

非结构网格催化壁面的隐式处理方法^{*}

原志超, 黄世璋, 高效伟

(大连理工大学 工业装备结构分析国家重点实验室, 航空航天学院, 辽宁 大连 116024)

摘 要: 为了解决格点型非结构有限体积法隐式处理完全催化壁面时边界上出现非物理解的情况, 提出了壁面边界隐式矩阵“松弛”处理方法, 使得格点型非结构有限体积法可以用于高超声速非平衡条件下气动热的预测。提出了考虑等温壁面和辐射平衡壁面下, 处理完全催化壁面的“松弛”方法, 并给出了边界控制体上隐式矩阵的具体形式。针对高超声速化学非平衡流动, 使用非结构网格对典型的圆柱绕流以及球头绕流问题进行模拟, 并与结构网格计算结果进行比较分析。验证了所提出的强制边界条件的“松弛”格式可以正确模拟完全催化壁面边界条件。在此基础上, 针对不同质量分数配比的自由来流进行计算, 分析壁面处组元的质量分数以及热流, 计算结果显示即使在自由来流中两个组元质量分数各占50%的情况下, 被“松弛”的组元质量方程的残差仍然能够到 10^{-8} 量级, 壁面上热流计算正确并且组元质量分数与自由来流保持一致。这表明本文方法在自由来流中质量分数最大组元不占优的情况下仍然有效。

关键词: 非结构网格; 高超声速; 化学非平衡; 壁面催化; 隐式处理方法

中图分类号: O357.1

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2018) 02-0251-10

DOI: 10.13675/j.cnki.tjjs.2018.02.002

An Implicit Scheme with Unstructured Grid for Catalytic Surface

YUAN Zhi-chao, HUANG Shi-zhang, GAO Xiao-wei

(School of Aeronautics and Astronautics, State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: In order to solve the nonphysical phenomenon when the unstructured finite volume solver based on cell-vertex scheme is employed for fully catalytic surface, the ‘relaxation’ method for implicit matrix on boundary is developed. Thus, the unstructured finite volume solver based on cell-vertex scheme can be used to predict aero-heating for hypersonic nonequilibrium. The strong implicit scheme with ‘relaxation’ considering fully catalytic surface under isothermal and radiative equilibrium wall is developed and the implicit matrix for the control volume on boundary is given. This scheme based on unstructured grid is implemented for the simulation of hypersonic chemical nonequilibrium flows around a cylinder and a sphere. Numerical results are obtained and compared with that of structured grid solver. It indicates that the ‘relaxation’ scheme for strong boundary condition can simulate fully catalytic surface accurately. Furthermore, the simulation for different mass fraction compositions of freestream is performed and the mass fraction and heat flux on the wall are analyzed. The results show that the residual order of mass conservation equation for the ‘relaxation’ species can reach 10^{-8} and the mass fraction on the wall is the same to that of freestream even if the mass fraction of two species both equal to 50%. It shows that the developed method is still effective when the maximum mass fraction species does not dominate.

^{*} 收稿日期: 2016-12-14; 修订日期: 2017-02-23。

作者简介: 原志超, 男, 博士生, 研究领域为高超声速气动热数值模拟。E-mail: zhichaoy@126.com

通讯作者: 高效伟, 男, 博士, 教授, 研究领域为边界单元法, 飞行器热防护系统优化设计。E-mail: xwgao@dlut.edu.cn

Key words: Unstructured grid; Hypersonic; Chemical nonequilibrium; Surface catalysis; Implicit scheme

1 引言

高超声速飞行器所处的环境,空气密度低、飞行速度高,周围的空气经过激波强烈压缩而急剧升温,空气中的氧分子与氮分子发生离解、电离等复杂的化学反应,此时,量热气体与平衡气体已经不再适用,需要使用考虑化学反应的非平衡气体模型进行模拟。高超声速热环境的准确预测对于飞行器的设计起到了至关重要的作用^[1]。目前进行高超声速气动热预测的方法主要三类:(1)纯工程方法;(2)纯数值方法;(3)基于 Prandtl 边界层理论的边界层外无粘外流解与边界层内工程方法相结合的方法^[2~4]。针对连续流区域气动热的计算,纯数值方法是通过求解 Navier-Stokes 方程来实现的,高超声速气动热的数值模拟一直是 CFD(Computational Fluid Dynamics)研究的难点^[5~7]。

目前对高超声速飞行器进行气动热环境预测的 CFD 程序主要是基于有限体积法。在实际工程计算中,应用广泛的是多块结构网格程序,国外程序主要包括 NASA Langly 研究中心开发的 LAURA^[8], NASA Ames 研究所开发的 DPLP^[9];在国内,主要是中国空气动力研究与发展中心的董维中、高铁锁、李海燕等^[10~12]、国防科技大学的李桦、潘沙、柳军等^[13,14]都开发了相应的程序,并对气动热环境计算当中存在的数值离散格式、物理模型,边界条件等问题进行了相应的研究。对于复杂外形飞行器,相比较于结构网格,非结构网格在网格前处理、并行计算以及网格自适应等^[15~17]方面更具优势,但是目前针对高超声速气动热环境进行预测的非结构的程序很少,比较成熟的是 NASA Langly 研究中心开发的 FUN3D^[18]程序。在国内,南京航空航天大学的王江峰、伍貽兆、余奇华^[19,20]采用空间上为 Jameson 格式、时间推进上为五步 Runge-Kutta 显式格式的格心型非结构网格有限体积法对高超声速化学非平衡流以及热化学非平衡流开展了流场计算以及并行效率的研究。因而进一步研究非结构网格技术在高超声速气动热预测中的应用,以及开发相应的程序是很有必要的。

格心型与格点型格式是有限体积法构造控制体的两种方法,两种方法各有特点(优劣仍没有确定结论)^[21,22]。格心型非结构有限体积法计算时所需的内存空间和时间约为格点型格式的两倍^[23]。对于考

虑化学反应的气动热环境模拟,计算量很大,本文选用格点型非结构网格对高超声速化学非平衡流动进行模拟。相对于格心型格式,格点型格式要面临物理边界处理的问题,当控制体仅有一半左右留在边界上时,格心型网格的边界处理的误差储存于网格的中心,而格点型网格的边界处理产生的误差寄存于顶点上,也即将会直接在边界上产生新的离散误差。

