

# 适用于气相爆轰数值模拟的 WENO-THINC 有限顺风格式

钱琛庚<sup>1,2</sup>, 杨同会<sup>3</sup>, 咎文涛<sup>1,4\*</sup>

(1. 陆军勤务学院 油料系, 重庆 401311;

2. 北京理工大学 爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

3. 清华大学 航天航空学院, 北京 100084;

4. 中国兵器科学研究院, 北京 100089)

**摘要:**针对 WENO (Weighted Essentially Non-oscillatory) 有限差分格式数值耗散较大, 粗网格下模拟爆轰波位置不准确的问题, 构造了高精度低耗散 WENO-THINC 有限顺风格式, 分别使用 WENO 重构和 THINC (Tangent of Hyperbola Interface Capturing) 重构计算数值通量, 选择与有限顺风通量最为接近的数值通量进行空间离散。该格式在接触间断处只需 2~3 个过渡点, 在保证数值格式的稳定性的同时极大地提高了传统 WENO 格式在接触间断处的分辨率。数值试验表明, 即便使用粗网格计算爆轰波传播问题时, 该格式也能获得正确的爆轰波位置, 且不会出现非物理结构, 这说明其数值耗散很小, 相比于传统 WENO 有限差分格式, 更适用于工程尺度气相爆轰数值模拟。

**关键词:** WENO 有限差分格式; THINC 重构; 数值模拟; 高精度数值格式

**中图分类号:** TJ301 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2395(2024)02-0425-10

## A WENO-THINC Finite Downwind Scheme for the Simulations of Gaseous Detonation

QIAN Chengeng<sup>1,2</sup>, YANG Tonghui<sup>3</sup>, ZAN Wentao<sup>1,4\*</sup>

(1. Petroleum, Oil & Lubricants Department in Army Logistics Academy of PLA, Chongqing 401311, China;

2. State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

3. School of Aerospace Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

4. Chinese Academy of Ordnance Sciences, Beijing 100089, China)

**Abstract:** In response to the problem of high numerical dissipation in the WENO (Weighted Essentially Non-oscillatory) finite difference scheme and inaccurate simulation of detonation wave positions in coarse grids, a high-resolution and low dissipation WENO-THINC finite downwind scheme was constructed. The numerical flux was calculated using WENO reconstruction and THINC (Tangent of Hyperbola Interface Capturing) reconstruction, respectively. The numerical flux closest to the finite downwind flux was selected for spatial discretization. This scheme only requires 2~3 transition points at contact discontinuities, ensuring the stability of the numerical format while greatly improving the resolution of the traditional WENO scheme at contact discontinuities. Numerical experiments show that the scheme can obtain the correct detonation wave position even when using coarse grid to calculate the detonation wave propagation problem, and there is no non-physical structure, which indicates that its numerical dissipation is very small. Compared with the traditional WENO finite difference scheme, it is more suitable for engineering scale numerical simulation of gas-

**收稿日期:** 2023-06-05; **接受日期:** 2023-07-06

**基金项目:** 火灾与爆炸安全防护重庆市重点实验室(军用油库安全与设施设备评测实验室)开放基金(LQ21KFJJ03); 国家自然科学基金(12002043)

**作者简介:** 钱琛庚(1990-), 男, 河北唐山人, 博士, 研究方向为计算流体力学。E-mail: 3120170079@bit.edu.cn

\* **通信作者:** 咎文涛(ZAN Wentao), E-mail: wentzan@bit.edu.cn

**引文格式:** 钱琛庚, 杨同会, 咎文涛. 适用于气相爆轰数值模拟的 WENO-THINC 有限顺风格式[J]. 山西大学学报(自然科学版), 2024, 47(2): 425-434. DOI: 10.13451/j.sxu.ns.2023115

eous detonation.

**Key words:** WENO finite difference scheme; THINC reconstruction; numerical simulation; high order numerical scheme

## 0 引言

随着计算机水平的发展,数值模拟成为了研究气相爆轰问题的重要手段之一。但是,能够较好地计算空气动力学问题的高精度间断捕捉格式,如WENO(Weighted Essentially Non-oscillatory)有限差分格式<sup>[1]</sup>模拟气相爆轰问题时,因为刚性化学反应源项的存在,网格分辨率不足时,会导致爆轰波位置误差很大。这主要是因为间断捕捉格式自身数值耗散较大,过度光滑了爆轰波阵面,通过刚性化学反应源项放大了数值耗散误差,导致了非物理解。但是,采用充分分辨爆轰波化学反应区的精细网格开展数值模拟,对计算资源消耗巨大。因此,在实际工程计算中,我们希望构造一种能够在不计算精细化学反应结构的前提下,准确获得爆轰波位置与传播速度的数值格式,提高气相爆轰数值模拟的计算效率。

针对这一问题,Leveque和Yee<sup>[2]</sup>最先提出了Well-Balance的概念求解带刚性源项的双曲守恒问题。Leveque等<sup>[3]</sup>在其后续的研究中,又引入Level set方法对间断面进行追踪。Chorin等<sup>[4-5]</sup>提出了一种随机精确Riemann问题的方法,极大地减少了间断捕捉格式的数值耗散,使其适用于爆轰问题的数值模拟。Harten<sup>[6]</sup>通过在间断所在单元重构守恒变量,提高了ENO(Essentially Non-oscillatory)格式对接触间断的分辨率,提出了subcell resolution的思想。Chang<sup>[7-8]</sup>结合精确时间离散格式和Harten的subcell resolution的思想,发展了适用于刚性化学反应源项的低数值耗散计算方法。Bao等<sup>[9-11]</sup>提出了随机投影方法,并把该方法成功应用于多组分反应Euler方程数值模拟中,在忽略精确化学反应结构的前提下,获得了准确的爆轰波传播速度。Wang等<sup>[12]</sup>通过对刚性化学反应源项进行subcell resolution的ENO重构,发展了带有刚性源项的标量双曲方程粗网格求解方法。并把这种方法成功推广至单组分爆轰问题<sup>[13]</sup>和多组分爆轰问题<sup>[14]</sup>。

