

文章编号: 1001-1455(2008)03-0229-07

CE/SE 方法在多管爆轰流场并行计算中的应用*

刘建文^{1,2,3}, 赵书苗^{1,2,3}, 钟诚文^{1,2}, 韩王超^{1,2}

(1. 西北工业大学翼型、叶栅空气动力学国防科技重点实验室, 陕西 西安 710072;

2. 西北工业大学高性能计算研究与发展中心, 陕西 西安 710072;

3. 中国航天科工集团三院三十一所, 北京 100074)

摘要: 应用改进的 CE/SE 方法和并行分区技术, 针对二维非结构网格, 发展了一套求解化学反应流场的并行程序。采用带扩张-收敛喷管的多管脉冲爆轰发动机模型, 把计算域分成若干子域进行并行求解。采用 H₂ 和 O₂ 的 8 组分 34 基元化学反应模型, 对恰当化学当量比混合的氢气和氧气在单爆轰管内的起爆和向多管传播的过程进行了数值模拟。计算结果表明: CE/SE 方法能很好地捕捉爆轰流场的精细结构, 结果与相关文献符合良好; 单管产生的爆轰波对旁通爆轰管的流场结构有很大的影响, 能引爆其中的可燃气体。

关键词: 爆炸力学; 爆轰流场结构; 时空守恒元和解元方法; 爆轰; 并行分区; 基元化学反应; 数值模拟

中图分类号: O381; V231.22

国标学科代码: 130·3510

文献标志码: A

1 引言

时空守恒元和解元方法 (space-time conservation element and solution element, CE/SE) 是 S. C. Chang^[1] 在 1995 年提出来的。CE/SE 是一种全新的数值求解方法, 它把时间和空间统一处理, 通过设立守恒元和解元, 使格式在局部和全局都能严格保证其物理意义上的守恒。由于具有格式简单、精度高、能比较好地捕捉流场间断解等优点, CE/SE 方法在近几年得到了很大的发展和完善, 在航空航天领域的多组分化学反应流动等方面得到了很广泛的应用。

对 CE/SE 方法在化学反应方面的应用研究较多, 均采用一步不可逆化学反应模型。MA Fu-hua 等^[2] 对单管多循环脉冲爆轰发动机的爆轰流场和性能进行了计算和评估, HE Hao 等^[3] 计算了二维、三维爆轰胞格的形状; K. -S. Lm 等^[4] 采用有限速率化学反应模型对 H₂/O₂/AR 混合气体的爆轰过程进行了模拟。在我国开展了一些在 CE/SE 的应用上的工作^[5], 解决的问题较简单, 翁春生等^[6] 采用一步不可逆化学反应对直管的非定常爆轰过程进行了模拟; 陈永刚等^[7] 采用 H₂/O₂ 的 8 组分 24 基元反应对一维氢氧爆轰波传播过程进行了数值计算。

基元反应对化学反应过程进行模拟需要很大的计算量, 同时非结构网格与结构网格相比具有更大的灵活性。本文中, 基于二维的非结构网格, 采用改进的 CE/SE 方法、并行分区技术和 H₂/O₂ 的 8 组分 34 基元化学反应模型, 在计算机集群上对多管脉冲爆轰发动机的单管点火和爆轰流场的传播过程进行数值模拟。

2 控制方程

忽略粘性, 非定常带化学反应的控制方程组可以用向量的形式表示为

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

式中: \mathbf{U} 是守恒变量, \mathbf{E} 和 \mathbf{F} 是无粘通量, \mathbf{S} 是化学反应源项。分别定义为

* 收稿日期: 2006-10-30; 修回日期: 2007-05-08

基金项目: 国防科技重点实验室基金项目(9140C4201020602)

作者简介: 刘建文(1981—), 男, 硕士研究生。

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \rho_{N_S} \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \vdots \\ \rho_{N_S} u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho_1 v \\ \rho_2 v \\ \vdots \\ \rho_{N_S} v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho E + p)v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \dot{w}_1 \\ \dot{w}_2 \\ \vdots \\ \dot{w}_{N_S} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

