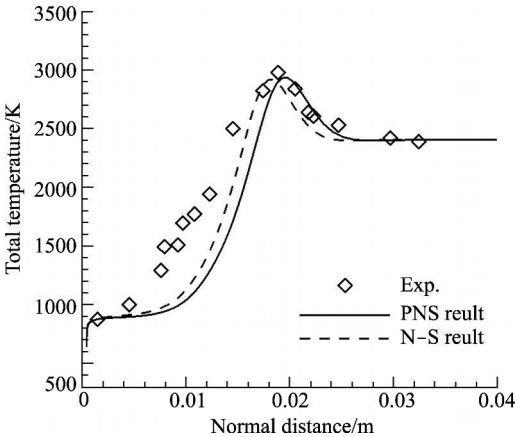


图 4 出口截面的总温分布比较
Fig. 4 Total temperature comparison at exit plane

示了空间推进方法在最后几个推进截面上的收敛过程. 空间推进求解在每个截面上的 $\max(\Delta\theta/\theta)$ 收敛到 10^{-5} . 时间迭代方法采用 LU-SGS 方法求解与式 (1) 对应的完全 N-S 方程. 表 2 给出了空间推进和时间迭代的耗时比较. 本文的计算是在同一个 2.8 GHz 的 CPU 上完成的. 可以看出, 采用空间推进方法, 大大的节约了计算时间.

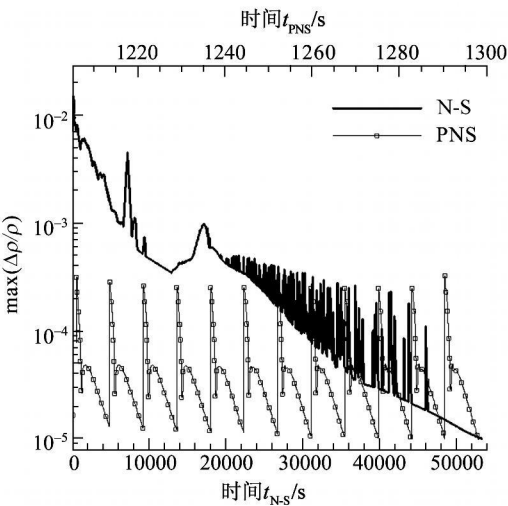


图 5 空间推进/时间迭代的收敛历程
Fig. 5 Convergence rate of space marching and time iteration method

表 2 求解时间效率比较
Table 2 Time efficiency comparison

时间 t_{NS}/s	时间 t_{PNS}/s	时间比
3 450	1 298	41. 2

2. 2 三维超声速氢/空气燃烧的推进求解

为了显示目前的空间推进方法在处理超声速三维化学反应流动的能力, 推进求解了一个带侧壁和上壁面的三维压缩拐角流动. 物体的几何模型如图 6 所示, 压缩拐角的角度为 $\alpha = 15^\circ$. 整个计算区域的网格为 $121 \times 61 \times 62$, 约 45.8 万. 采用 $k-\omega$ 湍流模型, 网格在壁面加密 $10^{-5}m$ 左右.

数值模拟的边界条件为^[3]: 来流马赫数 $Ma = 7.0$, 静温 $T = 1200\text{ K}$, 单位长度的雷诺数为 $Re = (1.013 \times 10^6)/m$, H_2 的质量分数为 0.03207, O_2 的质量分数为 0.25447, N_2 的质量分数为 0.71346.

图 7 为对称面上压力等值线云图, 可以清楚的看到前缘平板产生的激波以及由压缩拐角产生的激波. 图 8 为对称面出口处沿法向的温度分布,

和文献[3]结果比较, 温度在下壁面一致, 在上壁面的峰值区域, 本文的温度分布略高于文献结果. 图 9 为对称面出口处沿法向的 H_2O 摩尔分布. 本文

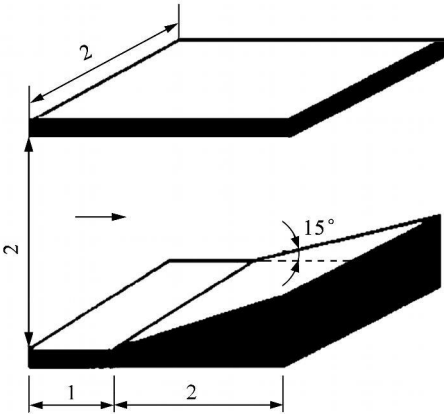


图 6 计算模型的示意图 (单位: cm)
Fig. 6 Computation model map (unit: cm)

