

高温化学非平衡计算中源项处理方法

马 辉 王发民

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘 要: 高超声速三维化学非平衡绕流流场的数值模拟中, 在计算初期容易发生组元密度出现负值的非物理现象, 另外源项的刚性是影响计算稳定性和收敛速度的主要原因。根据源项线性化理论, 采用 2 种源项线性化方法处理化学反应源项。一种为根据流场内化学反应物理规律构造的线性化方法, 该方法能抑制在计算过程中组元密度出现负值现象, 提高了计算稳定性, 加速了收敛速度。同时采用了时间预处理矩阵的线性化方法, 较好地解决了非平衡化学反应与流场耦合的刚性问题。证明了所构造源项线性化方法相容性。数值实验表明该方法有效地避免了源项计算中密度出负的问题, 加快了计算的收敛速度, 从而提高了计算效率。

关 键 词: 化学非平衡; 三维计算; 高超音速再入; 源项线性化方法

中图分类号: V 211.24

文献标识码: A

文章编号: 1001-5965(2004)07-0679-03

Calculation method of source terms in high temperature chemical nonequilibrium flows

Ma Hui Wang Famin

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: In the numerical simulation of hypersonic chemical nonequilibrium flows, species density may become negative at the beginning of calculation, chemical stiffness is the main reason that affects the calculation's stability and convergence. Based on the basic theory of source term's linearization, two linearization methods were chosen. One is based on the physical rules of chemical reaction flows. The method's advantage is that can improve the calculation's stability and can avoid the species' density to become negative during the calculation. The other method is the time preconditioner method, which has the function of diminishing the stiffness of the source term. The method was proved to be well approximates the partial differential equations. The calculation result shows that this method can effectively avoid negative density's appearance and accelerate the calculation's convergence. So the method effectively improves the calculation's efficiency.

Key words: chemical non-equilibrium; three-dimensional calculation; hypersonic reentry; source term linearization method

在飞行器再入大气层过程中, 波后气体所处的高焓状态足以激发气体分子振动能, 产生气体离解, 甚至更复杂的辐射非平衡过程。在再入飞行器流场的研究中必须考虑非平衡化学反应的影响。对三维化学反应非平衡流动的数值模拟, 主要面临化学反应源项引起的刚性和节约计算时间提高计算效率 2 个问题。目前对于刚性的处理较通

用的处理方法是采用时间预处理矩阵的方法^[1-3]。但是这种方法需要做矩阵求逆计算, 计算量大。对于三维计算来说, 又面临计算量节省这一敏感问题。另外, 在源项计算过程中, 常常会出现由于源项的过度调整而产生不应有的负密度, 从而影响了计算的稳定性。针对这 2 个问题, 本文采用了源项线性化方法, 提高了计算的稳定性和加

收稿日期: 2003-02-28

作者简介: 马 辉(1973-), 女, 黑龙江齐齐哈尔人, 博士生, ma_hui@iapcm.ac.cn.

快了计算的收敛速度,消除了密度出负等非物理现象的产生,提高了计算效率.

1 控制方程及化学反应源项处理

三维带化学源项的全 Navier-Stokes 方程的向量形式如下:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{\partial E_v}{\partial x} + \frac{\partial F_v}{\partial y} + \frac{\partial G_v}{\partial z} + S \tag{1}$$

其中总质量守恒方程由各组元质量守恒方程代替,采用有限体积 NND 格式计算对流项,对粘性项采用显示格式积分方法计算.对源项采用源项线性化方法处理,将源项线性化解

$$S = S_c + S_p U \tag{2}$$

源项离散格式的构造应遵守各离散节点前的系数保证为正及源项的离散公式有负的线性化斜率 2 个原则.即式(2)中 S_c 保证为正值, S_p 保证为负值. $S_c > 0$ 是保证计算过程中不出现非物理解的关键, $S_p < 0$ 是保证计算的稳定性,提高计算的收敛速度的关键.对于 S_c 与 S_p 构造的具体格式,在本文中主要采取了 2 种构造方法:

1) 取

$$S^{n+1} = S^n + \left(\frac{dS}{d} \right)^n \left(U^{n+1} - U^n \right) \tag{3}$$

2) 假设源项为控制项,流场内的对流项及粘性项相对可忽略的极限条件下,此时离散化方程近似为 $S_c + S_p U_p = 0$. 此时方程的解为: $U_p^* = -\frac{S_c}{S_p}$,是直线 $S = S_c + S_p U_p$ 与横轴的交点.

