文章编号：1000-5773(2013)02-0230-09

基于附加 Runge-Kutta 方法的高精度气相爆轰数值模拟*

李　健[1]，郝　莉[2]，宁建国[1]

（1.北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室，北京　100081；
2.北京建筑工程学院理学院，北京　100044）

摘要：多组分反应欧拉方程是气相爆轰的控制方程，其源项存在刚性。应用显式格式求解，由于格式稳定性条件的限制，时间步长远小于 CFL(Courant-Friedrichs-Lewy)条件得出的时间步长，给求解带来很大困难。引入一种 IMEX(Implicit-Explicit)型附加 Runge-Kutta 算法，对非刚性对流项进行显式处理，源项用半隐式格式处理，整体具有高精度和 L-稳定性，并进行算例考核。在此基础上，利用基元反应模型对气相爆轰问题进行了数值研究。结果表明，该算法能够很好地处理源项引起的刚性问题，准确地捕捉和描述爆轰波的复杂结构和典型特征，同时也能够很好地模拟爆轰波在楔面上的马赫反射问题。

关键词：源项；附加 Runge-Kutta 方法；刚性；气相爆轰
中图分类号：O381　　**文献标识码**：A

1　引　言

气相爆轰是化学反应和流体动力学的强耦合过程，近百年来一直是一个重要且活跃的研究领域，直到今日，仍然有很多问题没有得到很好的解决。气相爆轰是一个超音速燃烧过程，依靠波阵面后反应区能量的快速释放来自维持。相对于理论和实验研究，随着计算技术和计算能力的大幅度提高，气相爆轰的数值模拟研究成为一个高效的研究手段。气相爆轰数值模拟的最大困难在于，多组分欧拉方程的化学反应源项存在很强的刚性。这种刚性一方面体现在流动和化学反应的时间尺度不同，另一方面基元反应模型各个子反应的时间尺度也存在巨大的差异[1]。如果用显式方法对刚性方程组进行数值积分，格式精度所要求的时间步长将远小于由 CFL(Courant-Friedrichs-Lewy)条件决定的时间步长，会严重影响计算效率。由于显式方法在处理刚性问题中存在不足，使隐式方法或者半隐式方法得到了很大的应用，但全隐式方法占用大量计算时间和内存，因此实践中广泛应用的隐式方法主要有两种：分步法(时间分裂方法)和附加半隐式方法。

时间分裂方法[2-5]解决下述形式的反应欧拉方程，$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{L}(\boldsymbol{U})+\boldsymbol{S}(\boldsymbol{U})$，其中 $\boldsymbol{L}(\boldsymbol{U})$、$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{U})$分别表示对流项和反应源项。首先对对流项离散得到中间值$\tilde{U}^{n+1}$，然后加上源项的贡献得到这一步最终的结果 U^{n+1}[3,6]。附加半隐式方法把代数常微分方程的右端项分为刚性项和非刚性项，前者隐式处理，后者显式积分。Zhong[1]对附加半隐式方法进行了详细研究，并构造了至多 3 阶精度的数值格式，并对刚性非平衡反应流进行了计算。Kennedy 和 Carpenter[7]构造了 L-稳定的、能够处理刚性问题的附加 Runge-

* **收稿日期**：2013-03-20
基金项目：国家重点基础研究计划(2010CB832706)；国家自然科学基金 (11032002，11072025)
作者简介：李　健(1985—)，男，博士研究生，主要从事反应流数值研究. E-mail：10802005@bit.edu.cn
通讯作者：郝　莉(1963—)，女，博士，教授，主要从事爆炸力学研究. E-mail：haoli_haoli@126.com

Kutta 方法,应用于对流-扩散-反应方程的数值研究。Xia 等[8]使用间断 Galerkin 格式,并结合上述方法,应用到偏微分方程的研究中。

本工作应用 5 阶精度的 WENO 格式和附加 Runge-Kutta 方法,对一维、二维气相爆轰波以及爆轰波在楔面上的马赫反射进行数值研究。气相爆轰采用基元化学反应模型,包括 9 种组分、19 个基元反应,并用 70%的 Ar 稀释。

2　控制方程和数值方法

2.1　控制方程

计算的爆轰气体为按照化学当量比混合的氢气和氧气,添加 70%氩气进行稀释。假设气体为热理想气体(比热是温度的函数),无黏性,忽略热传导和扩散效应。本研究采用的控制方程为二维多组分反应欧拉方程

$$\boldsymbol{U}_t+[\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})]_x+[\boldsymbol{G}(\boldsymbol{U})]_y=\boldsymbol{S} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ E\\ \rho Y_1\\ \vdots\\ \rho Y_N\end{pmatrix},\ \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})=\begin{pmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ (E+p)u\\ \rho uY_1\\ \vdots\\ \rho uY_N\end{pmatrix},\ \boldsymbol{G}(\boldsymbol{U})=\begin{pmatrix}\rho v\\ \rho uv\\ \rho v^2+p\\ (E+p)v\\ \rho vY_1\\ \vdots\\ \rho vY_N\end{pmatrix},\ \boldsymbol{S}=\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 0\\ 0\\ \omega_1(T,\rho,Y_1,Y_2,\cdots,Y_N)\\ \vdots\\ \omega_N(T,\rho,Y_1,Y_2,\cdots,Y_N)\end{pmatrix} \tag{2}$$

