

文章编号: 1000 0887(2000) 06 0655 06

# 隐式 TVD 格式在气液两相爆轰数值模拟中的应用\*

郭永辉, 田 宙, 郝保田

(西北核技术研究所, 西安 710027)

(林建中推荐)

摘要: 为研究 FAE(燃料空气炸药)爆炸参数规律, 运用二维轴对称气液两相方程组模型, 针对其中的气相方程组采用高分辨率的隐式 TVD 格式, 液相方程组采用 MacCormack 格式, 较好地对 FAE 气液两相爆轰产生的爆轰波的发展和传播过程进行了数值模拟, 计算结果与国内外的研究结果符合良好

关键词: 两相流; TVD 格式; 数值模拟; 爆轰波

中图分类号: O381; O241 文献标识码: A

## 引 言

自 80 年代初, Ami Harten 提出新的高分辨率差分格式 TVD (total variation diminishing) 格式以来, TVD 格式已被广泛应用于流体力学的数值计算中, 但在二维两相爆轰中的应用还未见报道。本文针对气液两相爆轰数值模拟中采用的二维轴对称气液两相方程组中气相、液相方程的特点, 对气相方程采用了高分辨率的隐式 TVD 格式并进行线性化后求解, 它不仅能保持 TVD 格式的优点, 如间断面窄、间断面处无非物理振荡、光滑区域精度高等, 而且收敛速度很快, CFL 数无限制; 对液相方程组采用了 MacCormack 格式, 两相方程组耦合进行计算。根据实际需要, 计算网格取为不等距网格, 为了较好地处理它带来的不利影响, 并且在以后可以对带有不规则边界的问题方便的进行计算, 本文对气相方程组进行了坐标变换, 推导出了坐标变换后气相方程组的 Jacobi 矩阵、特征值、特征向量, 写出了相应的隐式 TVD 格式及线性化计算过程。运用上述方法, 本文较好地模拟了 FAE(燃料空气炸药)气液两相爆轰产生的爆轰波的发展和传播过程, 其计算结果与国内研究结果相比, 符合良好。

## 1 物理模型

### 1.1 基本假定

与国内外研究类似, 假定: (1) 液滴均为球形, 大小均匀, 相互之间不发生碰撞、凝结和破碎; (2) 液滴所占有的体积与空气体积相比可以忽略; (3) 化学反应只发生在气相之间; (4) 液滴中的温度梯度为零; (5) 气相表现为理想气体形式。

\* 收稿日期: 1998 11 25; 修订日期: 1999 01 25

作者简介: 郭永辉(1966-), 女, 助理研究员。

## 1.2 守恒方程组

根据上述假定, 我们可以得到下列守恒形式的方程组:

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial R} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial Z} + \phi = 0$$

对气相, 有

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_1 v_1 \\ E_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 \\ P_1 + \rho_1 u_1^2 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ (E_1 + P_1) u_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho_1 v_1 \\ \rho_1 u_1 v_1 \\ P_1 + \rho_1 v_1^2 \\ (E_1 + P_1) v_1 \end{pmatrix},$$

$$\phi = \begin{pmatrix} \rho_1 u_1 / R - \delta \rho_2 \\ \rho_1 u_1^2 / R + \rho_2 M_R - \delta \rho_2 u_2 \\ \rho_1 u_1 v_1 / R + \rho_2 M_Z - \delta \rho_2 v_2 \\ (E_1 + P_1) u_1 / R + \rho_2 (u_2 M_R + v_2 M_Z) - \delta \rho_2 (0.5 u_2^2 + 0.5 v_2^2 + Q) \end{pmatrix},$$

$$E_1 = 0.5 \rho_1 (u_1^2 + v_1^2) + \frac{P_1}{\gamma - 1};$$

对液相, 有

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho_2 \\ \rho_2 u_2 \\ \rho_2 v_2 \\ N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho_2 u_2 \\ \rho_2 u_2^2 \\ \rho_2 u_2 v_2 \\ N u_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho_2 v_2 \\ \rho_2 u_2 v_2 \\ \rho_2 v_2^2 \\ N v_2 \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} \rho_2 u_2 / R + \delta \rho_2 \\ \rho_2 u_2^2 / R - \rho_2 M_R + \delta \rho_2 u_2 \\ \rho_2 u_2 v_2 / R - \rho_2 M_Z + \delta \rho_2 v_2 \\ N u_2 / R \end{pmatrix};$$