对于高超声速化学非平衡粘性流体的定常计算,化学反应源项会带来刚性以及稳定型问题^[13,24~26],为此,本文选择隐式时间推进方法进行计算。对于格点型非结构网格,边界处理一直是棘手处理的问题,尤其是边界需要隐式处理的时候,不能像格心型那样使用虚网格技术进行处理,为了进行隐式强制处理边界条件,需要对隐式矩阵进行特殊处理。因此,对非结构格点型有限体积法中催化壁面隐式处理的研究很有必要。

本文针对格点型格式在隐式处理完全催化壁面上存在的问题,提出了强制边界条件矩阵的“松弛”形式,使得边界上满足完全催化的强制条件而不出现非物理解。基于此方法,开发了非结构网格格点型有限体积法的程序。在此基础上,分别计算了高超声速圆柱在等温壁与辐射平衡壁条件下完全催化壁面下的热流,并且与结构网格计算结果进行了比较分析,证明了本文提出的“松弛”方法是可行的、有效的。

2 控制方程及物理模型

2.1 控制方程

高超声速连续流的主要控制方程为考虑化学非平衡的三维可压缩 Navier-Stokes 方程,其守恒型积分形式具体可以写为^[23]

$$\oint \frac{\partial q}{\partial t} d\Omega + \oint (g - h) d\sigma = \oint \dot{\omega} d\Omega \quad (1)$$

式中 Ω 为控制体, $d\sigma$ 为控制体单元面; q 是守恒变量, g 和 h 分别为对流通量与粘性通量, $\dot{\omega}$ 为源项,其表达式为

$$q = \begin{bmatrix} \rho_s \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix}; g = \begin{bmatrix} \rho_s U \\ \rho U u + p n_x \\ \rho U v + p n_y \\ \rho U w + p n_z \\ \rho U H \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\mathbf{h} = \begin{bmatrix} n_x \Phi_{x,s} + n_y \Phi_{y,s} + n_z \Phi_{z,s} \\ n_x \tau_{xx} + n_y \tau_{xy} + n_z \tau_{xz} \\ n_x \tau_{yx} + n_y \tau_{yy} + n_z \tau_{yz} \\ n_x \tau_{zx} + n_y \tau_{zy} + n_z \tau_{zz} \\ n_x \Theta_x + n_y \Theta_y + n_z \Theta_z \end{bmatrix} \quad (3)$$

$$\dot{\omega} = \begin{bmatrix} \dot{\omega}_s \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

式中 $\dot{\omega}_s$ 为组分 s 的质量生成率, ρ_s 为组分 s 的密度, ρ 为混合气体的密度, u, v, w 分别为 x, y, z 三个方向上的速度分量, E 为单位质量单位体积内的总能量, U 为控制体面上的法向速度, p 为压强, H 为单位质量单位体积内的总焓, τ_{ij} 表示应力张量的 9 个分量, n_x, n_y, n_z 表示控制体面上法向矢量的三个分量, 其它变量的表达式如下所示

$$\Phi_{x,s} = \rho D_s \frac{\partial y_s}{\partial x} \quad (5)$$

$$\Phi_{y,s} = \rho D_s \frac{\partial y_s}{\partial y} \quad (6)$$

$$\Phi_{z,s} = \rho D_s \frac{\partial y_s}{\partial z} \quad (7)$$

$$\Theta_x = u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} + \eta \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{s=1}^{N_r} h_s D_s \frac{\partial y_s}{\partial x} \quad (8)$$

$$\Theta_y = u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} + \eta \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{s=1}^{N_r} h_s D_s \frac{\partial y_s}{\partial y} \quad (9)$$

$$\Theta_z = u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} + \eta \frac{\partial T}{\partial z} + \rho \sum_{s=1}^{N_r} h_s D_s \frac{\partial y_s}{\partial z} \quad (10)$$

在式(5)~(10)中, y_s 表示组分 s 的摩尔分数, T 表示混合气体的温度, η 是空气混合物热传导系数, D_s 是组分 s 的摩尔扩散系数, h_s 是单位质量组分 s 的静焓。

2.2 热力学关系

本文所考虑的多组分混合气体可以认为是有多组单一组分热完全气体组成的, 混合气体的焓值以及组分焓值根据以下式子进行计算

$$h_s(T) = \frac{R}{M_s} \left(\sum_{k=1}^s \frac{A_k^s T^k}{k} + A_0^s \right) \quad (11)$$

$$h = \sum_{s=1}^{N_r} h_s(T) \quad (12)$$

式(11)当中的拟合系数可以在文献[27]中找到。

2.3 输运系数

为了使得 Navier-Stokes 方程能够封闭, 需要计算混合气体的输运系数(粘性系数、热传导系数和扩散系数)。考虑包含多组分的非平衡反应的影响, 含混气体中的输运过程与量热完全气体有所不同。本文计算方法与文献[24, 27]中计算方法是一致的。

2.4 化学反应源项

对于式(4)中单位体积组分 s 的质量生成率 $\dot{\omega}_s$, 使用有限速率模型的计算公式为

$$\dot{\omega}_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} (\beta_{s,r} - \alpha_{s,r}) (R_{f,r} - R_{b,r}) \quad (13)$$

式中 N_r 表示基元反应的总个数, $\alpha_{s,r}, \beta_{s,r}$ 分别表示组分 s 在第 r 个反应中反应物与生成物的化学计量数, $R_{f,r}, R_{b,r}$ 表示第 r 个反应中的正反应生成率与逆反应生成率, 表达式为

$$R_{f,r} = k_{f,r} \prod_{s=1}^{N_r} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\alpha_{s,r}} \quad (14)$$

$$R_{b,r} = k_{b,r} \prod_{s=1}^{N_r} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\beta_{s,r}} \quad (15)$$

式中 $k_{f,r}, k_{b,r}$ 分别表示正反应速率与逆反应速率。本文计算采用 5 组分 (N, N_2, O, O_2, NO) 化学反应模型, 基元反应的具体描述以及反应速率的计算详见文献[27]。

3 数值离散

3.1 计算格式

本文使用格点型非结构网格算法求解 Navier-Stokes 方程, 控制体如图 1 中的虚线所示(如 $ABCDEF$)。数据结构采用的是基于边的数据结构, 在计算对流通量的时候只需要对所有的边(如图 1 中蓝色虚线所示)进行循环即可。

