

文章编号: 1001-1455(2008)01-0075-05

动态存储方法在气相爆轰波数值模拟中的应用*

董 刚¹, 范宝春¹, 朱旻明², 陈义良²

(1. 南京理工大学瞬态物理重点实验室, 江苏 南京 210094;

2. 中国科学技术大学热科学和能源工程系, 安徽 合肥 230026)

摘要: 为减少反应流计算花费的时间, 采用动态存储建立热力学数据表 (*In situ* adaptive tabulation, ISAT) 的方法来取代反应流计算中化学反应的直接积分 (Direct integral, DI), 并针对气相 H_2/O_2 爆轰波的传播过程进行了数值模拟。采用两种不同的 ISAT 误差放大判据对一维爆轰波的压力、温度及组分变化进行了计算, 并和 DI 的结果进行了比较以考察其计算精度。此外, 还探讨了 ISAT 方法的效率。计算结果表明, 和 DI 方法相比, 在爆轰波传播计算中 ISAT 方法计算误差小于 3%, 化学反应计算速度提高了 8 倍。

关键词: 爆炸力学; 化学反应精度和效率; 动态存储建表; 爆轰波; 直接积分; 数值模拟

中图分类号: O382

国标学科代码: 130 · 3510

文献标志码: A

1 引 言

爆轰波是化学反应诱导的激波, 在气相爆轰波传播过程的计算中, 需要求解真实的化学反应过程, 这会涉及包含多组分和多基元反应的详细化学反应机理的处理和计算。由于各组分的反应时间尺度相差可达 10 个数量级, 组分方程的求解存在严重刚性现象, 故计算量很大。另外, 为精确捕捉爆轰波的结构, 还需要细化计算网格的尺寸, 这又增加了化学反应的计算量。为减少气相爆轰波计算中化学反应所消耗的 CPU 时间, 同时不失去计算应有的精度, 必须对化学反应的计算过程作适当处理。

传统方法中一般采用局部化学平衡假设和准稳态假设的方法简化反应机理^[1-4], 由于该方法可以降低反应自由度的维数, 使化学反应过程的计算得以简化, 因而得到了广泛的应用。然而, 这类简化机理的获得依赖于所考虑的物理问题, 缺乏通用性, 而且在预测痕量物质 (如小浓度的自由基) 时往往严重失真甚至无法预测, 故受到了一定程度的限制。另一类方法是通过改进化学反应的算法来减少计算时间。J. Y. Chen 等^[5] 采用了静态存储的方法将可能的反应速率计算结果预先存入一个查找表 (Look-up table, LUT) 中, 实际计算时通过查找相近数据并进行插值的方法获得计算结果, 这样可以避免大量重复的积分过程, 然而当反应自由度维数较高时, LUT 表的存储量极大, 这不仅增加了查表的时间, 同时还对计算机存储提出了更高的要求。针对上述建表方法的不足, S. B. Pope^[6] 提出了一种动态存储的建表方法 (*In situ* adaptive tabulation, ISAT), 即在计算过程中动态地建立与化学反应速率相关的数据表, 表中数据仅覆盖实际计算所需的结果, 从而避免了存储量高的缺点。该方法的优越性在零维均匀湍流反应器^[6-7] 和湍流射流火焰^[8-9] 的计算中得到了很好的体现。

爆轰波稳定传播过程中, 其反应体系中的热力学状态相对稳定, 预期计算过程中动态表内的热力学数据能够覆盖大多数热力学状态。因此, 本文中尝试将基于动态存储的 ISAT 的方法应用于气相爆轰波结构及其传播过程的计算中, 并对该方法在这类问题中的计算精度和计算效率进行分析。

2 动态存储的 ISAT 方法

令反应体系中包含 K 个热力学状态标量 φ_k (组分浓度和温度), 则反应流计算中的一个时间步长内,

* 收稿日期: 2006-08-07; 修回日期: 2007-02-02

基金项目: 国家自然科学基金项目 (10472047、50506028)