式中,

$$\rho_2 = \frac{4}{3} \pi l^3 N \rho_2^{\text{mi}}, \quad N u = 2 + 0.6 Pr^{0.33} Re^{0.5},$$

$$\delta = \frac{9kN_u(T_1 - T_2)}{\pi l^2 \rho_2^{\text{mi}} L} + 3 \left( \frac{\rho_1 \mu_1}{\rho_2^{\text{mi}} \mu_2} \right)^{1/6} \left( \frac{\mu_2}{\rho_2^{\text{mi}}} \right)^{1/2} (V_1 - V_2)^{1/2} l^{-3/2},$$

$$M_R = \frac{3\rho_1 C_D}{8\rho_2^{\text{mi}} l} |V_1 - V_2| (u_1 - u_2), \quad M_Z = \frac{3\rho_1 C_D}{8\rho_2^{\text{mi}} l} |V_1 - V_2| (v_1 - v_2),$$

$$C_D = \begin{cases} 27Re^{-0.84}, & Re < 80 \\ 0.27Re^{0.21}, & 80 \leq Re < 10^4 \\ 2, & 10^4 \leq Re \end{cases}, \quad Re = \frac{2\rho_1 l |V_1 - V_2|}{\mu_1},$$

$$|V_1 - V_2| = [(u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2]^{1/2},$$

式中  $\rho$ 、 $u$ 、 $v$ 、 $P$ 、 $E$ 、 $T$ 、 $\mu$  分别表示两相介质中的密度、径向速度、轴向速度、压力、单位体积的总能量、温度和粘性系数; 其中下标“1”表示气相, 下标“2”表示液相。  $Q$  为单位质量燃料的化学反应热;  $N$  为单位体积中的液滴数目;  $l$  为液滴的平均半径;  $\rho_2^{\text{mi}}$  为燃料液滴的密度;  $k$  为气体的热传导系数;  $L$  为燃料液滴的蒸发热;  $Pr$  为 Prandtl 数;  $\gamma$  为气相的有效绝热指数;  $\delta$  为燃料液滴受蒸发、边界层剥离作用引起的与液滴尺寸减小率有关的变量;  $M$  为与两相介质之间动量变换有关的拖曳力项。

## 2 差分格式

### 2.1 气相方程组坐标变换下的隐式 TVD 格式

在数值计算中,对于气相方程组采用隐式 TVD 格式<sup>[1]</sup>。由于计算范围很大,网格需划分为不等距网格,即在云雾区内为细网络,对云雾区外冲击波的传播模拟运用了较粗的网格(如图 1),为了保证计算精度,对这种不等距网格以及更复杂的边界形状进行较好的处理。本文对上述方程组进行了坐标变换<sup>[2]</sup>,将不规则的物理平面变换为矩形计算平面,设物理平面为  $(x, y)$ ,计算平面为  $(\xi, \eta)$ ,且有如下坐标关系:

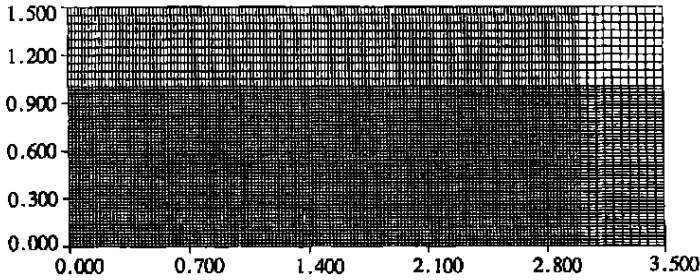


图 1 计算网格

$$\begin{cases} \xi = \xi(x, y), \\ \eta = \eta(x, y). \end{cases}$$

变换后上述气相方程组可写为:

$$\frac{\partial F'}{\partial t} + \frac{\partial G'}{\partial \xi} + \frac{\partial H'}{\partial \eta} + \phi' = 0,$$

其中:

$$\begin{cases} F' = F/J, \\ G' = (G\xi_x + H\xi_y)/J, \\ H' = (G\eta_x + H\eta_y)/J, \\ \phi' = \phi/J, \\ J = \frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(x, y)} = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x. \end{cases}$$

设  $A = \partial G'/\partial F, B = \partial H'/\partial F$ , 用  $A', B'$  表示  $G', H'$  的 Jacobi 矩阵, 则它们分别为:

$$A' = \xi_x A + \xi_y B, \quad B' = \eta_x A + \eta_y B,$$

其中  $A'$  的特征值为:

$$a_{\xi}^1 = S - c \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}, \quad a_{\xi}^2 = S, \quad a_{\xi}^3 = S + c \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}, \quad a_{\xi}^4 = S,$$

