

文章编号: 1001-1455(2006)06-0572-05

驻定斜爆轰波并行数值模拟*

代淑兰, 许厚谦

(南京理工大学动力工程学院, 江苏 南京 210094)

摘要: 采用多组分化学反应 Euler 方程组对驻定在高速飞行弹丸上的斜爆轰波流场进行了数值模拟。计算中分别采用 TVD 格式和基元反应模型, 并基于并行编程模型 MPI(message passing interface) 实现了非结构网格上的并行计算, 对流项和化学反应项用时间分裂法进行处理。计算结果表明并行计算能有效地提高计算速度, 扩展计算规模, 为进一步研究超驱爆轰推进技术奠定基础。

关键词: 爆炸力学; 并行计算; 基元反应; 爆轰波; TVD 格式; 非结构网格

中图分类号: O381

国标学科代码: 130 · 1510

文献标志码: A

1 引言

驻定斜爆轰推进技术是一项新概念尖端技术, 有重要的工程应用前景^[1]。20 世纪 80 和 90 年代许多学者对此问题进行了实验研究或数值模拟^[2]。在对驻定在高速飞行弹丸上的斜爆轰波流场数值模拟中, 采用基元反应化学模型能更准确地模拟爆轰波流场结构, 但在求解流动守恒方程组时就要考虑所含组分各自的变化情况, 方程组的求解远比单一成分时复杂得多。而无固定结构的非结构网格虽然对复杂边界具有较强的描述能力, 但必须占用更大的内存来存储网格单元和节点之间的关联信息, 在数值计算时需要更多的 CPU 时间。在爆轰波数值模拟过程中, 由于化学反应计算时间长和非结构网格占有资源大, 因而单机资源不足和计算效率低的问题很突出。并行计算是提高计算效率、节省计算时间和缩小单机计算规模的有效手段^[3], 是解决这些困难的关键, 因而受到了极大关注。

本文中采用多台 PC 机组成的集群并行系统中, 基于非结构网格和分区并行算法, 在 MPI 平台上采用信息传递的并行编程模型, 对求解多组分化学反应流动守恒方程组开发单程序多数据流 (SPMD) 形式的并程序, 对已有的驻定在飞行弹丸上的斜爆轰实验现象进行数值模拟。

2 二维非定常化学反应流控制方程

采用基元反应的二维 Euler 方程组描述爆轰化学反应过程, 不考虑热流项

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

$$\mathbf{U} = [\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N, \rho u, \rho v, E]^T$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = [\rho_1 u, \rho_2 u, \dots, \rho_N u, \rho u^2 + p, \rho uv, (E + p)u]^T$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}) = [\rho_1 v, \rho_2 v, \dots, \rho_N v, \rho uv, \rho v^2 + p, (E + p)v]^T$$

$$\mathbf{W}(\mathbf{U}) = [\dot{w}_1, \dot{w}_2, \dots, \dot{w}_N, 0, 0, 0]^T$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{U}) = -\frac{v}{y} [\rho_1, \rho_1, \dots, \rho_N, \rho u, \rho v, E + p]^T$$

式中: ρ_i 为 i 组分的质量密度; ρ, u 和 v 分别是混合物密度、水平速度分量和垂直速度分量; N 为参与有限速率反应的组分数目, E 为单位体积总能量; \dot{w}_i 为化学反应引起组分 i 的质量生成速率, $\mathbf{S}(\mathbf{U})$ 表示轴

* 收稿日期: 2005-08-31; 修回日期: 2006-03-17

基金项目: 国家自然科学基金项目(10476011)

作者简介: 代淑兰(1976—), 女, 博士研究生。

向流动,当计算平面流动时 $\mathbf{S}(\mathbf{U})$ 为零。总能量 E 与压力 p 的关系式

$$E = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i - p + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2)$$

式中: h_i 为组分 i 的焓。

对于具有 N_R 个基元反应的某反应当量表达式可以写为

$$\sum_{j=1}^N v'_{ij} M_j \Leftrightarrow \sum_{j=1}^N v''_{ij} M_j \quad i = 1, 2, \dots, N_R \quad (2)$$