近年来新发展起来的另一种减少数值格式耗散的技术是针对有限体积格式的边界变差递减原理(Boundary Variation Diminishing,简称BVD)。其主要思路是选取边界差值最小的重构方式,计算单元边界左右守恒变量,再带入近似Riemann算子中更新数值通量。Sun和Xiao等首次提出了BVD的思想<sup>[15]</sup>,成功地结合了WENO重构和THINC(Tangent of Hyperbola Interface Capturing)重构,极大地减少了WENO有限体积格式的数值耗散。Deng等<sup>[16]</sup>又将THINC重构和二阶MUSCL格式结合起来,使用BVD原理决定单元上的重构方式,得到了MUSCL-THINC格式。虽然该格式只有二阶精度,但是在间断处的分辨率不低于五阶WENO有限体积格式。值得一提的是,MUSCL-THINC格式能够在不对化学反应源项进行特殊处理的前提下,使用粗网格得到准确的爆轰波真面的位置,这从另一个角度说明其数值耗散显著低于传统的数值格式。进一步分析THINC重构,Deng等发现小参数的THINC重构具有MUSCL(Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws)格式抑制振荡的性质,而大参数的THINC重构能够更好地近似大梯度结构。受此启发,Deng及其合作者<sup>[17]</sup>提出了线性重构和多级THINC重构结合的BVD格式,进一步提高了计算效率。后续的研究中,Deng等优化了BVD原理选取重构形式的策略<sup>[18-20]</sup>,计算过程中多次使用BVD原理筛选到耗散小的重构方式。目前,对BVD原理及THINC重构还处于初级阶段,更详细研究方向请读者参考肖锋的综述<sup>[21]</sup>。

本文通过结合有限顺风格式和THINC重构的思想,分别使用WENO重构和THINC重构计算数值通量,选择与有限顺风通量最为接近的数值通量进行空间离散,并通过数值实验验证,在保证数值格式的稳定性的同时提高传统WENO格式在接触间断处的分辨率,能够在不精确求解反应区的前提下,准确计算爆轰波位置和传播速度。

## 1 反应 Euler 控制方程组

考虑包含单步化学反应的 Euler 方程,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j u_j + p \delta_{ij})}{\partial x_i} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p) u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y u_i}{\partial x_i} = \omega, \quad (4)$$

其中,  $\rho, u_j, p, E, Y$  分别表示密度、速度分量、压力、比总能量、反应物的质量分数和化学反应生成速率。状态方程为理想气体状态方程,

$$p = (\gamma - 1) \left( \rho E - \frac{1}{2} \rho u_j^2 - \rho Y h_0 \right), \quad (5)$$

其中  $h_0$  是生成焓, 是与反应物种类相关的参数。

## 2 高精度 WENO-THINC 有限顺风格式

### 2.1 WENO 有限顺风格式

虽然 WENO 有限差分格式是高精度激波捕捉格式, 在抑制非物理振荡的同时对激波有较高的分辨率。但是, 由于引入了一定的数值耗散, WENO 格式对接触间断的分辨率反而降低了, 过量的数值耗散也会影响大涡模拟结果的准确性。因此, 在 WENO 格式提出后, 许多学者开始研究如何在保持 WENO 格式本质无振荡这一优秀的性质的同时, 减少格式的数值耗散, 提高间断处的分辨率。

Bruno 及其合作者在 2001 年<sup>[22]</sup>, 提出了一种有限顺风格式, 其主要思想是构造的数值通量尽量接近顺风数值通量, 同时引入限制条件使数值格式满足总变差递减 (TVD)。虽然有限顺风格式能够准确求解接触间断, 但是数值解不满足熵不等式, 求解激波是会产生违熵解。在 2004 年, Bouchut<sup>[23]</sup> 对有限顺风格式进行了熵修正, 使其能够正确计算激波, 但该格式只适用于标量方程。需要指出的是这两种有限顺风格式只有一阶精度。2005 年, Xu 和 Shu<sup>[24]</sup> 把有限顺风格式的思想推广到了高阶格式, 提出了逆耗散修正的 WENO 有限差分格式。但该格式依赖于间断指示器, 还需要分开

计算线性衰减空间和非线性衰减空间。

首先回顾一下一阶有限顺风格式, 假设双曲守恒律

$$u_t + f(u)_x = 0$$

满足  $f'(u) \geq 0$ , 对其半离散格式应用一阶时间离散, 得到

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\hat{f}_{j+1/2} - \hat{f}_{j-1/2}),$$

为保持数值格式的稳定性, 数值通量可直接取为迎风通量

$$\hat{f}_{j+1/2}^{\text{upwind}} = f(u_j),$$

不考虑数值稳定性还有顺风通量,

$$\hat{f}_{j+1/2}^{\text{downwind}} = f(u_{j+1})$$

和极迎风通量

$$\hat{f}_{j+1/2}^{\text{extremal}} = f(u_{j-1}) + (u_j - u_{j-1}) \frac{\Delta t}{\Delta x},$$

则 Bouchut 证明了如下定理<sup>[23]</sup>。

**定理 1** 如果半离散格式满足 CLF (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} f'(u) \leq 1,$$

其数值通量满足

$$\hat{f}_{j+1/2} \in [\hat{f}^{\text{extremal}}, \hat{f}^{\text{upwind}}] \cap [\hat{f}^{\text{downwind}}, \hat{f}^{\text{upwind}}],$$

则半离散格式满足最大值原理

$$\min_k u_k^n \leq u_k^{n+1} \leq \max_k u_k^n$$

和总变差递减 (TVD)

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$$

其中定义  $[a, b] = [\min(a, b), \max(a, b)]$ ,

$$TV(u) = \sum |u_{k+1} - u_k|.$$

有了以上定理, 可以定义有限顺风通量  $\hat{f}^{\text{ld}}$  为满足

$$\hat{f}_{j+1/2} \in [\hat{f}^{\text{extremal}}, \hat{f}^{\text{upwind}}] \cap [\hat{f}^{\text{downwind}}, \hat{f}^{\text{upwind}}]$$

的数值通量, 易知有限顺风通量可以显式表达为

$$\hat{f}_{j+1/2}^{\text{ld}} = f_{j+1/2}^{\text{upwind}} + \min \text{mod}(\hat{f}_{j+1/2}^{\text{extremal}} - \hat{f}_{j+1/2}^{\text{upwind}}, \hat{f}_{j+1/2}^{\text{downwind}} - \hat{f}_{j+1/2}^{\text{upwind}})$$

其中,  $\min \text{mod}$  函数定义为

$$\min \text{mod}(a, b) = \begin{cases} 0, & ab \leq 0, \\ a, & ab > 0, |a| \leq |b|, \\ b, & ab > 0, |a| \geq |b|. \end{cases}$$