式中:$\boldsymbol{U}$、$\boldsymbol{F}$、$\boldsymbol{G}$、$\boldsymbol{S}$ 分别表示守恒变量、x 方向的通量、y 方向的通量和反应源项,ω_i 为第 i 种组分的质量生成率;p、ρ、T 分别表示压力、密度和温度,且满足 $p=\rho RT$,其中 R 为通用气体常数;u、v、E、h 分别为 x 方向速度、y 方向速度、单位体积的总能和单位质量的焓,并且有 $E=\rho h-p+\rho u^2/2$;e 表示内能,且有 $h=e+p/\rho$;N 是所有组分的数量,Y_i 是第 i 组分的质量分数,并且有 $\sum_{i=1}^{N}Y_i=1$。

2.2　基元反应模型

对于氢氧预混气体的爆轰反应过程,采用 9 种组分、19 个基元反应的模型描述其化学反应机理[9],相关组分为 H_2、O_2、O、H、OH、HO_2、H_2O_2、H_2O,另外还加入了 70% 的 Ar 作为稀释气体,加入稀释气体可以放缓波后能量释放的速率,使爆轰波更加规则。化学反应式可以统一写为

$$\sum_{i=1}^{9}\nu'_{ik}x_i\rightleftharpoons^{K_{f,k}}_{K_{b,k}}\sum_{i=1}^{9}\nu''_{ik}x_i\qquad k=1,2,3,\cdots,19 \tag{3}$$

式中:ν'_{ik} 和 ν''_{ik} 分别为第 k 个反应中反应物和产物的第 i 种组分的化学计量系数;x_i 表示第 i 种组分的摩尔分数;$K_{f,k}$ 和 $K_{b,k}$ 分别为第 k 个反应的正向和逆向反应速率常数,两者均通过阿伦尼乌斯定律得出,并满足下面的关系式

$$\begin{cases}K_{f,k}=A_kT^{n_k}\exp(-E_{ak}/RT)\\ K_{b,k}=K_{f,k}/K_{c,k}\\ K_{c,k}=K_{p,k}(p_{atm}/RT)^{\sum_{i=1}^{9}(\nu''_{ik}-\nu'_{ik})}\\ K_{p,k}=\exp\left\{\sum_{i=1}^{9}\left[(\nu''_{ik}-\nu'_{ik})\left(\frac{s_i^0}{R_i}-\frac{h_i}{R_iT}\right)\right]\right\}\end{cases} \tag{4}$$

式中:$R_i=R/W_i$,R 是通用气体常数;p_{atm} 是标准大气压;s_i^0 是标准熵;A_k、n_k、E_{ak} 分别表示阿伦尼乌斯公式中的指前系数、温度指数和活化能。第 i 种组分的生成率 ω_i 通过下述公式得出

$$\omega_i=W_i\sum_{k=1}^{19}(\nu''_{ik}-\nu'_{ik})\left(\sum_{i=1}^{9}\alpha_{ik}C_{xi}\right)\left[K_{f,k}\prod_{i=1}^{9}(C_{xi})^{\nu'_{ik}}-K_{b,k}\prod_{i=1}^{9}(C_{xi})^{\nu''_{ik}}\right] \tag{5}$$

式中:W_i 和 C_{xi} 分别表示第 i 种组分的的摩尔质量和摩尔分数,并且满足公式 $C_{xi}=\rho_i/W_i$;α_{ik} 表示第 k

个反应中第 i 种组分的三体效应系数。在本研究所使用的模型中，$\alpha_{1k}=2.5(\mathrm{H_2})$，$\alpha_{8k}=16(\mathrm{H_2O})$。

2.3 数值计算方法

考虑到多组分反应欧拉方程源项的刚性问题，采用附加 Runge-Kutta 方法耦合方程中非刚性对流项和刚性反应源项。根据 Araújo 等人的工作[10]，附加 Runge-Kutta 方法能够求解下述形式的常微分方程

$$\mathrm{d}U/\mathrm{d}t=F(U)=\sum_{\nu=1}^{N}F^{[\nu]}(U) \tag{6}$$

其中，$F(U)$ 可以分为 N 项，对于反应欧拉方程，$N=2$，即对流项和反应源项。附加 Runge-Kutta 方法的具体使用过程如下

$$\begin{cases}U^{(i)}=U^n+\Delta t\sum\limits_{\nu=1}^{N}\sum\limits_{j=1}^{s}a_{ij}^{[\nu]}F^{[\nu]}(U^{(j)})\\ U^{n+1}=U^n+\Delta t\sum\limits_{\nu=1}^{N}\sum\limits_{j=1}^{s}b_{i}^{[\nu]}F^{[\nu]}(U^{(j)})\end{cases} \tag{7}$$

