

基于自适应网格的钝头体激波诱导燃烧现象 数值模拟研究^{*}

陈伟强, 刘 彧, 王 兰, 肖保国

(中国空气动力研究与发展中心 高超声速冲压发动机技术重点实验室, 四川 绵阳 621000)

摘 要: 钝头体激波诱导燃烧是爆震研究的一个基本问题。针对化学恰当量比的 H_2/Air 预混气体在 $Ma=4.79$ 和 $Ma=6.46$ 时的激波诱导燃烧现象开展数值研究, 采用基于有限体积法的块结构自适应网格加密程序 AMROC, 对带化学反应源项的轴对称 Euler 方程解耦求解, 考察了数值模拟中不同形式的 MUSCL 重构格式、限制器类型以及化学反应机理等重要因素对模拟结果的影响。结果表明, 程序能够根据设定的加密判据较好地实现网格自适应加密, 减小总网格量, 实现高效数值模拟。与实验数据的对比表明, 非定常激波诱导燃烧算例的准确程度不仅取决于化学反应机理, 也取决于限制器类型, 而采用两种不同形式的 MUSCL 重构格式获得的振荡频率则几乎一致, 与试验结果的误差分别为 1.17% 和 0.97%。模拟对比经典的 Jachimowski 机理和近年来新发展的几种包含压力相关反应步的氢/氧反应机理, 模拟结果表明: 对于 $Ma=4.79$ 时的非定常激波诱导燃烧模拟, 经典的 Jachimowski 机理仍然是能够给出与实验结果最接近的反应机理; 而对于 $Ma=6.46$ 时的定常激波诱导燃烧模拟, 几种反应机理均能给出与实验吻合较好的结果。

关键词: 自适应网格加密; 激波诱导燃烧; 爆震; 限制器; 化学反应机理

中图分类号: V231.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2021) 04-0776-10

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 200748

Numerical Study on Shock-Induced Combustion of a Blunt Projectile via an Adaptive Mesh Program

CHEN Wei-qiang, LIU Yu, WANG Lan, XIAO Bao-guo

(Science and Technology on Scramjet Laboratory, China Aerodynamics Research and Development Center,
Mianyang 621000, China)

Abstract: Shock-induced combustion of a blunt projectile is a basic problem in detonation research. Numerical simulations were conducted to study the shock-induced combustion phenomenon of a stoichiometric H_2/Air mixture at the flow Mach numbers of 4.79 and 6.46. The block-structured adaptive mesh refinement program AMROC based on the finite volume method was adopted to solve the axisymmetric Euler equations with chemical reaction source terms, and the influence of some important factors such as the form of the MUSCL reconstruction, the slope limiter types, and the chemical reaction mechanisms were investigated. The results show that, based on the mesh adaption flag parameters, the program can realize adaptive mesh refinement efficiently.

^{*} 收稿日期: 2020-09-25; 修订日期: 2020-11-17。

基金项目: 国家自然科学基金 (11702316; 91941301; 91841303); 国家重点研发计划项目 (2017YFB0202404); 国家科技重大专项 (2017-I-0004-0004)。

作者简介: 陈伟强, 博士, 助理研究员, 研究领域为爆震燃烧。E-mail: wqchancn@163.com

通讯作者: 刘 彧, 博士, 助理研究员, 研究领域为爆震燃烧。E-mail: 524698053@qq.com

引用格式: 陈伟强, 刘 彧, 王 兰, 等. 基于自适应网格的钝头体激波诱导燃烧现象数值模拟研究[J]. 推进技术, 2021, 42(4): 776-785. (CHEN Wei-qiang, LIU Yu, WANG Lan, et al. Numerical Study on Shock-Induced Combustion of a Blunt Projectile via an Adaptive Mesh Program[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2021, 42(4): 776-785.)

The comparisons with experimental results show that the accuracy of the unsteady shock-induced combustion simulation depends not only on the chemical reaction mechanism, but also on the form of the limiter. Adopting two different forms of the MUSCL reconstruction format acquires almost the same oscillating frequencies, which is 1.17% and 0.97% different from the result obtained in the experiment, respectively. Numerical study is conducted for comparing the classic Jachimowski mechanism with several newly developed pressure-dependent hydrogen/oxygen reaction mechanisms. It is shown that, in the unsteady shock-induced combustion case at $Ma=4.79$, the classic Jachimowski mechanism is still the most suitable mechanism to obtain the closest oscillating frequency to the experimental result. While in the steady shock-induced combustion case at $Ma=6.46$, all of the given mechanisms can give results that are in good agreements with the experiment.

Key words: Adaptive mesh refinement; Shock-induced combustion; Detonation; Slope limiter; Chemical reaction mechanisms

1 引言

爆震燃烧近似为等容燃烧,理论热力循环效率高于等压爆燃燃烧^[1]。将爆震燃烧应用于推进系统具有提高发动机热效率、减轻发动机结构重量、提高推进系统性能的优势。基于爆震燃烧的推进系统目前主要有脉冲爆震发动机^[2-3]、旋转爆震发动机^[4-7]和斜爆震发动机^[8-11]等。由于斜爆震发动机中斜爆震燃烧波的驻定需要高马赫数来流条件,因而在高马赫数条件下,斜爆震发动机有先天的应用优势,不失为一种潜在的可行方案。斜爆震发动机的高马赫数背景使试验研究较为困难,而采用数值模拟能够为斜爆震研究提供进一步认识。斜爆震波是斜激波与燃烧波面的高度耦合体,流场中波系动态相互作用复杂,因此斜爆震燃烧流场的模拟对网格精细程度要求高。采用自适应网格加密技术是模拟斜爆震燃烧流场的一种有效方案。

面向对象的块结构自适应网格加密程序 AMROC (Adaptive mesh refinement in object-oriented C++)^[12]是由 Ralf Deiterding 从 DAGH 源代码开发而来的专门针对爆震模拟的开源高效计算流体力学程序。该程序采用有限体积法,能够求解双曲欧拉方程,已经开发出了多种求解器。国内外基于 AMROC 程序广泛开展了爆震问题研究,文献[13-15]利用 AMROC 程序系统开展了超声速来流条件下热射流起爆形成正爆震波的相关研究;Liu 等^[16]利用 AMROC 程序开展了斜爆震迟滞现象研究;Eude 等^[17]开展了连续旋转爆震发动机的大规模三维模拟;Yuan 等^[18]开展了弯管中爆震波传播的相关研究。AMROC 程序能够根据流场物理参数变化的剧烈程度自动加密网格,是模拟激波与燃烧波面耦合的钝头体激波诱导燃烧流场的有利工具。

