

第 2 章 数值模拟方法介绍

2.1 计算模型与控制方程

本论文的主要研究问题是超声速欠膨胀热射流的数值模拟，采用的物理模型中，喷口为圆形喷口。为了计算以及网格划分的便利，我们采用圆柱形的计算域，并采用柱坐标进行运算。计算模型的横截面如图 2.1 所示。

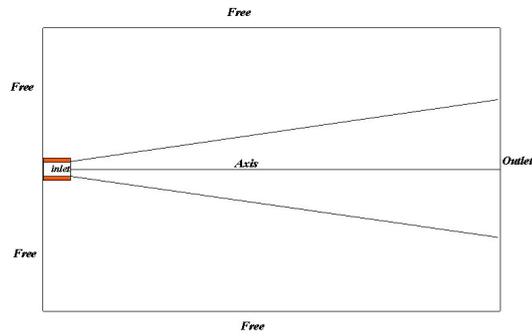


图 2.1 计算域截面示意图

根据此计算模型，由于超声速射流问题中三维效应十分明显，为了保证计算的准确性，不能简单地采用轴对称的欧拉方程进行计算，故本文选择采用柱坐标下的三维 N-S 方程作为控制方程。

另外，由于超声速欠膨胀热射流问题是一个湍流问题，本文选择采用大涡模拟的方式来进行方程的过滤，从而完成热射流问题的数值模拟，研究其流场特征及声学特征。

2.1.1 柱坐标下无量纲化的 N-S 方程

柱坐标下的 N-S 方程写成分量形式如下^[32]：

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rw)}{\partial r} = 0 \quad (2-1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{v}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + w \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{r^2 \partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial u}{r \partial r} \right) + f_x \quad (2-2a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + w \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{vw}{r} = -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \nu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{r^2 \partial \theta^2} + \frac{1}{r \partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{2}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} - \frac{v}{r^2} \right] + f_\theta \quad (2-2b)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{v}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + w \frac{\partial w}{\partial r} - \frac{v^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{r^2 \partial \theta^2} + \frac{1}{r \partial r} \left(r \frac{\partial w}{\partial r} \right) - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{w}{r^2} \right] + f_r \quad (2-2c)$$

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{v}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + w \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \Phi + \kappa \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{r^2 \partial \theta^2} + \frac{1}{r \partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right] \quad (2-3)$$

$$\Phi = 2\mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{r \partial \theta} + \frac{w}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial r} \right)^2 \right] + \mu \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{r \partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial w}{r \partial \theta} - \frac{v}{r} \right)^2 \right] \quad (2-4)$$

为了保证数值模拟结果的普适性和一般性，我们将柱坐标下的 N-S 方程做无量纲化处理，参考物理参数如下所示：

$$L \sim D, U \sim a_a, T \sim D/a_a, \rho \sim \rho_a, p \sim \rho_a a_a^2, \mu \sim \mu_a$$

由此，可以得到各个物理参数的无量纲形式，具体如下所示：

$$x = \frac{x^*}{D}, r = \frac{r^*}{D}, t = \frac{t^*}{D/a_a}, \rho = \frac{\rho^*}{\rho_a}, u = \frac{u^*}{a_a}, v = \frac{v^*}{a_a}, p = \frac{p^*}{\rho_a a_a^2}, \text{Re} = \frac{\rho_a a_a}{\mu_a}$$

由此，可以推导出无量纲化的 N-S 方程，为了数值计算的需要，本文中采用向量守恒形式的方程，如下所示^[1]：

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial(E - V_x)}{\partial x} + \frac{\partial(F - V_\theta)}{r \partial \theta} + \frac{\partial(G - V_r)}{\partial r} + S = 0 \quad (2-5)$$

其中，各大写字母都代表一个向量，其具体表达式如下所示：

$$\begin{aligned}
U &= \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u u + p \\ \rho v u \\ \rho w u \\ \rho h u \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u v \\ \rho v v + p \\ \rho w v \\ \rho h v \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho u w \\ \rho v w \\ \rho w w + p \\ \rho h w \end{pmatrix} \\
V_x &= \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{\theta x} \\ \tau_{rx} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{\theta x} + w\tau_{rx} - q_x \end{pmatrix}, \quad V_\theta = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{x\theta} \\ \tau_{\theta\theta} \\ \tau_{r\theta} \\ u\tau_{x\theta} + v\tau_{\theta\theta} + w\tau_{r\theta} - q_\theta \end{pmatrix} \\
V_r &= \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xr} \\ \tau_{\theta r} \\ \tau_{rr} \\ u\tau_{xr} + v\tau_{\theta r} + w\tau_{rr} - q_r \end{pmatrix}, \quad S = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho u w - \tau_{xr} \\ 2(\rho v w - \tau_{\theta r}) \\ -\rho v v + \tau_{\theta\theta} + \rho w w - \tau_{rr} \\ \rho h w - (u\tau_{xr} + v\tau_{\theta r} + w\tau_{rr} - q_r) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3} \frac{\mu}{\text{Re}} \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial r w}{r \partial r} - \frac{\partial v}{r \partial \theta} \right)$$