式中: v'_{ij}, v''_{ij} 分别为第 i 个基元反应中第 j 个组分反应物和生成物的当量反应系数。

化学反应速率可以由 Arrhenius 公式给出

$$K_{fi} = A_i \exp\left(-\frac{E_i}{R_u T}\right)$$

式中: K_{fi} 为第 i 个反应的正反应速率常数, A_i 为碰撞频率, E_i 为活化能, R_u 为通用气体常数, T 为温度。相应的逆反应速率常数表达式为 $K_{bi} = K_{fi}/K_c$, K_c 为第 i 个基元反应的平衡常数。

某组分 j 通过反应,其质量变化率

$$\dot{w}_{jr} = \frac{d\rho_j}{dt} \Big|_r = (v''_j - v'_j) \left[K_i \prod_{l=1}^N \left(\frac{\rho_l}{W_l}\right)^{v'_l} - K_b \prod_{l=1}^N \left(\frac{\rho_l}{W_l}\right)^{v''_l} \right] W_j \quad (3)$$

下标 r 表示第 j 个化学反应造成的密度改变。

对于甲烷和空气混合物有很多种化学反应模型,采用 13 组分 19 步反应步模型^[4]如表 1 所示。

表 1 13 组分 19 步反应步模型

Table 1 Reaction model of 13 fractions and 19 steps

步骤	反应方程	步骤	反应方程
1	$\text{CH}_4 + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$	11	$\text{CHO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$
2	$\text{CH}_4 + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{H}_2$	12	$\text{CHO} + \text{M} = \text{CO} + \text{H} + \text{M}$
3	$\text{CH}_4 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	13	$\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$
4	$\text{CH}_4 + \text{O} = \text{CH}_3 + \text{OH}$	14	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$
5	$\text{CH}_3 + \text{O} = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	15	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{H}$
6	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	16	$\text{H}_2 + \text{OH} = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$
7	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M} = \text{CO} + \text{H}_2 + \text{M}$	17	$\text{OH} + \text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$
8	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} = \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	18	$\text{H}_2 + \text{M} = \text{H} + \text{H} + \text{M}$
9	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} = \text{CHO} + \text{OH}$	19	$\text{H}_2\text{O} + \text{M} = \text{OH} + \text{H} + \text{M}$
10	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} = \text{CHO} + \text{H}_2$		

3 数值求解

3.1 数值方法

采用节点和网格同步生成的阵面推进法生成二维非结构网格,而且可以根据不同的空间尺度来控制网格密度的大小。阵面推进法生成的网格一般都具有较高的质量,可适用于弹丸复杂外形边界。

对二维多组分化学反应流控制方程组,取三角形控制体 V ,并对式(1)两边在 V 上积分得

$$\int_V \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dx dy + \int_V \left(\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial y} \right) dx dy = \int_V (\mathbf{S}(\mathbf{U}) + \mathbf{W}(\mathbf{U})) dx dy \quad (4)$$

再由 Green 公式得

$$A_c \frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \oint_{\partial V} \mathbf{P} \cdot \mathbf{n} dl = A_c (\mathbf{S}(\bar{\mathbf{U}}) + \mathbf{W}(\bar{\mathbf{U}})) \quad (5)$$

式中: $\bar{\mathbf{U}} = \frac{1}{A_c} \int_V \mathbf{U} dx dy$ 是 \mathbf{U} 在控制体 V 上的平均值, A_c 是控制体 V 的有向面积, $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ 是控制体 V 边界 ∂V 上的单位外法向量, $\mathbf{P} = (F, G)$ 为通量向量。

在控制体上用高斯公式将式(5)进行积分转换

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = -\frac{1}{A_c} \sum_{i=1}^3 (f_i \Delta y_i - g_i \Delta x_i) + (S(\bar{U}) + W(\bar{U})) \quad (6)$$

式中: f_i, g_i 分别是三角形第 i 条边上的水平数值通量和垂直数值通量, 用 TVD 格式求解。 $\Delta x_i, \Delta y_i$ 是第 i 条边的坐标改变量。式(4)两边进行时间积分就能得到原方程组的数值解。