钝头体激波诱导燃烧算例是燃烧模拟普遍采用的验证算例。1972 年,Lehr^[19]开展了钝头体激波诱导燃烧的一系列实验研究,获得了大量不同条件下流场结构的清晰照片,测量获得了不同钝头体弹丸速度下球头滞止点的燃烧振荡频率。Lehr 球头实验弹丸飞行速度为 $Ma=4.79$ 时,获得的不稳定燃烧振荡频率为 712kHz,弹丸飞行速度为 $Ma=6.46$ 时则产生了定常的激波诱导燃烧流场。Lehr 球头实验成为很多数值方法以及物理模型的检验对照算例,国内外许多学者都对该问题开展了相关数值模拟^[20-26],包括对数值方法的验证^[20-23]、来流条件、网格间距、限制器函数、时间积分算法对激波诱导燃烧的影响^[24-25],不稳定模态理论预测^[26]。虽然已经知道化学反应机理对钝头体激波诱导燃烧问题模拟的准确性十分重要,但是否存在其它关键因素尚未完全明确。此外,近年来一些用于高压燃烧的包含压力相关反应步的氢/氧反应机理被相继提出,这些反应机理尚缺乏在激波诱导燃烧问题中的验证。

本文基于块结构自适应网格加密程序 AMROC 开展 Lehr 钝头体激波诱导燃烧算例模拟,考察不同形式的 MUSCL 重构格式、限制器类型和化学反应机理对模拟结果的影响,为进一步理解激波诱导燃烧问题的数值模拟方法提供参考。

2 物理模型和计算方法

2.1 物理模型

图 1 为模拟 Lehr 激波诱导燃烧现象的计算模型。模拟 $Ma=4.79$ 条件下的不稳定振荡燃烧采用图 1(a)所示的半球头体,模拟 $Ma=6.46$ 条件下的诱导燃烧采用图 1(b)所示的球柱组合体,球头的半径与实验一致, $R_1=R_2=7.5\text{mm}$ 。图 1(a)中计算域尺寸为 $X_1=12\text{mm}$, $Y_1=18\text{mm}$,图 1(b)中计算域尺寸为 $X_2=25.5\text{mm}$,

$Y_2=25\text{mm}, X_3=15\text{mm}$ 。

计算域左侧均为超声速入口条件,采用化学恰当的 H_2/Air 预混气 ($\text{H}_2, \text{O}_2, \text{N}_2$ 摩尔分数比为 2:1:3.76), 预混气的温度为 293K, 压力为 42.665kPa, $Ma=4.79$ 来流的速度为 1931m/s, $Ma=6.46$ 来流的速度为 2604.2m/s。右侧和上侧均采用一阶外推出口条件。下侧均为轴对称边界条件。球头/球柱采用滑移边界条件。初始时刻, 计算域全场设成与入口条件相同的超声速未燃预混气。

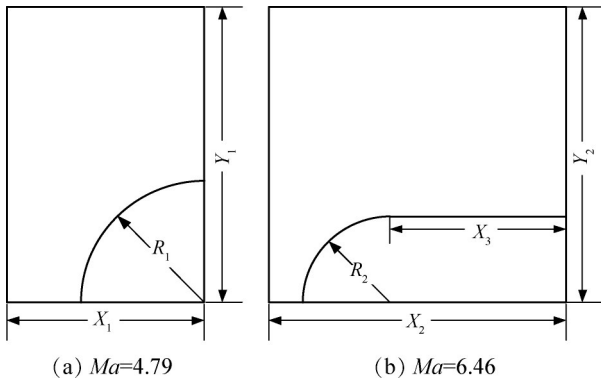


Fig. 1 Computational domains of shock induced combustion

2.2 控制方程

钝头体激波诱导燃烧现象涉及激波与燃烧火焰面相互作用, 本文忽略粘性的作用。描述激波诱导燃烧现象的控制方程为带化学反应源项的二维轴对称 Euler 方程为

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial y} = \mathbf{g}_{\text{ax}} + \mathbf{s} \quad (1)$$

式中, 守恒变量 $\mathbf{q}$ 、无粘对流通量 $\mathbf{f}$ 和 $\mathbf{g}$ 、轴对称源项 $\mathbf{g}_{\text{ax}}$ 以及化学反应源项 $\mathbf{s}$ 分别为

$$\mathbf{q} = (\rho_1, \dots, \rho_{N_s}, \rho u, \rho v, \rho E)^T \quad (2)$$

$$\mathbf{s} = (\dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_{N_s}, 0, 0, 0)^T \quad (3)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_{N_s} u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{bmatrix}, \mathbf{g} = \begin{bmatrix} \rho_1 v \\ \vdots \\ \rho_{N_s} v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\mathbf{g}_{\text{ax}} = -\frac{1}{y} \begin{bmatrix} \rho_1 v \\ \vdots \\ \rho_{N_s} v \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ v(\rho E + p) \end{bmatrix}$$

式中 N_s 为化学反应的组分数; $\rho_i (i=1, \dots, N_s)$ 为第 i 个组分的密度; u 和 v 为 x 方向和 y 方向的速度; $\dot{\omega}_i (i=1, \dots, N_s)$ 为第 i 个组分的质量生成速率; ρ 为总密度,

$$\rho = \sum_{i=1}^{N_s} \rho_i; p \text{ 为压力。}$$

单位质量的总能 E 为

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) \quad (5)$$

式中 h 为总焓。

$$h = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i h_i \quad (6)$$

式中 $Y_i = \rho_i / \rho$, 为第 i 个组分的质量分数。

第 i 组分比焓 h_i 为

$$h_i = h_{\text{ref}}^0 + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p_i} dT \quad (7)$$

式中 h_{ref}^0 为参考焓。

假设各组分均为热完全气体, 则其定压比热 c_{p_i} 只是温度的函数, $c_{p_i} = c_{p_i}(T)$, $i = 1, 2, \dots, N_s$ 。实际计算过程中, 定压比热 c_{p_i} 采用 4 阶多项式拟合, 见式 (8), 式中多项式的系数参考文献 [27]。

$$c_{p_i}(T) = \frac{R}{W_i} (a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4) \quad (8)$$

假设气体各组分均遵守理想气体状态方程, 则压力 p 满足

$$p = \sum \rho_i = \sum \rho_i R_i T = \sum_{i=1}^{N_s} \rho_i \frac{R_u}{W_i} T = \rho R T \quad (9)$$

2.3 化学反应机理

各个组分的质量生成率 $\dot{\omega}_i$ 通过 K 组分、 J 个基元反应组成的化学反应机理获得, 有

$$\sum_{i=1}^K \nu_{ji}^F S_i \rightleftharpoons \sum_{i=1}^K \nu_{ji}^R S_i, \quad j = 1, \dots, J \quad (10)$$

