

改进三维 CE/SE 算法在气相爆轰中的应用*

中华¹，张德良²，刘凯欣¹
(1.北京大学力学与空天技术系，北京 100871；
2.中国科学院力学研究所，北京 100080)

摘要 本文推导了一种改进三维 CE/SE 格式，用二步模型对氢氧 ($2\text{H}_2+\text{O}_2$) 气相爆轰进行了数值模拟，得到了氢氧爆轰的三维数值胞格结构。数值结果表明：1.本文的 CE/SE 格式能很好的适用于有化学反应存在的流动；2.氢氧爆轰具有复杂的三维结构。

关键词：三维 CE/SE、气相爆轰、胞格

一、CE/SE 算法简介

时一空守恒元解元方法 (The Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element, CE/SE) 是由 NASA Lewis 研究中心的 Chang 研究组在 1991 年提出来的。该算法思想不同于传统的差分算法和有限体积法，从微分方程的积分形式出发，将时间和空间统一起来看待，对时空同时进行离散，划分为守恒元和解元，在守恒元上求解方程积分形式得到数值格式。该算法具有很多传统方法不具有的特点：1.将时间和空间统一起来同等对待；2.格式局部和全局都严格保证物理意义上的守恒律；3.把流场物理量及其空间导数作为独立未知量同时求解；4.在推广到多维时无需使用算子分裂或方向交替技术，是一种真正意义上的多维算法。该算法的优点：1.构造方法简单，只需要用到简单 Taylor 展开便于推广至三维；2.物理意义明确；3.边界处理容易；4.激波分辨率高，在间断处能有效抑制非物理振荡。本文使用的格式是在王刚^[1]的二维格式基础上推广得到的三维格式。

二、化学反应模型

目前爆轰波数值模拟中广泛使用的化学模型包括：CJ 模型、一步模型、二步模型、基元反应模型。本文对以上几种模型进行了分析和调研，结果表明二步模型能反应流场基本特性，并且计算量较小，能够实现三维计算，因而本文采用二步模型，其控制方程为：

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = \mathbf{S} \quad (1)$$

*国家自然科学基金 (批准号 10732010、10972010) 资助项目。

$$\text{其中: } U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \\ \rho\alpha \\ \rho\beta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (E+p)u \\ \rho\alpha u \\ \rho\beta u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (E+p)v \\ \rho\alpha v \\ \rho\beta v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (E+p)w \\ \rho\alpha w \\ \rho\beta w \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho\omega_\alpha \\ \rho\omega_\beta \end{pmatrix}.$$

诱导反应速率

$$\omega_\alpha = \frac{P}{3R_0T} \times \exp\left(35.1715 - \frac{8530.6}{T} - 7.22 \times 10^{-11} P^2 \exp\left(\frac{21205}{T}\right)\right)$$

$$\text{放热反应速率} \quad \omega_\beta = \begin{cases} 0 & \alpha > 0 \\ (1-\beta) \times a \times \exp\left(-\frac{b}{T}\right) + c & \alpha \leq 0 \end{cases}$$

其中: P 为压强, 单位是大气压 (atm), T 为温度, R_0 ($=8.314\text{J/mol/K}$) 是普适气体常数, a, b, c 为常数。

三、模拟结果

计算区域: $0.08\text{m} \times 0.04\text{m} \times 0.02\text{m}$; 网格数量: $321 \times 161 \times 81$

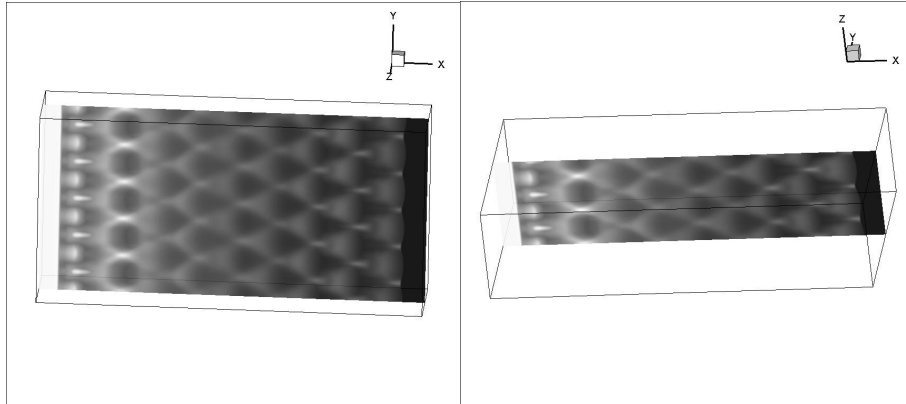


图1 沿 z 方向观察到的胞格

图2 沿 y 方向观察到的胞格

参 考 文 献

- 1 Gang Wang, Deliang Zhang, Kaixin Liu. An Improved CE/SE Scheme and Its Application to Detonation Propagation [J]. Chinese Physics Letters, 2007, 24(12): 3563-3566.
- 2 Taki S., Fujiwara T., Numerical Analysis of Two-Dimensional Nonsteady Detonations. AIAA Journal 1978, 16(1): 73-77.