作者简介: 董 刚 (1970—), 男, 博士, 副教授。

这些标量的变化(即化学反应过程)可通过直接积分反应速率方程来得到,此过程称为直接积分(Direct integral, DI)。在 ISAT 方法中,计算初始时刻首先建立空数据表(Buildup),将标量 φ_k 和直接积分得到的标量变化量 $\Delta\varphi_k$ 存入该表中,计算过程中,对任一标量 φ'_k ,在表中查找满足误差范围内的 φ_k ,此过程称为查找(Search),如果查到,则用 $\varphi_k + \Delta\varphi_k$ 作为 φ'_k 的计算结果,此过程称为取回(Retrieval);如果未查到,则以 φ'_k 为初始值执行直接积分的过程,并将得到的 $\Delta\varphi'_k$ 与最接近的 $\Delta\varphi_k$ 进行比较,若有

$$\text{Max}_K \left(\frac{|\Delta\varphi_k - \Delta\varphi'_k|}{|\varphi_k|} \right) < \varepsilon \quad (1)$$

则增加 φ_k 的误差范围,使 φ'_k 落在 φ_k 的误差范围内,仍以 $\varphi_k + \Delta\varphi_k$ 作为 φ'_k 的计算结果取回,此过程成为放大(Enlarge);

若式(1)不满足,将 φ'_k 、 $\Delta\varphi'_k$ 以及误差范围的信息作为一组数据放入表中以备后续计算查找,此过程称为插入(Insert),同时以 $\varphi'_k + \Delta\varphi'_k$ 作为 φ'_k 的计算结果取回。对上述动态存储数据进行建表的过程如图 1 所示。在数据表的建立过程中使用了平衡二叉树的数据结构形式,树中每个节点存储了包含初始标量、标量变化量以及标量误差范围等一组信息。随着计算的进行和数据组的插入,节点以二叉树方式不断生长,同时生长的节点必要时需进行旋转以保证每个节点的左右子节点的层数相差不超过 1,这样使二叉树在生长的同时保证左右平衡。对于包含 N 个节点的平衡二叉树,对满足要求的数据组搜索的次数将不超过 $\log_2 N$,这样可以快速查得所需的数据。

3 一维爆轰波的计算结果与讨论

为简化应用的问题,计算中采用了一维带化学反应的多组分 Euler 方程,其中,使用了 H_2/O_2 基元反应机理^[10],该机理包含 18 个基元反应和 9 种组分,其原始的惰性组分 Ar 被 N_2 所替代。采用时间分离算法求解控制方程,其中对化学反应源项可以采用 DI 或 ISAT 的方法求解。为考察动态存储技术的效果,采用两种数据插入放大判据($\varepsilon = 10^{-3}$ 和 $\varepsilon = 10^{-2}$,见式(1))的 ISAT 方法和 DI 方法对上述爆轰波传播过程进行了计算。计算过程中使用了等当量比的 H_2 和 O_2 预混气,其初始值 $p_0 = 100 \text{ kPa}$, $T_0 = 298 \text{ K}$ 。计算区域长度 $l_0 = 0.3 \text{ m}$,左端为刚性固壁边界条件,右端为零梯度出口边界条件。采用左端(封闭端) $\Delta x = 5 \text{ mm}$ 的高温点火区域形成爆轰。所有计算使用的网格尺寸均为 0.1 mm 。

3.1 计算精度

图 2 为直接积分(DI)和两种不同放大判据的动态建表(ISAT)计算的爆轰波压力和温度曲线。根据 DI 计算结果获得的爆轰波爆速与 CJ 爆速之比 $D/D_{\text{CJ}} = 1.07$,表明了本文计算的准确性。这些结果比较表明 ISAT 方法计算的结果与 DI 结果吻合得很好。表 1 给出了计算的 3 个不同时刻,爆轰波峰值压力(Von Neumann 尖峰)以及 ISAT 方法与 DI 比较的相对误差 ε_r ,该结果也表明,ISAT 技术能够很好地计算爆轰波的传播过程,两种放大判据下计算的峰值压力较 DI 计算结果的相对误差均小于 3%,其中较小的放大判据($\varepsilon = 10^{-3}$)计算的相对误差小于 0.3%,表明更严格限制表中已有数据的误