式中 ν_{ji}^F 和 ν_{ji}^R 是组分 S_i 作为反应物和生成物的化学恰当量比系数。

单位体积组分 S_i 的质量生成率 $\dot{\omega}_i$ 表示为

$$\dot{\omega}_i = \sum_{j=1}^J (\nu_{ji}^R - \nu_{ji}^F) \left[k_j^F \prod_{n=1}^K \left(\frac{\rho_n}{W_n} \right)^{\nu_{jn}^F} - k_j^R \prod_{n=1}^K \left(\frac{\rho_n}{W_n} \right)^{\nu_{jn}^R} \right] \quad (11)$$

式中 k_j^F, k_j^R 表示各个基元反应的正、逆向化学反应速率常数, 正/逆向化学反应速率常数通过 Arrhenius 定律计算得出。

$$k_j^{F/R}(T) = A_j^{F/R} T^{\beta_j^{F/R}} \exp \left(-\frac{E_j^{F/R}}{RT} \right) \quad (12)$$

式中的化学反应系数 $A_j^{F/R}, \beta_j^{F/R}, E_j^{F/R}$ 的具体值根据使用不同的反应机理参考相应的文献。数值模拟

迭代时,自适应加密程序中组分的质量生成率和化学反应速率常数的计算通过调用 Chemkin II 化学动力学子程序计算。

考虑到 H_2/Air 预混气模拟钝头体诱导燃烧时, N_2 的反应过程对燃烧模拟结果的影响可忽略不计,因而将 N_2 视为惰性气体。本文共采用 5 种 H_2/Air 详细化学反应机理(5 种机理均包含 9 种组分: $H, H_2, O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, N_2$), 分别为: 从 Keromnes 等^[28]提取的反应机理、Smith 等^[29]发表的基础燃料化学反应模型中提取的反应机理、Burke 等^[30]提出的反应机理、Hashemi 等^[31]提出的反应机理,以及经典的 Jachimowski 9 组分 19 步反应机理^[23]。下文简称 NUIG, FFCM, Burke, Hashemi 和 JM 反应机理。

2.4 数值离散方法

控制方程采用有限体积法积分离散,采用一阶精度的 Godunov 分裂方法对控制方程分成流动方程和源项进行解耦求解。研究表明,在自适应加密程序中,无论是一阶精度的 Godunov 分裂方法和二阶精度的 Strang 分裂方法,模拟结果没有明显的区别^[32]。出于减少数值计算量的考虑,这里采用一阶精度的 Godunov 分裂方法求解源项。程序采用混合 Roe-HLL Riemann 求解器,保证在必要时刻由 Roe 格式的 Riemann 求解器^[33]自动切换到 HLL Riemann 求解器^[34],克服 Roe 格式求解器的红宝石(Carbuncle)现象,该混合格式求解器的详细内容可进一步参考文献^[35]。空间离散采用二阶精度的 MUSCL-Hancock 重构格式,并通过限制器保持离散格式的 TVD 性质。本文对程序原有的重构格式和限制器进行了修改。程序原有的 MUSCL 重构格式为

$$\tilde{Q}_{j+\frac{1}{2}}^L = Q_j^n + \frac{1}{4} \left[(1-\omega) \phi_{j-\frac{1}{2}}^+ \Delta_{j-\frac{1}{2}} + (1+\omega) \phi_{j+\frac{1}{2}}^- \Delta_{j+\frac{1}{2}} \right] \quad (13)$$

$$\tilde{Q}_{j-\frac{1}{2}}^R = Q_j^n - \frac{1}{4} \left[(1-\omega) \phi_{j+\frac{1}{2}}^- \Delta_{j+\frac{1}{2}} + (1+\omega) \phi_{j-\frac{1}{2}}^+ \Delta_{j-\frac{1}{2}} \right] \quad (14)$$

其中

$$\Delta_{j-\frac{1}{2}} = Q_j^n - Q_{j-1}^n, \Delta_{j+\frac{1}{2}} = Q_{j+1}^n - Q_j^n$$

$$\phi_{j-\frac{1}{2}}^+ = \phi\left(r_{j-\frac{1}{2}}^+\right), \phi_{j+\frac{1}{2}}^- = \phi\left(r_{j+\frac{1}{2}}^-\right)$$

$$r_{j-\frac{1}{2}}^+ = \frac{\Delta_{j+\frac{1}{2}}}{\Delta_{j-\frac{1}{2}}}, r_{j+\frac{1}{2}}^- = \frac{\Delta_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta_{j+\frac{1}{2}}}$$

式中 $\phi(r)$ 为限制器,模拟中采用不同类型的限制器,包括程序原有的 Minmod 限制器,即

$$\phi(r) = \max(0, \min(1, r)) \quad (15)$$

原有的 Van Albada 限制器为

$$\phi(r) = \max\left(0, \frac{r^2 + r}{1 + r^2}\right) \quad (16)$$

本文新添加的 Anderson 等^[36]提出的另一种形式的 Van Albada 限制器(下文称为修正的 Van Albada 限制器)为

$$\phi_{j-\frac{1}{2}}^+ = \phi_{j+\frac{1}{2}}^- = \max\left(0, \frac{2\Delta_{j-\frac{1}{2}}\Delta_{j+\frac{1}{2}} + \varepsilon}{\Delta_{j-\frac{1}{2}}^2 + \Delta_{j+\frac{1}{2}}^2 + \varepsilon}\right) \quad (17)$$

式(17)中 ε 为一个小量,Anderson 等^[36]建议取值为 10^{-6} ,但在多组分化学反应流中,一些中间组分本身就是很小的量,实践表明,如果 ε 取值不充分小,则很可能对式(17)中的主项造成污染,使限制器失去限制作用。因此,对于多组分化学反应流, $\varepsilon=10^{-6}$ 这个取值可能并不合适,本文通过测试发现 $\varepsilon=10^{-20}$ 是合适的。

此外,本文还在程序中新添加了 Anderson 等^[36]使用的另一种形式的 MUSCL 重构格式(下文称为修正的 MUSCL 重构格式)为

$$\tilde{Q}_{j+\frac{1}{2}}^L = Q_j^n + \frac{1}{4} \phi_j \left[(1-\omega\phi_j) \Delta_{j-\frac{1}{2}} + (1+\omega\phi_j) \Delta_{j+\frac{1}{2}} \right] \quad (18)$$

$$\tilde{Q}_{j-\frac{1}{2}}^R = Q_j^n - \frac{1}{4} \phi_j \left[(1-\omega\phi_j) \Delta_{j+\frac{1}{2}} + (1+\omega\phi_j) \Delta_{j-\frac{1}{2}} \right] \quad (19)$$