其中，N 项中的每一项被属于该项的 s 步 Runge-Kutta 法积分。Butcher 系数，$a_{ij}^{[\nu]}$ 和 $b_i^{[\nu]}$，由精度条件和稳定性条件得出，具体见文献[7]。多组分反应欧拉方程可以写成下面的形式

$$\boldsymbol{U}_{\mathrm{t}}=\boldsymbol{F}_{\mathrm{ns}}+\boldsymbol{F}_{\mathrm{s}} \tag{8}$$

式中：$\boldsymbol{F}_{\mathrm{ns}}$ 和 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{s}}$ 分别表示非刚性项和刚性项。附加 Runge-Kutta 方法是一种隐-显式方法，由显式 Runge-Kutta（ERK）方法和对角隐式 Runge-Kutta（ESDIRK）方法组合在一起使用，ERK 方法积分非刚性项，ESDIRK 方法积分刚性项。本研究使用的 3 种附加 Runge-Kutta 方法，ARK3(2)4L[2]SA、ARK4(3)6L[2]SA 和 ARK5(4)8L[2]SA[5]，分别为 3 阶、4 阶和 5 阶精度。同时，非刚性对流项的空间离散通过 5 阶精度的 WENO 格式[11-13]完成。

3 程序测试

3.1 对流-反应方程

对流-反应方程用于测试上述 3 种附加 Runge-Kutta 方法的时间精度，包括 ARK3(2)4L[2]SA、ARK4(3)6L[2]SA和 ARK5(4)8L[2]SA[5]，并与已有的格式进行比较。测试方程采用如下带参数的对流反应方程

$$u_t+u_x=\varepsilon u,\quad 0\leqslant x\leqslant 1,\ u(0,x)=\sin(2\pi x)，\text{周期边界条件} \tag{9}$$

式中：ε 为刚性系数。方程(9)的刚性随着 ε 的增大而增大，反应项 εu 隐式处理，对流项 u_x 显式处理。方程(9)为初边值问题，其精确解为

$$u(t,x)=\mathrm{e}^{\varepsilon t}\sin[2\pi(x-t)] \tag{10}$$

时间精度通过下面的公式得出

$$e_h=|u_0-u_h|,\ R_P=2^P=\sqrt{e_h/e_{h/2}} \tag{11}$$

式中：P 为时间精度，e_h 和 $e_{h/2}$ 分别为时间步长为 h 和 $h/2$ 时的数值误差，u_0 和 u_h 分别为精确解和时间步长为 h 时的数值解。计算结果如表 1 所示，ARK5(4)8L[2]SA[5]、ARK4(3)6L[2]SA 和 ARK3(2)4L[2]SA 方法分别达到了 3 阶、4 阶和 5 阶精度。图 1 比较了 ARK3(2)4L[2]SA 方法、TVD Runge-Kutta 格式(Shu)、3 步 SSPRK 格式(Ruuth)和 8 步 SSPRK 格式 (Ruuth)4 种 3 阶精度格式的数值误差。可以看出，当 $\varepsilon<10$ 时，4 种格式的数值误差相差不大；当 $\varepsilon>10$ 时，随着方程的刚性不断增强，ARK3(2)4L[2]SA 比其它 3 种方法的误差都要小，能够很好地处理刚性问题。同时比较了 4 种格式的收敛性，ARK3(2)4L[2]SA 比其它 3 种方法的收敛性要好很多，如图 2 所示。

3.2 等容爆炸模型

ZND 模型既包括化学反应，同时也包含流体动力学。等容爆炸模型是一组常微分方程组，是 ZND 模型一个受限的特例，可以描述一定体积的反应气体的等压快速爆炸过程。该模型的代数物理方程为

$$\frac{\mathrm{d}Y_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\rho}\omega_i,\quad \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{c_V}\sum_{i=1}^{9}e_i\omega_i,\quad \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=0 \tag{12}$$

式中:Y_i、e_i、ω_i分别是第 i 种组分的摩尔分数、内能和质量生成速率,c_V 表示等容比热。

表 1　3 种方法的时间精度测试表($x=0.5$,$t=0.2$,$h=0.04$)

Table 1　Temporal accuracy test of three schemes ($x=0.5$,$t=0.2$,$h=0.04$)