式中: u 和 v 分别是直角坐标系下两个方向的速度分量, ρ_k 和 \dot{w}_k 分别是第 k 种组分的密度和质量生成率。混合物的总密度可以表示为

$$\rho = \sum_{k=1}^{N_S} \rho_k \quad (2)$$

假设每种组分的质量分数用 Y_k 表示, 焓用 h_k 表示, 则单位体积内的总能量

$$\rho E = \rho h - p + \rho(u^2 + v^2)/2 = \rho \sum_{k=1}^{N_S} Y_k h_k - p + \rho(u^2 + v^2)/2 \quad (3)$$

某一组分在温度 T 时的焓 h_k^T 又可以表示为

$$h_k^T = h_k^{T_0} + \int_{T_0}^T c_p(t) dt \quad (4)$$

式中: T_0 为参考温度, 等压比热 c_p 一般又可以写成温度的四次多项式形式。压强可以由理想气体状态方程给出

$$p = \rho R T = \rho R_u \left(\sum_{k=1}^{N_S} Y_k / w_k \right) T \quad (5)$$

式中: w_k 是各组分的摩尔质量, R_u 是通用气体常数。一般取 $R_u = 8.31441 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 。

3 数值方法

CE/SE 方法的基本原理和方法在文献[1-3, 5-7]中已有详细阐述, 以下对刚性化学反应源项的求解、并行分区和并行边界的处理等方面作具体说明。

3.1 化学反应模型和源项的处理

有限速率化学反应模型的一般形式为



由质量作用定律可得, 第 i 种组分的反应生成速率为

$$\dot{w}_i = w_i \sum_{j=1}^{N_R} (\nu''_{ij} - \nu'_{ij}) (k_{fj} \prod_{l=1}^{N_S} n_l^{\nu'_{lj}} - k_{bj} \prod_{l=1}^{N_S} n_l^{\nu''_{lj}}) \quad (7)$$

式中: N_R 是基元反应的总数目, N_S 是反应物的总数目, k_{fj} 和 k_{bj} 是第 j 个基元反应的正、逆反应速率常数, k_{fj} 可以由 Arrhenius 定律得到

$$k_{fj} = A_f T^n \exp(-E_a/R_u T) \quad (8)$$

式中: A_f 为指前因子, n 为温度指数, E_a 为活化能, T 为温度。 k_{bj} 可以由化学反应平衡常数 k_{eq} 求出

$$k_{bj} = k_{fj} / k_{eq} \quad (9)$$

由于化学反应的特征时间远小于流场的特征时间, 为了解决化学反应所造成的方程的刚性问题, 可利用分裂的方法, 把求解过程分成两个步骤: 第一步, 不考虑化学反应源项, 求出流场在某一时刻的解, 得到各组分的质量分数。方程(3)含有组分焓项, 它是关于温度的非线性方程, 可以通过牛顿迭代法求解, 再由气体状态方程(5)计算出压强。第二步, 把第一步的结果作为初始值, 计算由于化学反应作用, 流场在一个时间步长后的解。

对于第一步采用改进的 CE/SE 方法直接求解,对于第二步中源项计算采用变系数常微分方程求解器 DVODE^[8],调用 CHEMKIN II^[9]计算各组分的热力学特性和反应物生成率,最终得到组分的质量分数、温度和压强。

3.2 并行分区和并行边界的处理

由于采用基元反应对化学反应过程进行模拟,求解的方程数目大大增加,带来的计算量也相应的增加。采用并行方法来缩短计算时间,利用 METIS^[10]来完成计算域上非结构网格的分区。使用 METIS 时,只需要在整个计算域生成非结构网格,不需要在流场中间引入人工边界,因此能保证流场网格的光滑性。此外,METIS 能较好地实现各处理器之间的负载均衡,同时减少处理器之间的数据传递,从而提高并行效率。

首先在整个二维计算区域上生成非结构网格,把每个网格单元所包含的节点信息提取出来,然后再由用户指定所要划分子域的个数,根据这些信息 METIS 就可以划分出每个网格所在的子域,进而把网格划分成单独的子网格块,在计算时每个处理器计算单独的网格块。使用 METIS 划分时,各子域的网格在物理上可以是连续的,也可以是非连续的,这并不会影响计算结果和计算精度。网格数量相当是进行子域划分的标准,因此,从图 1 可以看出,由于网格疏密不同,划分后的各子域的形状、大小不尽相同。图 1 所示的算例划分为 18 个子域。