对于初值为分段常数的线性对流方程,

Bruno 证明了<sup>[22]</sup>当数值通量取为有限顺风通量时半离散格式的解在间断处最多存在一个过渡点。这说明有限顺风通量能够在保持数值稳定的同时,极大地减少了数值格式的数值耗散。不过,有限顺风通量 TVD 的性质只对一维标量双曲守恒律成立。对于二维标量双曲守恒律, Xu 和 Shu<sup>[24]</sup>证明了有限顺风通量的数值解依然满足最大值原理,并利用数值试验反证了有限顺风通量不满足 TVD。另一方面即便直接使用有限顺风通量计算 Euler 方程组的线性衰减空间依然可能导致数值不稳定性,因此, Xu 和 Shu 提出了松弛有限顺风通量

$$f_{j+1/2}^{\text{ud}} = f_{j+1/2}^{\text{upwind}} + \phi_j \min \text{mod}(\hat{f}_{j+1/2}^{\text{extremal}} - \hat{f}_{j+1/2}^{\text{upwind}}, \hat{f}_{j+1/2}^{\text{downwind}} - \hat{f}_{j+1/2}^{\text{upwind}}),$$

其中  $\phi_j$  为间断指示器,在光滑区域接近于 0,在间断附近接近于 1。虽然松弛有限顺风通量具有很好的接触间断分辨率,但是依然有两个缺点。第一个是只能应用于 Euler 方程组的线性衰减空间,这导致需要分别计算线性和非线性衰减空间。另一个缺点是间断指示器依赖于整个计算域的物理量,不利于实现并行计算。

## 2.2 WENO 有限顺风格式

近些年来,在限制有限体积格式耗散方面,肖锋提出了边界单元变差最小化 BVD 的思想<sup>[16-21]</sup>,并构造了一系列能够抑制非物理振荡的同时,保持较小的数值耗散的有限体积格式。主要思想是使用多种方式重构单元边界上的值,选择单元边界总变差最小的重构方式计算单元交界处左右的状态,带入黎曼算子更新数值通量。其理论依据基于有限体积近似黎曼算子的计算方式,如 Lax-Friedrichs 数值通量分为中心差分项、耗散项两个部分,所以减少单元边界左右状态的差值能够有效减少数值格式的数值耗散。常用的重构方式有常系数线性重构、非线性系数重构和非多项式重构,其中基于双曲正切函数的 THINC 重构具有很好的单调性,非常适合模拟接触间断、激波等问题。因为有限差分格式通常是基于通量直接重构数值通量,而不是先构造守恒变量,再使用黎曼算子计算数值通量,所以, BVD 的思想不能简单地推广到有限差分格式。

不过定理 1 为我们在保持数值稳定的前提下

减少数值耗散提供了理论依据,即重构的数值通量应该尽量接近有限顺风通量。因此,我们可以借鉴 BVD-THINC 有限体积格式的思想,同时使用 WENO 重构和 THINC 重构,选择最靠近有限顺风通量的重构方式进行空间离散。

双曲正切函数的单调性使其能够用较少的过渡点近似阶梯函数。Xiao<sup>[25]</sup>首先提出了使用双曲正切函数重构 VOF (Volume of Fluid) 方法中的多种介质界面。后来,又作为一种重构方法计算有限体积法的单元边界值。已知单元  $I_{j-1}, I_j, I_{j+1}$  的积分均值  $\bar{u}_{j-1}, \bar{u}_j, \bar{u}_{j+1}$ , 则  $I_j$  上的 THINC 重构为

$$h_j(x) = u_{\min} + \frac{u_{\max}}{2} \left\{ 1 + \gamma \tanh \left[ \beta \left( \frac{x - x_{j-1/2}}{x_{j+1/2} - x_{j-1/2} - \bar{x}_j} \right) \right] \right\},$$

其中

$$\begin{aligned} u_{\min} &= \min(\bar{u}_{j-1}, \bar{u}_{j+1}), \\ u_{\max} &= \max(\bar{u}_{j-1}, \bar{u}_{j+1}) - u_{\min}, \\ \gamma &= \text{sgn}(\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1}), \end{aligned}$$

参数  $\bar{x}_j$  由方程

$$\bar{u}_j = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} h(\xi) d\xi$$

的解析解确定,显式表达式为

$$\bar{x}_j = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\exp \left[ \frac{\beta}{\gamma} (1 + \gamma - 2\bar{u}_j) \right]}{1 - \exp \left[ \frac{\beta}{\gamma} (1 - \gamma - 2\bar{u}_j) \right]},$$

$\beta$  为可调参数,用于控制重构函数的陡峭程度,随着  $\beta$  的增加,单元重构的边界值越来越接近相邻单元的积分均值,所以适当的选取  $\beta$  能够减少间断处过渡点的个数, Deng 及其合作者<sup>[17]</sup>研究了 THINC 重构的谱性质随  $\beta$  的变化,发现当  $\beta=1.1$  时,数值格式具有一定的数值耗散,数值解接近于二阶 MUSLE 格式。当  $\beta \geq 1.3$  时,数值格式耗散开始减少,数值解的分辨率接近于使用 Super Bee 限制器的 TVD 格式。

以  $I_j$  为基准单元,易得半点  $x = x_j + 1/2$  处的重构为

$$h_{j+1/2}^{\text{L, THINC}} = \bar{u}_{\min} + \frac{\bar{u}_{\max}}{2} \left( 1 + \theta \frac{\tanh \beta + A}{1 + A \tanh \beta} \right),$$

$$h_{j-1/2}^{\text{R, THINC}} = \bar{u}_{\min} + \frac{\bar{u}_{\max}}{2} (1 + \theta A),$$

其中

$$A = \frac{\exp[\theta\beta(2C-1)]/\cosh\beta-1}{\tanh\beta},$$

$$C = \frac{\bar{u}_i - \bar{u}_{\min} + \epsilon}{\bar{u}_{\max} + \epsilon},$$

这里  $\epsilon=10^{-13}$ , 防止  $C$  的分母为 0。注意到 THINC 重构是基于积分均值重构半点值, 所以 WENO 重构中的  $h(x)$  可以取为 THINC 函数重构计算数值通量。

$$\hat{f}_{j+1/2,m}^{\text{THINC}} = \begin{cases} \hat{f}_{j+1/2,m}^{+\text{THINC}} = h_{j+1/2}^{\text{L,THINC}}, & f'_{j+1/2} \geq 0, \\ \hat{f}_{j+1/2,m}^{-\text{THINC}} = h_{j+3/2}^{\text{L,THINC}}, & f'_{j+1/2} < 0. \end{cases}$$