Δt	Err 1	R_P	Order	Err 2	R_P	Order	Err 3	R_P	Order
h	1.82×10^{-3}	7.2	2.85	3.21×10^{-4}	13.0	3.70	5.57×10^{-5}	26.0	4.70
$h/2$	2.53×10^{-4}	7.7	2.94	2.47×10^{-5}	15.1	3.92	2.14×10^{-6}	28.8	4.85
$h/4$	3.29×10^{-5}	7.9	2.98	1.63×10^{-6}	15.9	3.99	7.43×10^{-8}	29.9	4.90
$h/8$	4.16×10^{-6}	8.0	3.00	1.03×10^{-7}	16.1	4.01	2.49×10^{-9}	32.7	5.03
$h/16$	5.21×10^{-7}	8.2	3.04	6.37×10^{-9}	16.6	4.05	7.62×10^{-11}	33.1	5.05
$h/32$	6.43×10^{-8}	—	—	3.85×10^{-10}	—	—	2.30×10^{-12}	—	—

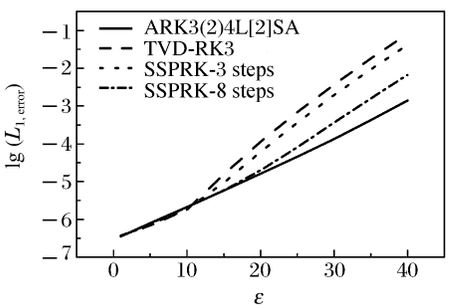


图 1　4 种 3 阶精度格式的误差随 ε 的变化曲线

Fig. 1　Error versus stiffness parameters ε for four third-order schemes

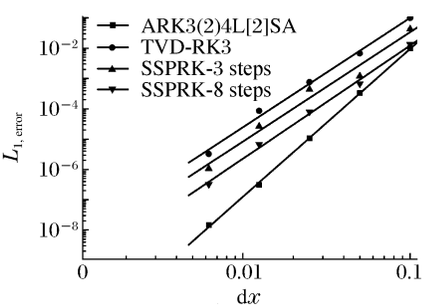


图 2　4 种 3 阶精度的格式收敛性曲线(ε=0.1)

Fig. 2　Grid convergence study for four third-order schemes with stiffness parameters ε=0.1

在本算例中,比较了 ARK4(3)6L[2]SA 和 ARK3(2)4L[2]SA 与已有的各种处理刚性问题的显-隐式格式,包括 Ascher 等人的(2,3,3)、(3,4,3)和(4,4,3)方法[14],Calvo 等人的 LIRK3 和 LIRK4 方法[15], Fritzen 等人的 FW53 方法[16]。定义“Work”为隐式迭代的数目,在图 3 的曲线中,Ascher 等人的(4,4,3)格式和 Fritzen 等人的 FW53 格式是效率最低的,LIRK3 是剩下的 4 种方法效率最低的,其次是 Ascher 等人的(3,4,3)格式,效率最高的方法是 ARK3(2)4L[2]SA 和 Ascher 等人的(2,3,3)格式。图 4 对两种 4 阶精度格式,ARK4(3)6L[2]SA 和 LIRK4 格式,进行了误差比较,可以看出前者的效率更高。

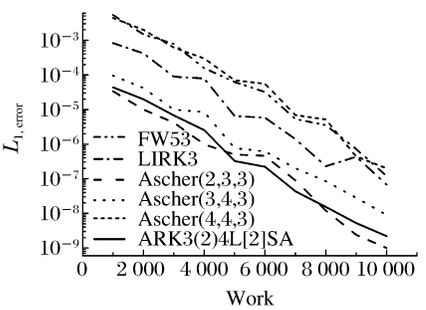


图 3　6 种 3 阶精度格式的误差比较曲线

Fig. 3　Error versus work for six third-order IMEX Runge-Kutta methods

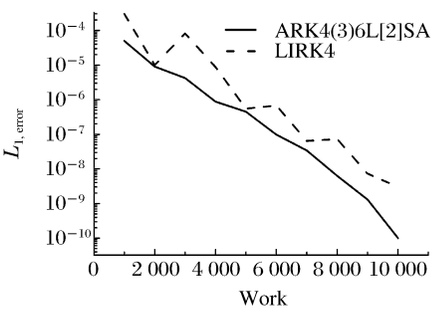


图 4　2 种 4 阶精度格式的误差比较曲线

Fig. 4　Error versus work for two fourth-order accuracy

4 结果和讨论

4.1 一维气相爆轰

预混气体为化学当量比的 H_2 和 O_2，用 70% 的 Ar 进行稀释，初始压力和温度分别为 6 670 Pa 和 298 K。在左侧封闭端的一段高温高压区域点火，迅速引爆混合气体，达到稳定爆轰并以恒定的爆速传播。点火区密度为初始压力的 5 倍，温度为初始温度的 10 倍。图 5 给出了在上述条件下，稳定爆轰波形成过程的压力分布图，每条曲线间隔时间相同。从图 5 中可以看出，初始条件产生一个冲击波和波后的高温高压区，高温高压区迅速点燃混合气体，形成更高的压力，克服壁面稀疏作用，并逐渐形成稳定爆轰波。