物理边界的处理方法和通常方法相同,对于 METIS 网格划分所产生的内边界,即并行边界,可以通过引入虚拟网格的方法来解决。区域 1 的虚拟网格与区域 2 的内网格重叠,区域 2 的虚拟网格与区域 1 的内网格重叠。因此,虚拟网格的值由其所对应的内网格单元得到,此过程不需要任何的插值或近似,只需要相邻处理器之间的数据传递。处理器之间的通信采用 MPI(message passing interface),使用 MPI_SEND 和 MPI_RECV 函数实现数据的传递和接收。图 2 为边界单元处理方法的算例示意图。

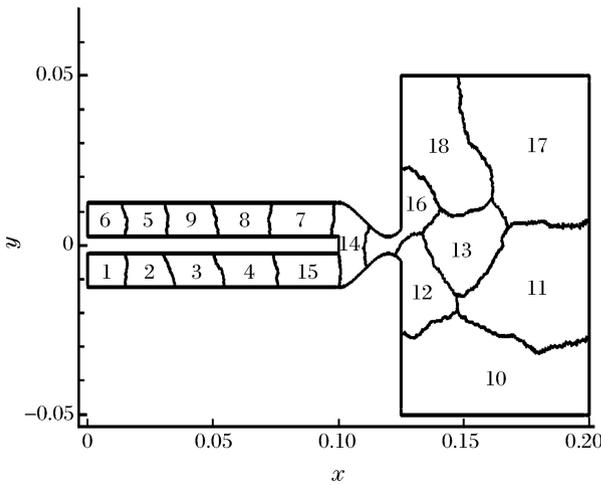


图 1 计算域和子域的划分

Fig.1 Computational domain and sub-domain decomposition

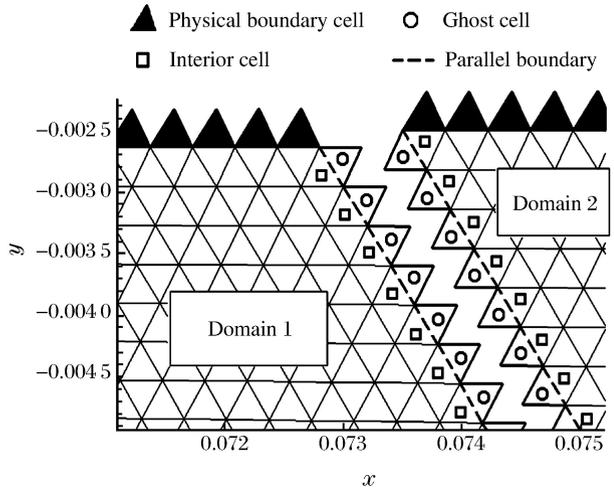


图 2 边界单元示意图

Fig.2 Illustration of boundary cells

4 问题描述和算例分析

4.1 问题描述

采用的计算模型与文献[11]相同,如图 3 所示,直管长 68 mm,高 10 mm,两段直管之间的间隔为管高的一半。两个直管共用一个喷管,喉道高度为 10 mm,喉道与直管开口端的水平距离是 17 mm,喷管总长 42 mm,其入口和出口的高度均为 27 mm,外流场是 90 mm×160 mm 的矩形区域。采用 METIS 把流场划分成 12 个子域,图 4 给出了各子域与平均网格数的比较,最大网格数量为 5 542,最小为 5 154,偏离平均值 5 381 不到 3%。计算中采用的时间步长是 25 ns,模拟流场时间为 250 μs。

初始流场的压强和温度分别是 0.101 MPa 和 300 K, 上面的直管、喷管段和外流场填充的气体是氧气, 下面的直管填充的是按恰当化学当量比混合的氢气和氧气, 下面直管的封闭端是宽为 8 mm 的点火区, 充填的是压强为 3.039 MPa、温度为 3 000 K 的水蒸气。文中的计算都是针对初始循环而言的, 不涉及到多循环流场的相互影响及多循环过程之间的衔接。