$$\tau_{x\theta} = \tau_{\theta x} = \frac{\mu}{\text{Re}} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{r \partial \theta} \right)$$

$$\tau_{xr} = \tau_{rx} = \frac{\mu}{\text{Re}} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial r} \right)$$

$$\tau_{\theta\theta} = \frac{2}{3} \frac{\mu}{\text{Re}} \left(2 \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial r w}{r \partial r} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\mu}{\text{Re}} \frac{2w}{r}$$

$$\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = \frac{\mu}{\text{Re}} \left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial w}{r \partial \theta} - \frac{v}{r} \right)$$

$$\tau_{rr} = \frac{2}{3} \frac{\mu}{\text{Re}} \left(2 \frac{\partial r w}{r \partial r} - \frac{\partial v}{r \partial \theta} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\mu}{\text{Re}} \frac{2w}{r}$$

$$q_r = -\frac{\mu}{\text{Re Pr}(\gamma-1)} \frac{\partial T}{\partial r}$$

$$q_x = -\frac{\mu}{\text{Re Pr}(\gamma-1)} \frac{\partial T}{\partial x}$$

$$q_\theta = -\frac{\mu}{\text{Re Pr}(\gamma-1)} \frac{\partial T}{\partial \theta}$$

此外，为了保证方程的封闭性，还需添加气体状态方程以及粘性系数所满足的

Sutherland 方程，形式如下所示^[1]：

$$T = \frac{\gamma P}{\rho} \quad (2-6)$$

$$\mu = T^{3/2} \frac{1+C}{T+C}, C = \frac{110.4}{T_a} \quad (2-7)$$

至此我们得到一个完整的流体力学控制方程，数学模型基本建立。

2.1.2 大涡模拟方法

对于超声速欠膨胀热射流，湍流数值模拟的基本方法包括雷诺平均方法（RANS）、直接数值模拟方法（DNS）和大涡模拟方法（LES）。其中，DNS 方法计算量过大，仅在一些特殊情况下（如射流启动问题^[23]）下使用。

RANS 方法与 LES 方法相比，其计算量较小，对于大部分的工程问题乃至科学问题，其计算精度和准确性都能满足设计要求。但是，由于超声速欠膨胀热射流问题是一个非定常流动问题，需要做较为精细的声学分析，而 RANS 方法是基于雷诺平均计算的，其计算所得的流场为短时平均场，在一定程度上会影响流场的非定常效应^{[1][4]}。因此，本文选择使用大涡模拟（LES）方法进行计算。

LES 方法的基础思想^[33]是使用一个空间滤波函数，对原方程中各个守恒量进行空间过滤，将原 N-S 方程分离成大尺度下的大涡模拟方程和小尺度下的亚格子模式。之后，直接数值求解大尺度下的方程，而将小尺度运动简化为一个固定的运动模式（即亚格子模式），在大涡模拟方程中体现为一个作用源项。

LES 空间滤波的基本形式如(2-8)所示，其中 $G(x, \xi)$ 为滤波函数，其满足关系式(2-9)：

$$\bar{f}(x, t) = \int_{\Omega} G(x, \xi) f(\xi, t) d\xi \quad (2-8)$$

$$\int_{\Omega} G(x, \xi) = 1 \quad (2-9)$$

为了书写方便，记：

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (2-10)$$

对(2-5)式中各项均进行空间滤波，可以得到如下形式的大涡模拟方程^[1]：

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{E} - \bar{V}_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{F} - \bar{V}_\theta)}{r \partial \theta} + \frac{\partial (\bar{G} - \bar{V}_r)}{\partial r} + \bar{S} = 0 \quad (2-11)$$

其中，各项参数的具体表达形式如下所示：

$$\bar{U} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{e} \end{pmatrix}, \quad \bar{E} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{u} + \tilde{p} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{u} \\ \bar{\rho} \tilde{w} \tilde{u} \\ \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u} \end{pmatrix}, \quad \bar{F} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v} + \tilde{p} \\ \bar{\rho} \tilde{w} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{v} \end{pmatrix}, \quad \bar{G} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{w} \tilde{w} + \tilde{p} \\ \bar{\rho} \tilde{h} \tilde{w} \end{pmatrix}$$