如果  $\hat{f}_{j+1/2}^{\text{THINC}}$  通量满足定理 1, 且比 WENO 通量更接近有限顺风通量, 则说明  $\hat{f}_{j+1/2}^{\text{THINC}}$  在能够保持数值格式稳定的同时, 比 WENO 通量数值耗散更小, 即新的数值通量取为,

$$\hat{f}_{j+1/2}^c = \begin{cases} \hat{f}_{j+1/2}^{+, \text{WENO}}, & \text{if } (\hat{f}_{j+1/2}^{+, \text{WENO}} - \hat{f}_{j+1/2}^{\text{L, THINC}})(\hat{f}_{j+1/2}^{+, \text{WENO}} - \hat{f}_{j+1/2}^{\text{L, THINC}}) > 0 \\ \hat{f}_{j+1/2}^{+, \text{L, THINC}}, & \text{else.} \end{cases}$$

### 3 数值算例

#### 3.1 Euler 方程

##### 3.1.1 Sod 问题

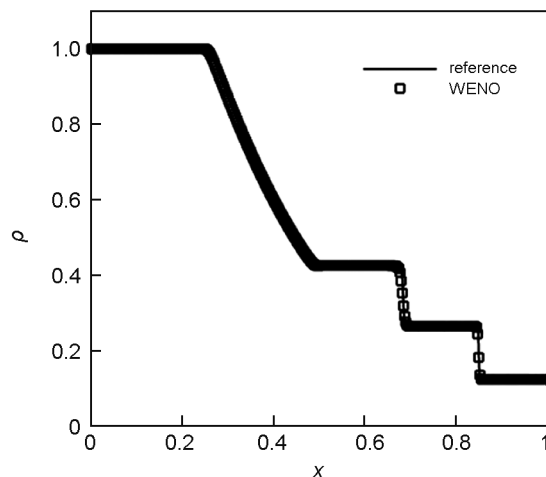
Sod 问题包含稀疏波、接触间断和激波三个典型结构, 是测试激波捕捉格式的经典问题。计算区域为  $[0, 1]$ , 使用  $N=200$  均匀网格, 计算终止时间为  $t=0.2$ , 左右边界条件为出流边界条件, 初值设置为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1.000, 0.0, 1.0), & 0.0 \leq x \leq 0.5, \\ (0.125, 0.0, 0.1), & 0.5 < x < 1.0. \end{cases}$$

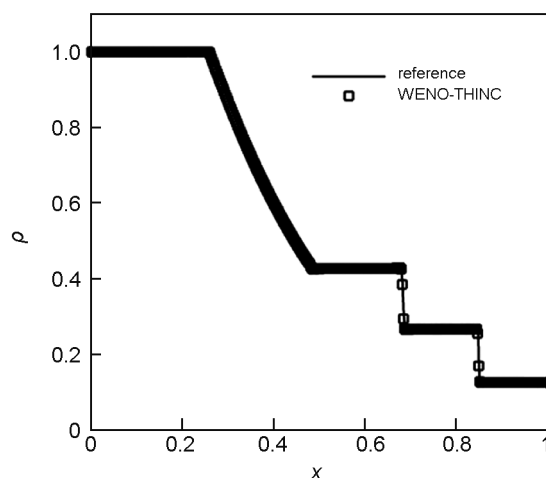
图 1 对比了使用五阶 WENO 格式和 WENO-THINC 有限顺风格式计算的密度结果, 其中精确解是使用五阶 WENO 格式在 1 000 个均匀网格上计算得到的。可以看出五阶 WENO 格式在接触间断处至少有 5 个过渡单元, 而 WENO-THINC 有限顺风格式只有两个过渡单元, 这说明 THINC 重构结合有限顺风修正能够显著提高接触间断的分辨率。

##### 3.1.2 Lax 问题

Lax 问题包含强接触间断和强激波结构, 能够测试数值格式捕捉强间断的能力。计算区域



(a) 五阶WENO格式



(b) WENO-THINC有限顺风格式

图 1 Sod 问题的压力计算结果

Fig. 1 Calculation pressure results of Sod problem

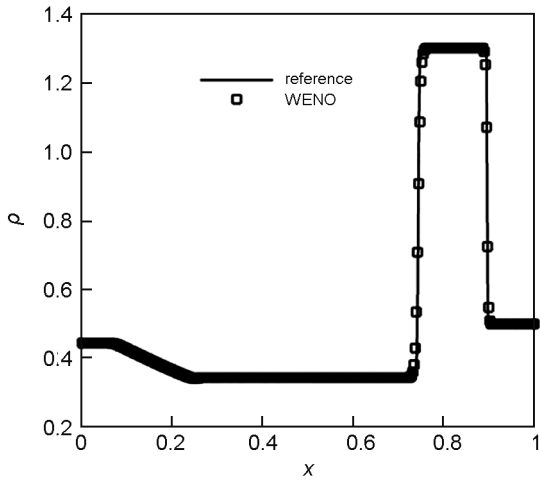
为  $[0, 1]$ , 使用  $N=200$  均匀网格, 计算终止时间为  $t=0.16$ , 左右边界条件为出流边界条件, 初值设置为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (0.445, 0.698, 3.528), & 0.0 \leq x \leq 0.5, \\ (0.500, 0.000, 0.571), & 0.5 < x \leq 1.0. \end{cases}$$

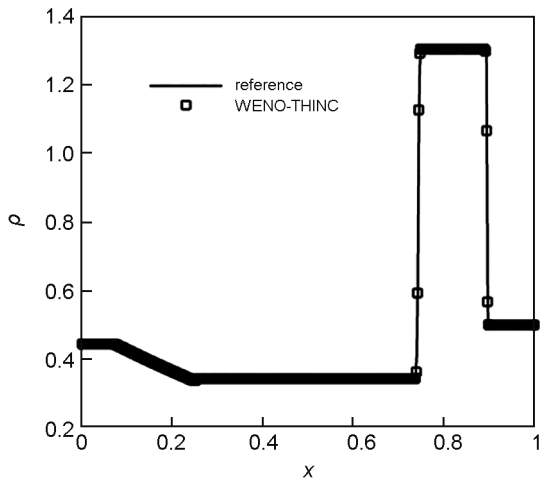
图 2 对比了使用五阶 WENO 格式和 WENO-THINC 有限顺风格式计算的密度与压力结果, 其中精确解是使用五阶 WENO 格式在 1 000 个均匀网格上计算得到的。从图中可以看出 WENO-THINC 有限顺风格式分辨强间断也只需要 2~3 个网格, 分辨率远高于 WENO 格式。