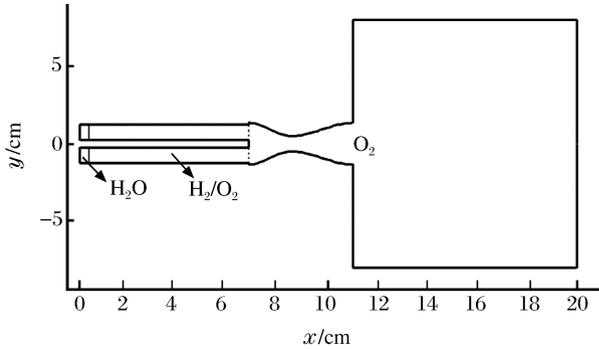


图3 多管 PDE 的计算模型

Fig.3 Computational model of multi-tube PDE

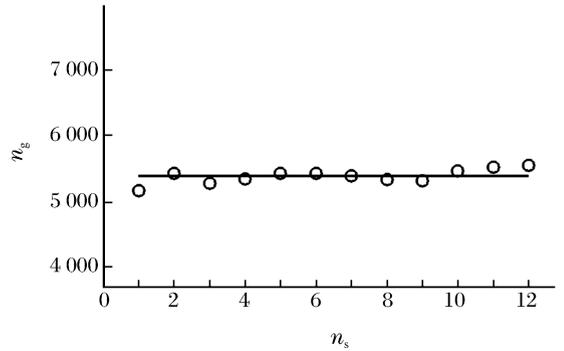


图4 各子域网格数量的比较

Fig.4 Sub-zones grid number comparison

4.2 算例分析

受到高温高压点火区的作用, 强爆轰波在起爆后瞬间建立。由于点火采用的是 H_2O , 没有化学反应发生, 因此点火区的温度和压强没有出现急剧升高的现象, 一直是缓慢减小的。形成的强爆轰波以大于稳定自持爆轰波的速度向开口端传播, 此时流动可以看成是准一维的, 图 5 给出了不同时刻爆轰管中心线压力的比较。在 $t=5 \mu s$ 以后, 爆轰波的压力峰值就基本稳定, 为约 1.844 MPa, 此时封闭端的高温高压区还存在。在 $t=15 \mu s$, 封闭端的压力已下降到 0.608 MPa, 在 $t=21 \mu s$ 左右爆轰波传出直管部分, 此时爆轰波的速度为约 2.851 7 km/s, 与理论推导得到的 CJ 速度 2.836 km/s 相差不到 1%。

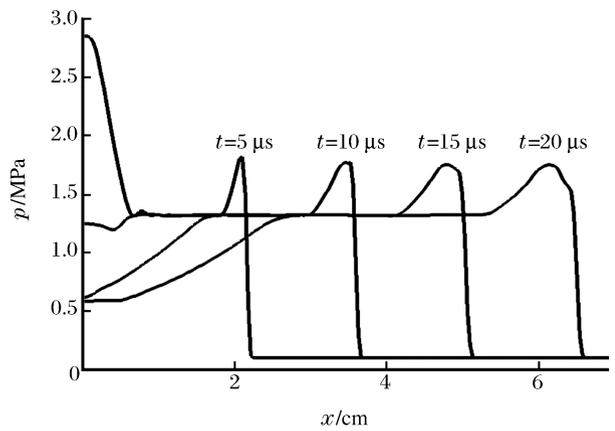


图5 不同时刻的压力分布

Fig.5 Pressure distribution at different time

图 6 给出了不同时刻的流场压力云图, 从图中可以清楚地看到爆轰波发展、传播的全过程。当 $t=10 \mu s$ 时, 爆轰波传播了直管长度的一半, 当 $t=25 \mu s$ 时, 爆轰波已经进入收敛段, 由于 H_2 消耗殆尽, 爆轰波蜕化成激波, 由于下壁面限制, 激波面发生弯曲, 壁面的压强也升高到 3.2 MPa。在上直角壁面处产生 Prandtl-Meyer 波, 使激波后的压强迅速下降, 并产生向上的速度分量, 一部分气体经过喉道进入外流场, 另一部分气体进入上面直管, 在两管之间壁面的后方产生一个旋涡, 涡心的位置为约 (7 cm, 0), 压强为 0.419 MPa。当 $t=50 \mu s$ 时, 激波已经传入上面直管, 流场压力最大值也下降到 1.9 MPa; 此时喷管中的激波已传出喉道, 向外传播的激波和喷管上壁面反射的激波相互作用, 使流场变得更加复杂, 流场呈现出很强的不对称性。当 $t=110 \mu s$ 时, 激波刚好到达上管的封闭端壁面处, 激波后的压力为约 0.669 MPa, 封闭端的压力瞬间由 0.101 MPa 升高到 3.26 MPa, 然后反射激波向右传播, 传播过程中压强逐渐被削减。当 $t=200 \mu s$ 时, 流动已传播到远场边界处。从图中可以看出, 爆轰波流过下面直管所需的时间为约 21 μs , 而进入上面直管的激波流过整个管道的的时间却需要 75 μs , 可见爆轰波的速度和激波的传播速度相差很大。