取 $S_c = \frac{S_p^* U_p^*}{p - p}$, $S_p = -\frac{S^n}{p - p}$,则有

$$S_p^{n+1} = \frac{S_p^* U_p^*}{p - p} - \frac{S^n}{p - p} \tag{4}$$

从式(4)可看出,直线 $S_p^{n+1} = \frac{S_p^* U_p^*}{p - p} - \frac{S^n}{p - p}$ 与直线 $S = S_c + S_p U_p$ 具有相同的斜率,因此它们具有相同的下降速度,因而可加快计算速度,同时又使 U_p^{n+1} 控制在合理的物理范围内,不会超过其物理极限 U_p^* . 因此,这种方法能有效的提高计算的稳定性和收敛性.在绕流流场中, U_p^* 实际上是当地各组元密度的平衡值.方法 1) 能有效的克服化学反应刚性问题,方法 2) 在化学反应比较接近平衡值,源项刚性作用不是很强时可以有效的提高计算收敛的速度,因此在实际

计算时,将 2 种方法结合使用,根据流场的不同情况处理.

为了保证正 S_c 、负 S_p ,在实际计算中对 S_c 和 S_p 做了如下代数处理:将源项线性化公式转化为 $S^{n+1} = \tilde{S}_c + \tilde{S}_p U_p^{n+1}$,其中

$$\tilde{S}_c = \max[S_c, 0] + \max[S_p, 0] U_p^n$$

$$\tilde{S}_p = \min[S_p, 0] + \frac{\min[S_c, 0]}{U_p^n}$$

式中, \tilde{S}_c 恒大于零; \tilde{S}_p 恒小于零.

2 数值离散和相容性的分析

将方程写成积分形式^[3]

$$\iiint_V \frac{\partial U}{\partial t} dx dy dz + \iint_S \left[(E - E_v) \cos(n, x) + (F - F_v) \cos(n, y) + (G - G_v) \cos(n, z) \right] ds = \iiint_V S dx dy dz \tag{5}$$

在有限体积内离散可得

$$V_{i,j,k} \frac{dU_{i,j,k}}{dt} = - \left[\bar{R}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \bar{R}_{i-\frac{1}{2},j,k} + \bar{R}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \bar{R}_{i,j-\frac{1}{2},k} + \bar{R}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \bar{R}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right] + V_{i,j,k} \bar{S}_{i,j,k} \tag{6}$$

式中, $\bar{S}_{i,j,k}$ 为单元体中心点的源项.

将方程近似为

$$U_{i,j,k}^{n+1} = - \frac{t}{V_{i,j,k}} \left[\tilde{R}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{R}_{i-\frac{1}{2},j,k} + \tilde{R}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \tilde{R}_{i,j-\frac{1}{2},k} + \tilde{R}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{R}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right] + t \tilde{S}_{i,j,k}^{n+1} \tag{7}$$

式中

$$U_{i,j,k}^{n+1} = U_{i,j,k}^{n+1} - U_{i,j,k}^n$$

$$\tilde{R}_{i+\frac{1}{2},j,k} = \tilde{R}_{i+\frac{1}{2},j,k} \left[U_{i-1,j,k}^n, U_{i,j,k}^n, U_{i+1,j,k}^n, U_{i+2,j,k}^n, U_{i,j,k}^n, U_{i+1,j,k}^n, S_{i-\frac{1}{2},j,k}^n, S_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, S_{i+\frac{3}{2},j,k}^n \right] \tag{8}$$

对于采用的有限体积离散公式可有(证明可见文献[3]):

$$\tilde{R}_{i+\frac{1}{2},j,k} \left[U_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, U_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, U_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, U_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, \mathbf{0}, \mathbf{0}, S_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, S_{i+\frac{1}{2},j,k}^n, S_{i+\frac{1}{2},j,k}^n \right] = \bar{R}_{i+\frac{1}{2},j,k} \tag{9}$$

式中, $S_{i+\frac{1}{2},j,k}^n$ 为 n 时刻单元 i 与 $i+1$ 相邻面的面积矢量.

将 $U_{i,j,k}^{n+1}$ 进行泰勒展开,到 2 种线性化方法中,得到方法 1) 和方法 2) 的表达式分别为式(10)



和式(11):

$$S_{i,j,k}^{n+1} = S_{i,j,k}^n + \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)^n \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)^n t + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right)^n (t)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial t^3}\right)^n (t)^3 \right] \quad (10)$$

$$S_{i,j,k}^{n+1} = S_{i,j,k}^n - \frac{S_{i,j,k}^n}{U_{i,j,k}^* - U_{i,j,k}^n} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)^n t + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right)^n (t)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial t^3}\right)^n (t)^3 \right] \quad (11)$$