##### 3.1.3 Blast 冲击波问题

Blast 冲击波问题包含两个相向运动的冲击波, 能够检测强激波相互作用以后的复杂流场。计算区域为  $[0, 1]$ , 使用  $N=400$  均匀网



(a) 五阶WENO格式



(b) WENO-THINC有限顺风格式

图2 Lax问题的压力计算结果

Fig. 2 Calculation pressure results of Lax problem

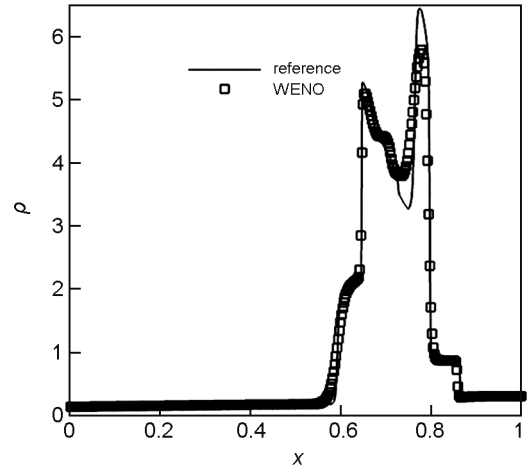
格,计算终止时间为  $t=0.038$ ,左右边界条件为反射边界条件,初值设置为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1.0, 0.0, 1.000), & 0.0 \leq x \leq 0.1, \\ (1.0, 0.0, 0.010), & 0.1 < x \leq 0.9, \\ (1.0, 0.0, 100.0), & 0.9 < x \leq 1.0. \end{cases}$$

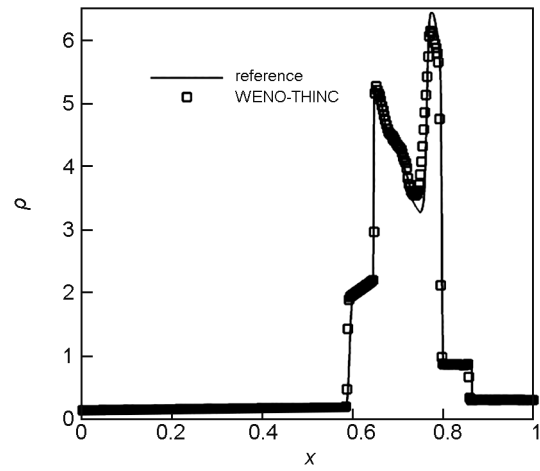
图3对比了使用五阶WENO格式和WENO-THINC有限顺风格式计算的密度结果,其中精确解是使用五阶WENO格式在2000个均匀网格上计算得到的。该算例结果说明WENO-THINC有限顺风格式计算极端问题时能够抑制非物理振荡,保持数值格式的稳定性,同时大幅提高数值格式对间断分辨率。

### 3.1.4 二维Riemann问题

本例我们对比WENO格式和WENO-THINC有限顺风格式求解二维问题的能力。二



(a) 五阶WENO格式



(b) WENO-THINC有限顺风格式

图3 Blast问题的压力计算结果

Fig. 3 Calculation pressure results of Blast problem

维黎曼问题是测试数值格式计算高维问题的经典算例,把  $[0, 1] \times [0, 1]$  的计算区域分为四部分,分别赋予不同的初始条件,计算区域边界为出流边界条件,所有算例网格数均为  $400 \times 400$ 。计算开始后,根据初始条件的不同,会形成激波(S)、稀疏波(R)和接触间断(J),Schulz给出了19种组合,为测试数值格式模拟二维间断问

$$(\rho, u, v, p) = \begin{cases} (1.0, 0.75, -0.5, 1.0), & 0.5 \leq x \leq 1.0, 0.5 \leq y \leq 1.0, \\ (2.0, 0.75, 0.5, 1.0), & 0.0 \leq x < 0.5, 0.5 \leq y \leq 1.0, \\ (1.0, -0.75, 0.5, 1.0), & 0.0 \leq x < 0.5, 0.0 \leq y < 0.5, \\ (3.0, -0.75, -0.5, 1.0), & 0.5 \leq x \leq 1.0, 0.0 \leq y < 0.5. \end{cases}$$

图4展示的是  $t=0.25$  时刻密度云图,该组初值的解包含四个接触间断。显然,在相同网格、相同等值线的情形下,WENO-THINC有限顺风格式计算得到的接触间断的厚度小于传统

五阶 WENO 有限差分格式,说明 WENO-THINC 有限顺风格式对间断的高分辨率依然适用于高维问题。

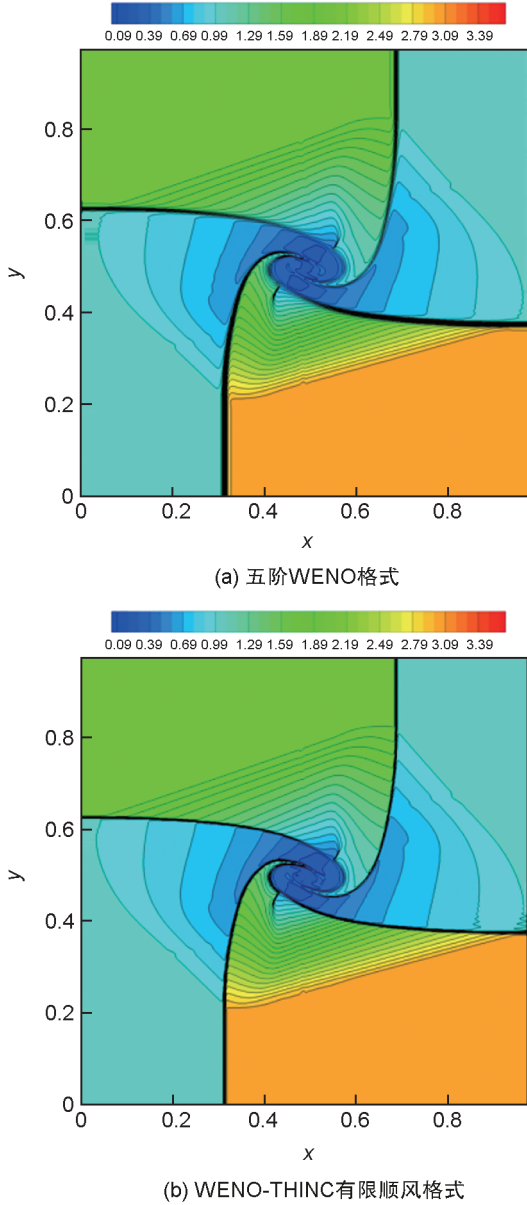


图4 密度云图

Fig. 4 Density clouds

### 3.2 反应Euler问题

#### 3.2.1 一维稳定爆轰波(Arrhenius 反应速率)

考虑一维一步化学反应 Euler 方程,反应源项为

$$\omega = -K_0 \exp\left(-\frac{T_{\text{ign}}}{T}\right) \rho Y,$$

其中  $K_0=16\ 418$ ,  $T_{\text{ign}}=25$ , 计算区域右端为未燃气体,状态为

$$(\rho_u, u_u, p_u) = (1.0, 0.0, 1.0),$$

左端为 C-J 爆轰产物,计算区域为  $[0, 30]$ , 初始间断位于  $x=10$ , 左边界为入流边界条件,入流状态即为反应产物的状态,右边界为出流边界条件,计算终止时间为  $t=1.8$ 。