式中 ω 取 1/3,此时重构值的精度为二阶精度。限制器的类型和重构格式对模拟结果的影响将在下文进行分析。

自适应加密程序全场采用矩形笛卡尔网格,为了在原有格式框架中考虑球柱体曲面边界,程序采用虚拟流体法^[37]将一部分有限体积网格作为虚网格强制插入到曲面边界条件中。这种插值方法并没有进行进一步修正,这使得在曲面边界上会引起轻微的扩散使得格式在该处并不严格守恒。但程序通过网格加密技术将柱体曲面边界加密到最高加密层级,从而减小这种梯形状网格构造的曲面边界引起的误差。

3 计算结果与讨论

3.1 数值模拟网格自适应加密验证

自适应加密程序开展激波诱导燃烧模拟时,通过标记加密参数,实现对模拟流场的自适应加密与疏化,流场参数梯度较大的区域网格间距小,总网格量小,减小计算量,实现高效精细模拟。模拟时,所有的算例均采用温度、密度、压力标量梯度阈值作为加密判据对大梯度区域的流场网格进行动态自适应加密。

为验证数值模拟钝头体激波诱导燃烧自适应加密模拟效果,对来流马赫数4.79的不稳定燃烧现象进行模拟。模拟采用JM机理,采用修正的Van Albada限制器和修正的MUSCL重构格式,迭代计算 $100\mu\text{s}$ 。模拟的计算域见图1(a),初始网格为 $0.15\text{mm}\times 0.15\text{mm}$ 的正方形网格,进行额外的三级加密,加密因子分别为2,2,4。在当前网格加密设置条件下,最高加密层级的网格宽度为 $9.375\mu\text{m}\times 9.375\mu\text{m}$ 。该网格精度和Choi等^[24]的模拟精度一致,设置温度、密度、压力标量梯度阈值分别为: $\varepsilon_T=50\text{K}$, $\varepsilon_\rho=5\times 10^{-2}\text{kg/m}^3$, $\varepsilon_p=5\times 10^4\text{Pa}$ 。模拟程序在中国空气动力研究与发展中心的银河-6高性能并行计算集群服务器中实现,计算集群每个计算节点有64个CPU,CPU为Intel Xeon E7-8837,主频为2.67GHz。

图2展示的是模拟获得的驻点压力振荡曲线。从图中可以看出,最后 $30\mu\text{s}$,压力振荡稳定,根据振荡曲线计算可知振荡频率为705.1kHz,和试验获得的振荡频率712kHz相差0.97%,因此当前采用的网格加密设置能够获得可靠的结果。本文在 $Ma=4.79$ 模拟算例均采用相同的网格设置和加密判据设置。

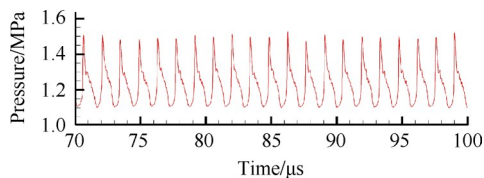


Fig. 2 Pressure oscillation history at the stagnation point for the last $30\mu\text{s}$

图3展示了不同时刻流场密度云图和对应的网格加密分布云图。从图中可以看出,随着流场的变化,程序根据设定的判据判断模拟区域是否需要加密,从而自动对流场进行网格加密或疏化,实现网格动态自适应加密。如图3所示,蓝色区域是采用基础网格的未加密区域,红色区域是网格加密到最高层

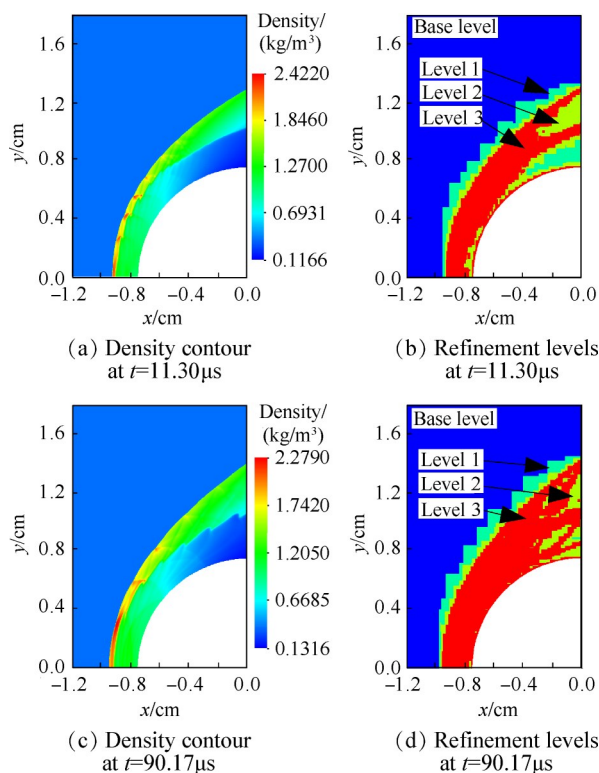


Fig. 3 Adaptive mesh refinement effects

级的区域。在球头诱导形成的激波面是密度、压力和温度梯度都很大的区域,而波后燃烧面也是温度梯度大的区域,程序根据设定的加密判据,对这些关键区域加密到了最高加密层级。流场的其它区域由于密度、温度、压力变化小,因而采用较低加密层级或者是只采用基础层级的网格。若采用全场均匀网格,则对应的网格量为2457600。 $t=11.30\mu\text{s}$ 时刻的总网格量为446307,为均匀网格总量的18.2%, $t=90.17\mu\text{s}$ 时刻的总网格量为545815,为均匀网格总量的22.2%。采用1个计算节点并行计算迭代模拟 $100\mu\text{s}$ 耗时22.5h。此外,如图3(a)所示, $t=11.30\mu\text{s}$,模拟刚开始时,流场未完全发展形成稳定振荡,激波面范围较小,因而加密的区域也较小;而当流场完全发展形成后,激波诱导燃烧区域较大,因而加密的区域也随着流场结构调整到较大的区域,程序根据流场特征实现了良好的网格自适应加密。从模拟结果可以看出,程序能够根据设定的加密判据较好地实现自适应网格加密,减小网格总量,实现高效数值模拟。

3.2 不同重构格式和限制器类型的影响

本文在原有程序基础上,添加修正的MUSCL重构格式和修正的Van Albada限制器,研究AMROC程序中不同重构格式及限制器类型对振荡燃烧模拟结果的影响。本小节的算例均采用JM机理,迭代计算

对应的物理时间为 $100\mu\text{s}$ 。表 1 列出了本小节算例所采用的设置。

Table 1 Case setting of the study on different MUSCL reconstruction forms and limiter types for $Ma=4.79$