图 7~8 给出了上、下直管封闭端面中心点的压强随时间的变化曲线, 与文献[11]总体上吻合很好, 只是在图 8 中 $t=200 \mu s$ 以后的时间内本文得到的压力偏低。图 7 中存在一个约 0.608 MPa 的平台压

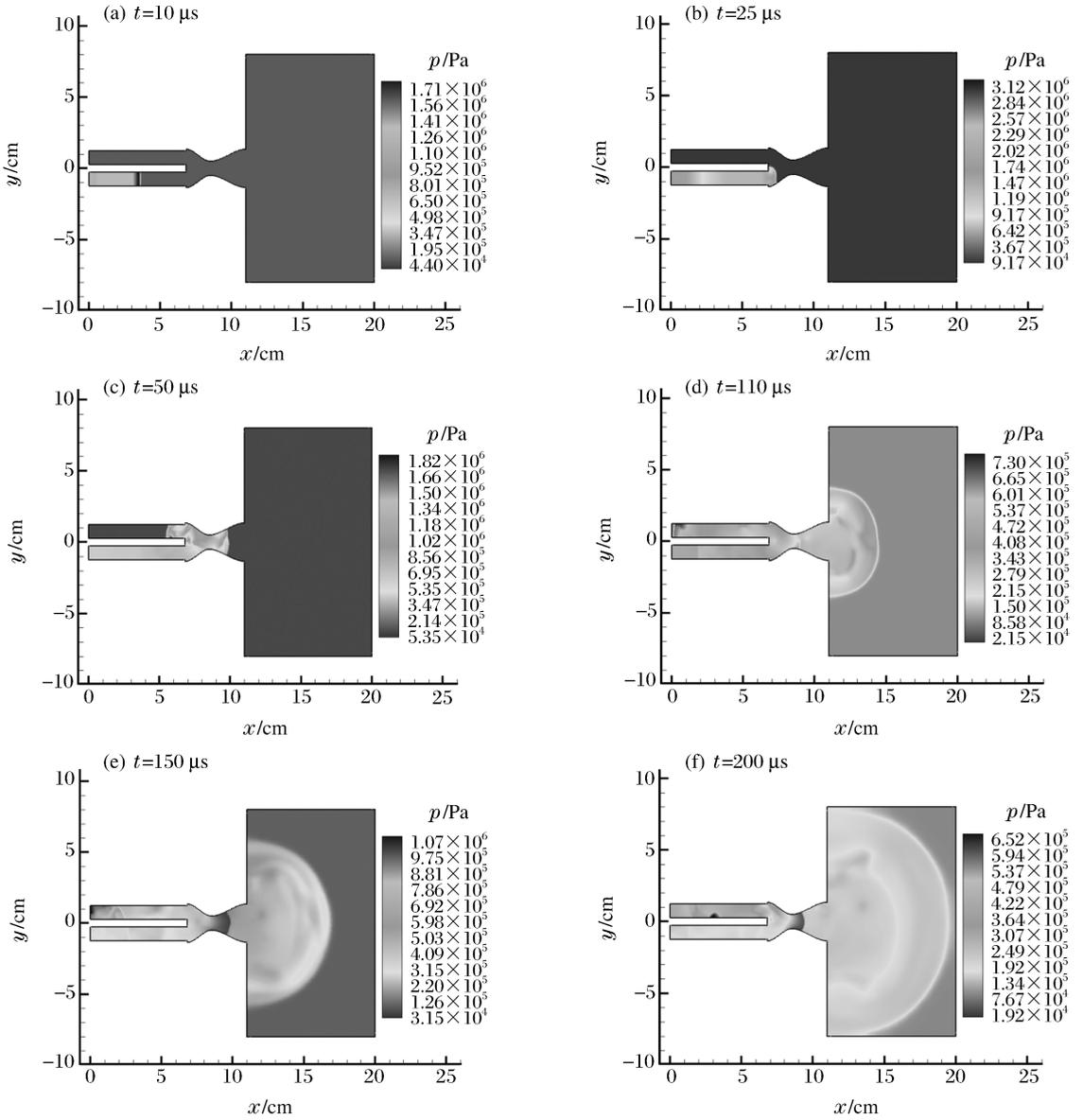


图 6 不同时刻流场的压力云图

Fig. 6 Pressure contours of flow field at different time

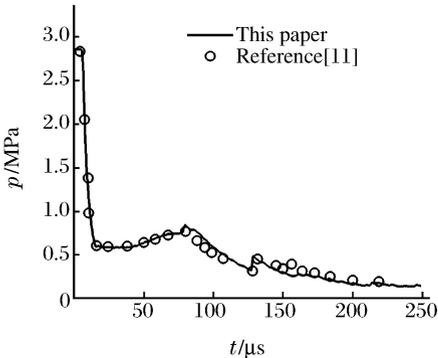


图 7 下面直管封闭端的压力随时间的变化

Fig. 7 Pressure curve on the lower closed end wall

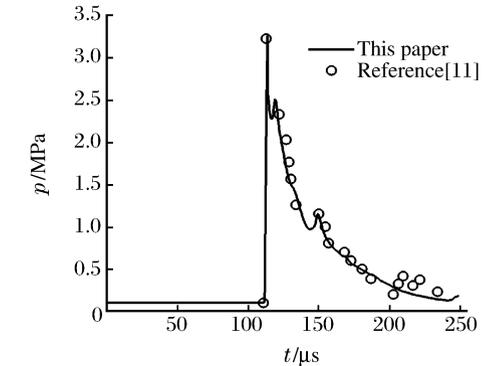


图 8 上面直管封闭端的压力随时间的变化

Fig. 8 Pressure curve on the upper closed end wall

力,在喷管处产生的膨胀波到达封闭端面后,压力缓慢减小。在 $t=110 \mu\text{s}$ 以前,下面直管中产生的激波还没有到达上管的封闭端面,壁面压力始终保持在 0.101 MPa ,然后突然升高到与下管初始点火压强相当的 3.26 MPa ,此压强完全可以引爆管内的未燃气体(假设已填充新鲜可燃物),可见此激波的程度很大,不过由于激波快速向右移动,此压强衰减得很快,经过 $90 \mu\text{s}$ 已经下降到 0.304 MPa 。