计算结果如图 5 所示,其中实线是精确解,为五阶 WENO 格式使用  $N=10\ 000$  个网格的计算结果,虚线和空心三角为  $N=300$  个网格下使用五阶 WENO 和 WENO-THINC 有限顺风格式的计算结果。可以发现由于五阶 WENO 格式的数值耗散的影响,在粗网格条件下,数值解的压力会出现非物理的“平台”结构,反应波的传播速度快于真实值,导致错误的质量分数间断位置。由于网格过粗,数值解不能准确求解反应区域,因此 WENO-THINC 有限顺风格式的压力曲线未出现反应区的压力峰值,但是,其数值解并未出现非物理结构,最重要的是 WENO-THINC 有限顺风格式数值耗散很小,能够准确计算间断位置。

#### 3.2.2 一维稳定爆轰波(Heaviside 反应速率)

本例考虑非 Arrhenius 形式的化学反应,其化学反应源项为

$$\omega = -\frac{1}{\epsilon} H(T - T_{\text{ign}}) \rho Y,$$

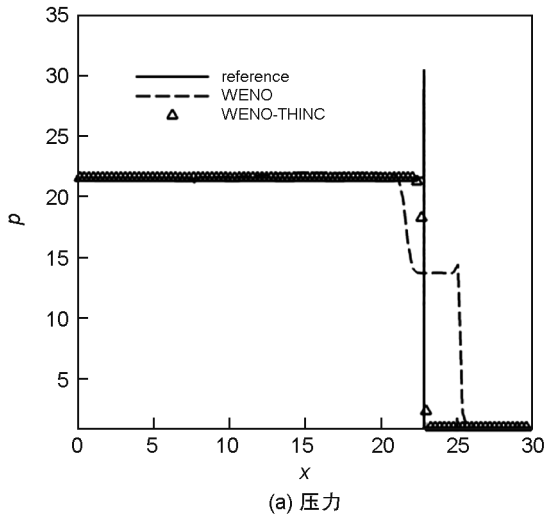
其中 Heaviside 函数为

$$H(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

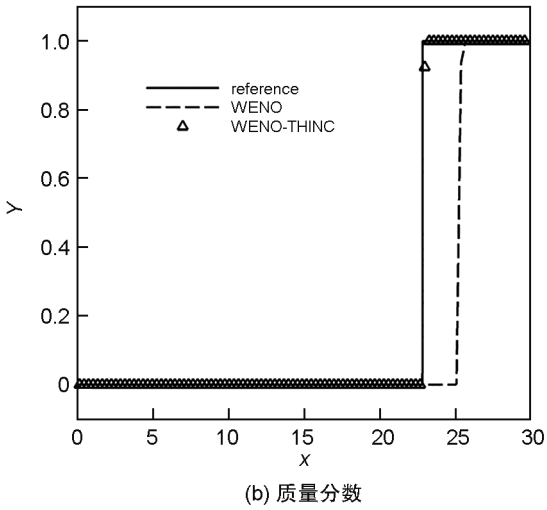
计算区域取为  $[0, 0.05]$ , 未燃气体状态为

$$(\rho_u, u_u, p_u) = (1.201 \times 10^{-3}, 0, 8.321 \times 10^5),$$

初始间断位置位于  $x=0.005$  处,计算终止时间为  $t=3 \times 10^{-7}$ 。计算结果如图 6 所示,其中实线为精确解,由五阶 WENO 格式使用  $N=4\ 000$  个网格计算得到,该算例的反应区长度约为  $5 \times 10^{-5}$ ,  $N=4\ 000$  时能够分辨化学反应区。当网格数减少到  $N=1\ 000$  时,网格大小与反应区长度一致,使用五阶 WENO 格式计算得到的结果如图 6 中虚线所示,与上例类似,压力曲线均出现非物理“平台”结构,同时爆轰波传播速度过快,间断位置计算错误。另一方面,当使用 WENO-THINC 有限顺风格式计算时,即便使用更粗的网格  $N=300$ ,也能得到正确的间断位置。



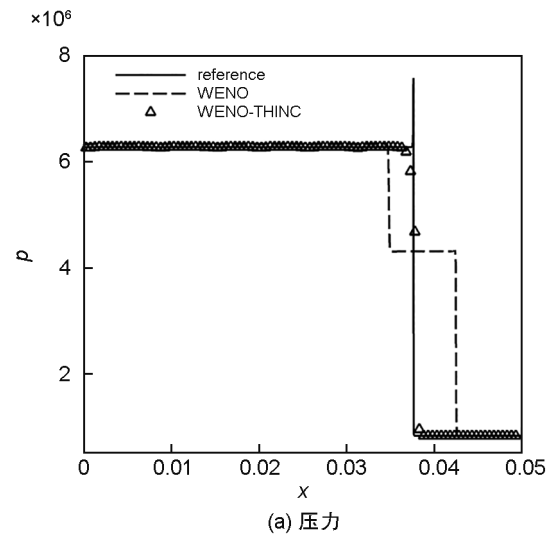
(a) 压力



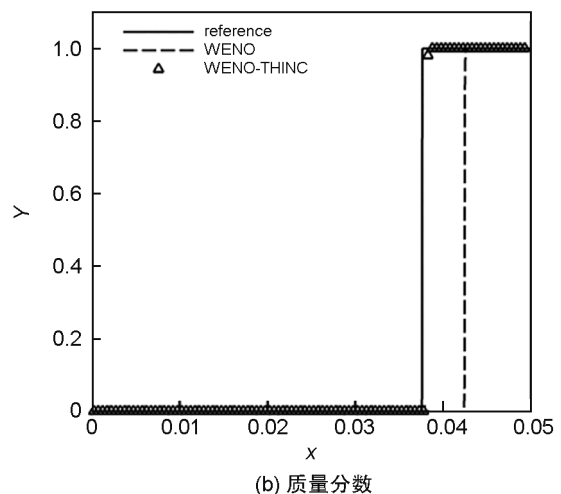
(b) 质量分数

图5 一维C-J爆轰计算结果,Arrhenius 反应速率

Fig. 5 Calculation results of one-dimensional C-J detonation (Arrhenius reation ratio)



(a) 压力



(b) 质量分数

图6 一维C-J爆轰计算结果,Heaviside 反应速率

Fig. 6 Calculation results of one-dimensional C-J detonation (Heaviside reation ratio)