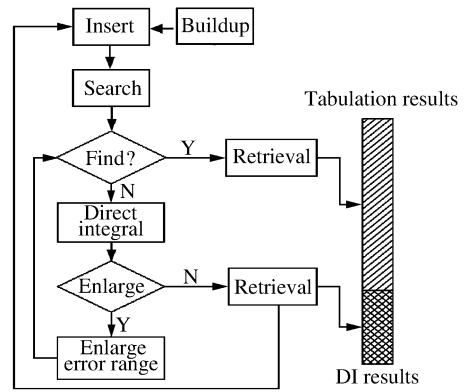


图 1 一个时间步长内动态建表流程图

Fig. 1 Flow chart of ISAT at one time step

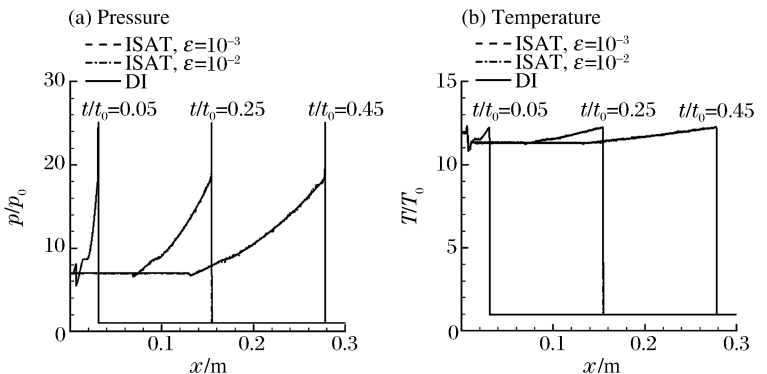


图 2 不同时刻爆轰波的压力图和温度图

Fig. 2 Pressure and temperature profiles of detonation wave at the different times

表 1 不同时刻计算的 Von Neumann 峰压力值以及相对误差

Table 2 Computed Von Neumann pressures and relative errors at the different times

t/t_0	$(p/p_0)_{max}$			ϵ_r	
	DI	ISAT		ISAT	
		$\epsilon=10^{-3}$	$\epsilon=10^{-2}$	$\epsilon=10^{-3}$	$\epsilon=10^{-2}$
0.05	25.028	25.032	25.163	1.6×10^{-4}	5.4×10^{-3}
0.25	25.044	25.036	24.435	3.2×10^{-4}	2.4×10^{-2}
0.45	25.066	25.013	24.344	2.1×10^{-3}	2.9×10^{-2}

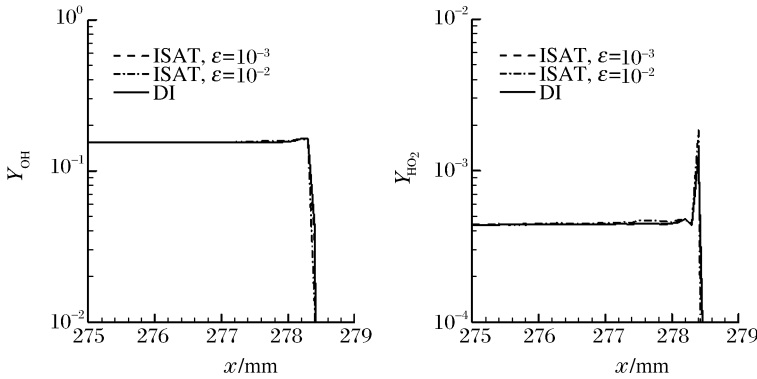


图 3 自由基组分浓度分布图 ($t/t_0 = 0.45$)

Fig. 3 Mass fraction distributions of radicals ($t/t_0 = 0.45$)

差范围会提高计算精度。

为检验组分浓度计算精度，图 3 给出了两种自由基(OH 和 HO₂) 的浓度分布，计算结果在爆轰波阵面附近(275~279 mm) 进行了放大。可以看出，即使将计算结果放大，两种 ISAT 方法计算的组分浓度和 DI 计算结果也吻合得很好，这进一步说明了 ISAT 方法的精确性。