Case	Reconstruction form	Limiter type	Chemical reaction mechanism
1	MUSCL	Minmod	JM mechanism
2	MUSCL	Van Albada	JM mechanism
3	MUSCL	Modified Van Albada	JM mechanism
4	Modified MUSCL	Modified Van Albada	JM mechanism

图 4 展示了来流 $Ma=4.79$ 时,采用不同限制器以及不同形式的 MUSCL 重构格式模拟获得的流场温度云图。如图 4(a)所示,采用原有的 MUSCL 重构格式及 Minmod 限制器时,燃烧面出现一定的振荡褶皱,但并不十分明显。而如图 4(b)所示,采用程序原有的 MUSCL 重构格式及原有的 Van Albada 限制器时,燃烧波面和激波面在球头前方出现了较明显的畸变。图 4(c)是采用程序原有的 MUSCL 重构格式以及修正的 Van Albada 限制器获得的流场温度云图,图 4(d)则是采用修正的 MUSCL 重构格式以及修正的 Van Albada 限制器获得的温度云图。可以看出无论采用原有的 MUSCL 重构格式还是修正的 MUSCL 重构格式,当限制为修正的 Van Albada 限制器时,燃烧面均出现一系列规则的振荡褶皱。

图 5 展示了来流 $Ma=4.79$ 时,采用不同重构格式和不同限制器类型获得的滞止点压力振荡曲线,分别对应于图 4(a)~(d)。各个算例获得的滞止点压力振荡频率以及和试验结果的相对误差如表 2 所示。如图 5(a)所示,采用原有的 MUSCL 重构格式和 Minmod 限制器时,滞止点压力形成一定的振荡,但并不

规则。图 4(a)的燃烧面褶皱情况也反映了这一现象。而如图 5(b)所示,采用原有的 MUSCL 重构格式和原有的 Van Albada 限制器时,滞止点压力无法形成规则振荡,并且出现压力过冲,最高振荡压力达到 3.68MPa 。图 4(b)的燃烧面和激波面在球头前部的前凸畸变也反映了压力过冲现象。如图 5(c)所示,当采用原有的 MUSCL 重构格式和修正的 Van Albada 限制器时,获得了规则的压力振荡,计算可知最后 $20\mu\text{s}$ 的振荡频率为 703.6kHz ,和试验获得的振荡频率 712kHz 相差 1.17% ,滞止点压力规则振荡在 $70\mu\text{s}$ 之后形成。而图 5(d)是采用修正的 MUSCL 重构格式和修正的 Van Albada 限制器,同样获得了规则的压力振荡,振荡频率为 705.1kHz ,和试验获得的振荡频率 712kHz 相差 0.97% ,滞止点压力规则振荡在 $33\mu\text{s}$ 之后形成,和图 5(c)相比建立规则振荡更快。对比图 5(a)~(c)结果可以看出, MUSCL 重构格式形式相同时,限制器类型不同,获得的结果差别很大;对比图 5(c),(d)结果可以看出,限制器均采用修正的 Van Albada 限制器,而 MUSCL 重构格式的形式不同时,均能够获得和实验结果接近的不规则振荡频率。由此可知,非定常激波诱导燃烧算例的准确程度受限制器类型影响较大,而 MUSCL 重构格式的不同形式对结果的准确程度影响较小。

Table 2 Oscillating frequencies using different reconstruction methods and slope limiters for $Ma=4.79$

Case	Frequency/kHz	Error/%
1	Irregular oscillation	—
2	Irregular oscillation	—
3	703.6	1.17
4	705.1	0.97

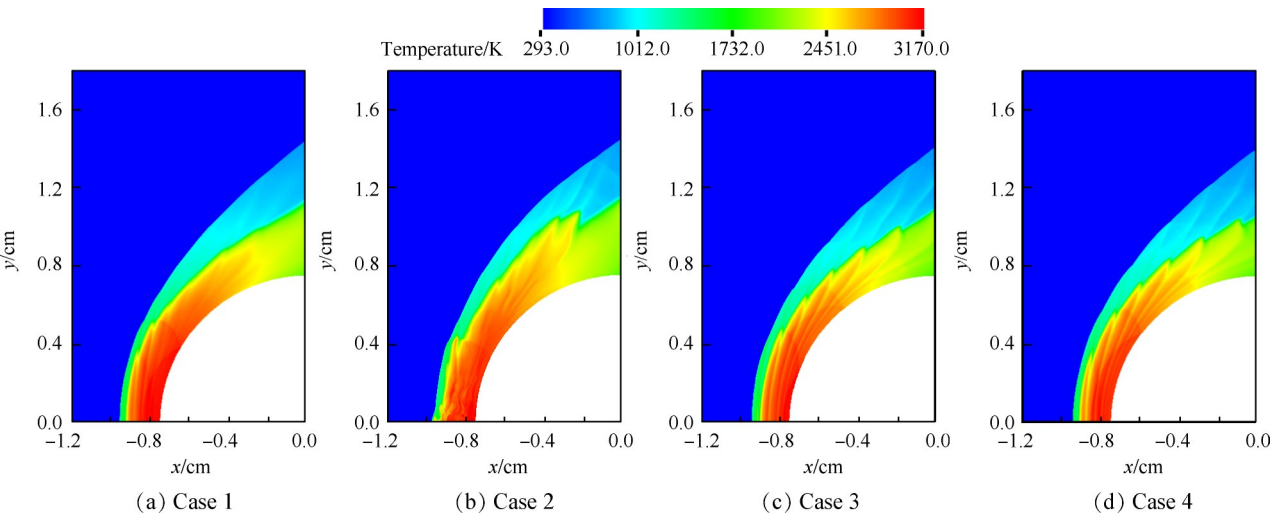


Fig. 4 Temperature contours using different reconstruction methods and slope limiters for $Ma=4.79$

3.3 $Ma=4.79$ 不同化学反应机理模拟结果

化学反应机理对不稳定振荡燃烧现象的模拟有较大的影响。反应机理中某些关键基元反应对诱导时间和放热时间的影响较大,从而影响了激波诱导燃烧振荡现象。本节模拟采用来流马赫数为4.79,程序采用修正的MUSCL重构格式以及修正的Van Albada限制器。通过采用不同化学反应机理,研究评价五个化学反应机理模拟钝头体激波诱导燃烧的效

果。表3列出了本小节算例所采用的设置。

图6展示了采用不同化学反应机理获得的滞止点压力振荡曲线。各个算例获得的滞止点压力振荡频率以及和试验结果的相对误差如表4所示。从结果可以看出,NUIG机理和FFCM机理的模拟无法获得规则的压力振荡。而Burke机理、Hashemi机理和JM机理能够获得规则的振荡。Burke机理不稳定振荡频率为677kHz,Hashemi机理为672kHz,而JM机