3.2.3 二维稳定爆轰波(Heaviside 反应速率)

本例考虑二维 Heaviside 反应速率的 CJ 爆轰问题。模型参数与例 3.2.2 相同,计算区域设为  $[0, 0.025] \times [0, 0.005]$ , 初始条件设置为其中函数  $\varphi(y)$  为

$$(\rho, u, v, p, Y) = \begin{cases} \rho_b, u_b, 0, p_b, 0, & x \leq \varphi(y), \\ \rho_u, u_u, 0, p_u, 0, & x > \varphi(y), \end{cases}$$

$$\varphi(y) =$$

$$\begin{cases} 0.004, & |y - 0.0025| \geq 0.001, \\ 0.005 - |y - 0.0025|, & |y - 0.0025| < 0.001, \end{cases}$$

$x$  方向右边界设置为入流边界条件,左边界为出流边界条件, $y$  方向边界条件均为固壁有滑移边界条件。图 7 为  $t=0.4 \times 10^{-7}$  时刻的密度梯度云图。第一行的结果为精确解,由五阶 WE-

NO 格式使用网格  $2000 \times 400$  计算得到。第二、三行分别是 WENO-THINC 有限顺风格式和五阶 WENO 格式在粗网格 ( $400 \times 80$ ) 下的计算结果。相比于细网格下的五阶 WENO 有限差分格式的结果, WENO-THINC 有限顺风格式在粗网格下的计算结果在大流场结构上几乎相同,然而网格变粗时,五阶 WENO 会产生明显的非物理结构,在爆轰波阵面前方又出现了新的间断。图 8 展示了沿中轴线上的物理量分布,显然 WENO-THINC 有限顺风格式在网格较粗时,也能正确捕捉间断位置,同时抑制非物理振荡。

4 结论

本文针对传统五阶 WENO 有限差分格式

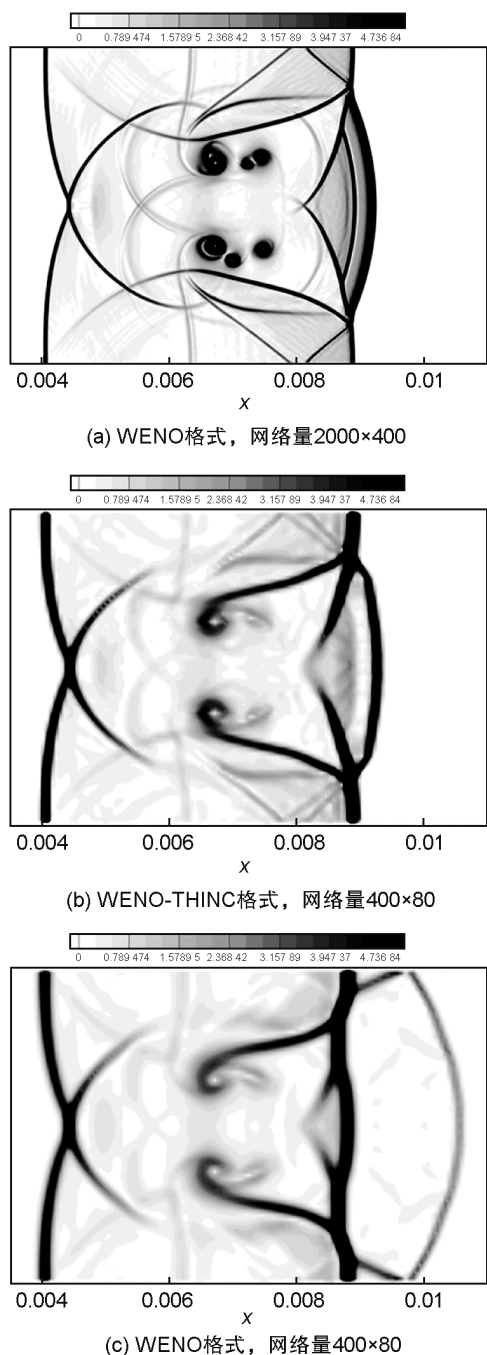


图7 二维C-J爆轰密度梯度云图,Heaviside反应速率  
**Fig. 7** Two-dimensional C-J detonation density gradient cloud image (Heaviside reation ratio)

计算接触间断数值耗散较大的不足,采用有限顺风格式的思想,结合THINC重构方法,构造了WENO-THINC有限顺风格式。数值实验表明,新的数值格式在粗网格的条件下,能够准确计算爆轰的位置,这也证明了WENO-THINC有限顺风格式具有较小的数值耗散,更加适用于气相爆轰问题的大尺度工程计算。在后续的工作中,将把本文的思想推

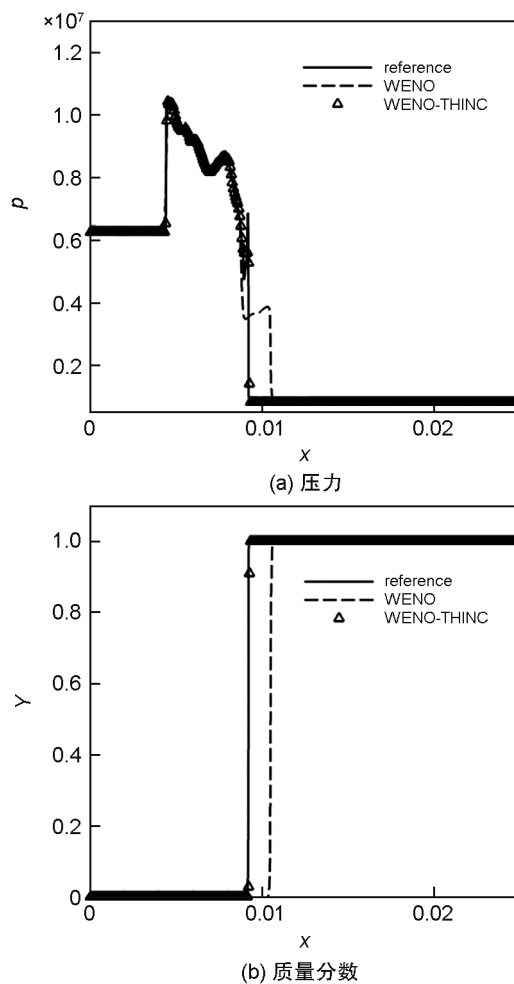


图8 二维C-J爆轰中轴线上物理量分布,Heaviside反应速率  
**Fig. 8** Physical quantity distribution on 2-D C-J detonation axis (Heaviside reation ratio)