3.2 计算效率

计算效率是检验 ISAT 方法的又一重要指标。由于反应流计算中实际存在的热力学状态在计算过程中可以通过建表和查找的过程获得，因此可避免大量而又费时的积分运算，从而缩短计算所需的 CPU 时间。图 4 为 ISAT 方法和 DI 积分方法计算所累积消耗的 CPU 时间以及 ISAT 方法提高计算速度倍数 r_i 的变化曲线。可以看出，随着计算的进行，ISAT 方法所消耗的 CPU 时间较 DI 方法明显缩短，计算到约 4 500 步时，两种 ISAT 方法消耗的 CPU 时间大体相当，但却均小于 DI 方法消耗 CPU 时间近一个数量级。从 r_i 曲线可以看出，ISAT 方法在约 4500 步时可以提速 8 倍，因而表明了动态存储技术在爆轰波计算中的强大优越性。

为进一步考察 ISAT 方法的效率，图 5 给出了两种误差放大判据下 r_n 和 n_{rec} 的变化曲线，其中 r_n 代表 ISAT 方法中 DI 次数占整个操作次数(DI 次数和查表次数之和) 的比例，表征了 ISAT 方法中数据查找效率； n_{rec} 代表表中记录数据的累积次数，表征了 ISAT 方法的存储量大小。由图 5 可知，在计算初始阶段， r_n 呈现快速增长的趋势，达到最大值后又快速下降。这表明，计算初始阶段主要以数据表的建立和增长为主，这是由于一方面初始表中数据较少，难以覆盖计算所需的热力学状态区域，因此要通过 DI 的方法向表中添加数据，另一方面，由于计算初始过程中存在高温点火过程向爆轰的过渡，此时体系热力学状态变化较大，因而也需要 DI 过程以提供所需的数据。随着爆轰波的形成与稳定传播， r_n 逐渐下降，这表明表中数据逐渐覆盖计算所需热力学状态区域，DI 过程减少，查表过程增加，到 4 500 步左右时，ISAT 中 DI 次数接近 10%，表明此时计算主要以查表过程为主。值得注意的是，计算过程中 $\epsilon = 10^{-2}$ 时的 r_i 变化始终小于 $\epsilon = 10^{-3}$ 时 r_i 的变化，这说明加宽放大误差的范围，查表成功的次数增多，DI 操作次数减少。 n_{rec} 的变化过程表明，随着计算的进行，表的存储量逐渐增加，然而，更大的误差放大判据($\epsilon = 10^{-2}$) 由于减少了 DI 以及将 DI 计算结果添入表内的次数，因而可以减少数据表的存储量。根据 3.1 节的分析，由于 $\epsilon = 10^{-2}$ 对应的结果仍和 DI 的结果吻合得很好，因此适当增加 ϵ 可以从计算精度和计算效率上满足实际需要。

图 6 给出了两种误差放大判据下每计算步长内发现节点的个数增量 (Δn_{find})、记录(插入)到表中的节点个数增量 (Δn_{rec}) 以及节点误差放大的个数增量 ($\Delta n_{enlarge}$) 的变化规律。图 6(a) 表明从表中读取数据的次数随计算的进行呈线性增加的趋势，且两种误差放大判据下的差别并不大。然而，图 6(b) 和 6(c) 的结果却表明，不同的误差放大判据所导致的节点记录个数和节点放大个数却有着不同的变化趋

图 6 给出了两种误差放大判据下每计算步长内发现节点的个数增量 (Δn_{find})、记录(插入)到表中的节点个数增量 (Δn_{rec}) 以及节点误差放大的个数增量 ($\Delta n_{enlarge}$) 的变化规律。图 6(a) 表明从表中读取数据的次数随计算的进行呈线性增加的趋势，且两种误差放大判据下的差别并不大。然而，图 6(b) 和 6(c) 的结果却表明，不同的误差放大判据所导致的节点记录个数和节点放大个数却有着不同的变化趋