3.2 并行计算方法

采用并行计算方法的原理: 将整个流动区域分割成 N 个子区域分配给 N 台处理器计算, 把子区域的初始流场参数、几何参数(网格坐标、标识号)分别装载入各子区域对应的处理器内存中, 在每一台处理器中启动计算进程。由各处理器完成子区域的计算并采用 MPI 信息传递在边界完成数据交换(各处理器间的信息传递), 并按需要进行写盘等其他操作。这种分区计算方法较为自然地解决了整个流场任务划分的问题, 它通过将区域划分成小块并将算法分别作用到每一块上来实现并行。而在并行计算时负载平衡、计算量与通信量之比是影响并行计算性能的关键因素。

将计算网格空间分块, 平均分配到各台处理器可以保证负载平衡。为了保证并行计算得到与串行计算相同的结果, 在分区网格的交界面两边各引入一层边界单元(通信点), 相邻子区域之间仅需要传递通信点的参数。为了尽可能减少处理器之间的通信量, 在分区时要尽可能减少相邻网格块之间的通信单元的数量。随着网格分块数量的增多, 单元的有效网格数(即不含通信单元的网格数)与总网格数(有效网格+通信网格)之比将随之下降。该比值越小则通信量越大, 当通信量大到一定的程度, 计算机系统将把大量的 CPU 时间用于通信, 这样并行也就失去了意义。用非结构网格来离散流场计算区域时不像结构网格存在特定的行和列, 而是将分区边界两边的待传输参数的网格作为通信点, 也可以将这些通信点看作是相关宽度为 1 的两行(列)。以分三个区域计算为例, 图 1 是区域相接处的示意图, 粗实线表示分区边界和计算域边界, 标记为 0、1、2 的三角形分别代表子区域 0、1、2 中需要传输参数的网格。在每步计算完成后, 计算机之间发送或接收相邻区域通信点的物理参数, 实时更新边界网格数据, 协同地求解同一问题。

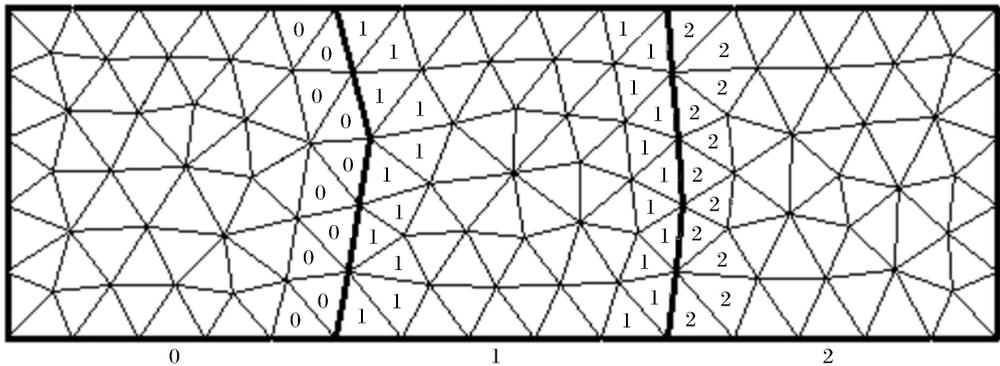


图 1 流场分区及通信点分布

Fig. 1 Distribution of computing region and elements of communication

3.3 数值算例及分析

采用上述的非结构网格和并行算法对在甲烷和空气($1\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 + 7.52\text{N}_2$)的混合物中高速飞行的弹丸诱导的驻定斜爆轰波流场进行了数值模拟, 部分结果如图 2~5 所示。锥角为 60° (以 1990 m/s 的速度飞入预混 $\text{CH}_4\text{-Air}$ 时弹丸头部斜激波比较弱, 不能点燃波后的混合气体, 只能形成驻定斜激波, 如图 2 所示。锥角为 120° (的弹丸以 1848 m/s 的速度飞入预混气体中能形成脱体的爆轰波结构, 弹丸前方的脱体爆轰波已完全呈弧形, 如图 3 所示。由图 2 和图 3 可以看出本文的计算结果与爆轰的实验照片基本吻合。