广到扩散项计算方法中,以期在不精确求解火焰结构的前提下,获得准确的火焰传播速度,提高热扩散主导的亚声速燃烧问题的计算效率。

参考文献:

[1] JIANG G S, SHU C W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes[J]. *J Comput Phys*, 1996, **126** (1): 202-228. DOI: 10.1006/jcph.1996.0130.  
 [2] LEVEQUE R J, YEE H C. A Study of Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Source Terms[J]. *J Comput Phys*, 1990, **86**(1): 187-210. DOI: 10.1016/0021-9991(90)90097-k.  
 [3] LEVEQUE R J, SHYUE K M. One-dimensional Front Tracking Based on High Resolution Wave Propagation Methods[J]. *SIAM J Sci Comput*, 1995, **16**(2): 348-377. DOI: 10.1137/0916023.  
 [4] CHORIN A J. Random Choice Methods with Applica-

- tions to Reacting Gas Flow[J]. *J Comput Phys*, 1977, **25**(3): 253–272. DOI: 10.1016/0021-9991(77)90101-2.
- [5] COLELLA P, MAJDA A, ROYTBURD V. Theoretical and Numerical Structure for Reacting Shock Waves[J]. *SIAM J Sci Stat Comput*, 1986, **7**(4): 1059–1080. DOI: 10.1137/0907073.
- [6] HARTEN A. ENO Schemes with Subcell Resolution[J]. *J Comput Phys*, 1989, **83**(1): 148–184. DOI: 10.1016/0021-9991(89)90226-X.
- [7] CHANG S H. On The Application of Subcell Resolution to Conservation Laws with Stiff Source Terms[R]. NASA Technical Memorandum 102384, ICOMP Report, 1989: 89-27.
- [8] CHANG S H, On the Application of Subcell Resolution to Conservation Laws with Stiff Source Terms, In: Computational Fluid Dynamics Symposium on Aeropropulsion[J]. *NASA Lewis Research Center*, 1991: 215–225.
- [9] BAO W Z, JIN S. The Random Projection Method for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Reaction Terms [J]. *J Comput Phys*, 2000, **163**(1): 216–248. DOI: 10.1006/jcph.2000.6572.
- [10] BAO W Z, JIN S. The Random Projection Method for Stiff Detonation Capturing[J]. *SIAM J Sci Comput*, 2001, **23**(3): 1000–1026. DOI: 10.1137/s1064827599364969.
- [11] BAO W Z, JIN S. The Random Projection Method for Stiff Multispecies Detonation Capturing[J]. *J Comput Phys*, 2002, **178**(1): 37–57. DOI: 10.1006/jcph.2002.7016.
- [12] WANG W, SHU C W, YEE H C, *et al.* High Order Finite Difference Methods with Subcell Resolution for Advection Equations with Stiff Source Terms[J]. *J Comput Phys*, 2012, **231**(1): 190–214. DOI: 10.1016/j.jcp.2011.08.031.
- [13] WANG W, SHU C W, YEE H C, *et al.* High-order Well-balanced Schemes and Applications to Non-equilibrium Flow[J]. *J Comput Phys*, 2009, **228**(18): 6682–6702. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.05.028.
- [14] WANG W, SHU C W, YEE H C, *et al.* High Order Finite Difference Methods with Subcell Resolution for Stiff Multispecies Discontinuity Capturing[J]. *Commun Comput Phys*, 2015, **17**(2): 317–336. DOI: 10.4208/cicp.250214.130814a.
- [15] SUN Z Y, INABA S, XIAO F. Boundary Variation Diminishing (BVD) Reconstruction: A New Approach to Improve Godunov Schemes[J]. *J Comput Phys*, 2016, **322**: 309–325. DOI: 10.1016/j.jcp.2016.06.051.
- [16] DENG X, XIE B, XIAO F, *et al.* New Accurate and Efficient Method for Stiff Detonation Capturing[J]. *AIAA J*, 2018, **56**(10): 4024–4038. DOI: 10.2514/1.j056632.
- [17] DENG X, XIE B, LOUBÈRE R, *et al.* Limiter-free Discontinuity-capturing Scheme for Compressible Gas Dynamics with Reactive Fronts[J]. *Comput Fluids*, 2018, **171**: 1–14. DOI: 10.1016/j.compfluid.2018.05.015.
- [18] DENG X, SHIMIZU Y, XIAO F. A Fifth-order Shock Capturing Scheme with Two-stage Boundary Variation Diminishing Algorithm[J]. *J Comput Phys*, 2019, **386**: 323–349. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.02.024.
- [19] DENG X, JIANG Z, VINCENT P, *et al.* A New Paradigm of Dissipation-Adjustable, Multi-Scale Resolving Schemes for Compressible Flows[J]. *J Comput Phys*, 2022, **466**: 111287. DOI: 10.1016/j.jcp.2022.111287.
- [20] XIE B, DENG X, XIAO F. Compact Multi-Stage Reconstruction Method on Polyhedral Unstructured Grids: Extension to Higher-order Finite Volume Scheme[J]. *Comput Fluids*, 2022, **240**: 105436. DOI: 10.1016/j.compfluid.2022.105436.
- [21] 肖锋. 基于BVD原理的高保真空间重构方法[J]. *空气动力学学报*, 2021, **39**(1): 125–137. DOI: 10.7638/kqdlxxb-2020.0150.
- XIAO F. High-fidelity Numerical Methods Based on Boundary Variation Diminishing Principle[J]. *Acta Aerodyn Sin*, 2021, **39**(1): 125–137. DOI: 10.7638/kqdlxxb-2020.0150.
- [22] DESPRÉS B, LAGOUTIÈRE F. Contact Discontinuity Capturing Schemes for Linear Advection and Compressible Gas Dynamics[J]. *J Sci Comput*, 2001, **16**(4): 479–524. DOI: 10.1023/A: 1013298408777.
- [23] BOUCHUT F. An Antidiffusive Entropy Scheme for Monotone Scalar Conservation Laws[J]. *J Sci Comput*, 2004, **21**(1): 1–30. DOI: 10.1023/B: JOMP.0000027953.74841.8c.
- [24] XU Z F, SHU C W. Anti-diffusive Flux Corrections for High Order Finite Difference WENO Schemes[J]. *J Comput Phys*, 2005, **205**(2): 458–485. DOI: 10.1016/j.jcp.2004.11.014.
- [25] XIAO F, HONMA Y, KONO T. A Simple Algebraic Interface Capturing Scheme Using Hyperbolic Tangent Function[J]. *Int J Numer Methods Fluids*, 2005, **48**(9): 1023–1040. DOI: 10.1002/fld.975.