这里:

$$c^2 = \frac{p}{\rho}, \quad S = u\xi_x + v\xi_y.$$

相应的右特征向量矩阵为:

$$R_{\xi} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ u - cD_1 & u & u + cD_1 & D_2 \\ v - cD_2 & v & v + cD_2 & -D_1 \\ HH - uD_1 - vD_2 & W & HH + uD_1 + vD_2 & uD_1 - vD_2 \end{bmatrix},$$

左特征向量矩阵为:

$$R_{\bar{\xi}}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left[ b_{1+} + \frac{(uD_1 + vD_2)}{c} \right] & -\frac{1}{2} \left( ub_2 + \frac{D_1}{c} \right) & -\frac{1}{2} \left( vb_2 + \frac{D_2}{c} \right) & \frac{b_2}{2} \\ & 1 - b_1 & ub_2 & vb_2 & -b_2 \\ \frac{1}{2} \left[ b_{1-} - \frac{(uD_1 + vD_2)}{c} \right] & \frac{1}{2} \left( -ub_2 + \frac{D_1}{c} \right) & \frac{1}{2} \left( -vb_2 + \frac{D_2}{c} \right) & \frac{b_2}{2} \\ & vD_1 - uD_2 & D_2 & -D_1 & 0 \end{bmatrix},$$

其中:

$$D_1 = \frac{\xi_x}{\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}}, \quad D_2 = \frac{\xi_y}{\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}}, \quad b_2 = \frac{v-1}{c^2}, \quad b_1 = \frac{v-1}{2c^2}(u^2 + v^2).$$

将上式中  $\xi_x, \xi_y$  分别用  $\eta_x, \eta_y$  代替, 则可得到相应的  $B', (b_{\eta}^1, b_{\eta}^2, b_{\eta}^3, b_{\eta}^4), R_{\eta}, R_{\eta}^{-1}$ , 在此就不一一写出.

定义:

$$\alpha_{i+1/2,j} = R_{i+1/2,j}^{-1} \frac{F'_{i+1,j} - F'_{i,j}}{0.5 \times (J_{i+1,j} + J_{i,j})}, \quad \alpha_{i,j+1/2} = R_{i,j+1/2}^{-1} \frac{F'_{i,j+1} - F'_{i,j}}{0.5 \times (J_{i,j+1} + J_{i,j})},$$

利用以上记号, 气相方程组的隐式 TVD 格式为:

$$F'_{i,j}^{n+1} + \lambda^{\xi} (G_{i+1/2,j}^{n+1} - G_{i-1/2,j}^{n+1}) - \lambda^{\eta} (H_{i,j+1/2}^{n+1} - H_{i,j-1/2}^{n+1}) = F'_{i,j}^n,$$

其中:

$$\begin{aligned} G_{i+1/2,j} &= (G_{i,j} + G_{i+1,j} + R_{i+1/2,j} \Phi_{i+1/2,j})/2, \\ \Phi_{i+1/2,j} &= \zeta_{i+1/2,j}^l \alpha_{i+1/2,j}^l (g_{i,j}^l + g_{i+1,j}^l) - \phi(a_{i+1/2,j}^l + v_{i+1/2,j}^l \alpha_{i+1/2,j}^l), \\ g_{i,j}^l &= \text{sign}(\alpha_{i+1/2,j}^l) \cdot \max[0, \min(|\alpha_{i+1/2,j}^l|, \text{sign}(\alpha_{i+1/2,j}^l) \cdot \alpha_{i-1/2,j}^l)], \\ v_{i+1/2,j}^l &= \zeta_{i+1/2,j}^l \alpha_{i+1/2,j}^l \begin{cases} (g_{i+1,j}^l - g_{i,j}^l) / \alpha_{i+1/2,j}^l, & \alpha_{i+1/2,j}^l \neq 0, \\ 0, & \alpha_{i+1/2,j}^l = 0, \end{cases} \\ \phi(z) &= \begin{cases} |z|, & |z| \geq \delta, \\ (z^2 + \delta^2)/2\delta, & |z| < \delta, \end{cases} \quad \sigma(z) = \frac{1}{2}[\phi(z) + \lambda^2], \\ \zeta_{i+1/2,j}^l &= 1 + \omega \max(\theta_i^l, \theta_{i+1}^l), \quad \lambda^{\xi} = \Delta t / \Delta \xi, \quad \lambda^{\eta} = \Delta t / \Delta \eta, \end{aligned}$$

相应地可写出  $H_{i,j+1/2}$ .