并行系统的加速比, 是指一个给定的应用并行程序的执行速度相对于串程序的执行速度快了多少倍。对于 60° 的弹丸流场在 3 台 P4 微机组成的集群并行系统中加速比为 2.608, 计算时间仅为原串程序的 38.34% (计算效率为 86.93%)。在相同条件下 120° 的弹丸流场计算中加速比为 2.735, 计算

时间仅为原串行程序的 36.56% (计算效率为 91.17%)。加速比有了明显的变化是由于发生化学反应的网格数的增加,迭代计算占用的 CPU 时间比数据传输占用的 CPU 时间增长幅度大,通信过程在并行计算中的比重相应减小,并行程序的计算效率得以提高。使用并行程序对实验弹丸的斜爆轰流场进行数值模拟时计算效率有很大的提高,而且可以采用更小尺度的网格对计算区域进行离散,从而提高激波、爆轰波间断解的分辨率,而扩大的问题又分配给并行系统中的多台微机,充分体现了并行计算的优点。文中计算采用的是 Euler 方程能量方程中虽不考虑热流项和粘性项,对流场放热和脱体激波的计算会存在一定的误差,但对并行系统的加速比影响不大。

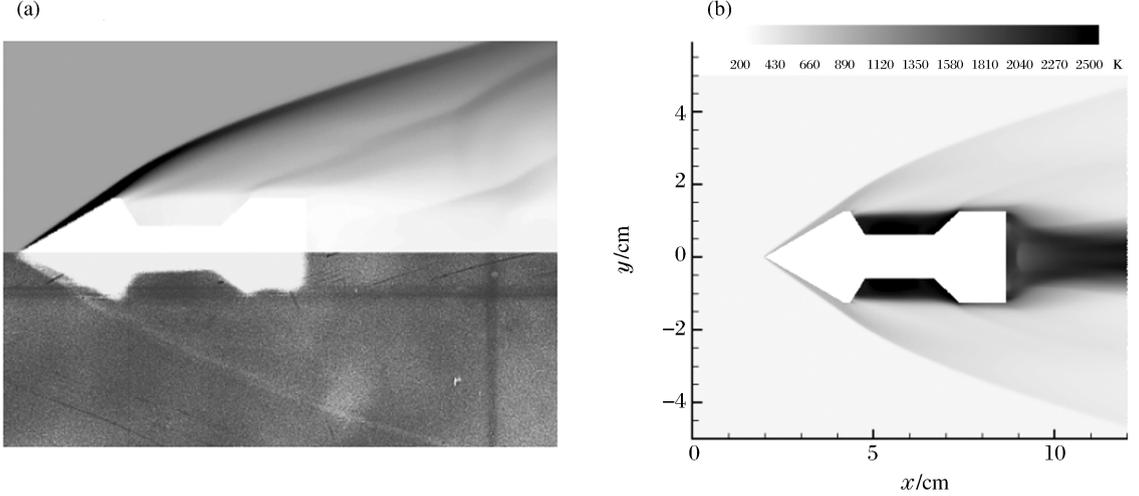


图 2 锥角为 60° , 弹丸速度为 1 990 m/s 时, (a) 密度计算结果与实验结果的比较以及 (b) 温度计算结果
 Fig. 2 (a) Experimental photo and calculated density contour (flood) and (b) calculated temperature contour (flooded) in case that cone angle is 60° , projectile speed is 1 990 m/s