分别采用方法 1) 和方法 2), 方程(7) 与方程(6) 的差可写为式(12) 和式(13):

$$R_{i,j,k}^n = o(t) + \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)^n \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)^n t + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right)^n (t)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial t^3}\right)^n (t)^3 \right] \quad (12)$$

$$R_{i,j,k}^n = o(t) - \frac{S_{i,j,k}^n}{U_{i,j,k}^* - U_{i,j,k}^n} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)^n t + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right)^n (t)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial t^3}\right)^n (t)^3 \right] \quad (13)$$

从式(12)、式(13) 可看出当 $t \rightarrow 0$ 时, $R_{i,j,k} \rightarrow 0$, 式(9)、式(12) 和式(13) 说明本文所采用的线性化方法式(3) 和式(4) 与式(5) 是相容的。

3 计算算例及检验

计算来流条件, 飞行高度 62.3 km, 飞行速度 4.579 km/s, 马赫数 14.72, 来流密度 $2.324 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$, 来流温度 240.8 K. 在物面上, 速度采用无滑移壁面条件, 温度取等温壁边界, 组元密度取非催化壁边界条件, 压力采用法向零压力梯度条件. 出口为超声速, 对流场变量采用一阶外推方法计算. 外边界用自由来流条件. 物形用头半径为 1.85 m 的球锥, 化学模型采用五组元模型, 反应速率系数用 Dunn & Kang 给出的拟合公式计算.

图 1 为计算过程收敛到定常解的过程. 图 1 中曲线 1 的计算过程为没有采用源项线性化方法, 仅采用了时间预处理矩阵方法的计算收敛过程, 本文称为方法 1. 曲线 2 为采用的源项线性化后的计算收敛过程, 本文称为方法 2. 在计算中, 根据组元 i 的化学反应生成率 $\dot{\rho}_i$ 与时间步长 t 的乘积得到单元体内组元的密度变化量 $\Delta \rho_i$, 然后根据 $\Delta \rho_i$ 与相应的平衡条件下组元 i 的密度变化量 ρ_i^* 相比较来判断流场内的化学反应程度, 根据化学反应是否接近平衡或冻结状态, 来判断采用哪种线性化方法. 从图 1 中可以看出, 方法 2 的计算效率要明显优于方法 1. 方法 1 残差收敛

到 10^{-3} 时所需的计算步为 7499 步; 方法 2 残差收敛到 10^{-3} 时所需的计算步为 2455 步. 图 2 为采用方法 2 计算时流场内 N_2 与 O_2 密度的收敛过程, 可看出它们的收敛过程较好, 没有出现负值.

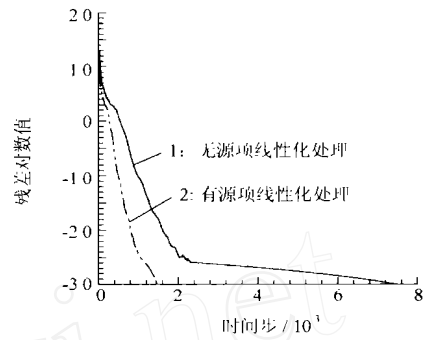


图 1 有无源项线性化方法的收敛过程的比较

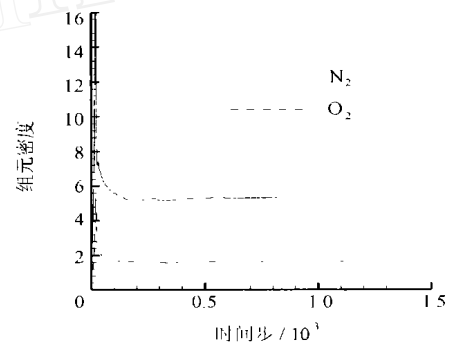


图 2 采用源项线性化方法时, 驻点 N_2 与 O_2 密度收敛过程

4 结 论

本文采用源项线性化方法计算了三维化学非平衡流场, 所得结果说明源项线性化方法可以有效的提高计算的收敛速度和克服计算中组元密度出负的现象. 对流场的计算表明源项线性化方法是可以有效的提高计算效率的.

参考文献 (References)

[1] Thomas R A B, Rarl M M. A finite volume method for the calculation of compressible chemically reacting flows[R]. AIAA-85-0331, New York: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1985

[2] Kim S L, Jeung I S, Park Y H, et al. Approximate jacobian methods for efficient calculation of reactive flows[R]. AIAA-2000-3384, Reston: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2000

[3] Kim S S, Kim C, Rho O H. Multigrid algorithm for computing hypersonic chemically reacting flows[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2001, 38(6): 865 ~ 874

[4] 陈让福. 三维高超声速无粘定常绕流的数值模拟[D]. 北京: 北京大学数学系, 1991

Chen Rangfu. Numerical simulation of inviscid steady hypersonic flow around three dimensional body[D]. Beijing: School of Mathematical Sciences, Peking University, 1991 (in Chinese)