势;图 6(b)中,当节点误差放大判据较小时($\epsilon=10^{-3}$),记录个数呈迅速上升然后缓慢下降的变化趋势,这说明在计算初始阶段,有更多的不能满足误差放大要求的积分过程被记录到数据表中,而节点误差放大判据较大时($\epsilon=10^{-2}$),能够满足误差放大要求的积分过程相对较多,其记录到数据表中的数据相对较少,故呈现了记录个数逐渐增加的趋势。图 6(c)表明,到计算接近 4 500 步时,每计算步的节点误差放大次数, $\epsilon=10^{-3}$ 对应的平均约为 15 次,而 $\epsilon=10^{-2}$ 对应的约为 35 次,这也反映了不同节点误差判据对节点操作过程的影响。

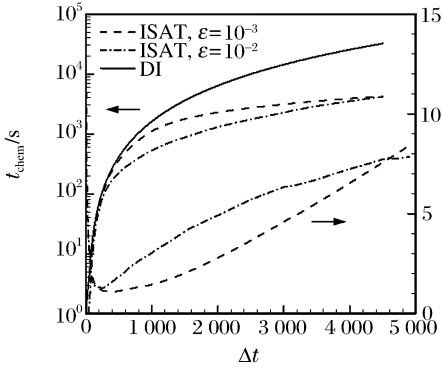


图 4 化学反应消耗时间和 r_i 的变化

Fig. 4 Variations of CPU time by chemical reactions and r_i

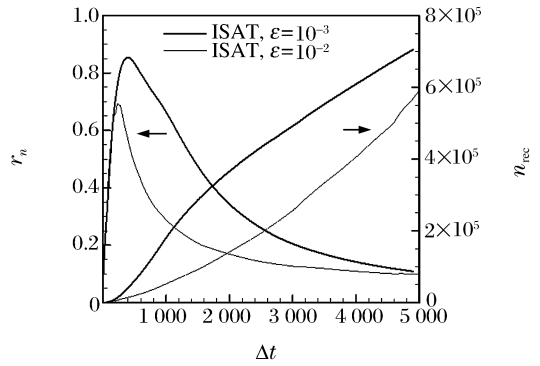


图 5 r_n 和 n_{rec} 的变化

Fig. 5 Variations of r_n and n_{rec}

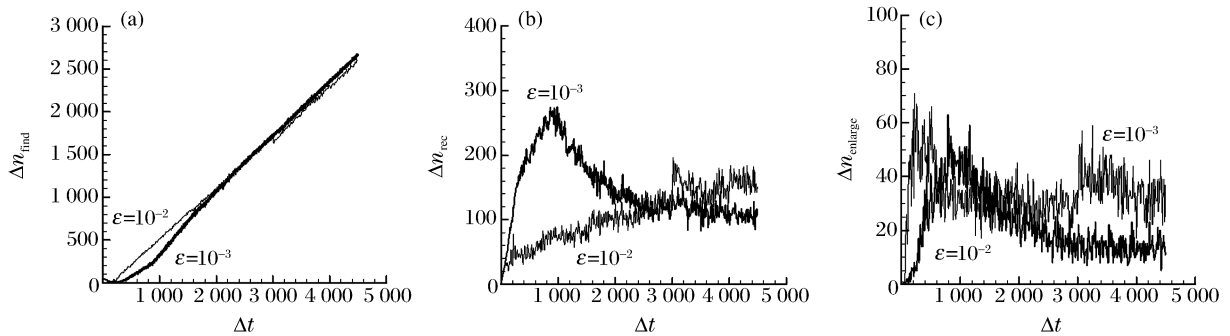


图 6 不同误差放大判据下 ISAT 方法中的发现、记录和放大的节点个数增量的变化

Fig. 6 Variations of increments of find, record and enlargement in ISAT for different ϵ

4 结论和展望

本文中成功地将简化化学反应计算量的 ISAT 方法应用于一维爆轰波问题的计算,从计算精度和计算效率两个方面考察了该方法的效果。结果表明,ISAT 方法在确保计算精度的条件下,可以大大节约计算化学反应的 CPU 时间。此外,ISAT 方法不依赖于物理问题,具有很好的移植性。上述优点为更复杂的化学反应流,尤其是涉及爆轰现象的高速反应流问题的数值模拟提供了可能。