$$\bar{V}_x = \begin{pmatrix} 0 \\ \widetilde{\tau_{xx}} + \overline{\sigma_{xx}} \\ \widetilde{\tau_{\theta x}} + \overline{\sigma_{\theta x}} \\ \widetilde{\tau_{rx}} + \overline{\sigma_{rx}} \\ \tilde{u} (\widetilde{\tau_{xx}} + \overline{\sigma_{xx}}) + \tilde{v} (\widetilde{\tau_{\theta x}} + \overline{\sigma_{\theta x}}) + \tilde{w} (\widetilde{\tau_{rx}} + \overline{\sigma_{rx}}) - (\bar{q}_x + Q_x) \end{pmatrix},$$

$$\bar{V}_\theta = \begin{pmatrix} 0 \\ \widetilde{\tau_{x\theta}} + \overline{\sigma_{x\theta}} \\ \widetilde{\tau_{\theta\theta}} + \overline{\sigma_{\theta\theta}} \\ \widetilde{\tau_{r\theta}} + \overline{\sigma_{r\theta}} \\ \tilde{u} (\widetilde{\tau_{x\theta}} + \overline{\sigma_{x\theta}}) + \tilde{v} (\widetilde{\tau_{\theta\theta}} + \overline{\sigma_{\theta\theta}}) + \tilde{w} (\widetilde{\tau_{r\theta}} + \overline{\sigma_{r\theta}}) - (\bar{q}_\theta + Q_\theta) \end{pmatrix},$$

$$\bar{V}_r = \begin{pmatrix} 0 \\ \widetilde{\tau_{xr}} + \overline{\sigma_{xr}} \\ \widetilde{\tau_{\theta r}} + \overline{\sigma_{\theta r}} \\ \widetilde{\tau_{rr}} + \overline{\sigma_{rr}} \\ \tilde{u} (\widetilde{\tau_{xr}} + \overline{\sigma_{xr}}) + \tilde{v} (\widetilde{\tau_{\theta r}} + \overline{\sigma_{\theta r}}) + \tilde{w} (\widetilde{\tau_{rr}} + \overline{\sigma_{rr}}) - (\bar{q}_r + Q_r) \end{pmatrix},$$

$$\bar{S} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w} - (\widetilde{\tau_{xr}} + \overline{\sigma_{xr}}) \\ 2\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} - 2(\widetilde{\tau_{\theta r}} + \overline{\sigma_{\theta r}}) \\ -\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} + (\widetilde{\tau_{\theta\theta}} + \overline{\sigma_{\theta\theta}}) + \bar{\rho} \tilde{w} \tilde{w} - (\widetilde{\tau_{rr}} + \overline{\sigma_{rr}}) \\ (\bar{e} + \bar{\rho}) h \tilde{w} - [\tilde{u} (\widetilde{\tau_{xr}} + \overline{\sigma_{xr}}) + \tilde{v} (\widetilde{\tau_{\theta r}} + \overline{\sigma_{\theta r}}) + \tilde{w} (\widetilde{\tau_{rr}} + \overline{\sigma_{rr}}) - (\bar{q}_r + Q_r)] \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\overline{\sigma_{xx}} &= -(\overline{\rho uu} - \overline{\rho \tilde{u}\tilde{u}}), \overline{\sigma_{x\theta}} = -(\overline{\rho uv} - \overline{\rho \tilde{u}\tilde{v}}), \overline{\sigma_{xr}} = -(\overline{\rho uw} - \overline{\rho \tilde{u}\tilde{w}}) \\
\overline{\sigma_{\theta x}} &= -(\overline{\rho vu} - \overline{\rho \tilde{v}\tilde{u}}), \overline{\sigma_{\theta\theta}} = -(\overline{\rho vv} - \overline{\rho \tilde{v}\tilde{v}}), \overline{\sigma_{\theta r}} = -(\overline{\rho vw} - \overline{\rho \tilde{v}\tilde{w}}) \\
\overline{\sigma_{rx}} &= -(\overline{\rho wu} - \overline{\rho \tilde{w}\tilde{u}}), \overline{\sigma_{r\theta}} = -(\overline{\rho wv} - \overline{\rho \tilde{w}\tilde{v}}), \overline{\sigma_{rr}} = -(\overline{\rho ww} - \overline{\rho \tilde{w}\tilde{w}}) \\
Q_x &= \frac{1}{\gamma-1}(\overline{\tilde{\rho}u\tilde{T}} - \overline{\tilde{\rho}\tilde{u}\tilde{T}}), Q_\theta = \frac{1}{\gamma-1}(\overline{\tilde{\rho}v\tilde{T}} - \overline{\tilde{\rho}\tilde{v}\tilde{T}}), Q_r = \frac{1}{\gamma-1}(\overline{\tilde{\rho}w\tilde{T}} - \overline{\tilde{\rho}\tilde{w}\tilde{T}})
\end{aligned}$$