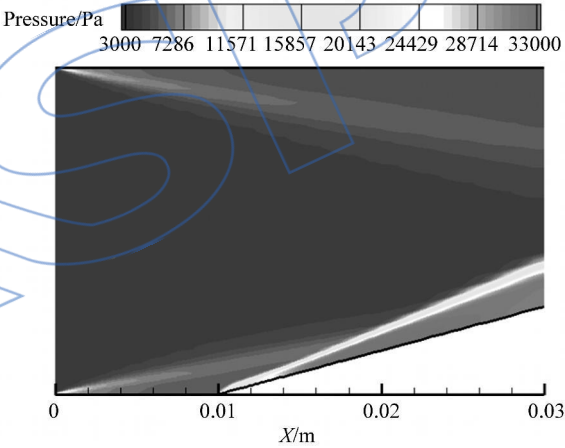


图 7 对称面上的压力云图
Fig. 7 Pressure contour in symmetry plane

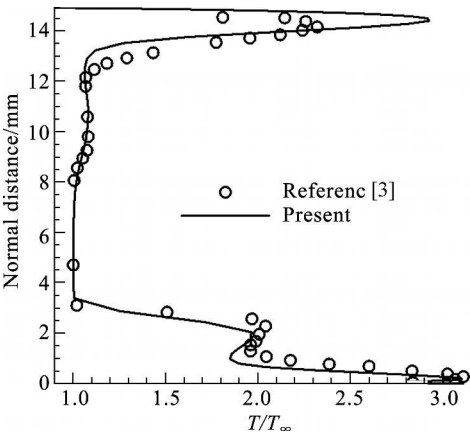
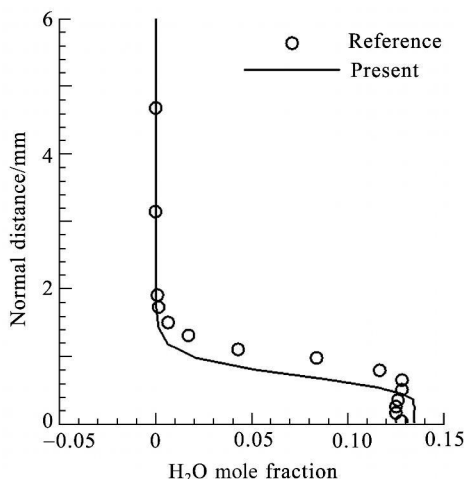


图 8 对称面出口截面温度分布
Fig. 8 Temperature distribution at symmetry exit plane

图 9 对称面出口截面 H_2O 摩尔组分Fig. 9 H_2O mole distribution at symmetry exit plane

的计算结果和文献[3]的计算结果作了比较,除了在局部峰值区域存在差别外,其他区域和文献吻合.文献[3]采用的是 9 组分 11 步反应模型.这个例子有 45.8 万个网格点,每个推进面 $\max(\Delta\theta)$ 收敛到 10^{-4} ,求解 12 个控制方程,采用空间推进方法在一个 2.8GHz 的 CPU 上,耗时 5.72h.

3 结 论

本文介绍了一种空间推进求解超声速化学反应流动的“伪时间 LU-SGS 迭代”方法.得到以下两点结论:

1) “伪时间 LU-SGS 迭代”方法可以成功的应用在求解超声速多组分有限速率化学反应流动当中,求解的准确性和时间迭代方法相当.

2) 采用“伪时间 LU-SGS 迭代”方法空间推进求解超声速化学反应流动,求解效率比采用相应的时间迭代方法提高一个数量级.开发的空間推进求解超声速化学反应流动的 CFD 软件可应用在超燃冲压发动机的快速评估、带动力状态下发动机和尾喷管的优化设计等方面.

参考文献:

[1] Anderson J D. hypersonic and high temperature gas dynamics[M]. 2nd. New York: AIAA Education Series, 2006: 445.

[2] John J K. An explicit upwind algorithm for solving the parabolized Navier-Stokes equations[R]. NASA Technical Paper 3050, 1991.

[3] Gerbsch R A. Solution of the parabolized Navier-Stokes equations for three dimensional real gas flows using Osher's upwind scheme[R]. AIAA 91-0248, 1991.

[4] Wadawadigi G, Tannehill J C, Buelow P E. A three dimensional upwind PNS code for chemically reacting scramjet flowfields[R]. AIAA 92-2898, 1992.

[5] Charles E C, Jr, Wakter C E. Integrated aeropropulsive CFD methodology for the hyper X flight experiment[R]. AIAA 2000-4010, 2000.

[6] 贺旭照, 乐嘉陵. 空间推进方法求解抛物化 Navier-Stokes 方程及其验证[J]. 空气动力学学报, 2007, 26(2): 189-193.

HE Xuzhao, LE Jialing. Solving PNS equations with space marching method and its validation[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2007, 26(2): 189-193. (in Chinese)

[7] 陈兵, 徐旭, 蔡国飙. 一种求解抛物化 Navier-Stokes 方程的空间推进算法[J]. 力学学报, 2008, 40(2): 162-170.

CHEN Bing, XU Xu, CAI Guobiao. A space marching algorithm for solving the parabolized Navier-Stokes equations[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2008, 40(2): 162-170. (in Chinese)

[8] 贺旭照. 高超声速飞行器气动热数值模拟和超声速流动的区域推进求解[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2007.

HE Xuzhao. Hypersonic vehicle's aerodynamic force/heat numerical simulation and supersonic flow's region marching simulation[D]. Mianyang: China Aerodynamic Research and Development Center, 2007. (in Chinese)

[9] White J A, Morrison J H. A pseudotemporal multigrid relaxation scheme for solving the parabolized Navier-Stokes equations[R]. AIAA 99-3360, 1999.

[10] Kok J C. Resolving the dependence on free stream values for the k - ω turbulence model[R]. NLR-TP-99295, 1999.

[11] Tysinger T L, Caughey D A. Implicit multigrid algorithm for the Navier-Stokes equations[R]. AIAA Paper 91-0242, 1991.

[12] Imlay S T, Roberts D W, Soetrisno M, et al. Nonequilibrium thermochemical calculations using a diagonal implicit scheme[R]. AIAA Paper 91-0468, 1991.

[13] Burrows M C, Kurkow A P. Analytical and experimental study of supersonic combustion of hydrogen in a vitiated airstream[R]. NASA TM X-2828, 1973.

[14] Evans J S, Schexnayder C J. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames[J]. AIAA Journal, 1979, 18(2): 805-811.