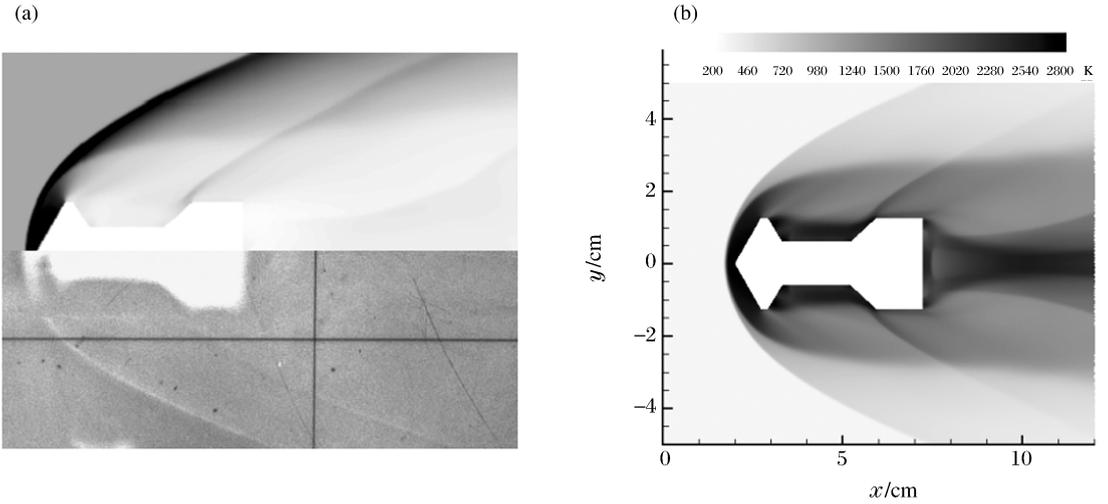


图 3 锥角为 120° , 弹丸速度为 1 848 m/s 密度计算结果与实验结果的比较以及温度计算结果
 Fig. 3 (a) Experimental photo and calculated density contour (flood) and (b) calculated temperature contour (flooded) in case that cone angle is 120° , projectile speed is 1 848 m/s

4 结 论

基于集群并行系统的 SPMD 模式并行算法,在对实验弹丸诱导的斜爆轰波流场数值模拟中,扩大了计算规模,有效地提高了计算速度,获得了很好的加速比,而且实时的数据传输也保证了并行计算结果与串行程序的一致性。说明本文中采用的并行算法是复杂流场数值模拟计算一条有效的途径。

参考文献:

- [1] 耿继辉. 驻定在飞行弹丸上的斜爆轰波数值计算[J]. 弹道学报, 2001, 13(4): 24-27.
GENG Ji-hui. Numerical simulation of unsteady flows induced by an accelerating projectile[J]. Journal of Ballistics, 2001, 13(4): 24-27.
- [2] Brucker A P. The ram accelerator: A technology Overview[R]. AIAA 02-1014, 2002.
- [3] 都志辉. 高性能计算并行编程技术-MPI并行程序设计[M]. 北京: 清华大学出版社, 2001.
- [4] Soetrisno M, Imlay S T, Roberts D W. Numerical simulation of the transdetonative ram accelerator flow field on a parallel computer[R]. AIAA 92-3249, 1992.
- [5] Nusa M J. Computation simulation of starting dynamics in a ram accelerator[R]. AIAA 98-3146, 1998.
- [6] Nusa M J. Reacting flow simulation of transient Multi-stage ram accelerator operation and design studies[R]. AIAA 95-2494, 1995.
- [7] He H, Zhang C, John Yu S T. Application of the CESE method to PDE plume dynamics using a Beowulf cluster [R]. AIAA 02-0614, 2002.

Numerical simulation of standing oblique detonation wave using parallel computation method

DAI Shu-lan^{*}, XU Hou-qian

*(Power Engineering School, Nanjing University of science & Technology,
Nanjing 210094, Jiangsu, China)*

Abstract: TVD format and elementary reaction model are applied to the study of numerical simulation for phenomena of chemical non-equilibrium oblique detonation wave standing on a projectile. A parallel arithmetic based on MPI parallel environment on PC-Cluster system for the oblique detonation wave flow field is discussed. The results of parallel computation indicate that the parallel computation is practical and efficient for simulating the standing oblique detonation waves.

Key words: mechanics of explosion; parallel computation; elementary reaction; detonation wave; TVD format; unstructured grid

^{*} Corresponding author: DAI Shu-lan
E-mail address: dsl2001@163.com
Telephone: 025-84315862