上式计算非常困难, 必须对它进行线性化, 线性化后再运用方向交替法将二维问题化为两个一维问题进行求解可得:

$$\begin{aligned} [I + \lambda^{\xi} Q_{i+1/2,j}^{\xi} - \lambda^{\eta} Q_{i,j+1/2}^{\eta}] Z' &= -\lambda^{\xi} (G_{i+1/2,j}^n - G_{i-1/2,j}^n) - \lambda^{\eta} (H_{i,j+1/2}^n - H_{i,j-1/2}^n), \\ [I + \lambda^{\xi} Q_{i,j+1/2}^{\xi} - \lambda^{\eta} Q_{i,j-1/2}^{\eta}] Z &= Z', \quad F'^{n+1} = F'^n + Z + \phi', \end{aligned}$$

其中:  $Q_{i+1/2,j}^{\xi} = (A'_{i+1,j} + \Omega_{i+1/2,j}^{\xi})^n / 2$ ,  $Q_{i,j+1/2}^{\eta} = (A'_{i,j+1} + \Omega_{i,j+1/2}^{\eta})^n / 2$ .

经简化后,  $\Omega$  为:

$$\begin{aligned} \Omega_{i+1/2,j}^{\xi} &= \left\{ \text{diag}[-\max \phi(a^l)] \right\}_{i+1/2,j} \Delta_{i+1/2,j}, \\ \Omega_{i,j+1/2}^{\eta} &= \left\{ \text{diag}[-\max \phi(a^l)] \right\}_{i,j+1/2} \Delta_{i,j+1/2} \end{aligned}$$

上述方程是三对角块矩阵方程, 可以方便的求解.

## 2.2 液相方程组的差分格式

对于液相方程组, 因它的四个特征值相等, 不适合用 TVD 格式, 因此采用了 MacCormack 格式, 具体的差分格式如下:

$$F'_{i,j}^{n+1} = F'_{i,j}^n - \lambda (G_{i,j}^n - G_{i-1,j}^n) - \lambda (H_{i,j}^n - H_{i,j-1}^n),$$

$$F_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2}(F_{i,j}^n + \overline{F_{i,j}^{n+1}}) - \frac{\Delta x}{2}(G_{i+1,j}^n - G_{i,j}^n) - \frac{\Delta y}{2}(H_{i,j+1}^n - H_{i,j}^n)$$

### 2.3 边界条件

在数值计算中, 左边界为对称轴, 下边界为地面, 故取对称边界条件; 上边界为连续边界, 采用类似简单波的方法, 根据流场等值线方向插值得到。

## 3 计算结果及分析

本文对氧气、庚烷混合云雾的爆轰过程进行了数值模拟, 庚烷液滴的直径取为 200 μm, 氧气、庚烷构成的云雾区域为高 1 m、直径 6 m 的圆柱形, 引爆中心点位于圆柱形云雾的对称轴上, 距地面 0.5 m。计算网格如图 1 所示, 图 2 为不同时刻计算区域中压力的等值线。可以看出, 球形爆轰波自爆点向四周传播, 在云雾区下边界碰到地面发生反射, 随着爆轰波阵面与地面的夹角逐渐增大, 爆轰波与地面的反射从规则反射逐渐过渡到马赫反射, 并形成了垂直于地面的马赫杆, 对应的反射压力如图 3 中线 1 所示, 反射波则自地面向上传播; 在云雾区上边界,