Table 3 Case setting of the study on different chemical reaction mechanisms for $Ma=4.79$

Case	Reconstruction type	Limiter type	Chemical reaction mechanism
5	Modified MUSCL	Modified Van Albada	NUIG mechanism
6	Modified MUSCL	Modified Van Albada	FFCM mechanism
7	Modified MUSCL	Modified Van Albada	Burke mechanism
8	Modified MUSCL	Modified Van Albada	Hashemi mechanism

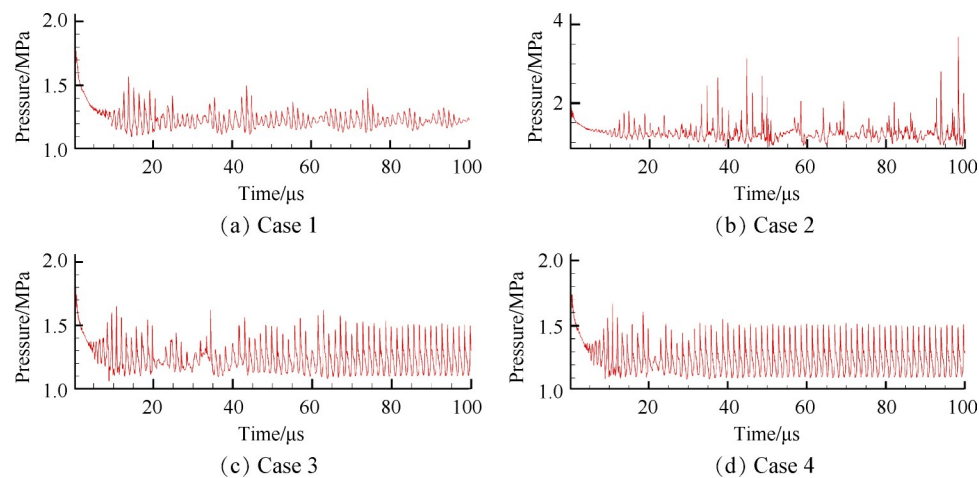


Fig. 5 Pressure oscillation history at the stagnation point using different reconstruction methods and slope limiters for $Ma=4.79$

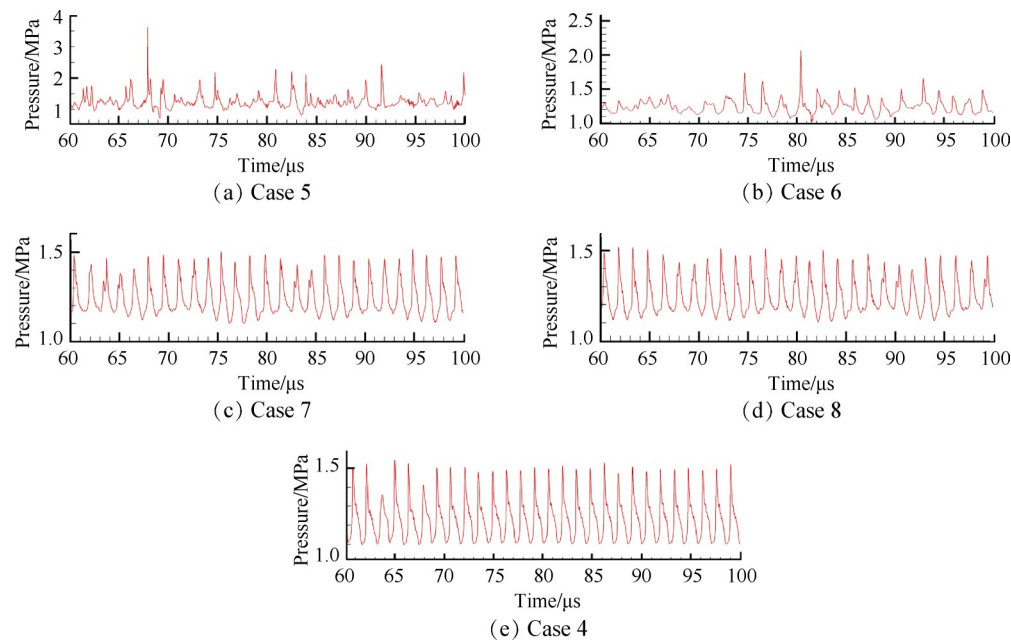


Fig. 6 Pressure oscillation history at the stagnation point using different reaction mechanisms for $Ma=4.79$

理为 705.1kHz,与试验获得的振荡频率 712kHz 分别相差 4.92%,5.62%,0.97%。

Table 4 Oscillating frequencies using different reaction mechanisms for $Ma=4.79$

Case	Frequency/kHz	Error/%
5	Irregular oscilation	–
6	Irregular oscilation	–
7	677.0	4.92
8	672.0	5.62
4	705.1	0.97

以上结果表明,在几个反应机理中 JM 机理模拟非定常的激波诱导燃烧现象与实验结果最为接近。

3.4 $Ma=6.46$ 不同化学反应机理模拟结果

当来流马赫数进一步提高时,激波诱导振荡燃

烧现象消失,激波面和燃烧波面高度耦合。激波面和燃烧面之间的诱导距离缩短,为了能够准确模拟,自适应网格初始网格间距减小为原来的 1/2,加密层级不变,模拟采用的最小网格间距为 $4.6875\mu\text{m}$ 。表 5 列出了本小节算例所采用的设置。

图 7 所示为采用不同反应机理模拟获得的温度云图。图中红色十字标示的是实验获得的激波面的位置,黑色十字标示的是实验获得的燃烧面的位置。从模拟结果可以看出,五个反应机理模拟的激波面和燃烧面的位置与实验结果非常接近,其中 NUIG 机理、Hashemi 机理和 Burke 机理获得的燃烧面和实验相比稍有抬升,FFCM 机理获得的燃烧面和实验相比稍向后,JM 机理符合得最好。模拟结果表明,对于中等压力条件下的定常激波诱导燃烧现象,几个反应

Table 5 Case setting of the study on different chemical reaction mechanisms for $Ma=6.46$

Case	Reconstruction type	Limiter type	Chemical reaction mechanism
9	Modified MUSCL	Modified Van Albada	NUIG mechanism
10	Modified MUSCL	Modified Van Albada	FFCM mechanism
11	Modified MUSCL	Modified Van Albada	Burke mechanism
12	Modified MUSCL	Modified Van Albada	Hashemi mechanism
13	Modified MUSCL	Modified Van Albada	JM mechanism