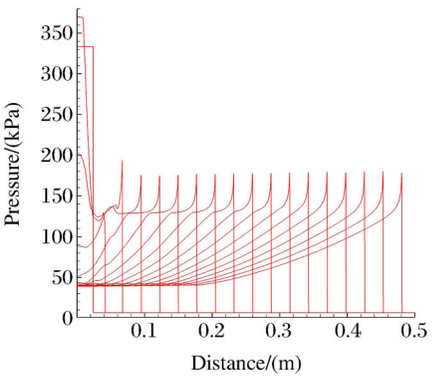


图 5 一维气相爆轰波形成过程曲线

Fig. 5 Formation of 1-D gaseous detonation wave

为了研究网格尺寸对数值模拟结果的影响，分别计算了网格尺寸为 2.00、1.00、0.50、0.20、0.10 和 0.05 mm 6 种情况下的直接起爆过程，结果见表 2。从表 2 可以看出，一些爆轰特征参数，包括爆速、C-J 压力和壁面压力都对网格尺寸不敏感，当网格小于 2.00 mm 时，基本稳定在某一数值。但是 von-Neumann 压力、反应区宽度和诱导区宽度随网格尺寸的变化很明显，最终反应区宽度稳定在 10 mm，诱导区宽度稳定在 1.2 mm。根据表 2 中的数据，拟合得到了压力比 p/p_{CJ}、反应区宽度 L_{rea} 随网格尺寸 Δx 的变化曲线

$$\begin{cases} p/p_{CJ} = 0.591\,58\mathrm{e}^{\frac{-\Delta x}{1.732\,60}} + 1.254\,63 \\ L_{rea} = 282.632\mathrm{e}^{\frac{-\Delta x}{32.115\,9}} - 272.603 \end{cases} \tag{13}$$

当 $\Delta x \to 0$ 时，p/p_{CJ} 和 L_{rea} 分别收敛于 1.85 和 10 mm。

表 2 不同网格尺寸下的爆轰参数计算结果

Table 2 Calculated detonation parameters with different grid sizes

Grid size /(mm)	Detonation velocity /(m/s)	p_{CJ} /(kPa)	p_{wall} /(kPa)	$p_{v\text{-}N}$ /(kPa)	L_{rea} /(mm)	Induction zone length/(mm)
2.00	1 620	93.60	35.83	135	28	—
1.00	1 620	93.60	35.83	149	18	—
0.50	1 620	93.60	35.83	159	15	—
0.20	1 620	93.60	35.83	166	12	1.6
0.10	1 620	93.60	35.83	169	10	1.1
0.05	1 620	93.60	35.83	178	10	1.0

4.2 二维气相爆轰

爆轰波波阵面附近复杂的三波点波系结构如图 6 和图 7 所示。典型的三波点波系结构包括马赫杆、入射激波和横波，三者交汇于一点，即三波点。从图 6 和图 7 可以看出，三波点附近出现压力和密度峰值，入射激波比马赫杆平整得多，然而强度却低于马赫杆，其后的密度梯度和温度梯度也比马赫杆后小很多，说明入射激波后的化学反应比马赫杆后的延迟，反应阵面滞后。同时根据马赫杆阵面的压力分布可以发现，马赫杆中心的压力最低，在两侧方向的压力逐渐升高，并在三波点附近达到峰值。相对而言，入射激波阵面的压力分布要均匀很多。

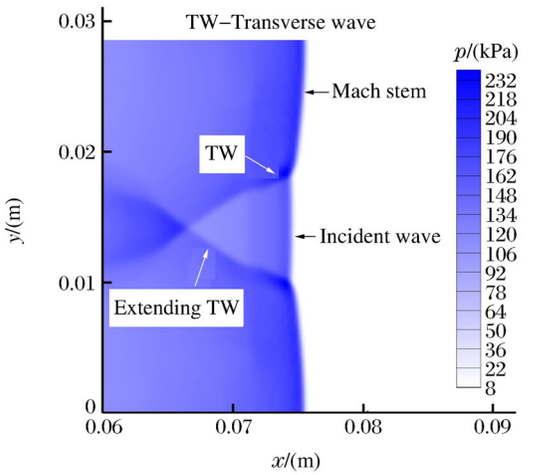


图 6　爆轰波波阵面和三波波系结构(压力)

Fig. 6　Profiles of mach stem and incident along detonation front (Pressure)