研究还表明,ISAT 的效率和精度受误差放大判据的影响,合理给定误差放大判据在不降低计算精度的情况下可以进一步节约计算的存储量。然而,对于二维或三维问题,当计算量显著增加时,ISAT 数据表也会急剧增加并突破计算机内存限制,因此可以采用多次建表的方法解决存储量问题。

参考文献:

- [1] Mauss F, Peters N, Rogg B, et al. Reduced kinetic mechanisms for premixed hydrogen flames[C]// Peters N, Rogg B. Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion System, Berlin: Springer-Verlag, 1993: 29-43.
- [2] Mass U, Pope S B. Laminar flame calculations using simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds[C]// The 25th International Symposium on Combustion. Pittsburg: The Combustion Institute, 1994: 1349-1356.
- [3] Sung C J, Law C K, Chen J Y. An augmented reduced mechanism for methane oxidation with comprehensive glob-

- al parametric validation[C]//The 27th International Symposium on Combustion. Pittsburg: The Combustion Institute, 1998:295-304.
- [4] Massias A, Diamantis D, Mastorakos E, et al. An algorithm for the construction of global reduced mechanisms with CSP data[J]. *Combustion and Flame*, 1999,117:685-708.
- [5] Chen J Y, Kollmann W, Dibble R W. Pdf modeling of turbulent nonpremixed methane jet flames[J]. *Combustion Science and Technology*, 1989,64:315-346.
- [6] Pope S B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 1997,1:41-63.
- [7] 李艺,陈义良,罗雅屏,等. 简化化学反应计算的当地自适应建表方法在PMSR中的应用[J]. *工程热物理学报*, 2001,22(3):378-381.
LI Yi, CHEN Yi-liang, LUO Ya-ping, et al. The application of *in situ* adaptive tabulation method in PMSR[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2001,22(3):378-381.
- [8] 陈华蕾,王海峰,陈义良. ISAT方法在射流火焰PDF计算中的应用[J]. *中国科学技术大学学报*, 2005,35(4):557-562.
CHEN Hua-lei, WANG Hai-feng, CHEN Yi-liang. Application of the *in situ* adaptive tabulation method in the PDF simulation of a turbulent jet diffusion flame[J]. *Journal of University of Science and Technology*, 2005,35(4):557-562.
- [9] Yang B, Pope S B. Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms: *In situ* adaptive tabulation in principle directions-premixed combustion[J]. *Combustion and Flame*, 1998,112:85-112.
- [10] Kee R J, Grcar J F, Smooke M D, et al. A Fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames[R]. SAND85-8240, 1985.

An application of *in situ* adaptive tabulation method in numerical simulation of gaseous detonation

DONG Gang^{1*}, FAN Bao-chun¹, ZHU Min-ming², CHEN Yi-liang²

(1. Key Laboratory of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology,
Nanjing 210094, Jiangsu, China;

2. Department of Thermal Science and Energy Engineering, University of Science
and Technology of China, Hefei 230026, Anhui, China)

Abstract: To reduce the CPU time cost by reactive flow calculations, the direct integral (DI) of chemical reactions is replaced by an *in situ* adaptive tabulation (ISAT) method. The ISAT method with two enlargement criterions of calculated error is used to numerically simulate the gaseous detonation process for H₂/O₂ mixture. The calculated pressure, temperature and mass fractions of species by ISAT are compared with those by DI to verify the accuracy of the ISAT. The computed CPU time and find, enlargement and record process of data in ISAT, which represent the calculated efficiency of ISAT, are discussed. Compared with those by DI method, the calculated errors by ISAT method are no more than 3% and the calculated efficiency of ISAT is improved 8 times. It is concluded that the ISAT method shows the advantage in the calculations of detonation wave propagation.

Key words: mechanics of explosion; accuracy and efficiency of chemical reactions; ISAT; detonation wave; direct integral; numerical simulation

* Corresponding author: DONG Gang
E-mail address: dgvehicle@yahoo.com
Telephone: 86-25-84303236