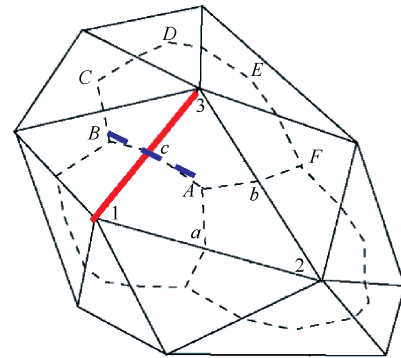


Fig. 1 Schematic of control volume for unstructured grid (in 2D)

对流项采用具有二阶精度的迎风型 STVD 格式^[16], 具体见式(16)~(26)所示, 式子中的下标 L, R 表示的是控制面两侧, 图中蓝色虚线所表示的控制面 (AB) 上的通量的计算时使用的 q_R, q_L 即是节点 1、3 上的守恒变量值。粘性项梯度采用 Green-Gauss 公式进行计算, 熵修正函数使用的是 Harten-Yee^[28] 型修正方法。

由于模拟的是定常流动,为了避免对组分生成源项采用显式求解时带来的刚性问题,本文采用隐式求解方法,源项采用点隐进行处理。使用基于线性欧拉向后时间差分的时间推进方式^[18],每一时间步上的线性方程组如式(25)所示,使用 Gauss-Seidel 迭代求解该线性方程组。式(25)与(26)中的 Rhs 表示的是控制体上的通量, V 表示的是控制体 Ω 的体积, I 是单位阵, Δt 为时间步长;式(26)中的 $[D]^n$ 与 $[O]^n$ 表示 $[A]^n$ 矩阵中的对角部分与非对角部分。

$$g = \frac{1}{2} [g_L + g_R - R] A [(d\tilde{q} - d\tilde{q}_{lim})] \quad (16)$$

$$d\tilde{q} = R^{-1} (q_R - q_L) \quad (17)$$

$$d\tilde{q}_{lim} = 2\varphi(p_L, p_R) \Psi \quad (18)$$

$$\Psi = \min \left(d\tilde{q}_L, d\tilde{q}_R, d\tilde{q}, \frac{1}{4} (d\tilde{q}_L + d\tilde{q}_R) \right) \quad (19)$$

$$d\tilde{q}_M = R^{-1} [ds \cdot \nabla q_M] \quad (20)$$

$$ds = (x_L - x_R)\mathbf{i} + (y_L - y_R)\mathbf{j} + (z_L - z_R)\mathbf{k} \quad (21)$$

$$\varphi(p_L, p_R) = \frac{1}{2} [1 - \cos(p_{rat} \pi)] \quad (22)$$

$$\hat{\varphi} = \max \left(\frac{p_L}{p_R}, \frac{p_R}{p_L} \right) \quad (23)$$

$$p_{rat} = \min \left[1, \max \left(0, \frac{\hat{\varphi}_{max} - \hat{\varphi}}{\hat{\varphi}_{max} - \hat{\varphi}_{min}} \right) \right] \quad (24)$$

$$[A]^n \{ \Delta q \}^n = - \{ Rhs \}^n \quad (25)$$

$$[A]^n = [D]^n + [O]^n = \frac{V}{\Delta t} I + \frac{\partial \{ Rhs \}^n}{\partial q} \quad (26)$$

3.2 边界处理

本文所研究的范围设置在连续流领域,因而固体壁面上采用无滑移壁面。在不考虑烧蚀与固体热传导的情况下,常常给定等温壁或辐射平衡壁面,分别见式(27), (28)所示

$$T = T_w \quad (27)$$

$$q_w = \varepsilon \sigma T_w^4 \quad (28)$$

同样地,对于组分连续方程,在壁面处需要给出边界条件,文献[16, 24]中的描述,一般给出的是完全催化壁面、非催化壁面还有有限催化壁面。本文着重考虑的是完全催化壁面边界条件的施加。在文献[15, 16, 24]中,完全催化壁面定义的是在表面处各个组分的质量分数与自由来流一致,即

$$c_{iw} = c_{i\infty} \quad (29)$$

式中 $c_i = \frac{\rho_i}{\rho}$ 表示的是组分 i 的质量分数。

对于格心型有限体积法,式(27)~(29)提出来的壁面边界条件可以通过虚网格技术来实现;对于格点型有限体积法,在边界上只有半个控制体,很多

时候是将边界点当作内点处理,同时也没有做隐式处理^[29]。图2中由红色线条与绿色线条围成的多边形 ($M_1 - M_2 - M_3 - M_4 - M_5$) 即为边界节点 P_b 所在的控制体。

本文使用隐式时间推进方式,由于 P_b 不是内部节点,在边界上需要对落在半个控制体上的点 P_b 进行特殊处理以达到边界强制的目的。换句话说,就是需要对式(26)中的 $[A]^n$ 进行特殊处理,对于内部点,一般情况下 $[O]^n \neq 0$,但是对于边界点, $[O]^n = 0$ 。格点型格式下,根据文献[18]中对于量热气体,等温壁面的隐式强制处理方式如式(30)所示。式(30)表示的是 $\Delta u = \Delta v = \Delta w = \Delta T = 0$, 其中 $D_{11}, D_{12}, D_{13}, D_{14}, D_{15}$ 表示的是式(26)中 $[D]^n$ 的元素,其计算方法与内点一致。换句话说,式(30)是式(25)的特殊形式,边界初始化后,无滑移等温壁面的条件在边界上每个点都满足。对于化学非平衡气体,等温壁面上需要同时满足式(27), (29)两个式子;边界初始化后为了使得在迭代过程中边界上满足式(29),需要在每个时间步上组分的质量分数的增量为0,即 $\Delta c_i = 0$,进而推导出组分质量增量的关系,如式(31)所示。将式(31)写成矩阵形式,并结合式(30)中关于动量方程以及能量方程的约束条件,可以得到边界上强制隐式方程形式,见式(32)。

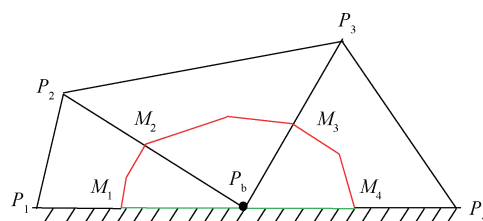


Fig. 2 Schematic of control volume on boundary

$$\begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & D_{14} & D_{15} \\ -u & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -w & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -C_v T_w + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) & -u & -v & -w & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \rho \\ \Delta \rho u \\ \Delta \rho v \\ \Delta \rho w \\ \Delta \rho E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Rhs_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (30)$$

$$\Delta c_i = \Delta \left(\frac{\rho_i}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} (\delta_{ij} \Delta \rho_j - c_{i\infty} \Delta \rho_i) = 0 \quad (31)$$

$$[A]^n \{ \Delta q \}^n = \begin{bmatrix} 1 - c_{i\infty} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -u & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -w & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{\partial T}{\partial \rho_i} & \frac{\partial T}{\partial \rho u} & \frac{\partial T}{\partial \rho v} & \frac{\partial T}{\partial \rho w} & \frac{\partial T}{\partial \rho E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \rho_i \\ \Delta \rho u \\ \Delta \rho v \\ \Delta \rho w \\ \Delta \rho E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (32)$$