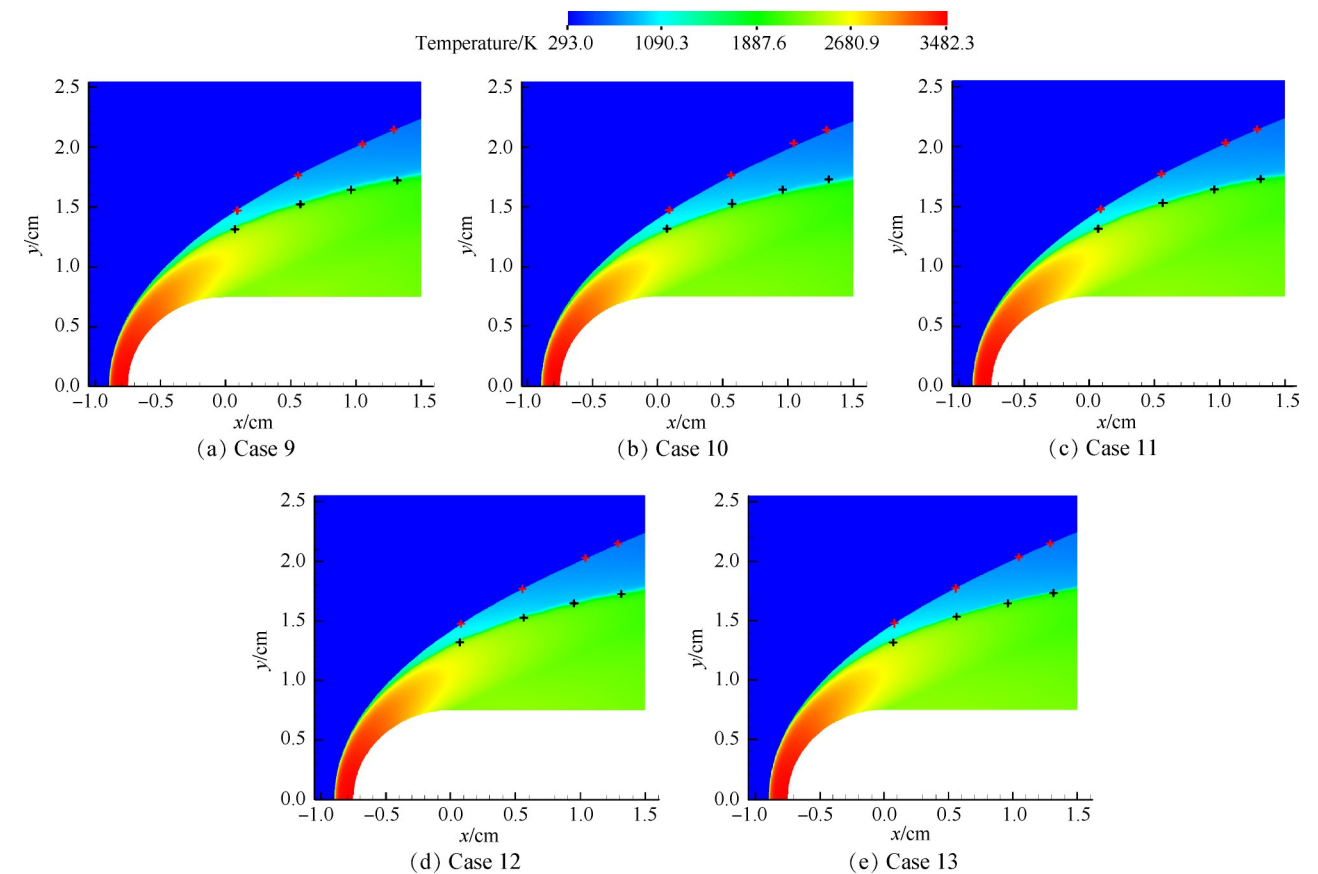


Fig. 7 Temperature contours using different reaction mechanisms for $Ma=6.46$

机理获得的结果与实验结果均吻合得较好。

4 结 论

通过本文研究,得出以下结论:

(1)自适应网格加密程序能够根据设定的阈值对激波诱导燃烧流场网格进行加密或疏化,实现高效数值模拟。

(2)采用不同形式的 MUSCL 重构格式和限制器类型模拟 $Ma=4.79$ 条件下的非定常激波诱导振荡燃烧现象,模拟表明激波诱导燃烧现象的模拟受限制器类型影响较大,而所采用的两种 MUSCL 重构格式获得的振荡频率则几乎一致,与试验结果的误差分别为 1.17% 和 0.97%。

(3)采用五个不同化学反应机理模拟非定常振荡燃烧现象表明,与其它几个较新的反应机理相比,经典的 Jachimowski 机理能够获得与实验最接近的振荡频率。

(4)采用五个不同化学反应机理模拟 $Ma=6.46$ 的定常激波诱导燃烧现象表明,几个机理均能给出与实验吻合较好的结果,其中 Jachimowski 机理和实验结果符合得最好。由于本文所采用的几种新的氢/氧反应机理均包含压力相关反应步且面向高压燃烧,因此本文结果意味着对于激波波后压力相对较低的非定常激波诱导燃烧或爆震算例,几种新反应机理的表现不及 Jachimowski 反应机理。