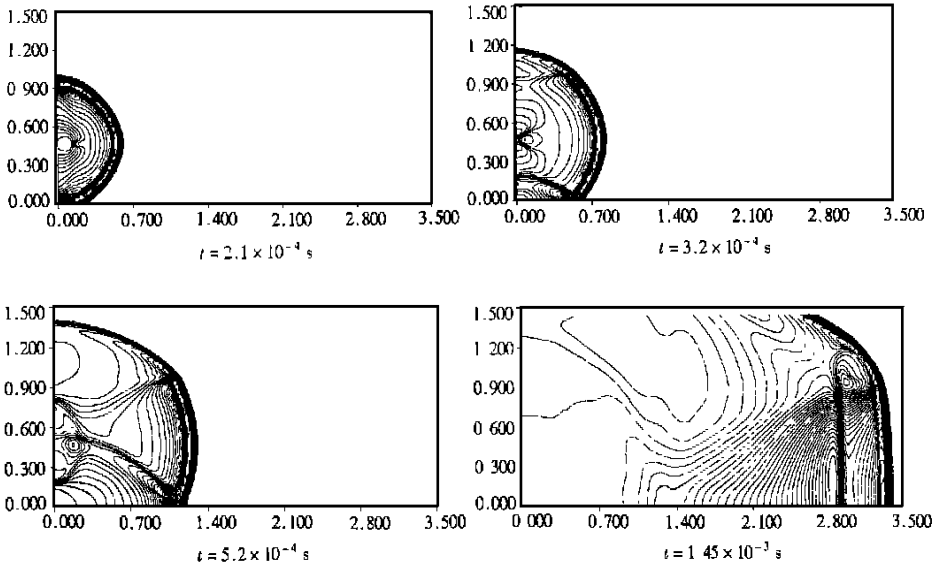


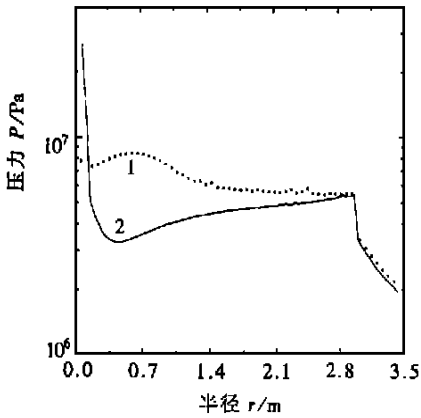
图 2 不同时刻计算区域中压力的等值线

爆轰波传入云雾外气体形成冲击波, 云雾界面产生的稀疏波向下运动。最终, 爆轰波从云雾区右边界传入云雾外气体, 同时, 透射进一个稀疏波向左传播。计算得到的稳定爆轰压力为  $5.5 \times 10^6$  Pa, 与 Eidelman 的一维计算结果  $5.7 \times 10^6$  Pa<sup>[2]</sup> 和 [3] 中的一维计算结果  $5.2 \times 10^6$  Pa 符合较好。

在对称轴与地面的交点(即  $R = 0, Z = 0$ ) 位置, 爆轰波的反射是典型的正反射。根据爆轰理论爆轰波反射后的冲击波压力  $P_2$  与反射前的爆轰波压力  $P_H$  之间有下列关系:

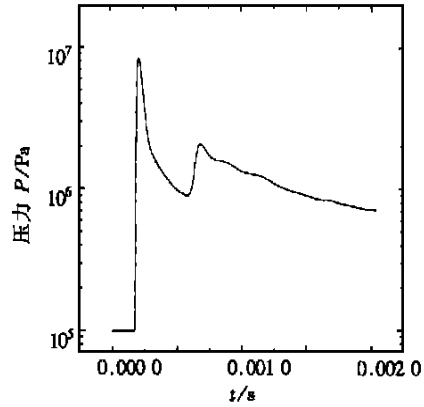
$$P_2/P_H = 5k + 1 + \sqrt{17k^2 + 2k + 1}/4k,$$

式中  $k$  为爆轰产物的绝热指数。图 3 中, 线 1 为地面反射波的波阵面压力分布, 线 2 为无反射的爆轰波波阵面压力分布, 据此可以得到  $P_H$  为  $3.3 \times 10^6$  Pa, 计算中  $k = 1.17$ , 用上面公式计算得  $P_2 = 8.47 \times 10^6$  Pa; 图 4 中, 第一个波峰为反射波压力, 第二个波峰是由二次激波反射引起的, 可以看出, 数值计算得到的反射峰值压力为  $8.44 \times 10^6$  Pa, 二者符合得相当好。



1. 地面反射波波阵面压力沿半径的变化
2. 云雾区中线爆轰波波阵面压力沿半径的变化

图3 波阵面压力沿半径的变化



( $R = 0, Z = 0$  位置)

图4 压力随时间的变化

### [参 考 文 献]

- [1] Yee H C, Warming R F. Implicit total variation diminishing schemes for steady\_state calculation[J]. J Comput Phys, 1985, 57(3): 327~ 360.
- [2] Eidelman S, Burcat A. Evolution of a detonation wave in a cloud of fuel droplets[J]. AIAA Journal, 1980, 18(9): 1103~ 1236.
- [3] 田宙, 郝保田, 郭永辉. 气液两相爆轰的数值模拟[J]. 第五次全国爆轰与冲击动力学学术会议论文集, 爆炸与冲击, 1997, (增刊): 426~ 431.

## Implicit TVD Schemes Applied to Gas Droplet Detonation Calculation

Guo Yonghui, Tian Zhou, Hao Baotian

(Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, P R China)

**Abstract:** In order to investigate parameters of FAE (fuel air explosive) explosion, the two-phase gas droplet conservation equations with two-dimensional axial symmetry in the Euler coordinate were used. High-resolution implicit TVD (total variation diminishing) schemes were applied to gas phase equations and MacCormack schemes to liquid equations. The formation and propagation of gas droplet detonation wave were simulated numerically. The simulation results and the others are compared with a good agreement.

**Key words:** two-phase flow; numerical simulation; TVD schemes; detonation wave