对于边界上的节点,式(32)表示壁面节点上每个时间步上线性方程组,也就是式(25)在等温、完全

催化壁上的具体体现。可以清楚地看出,对于边界节点而言,在每个时间步上都准确满足 $\Delta\rho_i = \Delta\rho u = \Delta\rho v = \Delta\rho w = \Delta T = 0$ 。这个结果与真实物理情况是相悖的,因为壁面处的密度跟压强是与来流不同的,并且在时间推进过程中是不断变化的。得到这种非物理现象的原因在于式(32)当中的 $[A]^n$ 是非奇异的,并且右端项为零向量,因此,无论内点如何计算,边界上的点都是不满足物理现象的。为了使得点隐格式的强制方式能够有效使用,需要对式(32)进行特殊处理一下。

因为所有组元的质量分数满足以下式子

$$\sum_{s=1}^{N_s} c_s = 1 \quad (33)$$

即所有组元的质量分数之和为1,故式(32)中对组元质量分数的约束是过约束,这样就造成了计算得到的组元质量是非物理的,换句话说,式(32)是壁面边界条件式(29)成立的充分但是不必要条件。为此,需要将式(19)中多余的约束去掉,物理条件的约束是 N_s 个,而式(32),(33)两个式子表示的是 $N_s + 1$ 个约束条件,因此,需要将式(32)中对于 $\Delta\rho_i$ 的约束去掉一个。对于式(32)中的第 j 个组分方程的强制条件进行“松弛”,具体形式见式(34)所示,其中, $j = \max_{i=1}^{N_s} (c_{i\infty})$ 。

式(34)与(32)两个式子不同之处在于对第 j 个组元方程的边界上的条件不是强制的,其中, D_j , D_u , D_v , D_w , D_e 表示的是式(26)中 $[D]^n$ 的元素,其计算方法与内点一致, Rhs_j 表示的是第 j 个组元的组分扩散方程计算得到的残差,其具体做法与式(30)当中连续方程的处理是一致的。经过“松弛”处理后的式(34)既能够满足无滑移、等温度壁面,同时也能满足 $N_s - 1$ 组分的质量分数满足式(29);由于式(33),在最后收敛的时候,对于第 j 个组分也是满足式(29)的。

$$[A]^n \{\Delta q\}^n = \begin{bmatrix} 1 - c_{i\infty} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ D_j & D_u & D_v & D_w & D_e \\ -u & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -w & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{\partial T}{\partial \rho_i} & \frac{\partial T}{\partial \rho u} & \frac{\partial T}{\partial \rho v} & \frac{\partial T}{\partial \rho w} & \frac{\partial T}{\partial \rho E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \rho_i \\ \Delta \rho_j \\ \Delta \rho u \\ \Delta \rho v \\ \Delta \rho w \\ \Delta \rho E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ Rhs_j \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (34)$$

对于辐射平衡壁面条件的施加,可以类比于等温壁,能量方程项的强制施加可以保留式(34)的形式,在每个时间步上满足 $\Delta T^{n+1} = 0$,只需要在计算时,依据壁面热流给出壁面温度

$$T_{\text{new}} = \sqrt[4]{\frac{q_w^n}{\varepsilon \sigma}} \quad (35)$$

$$T^{n+1} = \delta T_{\text{new}} + (1 - \delta) T^n \quad (36)$$

式中 ε 是表面材料辐射系数,本文中给定 $\varepsilon = 0.89$; σ 是 Stefan-Boltzmann 常数, $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$; δ 为迭代松弛因子,一般情况下取 $\delta = 0.01$ 。

4 算例验证与讨论

基于上一节中的理论方法,开发了非结构有限体积法程序 UNFLOW。为了验证本文所提出处理完全催化壁面边界条件的方法是可行的,计算半径为 1m 的圆柱的化学非平衡绕流,得到壁面热流与壁面上的各个组元的质量分数,将得到的结果与结构化网格程序 AHEAT 的计算结果进行对比。AHEAT 是可以求解量热气体、平衡气体、化学非平衡以及热化学非平衡气体的结构化网格程序,之前的文章中已经对其正确性进行了验证^[30,31]。所以在本文中选用 AHEAT 计算的结果进行对比验证。

4.1 等温条件下圆柱扰流问题

高超声速飞行器的翼前缘、舵面等受热严重的区域可以近似为圆柱面,为了更为简捷地验证方法的正确性,选择半径为 1m 的圆柱,在 $H = 53 \text{ km}$ 高空处的来流条件 ($T_\infty = 265.0 \text{ K}$, $p_\infty = 53.0 \text{ Pa}$) 下,速度为 $V_\infty = 4230 \text{ m/s}$,攻角为 0° 时的气动热环境的预测。在该条件下,空气发生化学反应,选择五组分 (N , N_2 , O , O_2 , NO) 进行计算,壁面边界条件为等温壁 $T_w = 343 \text{ K}$,完全催化壁。自由来流中各个组元的质量分数见表 1 所示。

首先,使用结构网格程序 AHEAT 进行计算,分别采用热平衡(单温)与热非平衡(双温)条件进行计算。计算热流时壁面法向网格尺寸的选择有不同的方法^[13,32,33],为了使得计算得到的壁面热流可靠准确,选择文献[13]中所述准则,本文中所有算例的壁面处网格雷诺数均保持在 $2 \sim 6$;在验证网格无关性的基础上(网格无关性过程在此不列出)选择环向网格为 79,垂直于壁面方向的网格为 78 的网格进行计算,需要指出的是,采用的网格在对称方向上的网格数为 1,计算网格见图 3 所示。

计算结果见图 4 所示,图中“Structured, 1-T”表示的是结构网格程序 AHEAT 采用热平衡(单温)计算的结果;而“Structured, 2-T”表示的是结构网格程序 AHEAT 采用热非平衡(双温)计算的结果。为方便起见,本文曲线图中“1-T”表示计算采用单温模型进行计算,而“2-T”表示计算采用双温模型进行计