为了研究两管同时点火情况下流场之间的相互影响,还对两管同时起爆的流场进行了数值模拟。由于双管同时点火时,上下直管内的流场完全一样,图 9 只对下管封闭端面中心点压力和单管点火的情况进行了比较。在 $t=82 \mu\text{s}$ 以前,上下管流场之间的相互影响暂未传播到封闭端面,所以压力完全相同。在 $t=35 \mu\text{s}$ 时,在喷管的收敛段产生反射激波,反射波在 $t=82 \mu\text{s}$ 时到达封闭端面,使压强有一个较大的跃升(约 1.6 MPa),但下降速度很快,不过此后过程的压力一直比单管点火时要高一些。

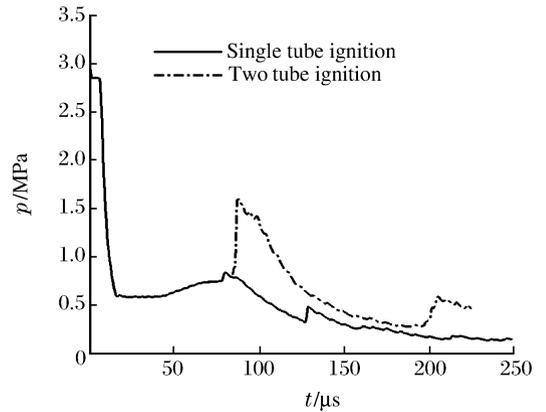


图 9 单管点火和双管同时点火时下管封闭端面压力比较

Fig. 9 The close-end-wall pressure comparison between two tube and single tube ignition

5 结 论

首先对 CE/SE 方法中化学反应源项的处理、并行分区方法和并行边界处理等做了详细介绍,采用 METIS 把计算流场划分成网格数量相当的 12 个子域,然后利用改进的 CE/SE 方法和 H_2/O_2 的 8 组分 34 基元化学反应模型,对二维多管脉冲爆轰发动机的单管起爆和传播过程进行了数值模拟,得到了精细的流场结构,发现单管爆轰对旁通爆轰管内的流场有很大的影响,它可使未起爆的管内封闭端压力升高到点火所需的状态。文中的结果与相关文献符合良好,可为多管脉冲爆轰发动机的流场分析和设计提供一定的参考数据。因此,本文的并行 CE/SE 方法对爆轰流场的数值模拟是成功的,并且并行分区技术也能较好地实现处理器之间的负载均衡。