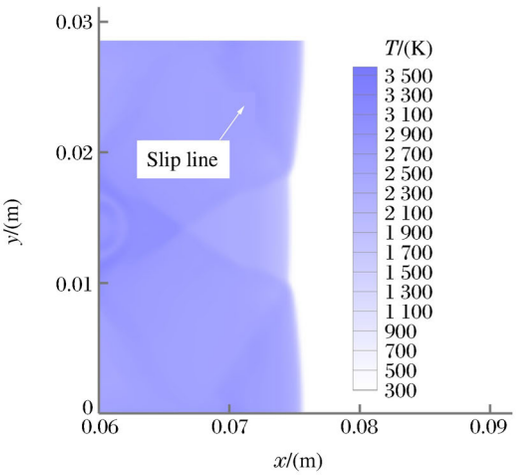


图 7　爆轰波波阵面和三波波系结构(密度)

Fig. 7　Profiles of mach stem and incident along detonation front (Density)

典型的三波结构本质上属于马赫反射的范畴,运用马赫反射经典理论,有助于理解爆轰波的三波结构。马赫反射中,马赫杆后的压力和密度均高于入射激波后的压力和密度;马赫杆后的压力是连续的,但是存在接触间断,即密度存在间断;马赫反射中的横波随着马赫反射种类的不同,如单马赫反射和双马赫反射(见图 8),其强度和形状也不同。在双马赫反射中,横波与三波点接触段强度很高,曲率较小;越往后发展横波强度越低,曲率越大。上述马赫反射现象与爆轰波三波结构的分析是吻合的,从图 8 中也可以看出马赫杆后的密度间断(滑移线)。滑移线附近存在复杂的涡系结构,但是在网格尺寸足够小的情况下才能够准确捕捉到。

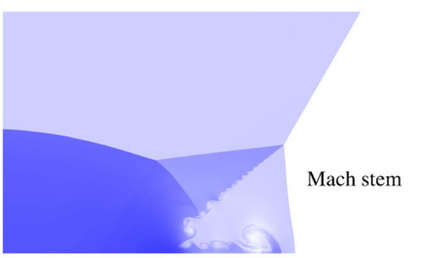


图 8　典型的双马赫反射波系结构图

Fig. 8　Peak pressure and reaction zone length versus grid size

烟迹技术广泛应用于记录爆轰波的胞格结构。用烟熏玻璃板或者金属板做成烟熏片,在烟熏片上均匀覆盖一层烟迹,然后将烟熏片放入管道内壁,用于记录爆轰波在管道中三波点的运动轨迹,所得到的运动轨迹呈鱼鳞状,即爆轰胞格。在数值计算中,通过记录整个计算时间内爆轰波的最大压力历史从而得到数值胞格,计算得到的规则的胞格结构如图 9 所示。结果表明:用本方法计算的爆轰波以规则的胞格结构传播,数值胞格图案和通过实验得到的胞格图案(图 10)十分相似。图 11 给出了胞格结构的若干特征参数的几何关系,包括出射角 α、胞格宽长比 λ/l、入射角 β 和横波轨迹角 ω。将计算得到的胞格结构的几何参数与前人的实验结果进行了比较,见表 3,两者结果吻合得比较好。

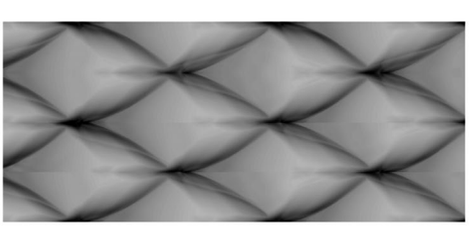


图 9　数值胞格结构

Fig. 9　Cellular pattern produced of numerical simulations

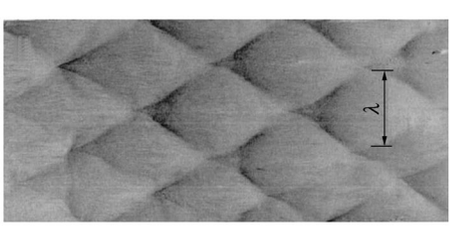


图 10　实验胞格结构 (Shepherd)

Fig. 10　Experimental cellular pattern (Shepherd)

表 3 实验与数值计算胞格参数对比

Table 3 Parameters comparison of the computed cells solution with experimental ones

Cell structure parameters	Computation results	Experimental results[17-18]
λ/l	0.6	0.5-0.6
α	10	5-10
β	35-42	32-40
ω	≈32	≈30