算。可以看出,采用单温与双温计算得到的壁面热流是一致的,说明圆柱所处流场中的热非平衡很不明显,可以使用热平衡(单温)方程进行计算。

Table 1 Mass fraction of species for freestream	
Species name	Mass fraction
N	6.217×10^{-20}
O	7.758×10^{-9}
N ₂	0.766
O ₂	0.233
NO	4.981×10^{-5}

使用本文所提出的施加边界条件的方法进行计算,采用的网格见图5所示。需要说明的是,非结构所采用的网格与结构网格的区别仅仅是网格类型不同,非结构网格在对称方向上有一层网格,非结构网格全部为四面体,节点坐标是完全一致的。结构与非结构使用单温进行计算的温度场云图见图6所示。图4中,“Unstructured, 1-T”表示的是非结构程序 UNFLOW 采用热平衡(单温)计算的结果,从图中可以看出,除了在 $x=0$ 处的热流峰值有较小差别外,其他各处的热流值与结构网格计算结果是相吻合的。本文对完全催化边界条件进行强制时,采用的方法是对自由来流当中质量分数最大组分的方程进行“松弛”处理的,对于收敛后的结果,壁面处的组分质量分数是否与自由来流一致主要取决于质量分数最大的 N_2 ,图7给出了壁面上 N_2 的质量分数以及 N_2 所在组分扩散方程的残差沿壁面的分布。可以清楚地看出,壁面处 N_2 的质量分数与来流的是吻合的, N_2

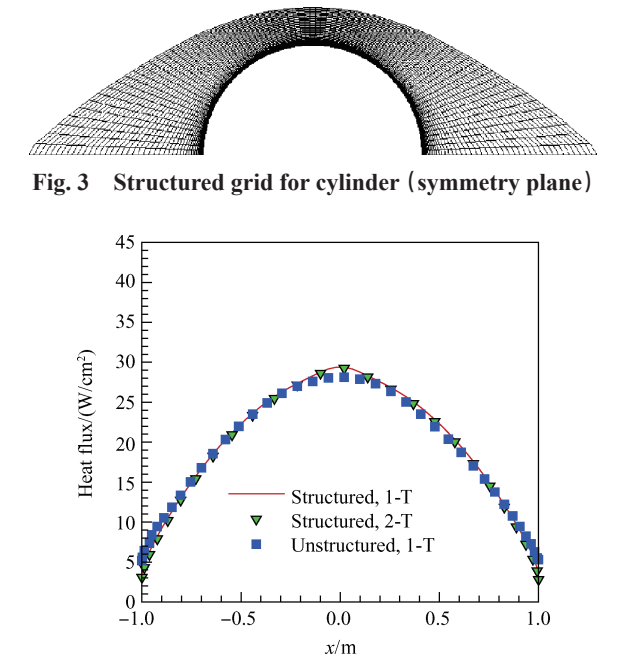


Fig. 4 Heat flux results for isothermal wall

所在组分扩散方程的残差虽然不像其他组分那样强制为0,但是在迭代计算后,它的残差也达到了 10^{-8} 量级,说明了该方程也收敛了。

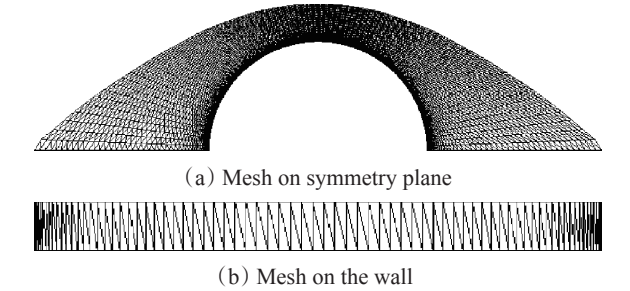


Fig. 5 Unstructured grid for cylinder

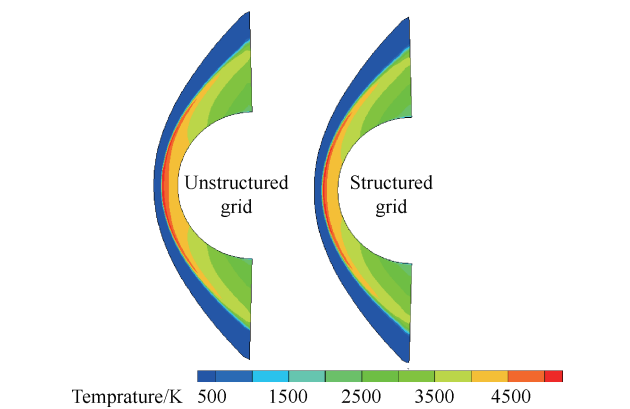


Fig. 6 Temperature contour for isothermal wall

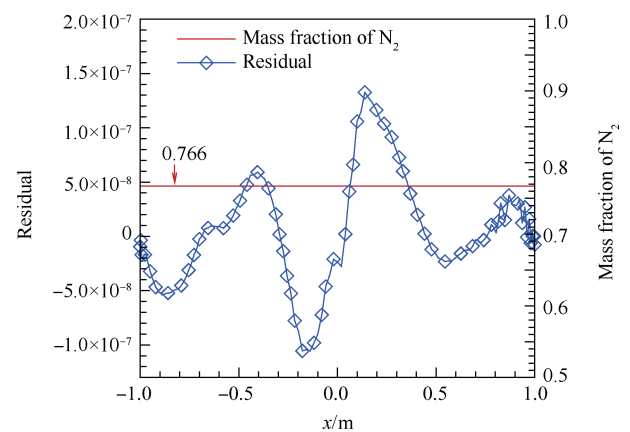


Fig. 7 Distribution of mass fraction of N_2 and residual along solid wall

4.2 辐射平衡条件下圆柱扰流问题

本节算例采用与上一节同样的网格、工况,不同之处在于壁面不是等温壁面,而是辐射平衡壁面。分别使用结构网格程序 AHEAT 和非结构网格程序 UNFLOW 进行计算。结构网格程序 AHEAT 分别采用热平衡(单温)与热非平衡(双温)计算。在图8中可以清楚地看出,壁面温度与热流在单温与双温条件下的结果是一致的,说明在该工况下,热力学是平