参考文献:

- [1] Chang S C. The method of space-time conservation element and solution element: A new approach for solving the Navier-Stokes and Euler equations[J]. Journal of Computational Physics, 1995,119:295-324.
- [2] MA Fu-hua, Choi J-Y, Yang V. Thrust chamber dynamics and propulsive performance of single-tube pulse detonation engines[J]. Journal of Propulsion and Power, 2005,21(3):512-526.
- [3] HE Hao, Yu S-T J, ZHANG Zeng-chan. Direct Calculation of One-, Two-, Three-Dimensional Detonations by the CESE Method[R]. AIAA 2005-229,2005.
- [4] Lm K-S, Yu S-T J, Kim C-K. Application of the CESE Method to Detonation with Realistic Finite-Rate Chemistry [R]. AIAA 2002-1020,2002.
- [5] 张德良,谢巍,郭长铭,等. 气相爆轰胞格结构和马赫反射数值模拟[J]. 爆炸与冲击,2001,21(3):161-167. ZHANG De-liang, XIE Wei, GUO Chang-ming, et al. Numerical simulation of cellular structures and Mach reflection of gaseous detonation waves[J]. Explosion and Shock Waves, 2001,21(3):161-167.
- [6] 翁春生, Gore T P. CE/SE 方法在非正常爆轰计算中的应用[J]. 空气动力学学报,2003,21(3):301-310. WENG Chun-sheng, Gore J P. Apply the CE/SE method to the simulation of unsteady detonation[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2003,21(3):301-311.
- [7] 陈永刚,何立明,刘建勋. 时空守恒元和解元方法的爆震波一维数值模拟[J]. 推进技术,2005,26(3):256-259. CHEN Yong-gang, HE Li-ming, LIU Jian-xun. One-dimensional numerical simulation of detonation waves based on space-time conservation element and solution element method[J]. Journal of Propulsion Technology, 2005,26

(3):256-259.

- [8] Brown P N, Byrne G D, Hindmarsh A C. VODE: A variable coefficient ODE solver[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1989,10:1038-1051.
- [9] Kee R J, Miller J A. Chemkin II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics[R]. SAND 89-8009B, 1989.
- [10] Karypis G, Kumar V. Multilevel K-way partitioning scheme for irregular graphs[J]. *Journal of Parallel and Distributed Computing*. 1998,48(1):96-129.
- [11] Ebrahimi H B, Malo-Molina F J. Numerical investigation of 2-D and 3-D multitube pulse detonation using H₂ and JP8 fuel[R]. AIAA 2004-465,2004.

CE/SE scheme applied in parallel computation of PDE flow field

LIU Jian-wen^{1,2,3}, ZHAO Shu-miao^{1,2,3}, ZHONG Cheng-wen^{1,2*}, HAN Wang-chao^{1,2}

(1. *National Key Laboratory of Aerodynamics Design and Research, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, Shaanxi, China;*

2. *Center for High Performance Computing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, Shaanxi, China;*

3. *The 31st Research Institute, China Aerospace Science and Industry Corporation, Beijing 100074, China)*

Abstract: A parallel computation program for reactive flow was developed based on two-dimensional unstructured grid by adopting the modified CE/SE (space-time conservation element and solution element) method and parallel domain decomposition technology. The computational domain was decomposed into several sub-domains and the parallel computation was conducted by introducing the multi-tube PDE (pulsed detonation engine) with convergent-divergent nozzle. The processes of ignition in single tube and propagation in multi-tube were simulated for H₂ and O₂ under stoichiometric ratio conditions by using the 8-species, 34-elementary reaction model. Computed results demonstrate the followings: (1) the CE/SE method can capture the complicated detonation flow structures, and the conclusion in this paper agrees well with that in the literature; (2) detonation waves generated in single tube have significant influences on flow field structures of side-tubes and can ignite the fresh reactant in them.

Key words: mechanics of explosion; detonation flow field structure; CE/SE; detonation; parallel domain decomposition; elementary reaction; numerical simulation

* Corresponding author: ZHONG Cheng-wen
E-mail address: zhongcw@nwpu.edu.cn
Telephone: 86-29-88460412