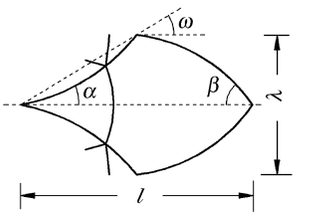


图 11 爆轰胞格特征参数的几何关系

Fig. 11 Some characteristic parameters of the cellular pattern

4.3 爆轰波马赫反射

在过去 10 年中，由于在超音速推进系统及爆轰波与结构相互作用研究中的应用，爆轰波在楔面上的反射引起了广泛的重视和更多的研究。在本节中，模拟了爆轰波与 19.3°楔面的相互作用过程，如图 12 所示，并与前人的计算结果进行了对比。

本研究采用基元化学反应模型，分别采用 3 阶精度的 TVD Runge-Kutta 方法和 ARK 数值方法；文献[19]采用与本研究相同的反应模型，数值方法采用 CE/SE 方法。从图 12 中可以看出，在楔上区域，存在一条明显的分界线，分界线下面的胞格尺寸、强度和数量均与分界线上面的有明显差距，具体为：胞格尺寸更小、数量更多，强大更大，这是因为马赫杆后的压力和密度比入射激波后的更大。图 12 中的分界线就是三波点的运动轨迹。如果直楔面换成曲面，如图 13 所示的 30°弯管，在下边界处也会发生马赫反射现象，上边界则为衍射。图 14 给出了本研究的计算结果与实验结果[20]、数值计算结果[19]的比较。从图 14 中可以看出，本研究的计算结果与实验吻合得很好，也与文献[19]的计算结果类似，但是相比较而言，应用 3 阶 ARK 方法得到的分界线两侧的胞格更为清晰，且规则性更好。

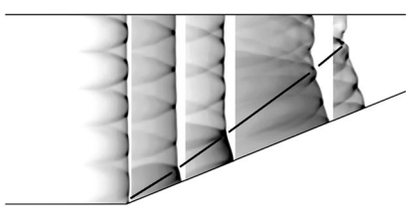


图 12 不同时刻楔面爆轰波波阵面

Fig. 12 Detonation front on a wedge at different time

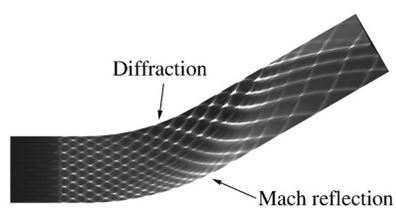
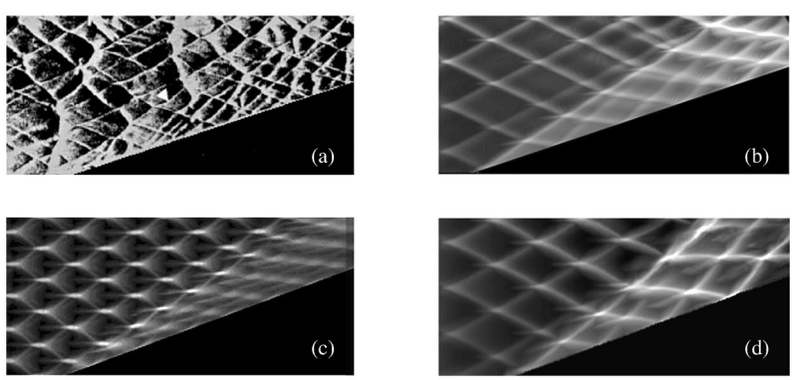


图 13 爆轰波在 30°弯管中传播的胞格图

Fig. 13 Cellular pattern on 30° smooth pipe bend



(a) Experiment[19]; (b) Detailed chemical reaction model and 3 order TVD Runge-Kutta scheme; (c) Detailed chemical reaction model and CE/SE scheme[20]; (d) Detailed chemical reaction model and 3 order ARK scheme

图 14 爆轰波胞格结构比较

Fig. 14 Cellular pattern produced in numerical simulations

5　结　论

采用附加 Runge-Kutta 方法,数值求解带刚性源项多组分反应欧拉方程,非刚性项采用显式方法积分,刚性源项采用半隐式方法积分,然后将其应用到气相爆轰问题的数值模拟中,包括一维、二维和楔面马赫反射。结果表明:方程刚性不大时,附加 Runge-Kutta 方法与显式 Runge-Kutta 方法相比较,计算精度相差不大;但当方程刚性大幅增加时,附加 Runge-Kutta 方法处理刚性的能力更好。在气相爆轰数值模拟中使用附加 Runge-Kutta 方法,能够准确地捕捉和描述爆轰波的复杂结构和典型特征,同时也能够很好地模拟爆轰波在楔面上的马赫反射问题。

References:

[1] Zhong X L. Additive semi-implicit Runge-Kutta methods for computing high-speed no equilibrium reactive flows [J]. J Comput Phys,1996,128(1):19-31.

[2] Yanenko N N. The Method of Fractional Steps [M]. New York/Berlin:Springer-Verlag,1971.

[3] Oran E S,Boris J P. Numerical Simulation of Reactive Flow [M]. New York:Elsevier Science,1987.