衡的,可以采用单温进行模拟热环境。

非结构网格下采用单温五组分进行计算,结构网格与非结构网格计算得到的温度云图如图9所示,从图中可以看出,非结构网格计算得到的温度场与结构网格所得到的结果吻合很好。与结构网格计算得到的壁面热流和温度进行比较,从图8中可以看出,吻合得很好,说明本文提出的方法可以有效地处理辐射平衡壁面下的完全催化壁面条件。同样地,可以绘出壁面上 N_2 的质量分数还有 N_2 组分方程的残差曲线,见图10所示。

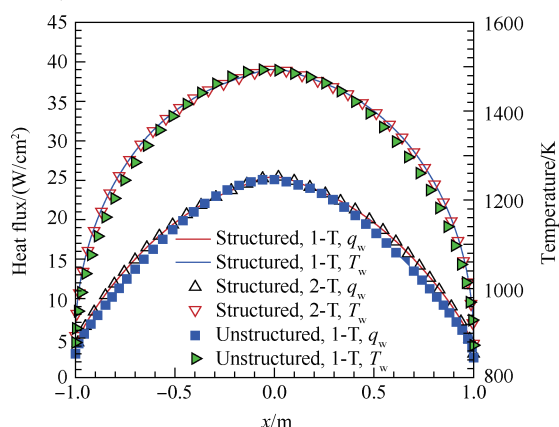


Fig. 8 Heat flux results for radiative equilibrium wall

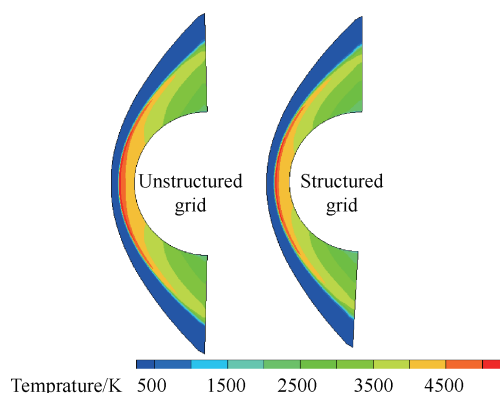


Fig. 9 Temperature contour for radiative equilibrium wall

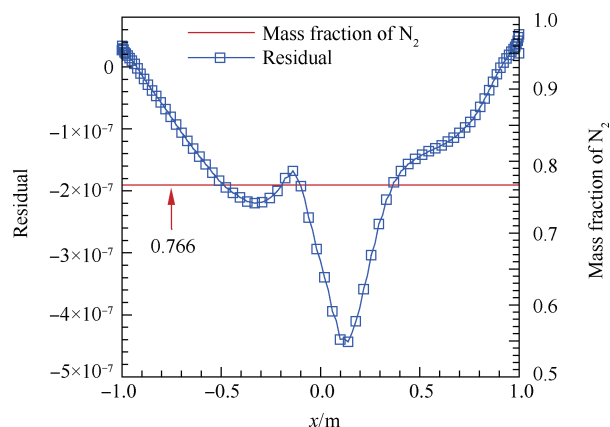


Fig. 10 Distribution of mass fraction of N_2 and residual along solid wall for radiative equilibrium wall

4.3 等温条件下球头扰流问题

本节算例选择高超声速飞行器中典型部位——球头进行计算,球头半径为 $R=1\text{m}$ 。来流速度 $V_\infty=5\text{ km/s}$,密度为 $\rho_\infty=0.001\text{ kg/m}^3$,温度 $T_\infty=200\text{ K}$,攻角为 0° 。该条件下,空气发生化学反应,选择五组分(N, N_2, O, O_2, NO)进行计算,壁面边界条件为等温壁 $T_w=500\text{ K}$,完全催化壁。自由来流中各个组元的质量分数见表1所示。

选择轴对称网格进行计算,将二维平面网格沿对称轴旋转 4.5° 后得到计算所用网格。AHEAT所使用的结构网格如图11所示,该网格环向网格量为64,垂直于壁面方向的网格量为100,垂直于轴对称方向的网格量为1;UNFLOW所使用的网格是将AHEAT使用的网格分割为四面体,如图12所示。

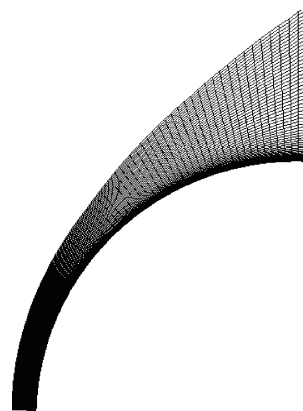


Fig. 11 Structured grid for sphere (symmetry plane)

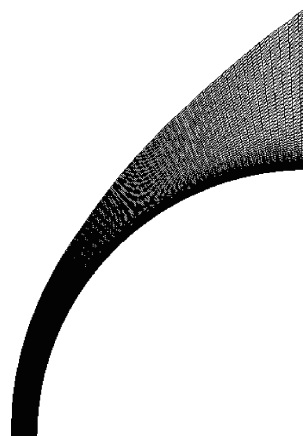


Fig. 12 Unstructured grid for sphere (symmetry plane)

分别使用AHEAT与UNFLOW进行计算,得到的温度云图如图13所示,可以看出,UNFLOW计算得到的温度场与AHEAT计算得到的温度场是相吻合的。图14给出了球头壁面上热流的计算结果,从图中可以清楚地看出,二者计算得到的热流相差很小,UNFLOW计算得到的热流是可信的。与前两节类

似,图 15 给出壁面上各个组元的质量分数以及各个组元方程的收敛残差。因为表 1 中质量分数最大的是 N_2 ,最后计算得到的 N_2 的质量分数与表 1 中一致,并且可以看出 N_2 的组元方程的残差达到了 10^{-8} 量级,表明该方程也收敛了。