致 谢:感谢国家自然科学基金、国家重点研发计划项目、国家科技重大专项的资助。

参考文献

- [1] Wolanski P. Detonative Propulsion [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34: 125–158.
- [2] 鲁 唯, 范 玮, 王 可, 等. 无阀式煤油脉冲爆震火箭发动机工作循环特性研究[J]. 推进技术, 2018, 39(5): 971–978. (LU Wei, FAN Wei, WANG Ke, et al. Study on Cycle Processes of a Valveless Kerosene-Fueled Pulse Detonation Rocket Engine[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2018, 39(5): 971–978.)
- [3] Lu W, Fan W, Wang K, et al. Operation of A Liquid-Fueled and Valveless Pulse Detonation Rocket Engine at High Frequency[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36 (2): 2657–2664.
- [4] 夏镇娟, 张义宁, 马 虎, 等. 点火位置对圆盘结构下旋转爆震波起爆过程的影响[J]. 推进技术, 2020, DOI: 10.13675/j.cnki.tjjs.200123. (XIA Zhen-juan, ZHANG Yi-ning, MA Hu, et al. Effects of Ignition Position on Initiation Process of Rotating Detonation Wave in Plane-Radial Structure [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2020, DOI: 10.13675/j.cnki.tjjs.200123.)
- [5] Zhang H, Liu W, Liu S. Effects of Inner Cylinder Length on H_2 /Air Rotating Detonation [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41 (30): 13281–13293.
- [6] Wang Y, Wang J, Li Y, et al. Induction for Multiple Rotating Detonation Waves in the Hydrogen-Oxygen Mixture with Tangential Flow [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2014, 39 (22): 11792–11797.
- [7] 杨鹏飞, 牟乾辉, 滕宏辉, 等. 旋转爆震波中多波流动模式的数值研究[J]. 推进技术, 2019, 40(2): 398–406. (YANG Peng-fei, MOU Qian-hui, TENG Hong-hui, et al. Numerical Investigation an Multiple Wave Propagation Mode of Rotating Detonation Waves [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2019, 40 (2): 398–406.)
- [8] Teng H, Ng H D, Li K, et al. Evolution of Cellular Structures on Oblique Detonation Surfaces [J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162 (2): 470–477.
- [9] 韩 旭, 周 进, 林志勇, 等. 超声速预混气的热射流起爆过程数值模拟[J]. 推进技术, 2012, 33(4): 650–656. (HAN Xu, ZHOU Jin, LIN Zhi-yong, et al. Numerical Investigation of Detonation Initiation by a Hot Jet in Supersonic Premix Flow [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2012, 33(4): 650–656.)
- [10] 滕宏辉, 姜宗林. 斜爆轰的多波结构及其稳定性研究进展[J]. 力学进展, 2020, 50(1).
- [11] Teng H, Yang P, Zhang Y, et al. Flow and Combustion Mechanism of Oblique Detonation Engines [J]. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, 2020, 50 (9).
- [12] Deiterding R. Parallel Adaptive Simulation of Multi-Dimensional Detonation Structures [D]. *Cottbus: Brandenburgischen Technischen Universität*, 2003.
- [13] Cai X, Deiterding R, Liang J, et al. Diffusion and Mixing Effects in Hot Jet Initiation and Propagation of Hydrogen Detonations [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2018, 836: 324–351.
- [14] Cai X, Liang J, Deiterding R, et al. Experimental and Numerical Investigations on Propagating Modes of Detonations: Detonation Wave/Boundary Layer Interaction [J]. *Combustion and Flame*, 2018, 190: 201–215.
- [15] 陈伟强, 梁剑寒, 林志勇, 等. 超声速预混气扩张流道热射流起爆研究[J]. 推进技术, 2015, 36(12): 1761–1767. (CHEN Wei-qiang, LIANG Jian-han, LIN Zhi-yong, et al. Numerical Study on Supersonic Premixed Mixtures Detonation Initiation via Hot Jet in Expanded Channel [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2015, 36(12): 1761–1767.)

- [16] Liu Y, Wang L, Xiao B, et al. Hysteresis Phenomenon of the Oblique Detonation Wave [J]. *Combustion and Flame*, 2018, 192: 170–179.
- [17] Eude Y, Davidenko D, Falempin F, et al. Use of the Adaptive Mesh Refinement for 3D Simulations of a CD-WRE (Continuous Detonation Wave Rocket Engine) [R]. *AIAA* 2011–2236.
- [18] Yuan X, Zhou Jin, Lin Z, et al. Numerical Study of Detonation Diffraction Through 90-Degree Curved Channels to Expansion Area [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42 (10): 7045–7059.
- [19] Lehr H F. Experiments on Shock Induced Combustion [J]. *Astronautica Acta*, 1972, 17 (4): 589–597.
- [20] 刘瑜. 化学非平衡流的计算方法研究及其在激波诱导燃烧现象模拟中的应用 [D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2008.
- [21] 刘世杰, 孙明波, 林志勇, 等. 钝头体激波诱导振荡燃烧现象的数值模拟 [J]. *力学学报*, 2010, 42 (4): 1–10.
- [22] Wilson G J, Sussman M A. Computation of Unsteady Shock-Induced Combustion Using Logarithmic Species Conservation Equations [J]. *AIAA Journal*, 1993, 31 (2): 294–301.
- [23] Hosangadi A, York B J, Sinha N, et al. Progress in Transient Interior Ballistic Flowfield Simulations Using Multi-Dimensional Upwind/Implicit Numerics [R]. *AIAA* 93–1915.
- [24] Choi J Y, Jeung I S, Yoon Y. Computational Fluid Dynamics Algorithms for Unsteady Shock-Induced Combustion, Part I: Validation [J]. *AIAA Journal*, 2000, 38 (7): 1179–1187.
- [25] Yungster S, Radhakrishnan K. A Fully Implicit Time Accurate Method for Hypersonic Combustion: Application to Shock-Induced Combustion Instability [R]. *AIAA* 94–2965.
- [26] Matsuo A, Fujii K, Fujiwara T. Flow Features of Shock-Induced Combustion Around Projectile Traveling at Hypervelocities [J]. *AIAA Journal*, 1995, 33 (6): 1056–1063.
- [27] Stull D R, Prophet H. JANAF Thermodynamic Tables [R]. *NSRDS-NBS* 37, 1971.
- [28] Keromnes A, Metcalfe W K, Heufer K A, et al. An Experimental and Detailed Chemical Kinetic Modeling Study of Hydrogen and Syngas Mixture Oxidation at Elevated Pressures [J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160: 995–1011.
- [29] Smith G P, Tao Y, Wang H. Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1) [EB/OL]. <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM-1/index.html>, 2016–07–15.
- [30] Burke M P, Chaos M, Ju Y, et al. Comprehensive H_2/O_2 Kinetic Model for High-Pressure Combustion [J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2012, 44 (7): 445–474.
- [31] Hashemi H, Christensen J M, Gersen S, et al. Hydrogen Oxidation at High Pressure and Intermediate Temperatures: Experiments and Kinetic Modeling [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, 35 (1): 553–560.
- [32] Berger M. Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations [R]. *STAN-CS-82-924*, 1982.
- [33] Grossmann B, Cinnella P. Flux-Split Algorithms for Flows with Non-Equilibrium Chemistry and Vibrational Relaxation [J]. *Journal of Computational Physics*, 1990, 88: 131–168.
- [34] Sanders R, Morano E, Druguet M C. Multidimensional Dissipation for Upwind Schemes: Stability and Applications to Gas Dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, 145: 511–537.
- [35] Deiterding R. Numerical Simulation of Transient Detonation Structures in H_2-O_2 Mixtures in Smooth Pipe Bends [C]. *Poitiers: 21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, 2007.
- [36] Anderson W K, Thomas J L, Van Leer B. Comparison of Finite Volume Flux Vector Splittings for the Euler equations [J]. *AIAA Journal*, 1986, 24 (9): 1453–1460.
- [37] Fedkiw R P, Aslam T, Merriman B, et al. A Non-Oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method) [J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 152: 457–492.

(编辑: 史亚红)