[4] Ma T B,Wang J,Ning J G. A hybrid VOF and PIC multi-material interface treatment method and its application in the penetration [J]. Science China Physics,Mechanics & Astronomy,2009,39(9):1185-1194.

[5] Fei G L,Ma T B,Hao L. Large-scale high performance computation on 3D explosion and shock problems [J]. Appl Math Mech (Eng Ed),2011,32(3):375-382.

[6] Hu X Y,Zhang D L,Jiang Z L. Numerical simulation of gaseous detonation with a detailed chemical reaction model [J]. Acta Aerodynamics Sinica,2003,21(1):59-66. (in Chinese)
胡湘渝,张德良,姜宗林. 气相爆轰基元反应模型数值模拟 [J]. 空气动力学学报,2003,21(1):59-66.

[7] Kennedy C A,Carpenter M H. Additive Runge-Kutta schemes for convection-diffusion-reaction equations [J]. Appl Numer Math,2003,44(1/2):139-181.

[8] Xia Y,Xu Y,Shu C W. Efficient time discretization for local discontinuous Galerkin methods [J]. Discrete and Continuous Dynamics Systems-Series B,2007,18(3):677-693.

[9] Westbrook C K. Hydrogen oxidation kinetics in gaseous detonation [J]. Combus Sci Technol,1982,29(1/2):67-81.

[10] Araújo A L,Murua A,Sanz-Serna J M. Symplectic methods based on decompositions [J]. SIAM J Numer Analys,1997,34(5):1926-1947.

[11] Zhang Y J,Liu Y D,Zhang Z H,et al. Computation on deflagration of hydrogen air mixture inside a duct and induced shell response [J]. Science China Physics,Mechanics & Astronomy,2009,39(9):1173-1184.

[12] Jiang G S,Shu C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes [J]. J Comput Phys,1996,126(1):202-228.

[13] Wang C,Ma T B,Lu J. Influence of obstacle disturbance in a duct on explosion characteristics of Coal Gas [J]. Science China Physics,Mechanics & Astronomy,2009,39(9):1248-1257.

[14] Ascher U M,Ruuth S J,Spiteri R J. Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential equations [J]. Appl Numer Math,1997,25(2/3):151-167.

[15] Calvo M P,de Frutos J,Novo J. Linearly implicit Runge-Kutta methods for advection-reaction-diffusion equations [J]. Appl Numer Math,2001,37(4):535-549.

[16] Fritzen P,Wittekindt J. Numerical solution of viscoplastic constitutive equations with internal state variables,Part Ⅰ:Algorithms and implementation [J]. Math Methods Appl Sci,1997,20(16):1411-1425.

[17] Wang G,Wang J T,Liu K X. New numerical algorithms in SUPER CE/SE and their applications in explosion mechanics [J]. Science China Physics,Mechanics & Astronomy,2009,39(9):1214-1220.

[18] Hu X Y. On the structures of gaseous detonation waves [R]. Beijing:The Institute of Mechanics,Chinese Academy of Sciences,2001. (in Chinese)

胡湘渝. 气相爆轰波结构研究 [R]. 北京:中国科学院力学研究所,2001.

[19] Wang G, Zhang D L, Liu K X, et al. An improved CE/SE scheme for numerical simulation of gaseous and two-phase detonations [J]. Comput Fluids, 2010, 39(1): 168-177.

[20] Guo C M, Zhang D L, Xie W. The Mach reflection of a detonation based on soot track measurements [J]. Combustion and Flame, 2001, 127(3): 2051-2058.

Additive Runge-Kutta Methods for Accurate H_2-O_2-Ar Detonation Simulation

LI Jian[1], HAO Li[2], NING Jian-Guo[1]

(1. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*;
2. *Science School, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing* 100044, *China*)

Abstract: We report here the additive Runge-Kutta methods for computing reactive Euler equations with a stiff source term, and in particular, their applications in gaseous detonation simulations. The source term in gaseous detonation is stiff due to the presence of wide range of time scales during thermal-chemical non-equilibrium reactive processes and some of these time scales are much smaller than that of hydrodynamic flow. The high order, L-stable, additive Runge-Kutta methods proposed in this paper resolved the stiff source term into the stiff part and non-stiff part, in which the stiff part was solved implicitly while the non-stiff part was handled explicitly. The proposed method was successfully applied to simulate the gaseous detonation in a stoichiometric H_2-O_2-Ar mixture based on a detailed elementary chemical reaction model comprised of 9 species and 19 elementary reactions. The results showed that the stiffly-accurate additive Runge-Kutta methods can well capture the discontinuity, and accurately describe the detonation complex wave configurations such as the triple wave structure and cellular pattern.

Key words: source term; additive Runge-Kutta methods; stiffness; gaseous detonation