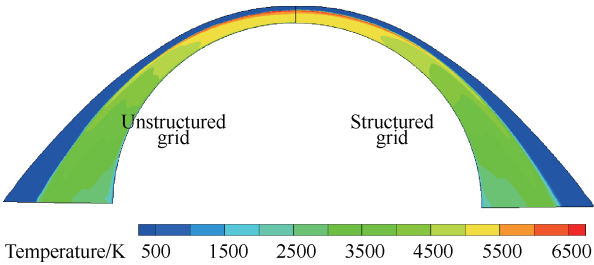


Fig. 13 Temperature contour of sphere for different grids

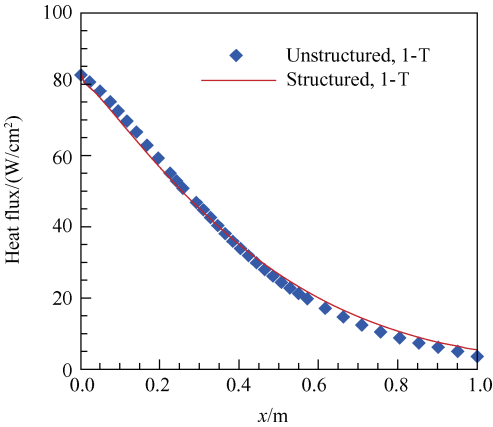


Fig. 14 Heat flux results of sphere for different grids

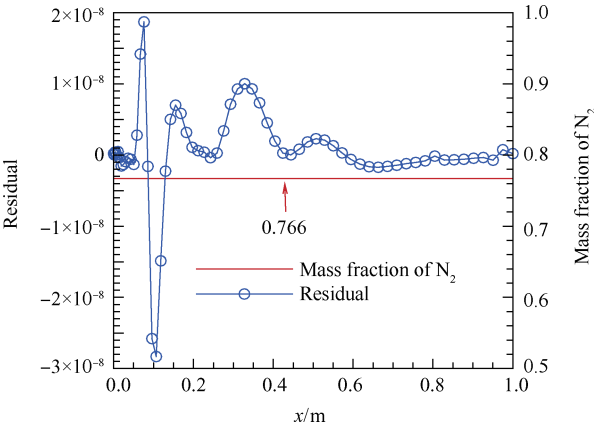


Fig. 15 Distribution of mass fraction of N_2 and residual along solid wall for sphere under isothermal wall

4.4 讨 论

通过上一节的讨论可以看出,本文所提出的边界处理方法对高超声速化学非平衡流动下考虑完全催化壁面条件的热流计算是准确的,壁面处经过“松弛”的组元的质量分数也满足边界条件。3.1 与 3.2 中的自由来流的组元质量分数都如表 1 中所示, N_2 的质

量分数最大,其值达到了 0.766,远远大于其他组分的质量分数之和,通过对 N_2 的组元方程在壁面处的隐式矩阵进行“松弛”处理,计算得到的壁面组元的质量分数满足边界条件,并且热流与结构网格程序计算得到的热流是相吻合的。

如果自由来流中质量分数最大的组元并没有像表 1 那样具有明显的质量“占优”,本文提出的“松弛”处理方法是否还能够有效,为了验证自由来流组元质量分数的组成对本文所提方法是否敏感,通过改变自由来流中组元的质量分数来观察壁面处理情况是否能够正确有效,具体算例的自由来流的组元组成见表 2 所示。

表 2 中三个算例的条件与 4.2 中算例相比,除了来流的组元成分组成不一样以外,其它条件均一致。这三个算例中 N 、 O 、 NO 的质量分数保持不变的,通过改变 N_2 与 O_2 的质量分数,来检测最大质量分数组元所占比重是否影响计算结果。逐渐增大 N_2 的质量分数,使其与比重最大的 O_2 的质量分数相差逐步减小,直至最后二者的质量分数均为 0.50。

需要关注的是组分在壁面上是否能够满足完全催化壁的条件,图 16 中绘出了表 2 中各个工况下的壁面处各个组元的质量分数的分布以及三个工况中被“松弛”的组元连续性方程的残差。从图中可以清

Table 2 Mass fraction of freestream species for different cases

Species name	Case 1	Case 2	Case 3
N	6.217×10^{-20}	6.217×10^{-20}	6.217×10^{-20}
O	7.758×10^{-9}	7.758×10^{-9}	7.758×10^{-9}
N_2	0.450	0.499	0.500
O_2	0.550	0.501	0.500
NO	4.981×10^{-5}	4.981×10^{-5}	4.981×10^{-5}

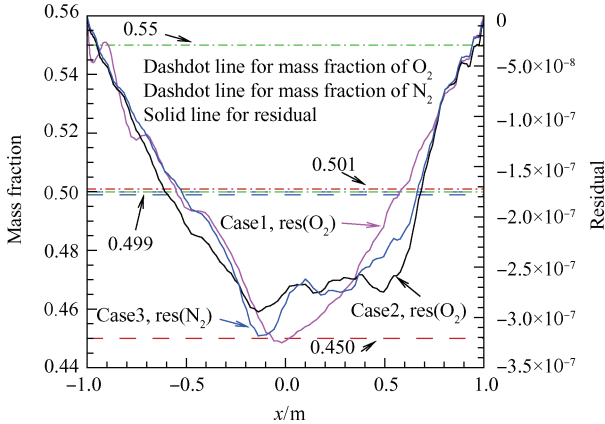


Fig. 16 Distribution of mass fraction and residual along solid wall for different cases

楚地看出,在前两位组元质量分数相差很小甚至相等的情况下,壁面边界条件仍然能够充分保证,并且经“松弛”处理的组元方程能够收敛。同时,从图17中可以看出,对于完全催化壁面,在保证壁面质量分数与来流条件一致的情况下,壁面的热流与温度是一定的。

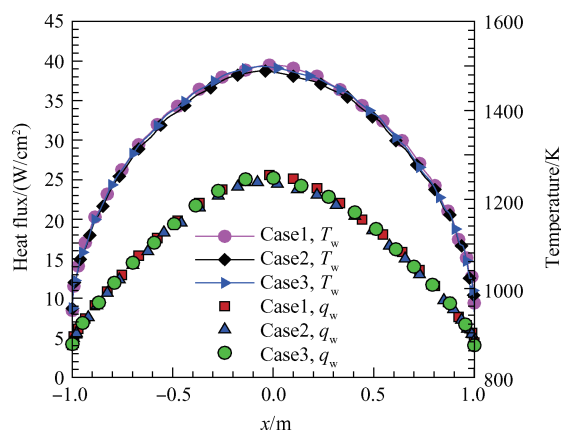


Fig. 17 Heat flux and temperature at surface for different cases

5 结 论

本文提出了一种边界上隐式矩阵的“松弛”方法,用以处理高超声速化学非平衡流动中的完全催化壁面条件。在此基础上使用基于格点型非结构有限体积法对圆柱、球头在高超声速下化学非平衡流动进行了模拟,通过对比分析,得到以下结论:

(1) 针对高超声速化学非平衡流,本文提出的“松弛”方法可以正确地表征等温与辐射平衡条件下的完全催化壁面,并且计算得到的壁面热流是合理、准确的。

(2) 通过改变来流中组元的质量分数来测试本文提出的强制隐式矩阵对来流组元质量分数是否敏感。数值实验表明,本文提出的边界处理方法对来流中比重最大组元的质量分数是否“占优”并不敏感。即使在两个组元质量分数各占50%的情况下,边界“松弛”处理方法也可以准确处理,不会造成算法的失效。

参考文献:

[1] 杨勇,张辉,郑宏涛. 有翼高超声速再入飞行器气动设计难点问题[J]. 航空学报, 2015, 36(1): 49-57.
[2] 王江峰,伍贻兆,季卫栋,等. 高超声速复杂气动问题数值方法研究进展[J]. 航空学报, 2015, 36(1): 159-175.

[3] Meng Z, Fan H, Peng K, et al. A Hypersonic Aeroheating Calculation Method Based on Inviscid Outer Edge of Boundary Layer Parameters [J]. *Acta Astronautica*, 2016, 129: 429-437.
[4] 刘健,原志超,杨恺,等. 高超声速飞行器多层复杂热防护结构气-固耦合快速热分析方法[J]. 推进技术, 2016, 37(2): 227-234. (LIU Jian, YUAN Zhi-chao, YANG Kai, et al. Fast Algorithm of Coupled Flow-Thermal for Multi-Layered Complex TPS of Hypersonic Aircraft [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2016, 37(2): 227-234.)
[5] 杨恺,高效伟. 高超声速飞行器关键部位气动热计算[J]. 计算力学学报, 2012, 29(1): 13-18.
[6] 潘静,阎超,耿云飞,等. 高超声速飞行器气动防热新概念研究[J]. 力学学报, 2010, 42(3): 383-388.
[7] 罗祖分,宋保银. 航天器再入大气层热力分析[J]. 航空动力学报, 2016, 31(10): 2507-2514.
[8] Mazaheri A, Gnoffo P A, Johnston C O, et al. LAURA Users Manual: 5.3- 48528 [R]. NASA TM- 2010-216836.
[9] Wright M, Candler G, Bose D. Data-Parallel Line Relaxation Method for the Navier-Stokes Equations [J]. *AIAA Journal*, 1998, 36(9): 1603-1609.
[10] 董维中,高铁锁,丁明松,等. 高超声速飞行器表面温度分布与气动热耦合数值研究[J]. 航空学报, 2015, 36(1): 311-324.
[11] 李海燕,唐志共,杨彦广,等. 高超声速飞行器高温流场数值模拟面临的问题[J]. 航空学报, 2015, 36(1): 176-191.
[12] 李海燕. 高超声速高温气体流场的数值模拟[D]. 绵阳:中国空气动力研究与发展中心, 2007.
[13] 李桦,潘沙,田正雨. 高超声速滑移流气动热并行计算数值模拟[M]. 北京:国防工业出版社, 2013.
[14] 柳军. 热化学非平衡流及其辐射现象的实验和数值计算研究[D]. 长沙:国防科学技术大学, 2004.
[15] Gnoffo P. Simulation of Stagnation Region Heating in Hypersonic Flow on Tetrahedral Grids[R]. AIAA 2007-3960.
[16] Gnoffo P, White J. Computational Aerothermodynamic Simulation Issues on Unstructured Grids [R]. AIAA 2004-2371.
[17] 唐静,郑鸣,邓有奇,等. 网格自适应技术在复杂外形流场模拟中的应用[J]. 计算力学学报, 2015, 32(6): 752-757.
[18] Anderson W K, Bonhaus D L. An Implicit Upwind Algorithm for Computing Turbulent Flows on Unstructured Grids[J]. *Computers & Fluids*, 1994, 23(1): 1-21.
[19] 王江峰,余奇华,伍贻兆. 高超声速热化学非平衡绕

- 流分布式并行计算[J]. 中国科学技术大学学报, 2008, 38(5): 529-533.
- [20] 王江峰, 伍贻兆, 余奇华. 混合网格化学非平衡绕流通量分裂格式及并行算法[J]. 中国科学技术大学学报, 2006, 36(10): 1034-1039.
- [21] Diskin B, Thomas J L. Comparison of Node-Centered and Cell-Centered Unstructured Finite-Volume Discretizations: Inviscid Fluxes[J]. *AIAA Journal*, 2011, 49(4): 836-854.
- [22] Diskin B, Thomas J L, Nielsen E J, et al. Comparison of Node-Centered and Cell-Centered Unstructured Finite-Volume Discretizations: Viscous Fluxes[J]. *AIAA Journal*, 2010, 48(7): 1326-1338.
- [23] Blazek J. Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications(3rd)[M]. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2015.
- [24] 欧阳水吾, 谢中强. 高温非平衡空气绕流[M]. 北京: 国防工业出版社, 2001.
- [25] 王 羽, 屈 崑, 蔡晋生. 高超声速化学反应源项雅克比矩阵的对角化[J]. 航空学报, 2016, 37(5): 1419-1427.
- [26] 王 羽, 蔡晋生, 屈 崑, 等. 增强高超声速化学反应流数值计算的稳定性方法[J]. 宇航学报, 2016, 37(9): 1135-1141.
- [27] Gnoffo P A, Gupta R N, Shinn J L. Conservation Equations and Physical Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium[R]. NASA-TP-2867.
- [28] Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws[J]. *Journal of Computational Physics*, 1983, 49(3): 357-393.
- [29] 王 兰. 超燃冲压发动机整机非结构网格并行数值模拟研究[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2007.
- [30] Yuan Z, Huang S, Gao X, et al. Effects of Surface-Catalysis Efficiency on Aeroheating Characteristics in Hypersonic Flow[R]. ASCE/AS. 1943-5525, 2016.
- [31] 杨 恺, 原志超, 朱强华, 等. 高超声速热化学非平衡钝体绕流数值模拟[J]. 推进技术, 2014, 35(12): 1585-1591. (YANG Kai, YUAN Zhi-chao, ZHU Qiang-hua, et al. Numerical Simulation of Hypersonic Thermochemical Nonequilibrium Blunt Body Flows[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2014, 35(12): 1585-1591.)
- [32] 程晓丽, 艾邦成, 王 强. 基于分子平均自由程的热流计算壁面网格准则[J]. 力学学报, 2010, 42(6): 1083-1089.
- [33] 黎作武. 近似黎曼解对高超声速气动热计算的影响研究[J]. 力学学报, 2008, 40(1): 19-25.
- (编辑: 梅 瑛)