其中， $\overline{\sigma}$ 和 Q 分别称为亚格子应力项和亚格子热通量项，这两项显示了大尺度运动和亚格子尺度运动的动量和能量输运过程，即小尺度运动对大尺度运动的作用源项^[33]。

2.1.3 亚格子应力模式

根据湍流中的基本涡粘假设^[33]，可以写出亚格子应力以及热通量的本构方程表达式，如下：

$$\overline{\sigma_{ij}} = 2\mu_R \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \overline{\sigma_{kk}} \delta_{ij} \quad (2-12)$$

$$Q_{ij} = -\frac{\mu_R}{(\gamma-1)\text{Pr}_R} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (2-13)$$

其中， μ_R 为亚格子尺度下的涡粘系数， \tilde{S} 为空间过滤后的流场应变率张量， Pr_R 为亚格子尺度下的普朗特数。

为了确定小尺度运动对大尺度的作用源项，我们需要规定一个亚格子尺度的运动模式，即规定 μ_R 的表达形式。这种表达形式成为亚格子模式^[33]。

常用的亚格子模式包括 Smagorinsky 模式、尺度相似模式、混合模式、动力模式、理性亚格子模式 (CZZS 模式) 等等^[33]。本文中，我们选取最简单的 Smagorinsky 模式，该模式下涡粘系数表达式如下^[33]：

$$\mu_t = \overline{\rho} (C_s \Delta)^2 \sqrt{2\overline{\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}} \quad (2-14)$$

其中， C_s 称为模式常数， Δ 为过滤尺度，在本文中即为网格尺度。

假设 Δ 处于惯性子区中，则通过推导，可以得出模式常数 C_s 的值^[33]：

$$C_s = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{3C} \right)^{3/4} \approx 0.18 \quad (2-15)$$

由于网格的各向异性，在壁面附近，该模式常数计算误差较大。Scotti 等人^[34]

基于各向异性网格的耗散作用，在壁面附近使用近壁阻尼函数进行修正，即：

$$l_s = C_s \Delta \left(1 - e^{-y^+/A^+}\right) \quad (2-16)$$

其中，

$$A^+ = 26, y^+ = \text{Re} \cdot y \cdot \frac{u_\tau}{v_w}, u = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}}$$

该亚格子模式的优势在于形式简单，易于计算，但只能反映亚格子尺度向大尺度运动的耗散，不能反映能量反传，计算耗散较大^[33]。

2.2 计算网格设计与生成

根据本文数值模拟问题的需要，需要在射流核心区，即喷口平面附近以及射流中轴线附近，得到更为精确的流场数据，尤其是在可能存在射流剪切层的喷口边缘处。因此，较为合理的网格生产方式是轴向网格在喷嘴出口平面处加密，径向网格在喷嘴内环平面处加密，中轴线附近也适当加密。

为了计算效率与精确性，本文计算网格使用柱坐标下的结构网格，其生成方法参照了崔新光的论文^[35]，并根据本文的特点和要求做了一定形式上和参数上的修改。本文计算网格的坐标变换表达式如下所示：

网格轴向坐标变换表达式^[35]：

$$\begin{cases} x = x_1 - \left(\beta_1 + 1 - 2\beta_1 \frac{A_1}{1 + A_1} \right) h_1, 0 \leq \xi \leq \xi_1 \\ x = x_1 + a(\xi - \xi_1)^3 + \frac{b}{2}(\xi - \xi_1)^2 + c(\xi - \xi_1), \xi_1 < \xi \leq \xi_2 \end{cases} \quad (2-17)$$

式 2-17 中， ξ_1 、 ξ_2 分别为计算空间内喷嘴出口平面的轴向坐标和计算域远场平面的轴向坐标， β_1 为控制网格加密程度的变量，当 β_1 逐渐趋近于 1 时，计算网格逐步向射流喷口平面集中加密。

A_1 、 b_1 表达式如下所示：

$$A_1 = b_1^{1-(\xi_1-\xi)}, b_1 = \frac{\beta_1 + 1}{\beta_1 - 1}$$

为了满足计算网格的连续性，其余参数表达式如下^[35]：

$$a = -\frac{\frac{b}{2}\left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{17}\right)^2 - c(\xi_2 - \xi_1) - H_1}{\left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{17}\right)^3},$$

$$b = -2\beta_1 h_1 (\ln b_1)^2 \frac{b_1(b_1 - 1)}{(b_1 + 1)^3},$$

$$c = 2\beta_1 h_1 \ln b_1 \frac{b_1}{(b_1 + 1)^2}$$

网格径向坐标变换表达式^[35]:

$$\begin{cases} r = h_2 - \left(\beta_2 + 1 - 2\beta_2 \frac{A_2}{1 + A_2} \right) h_2, 0 \leq \eta \leq \eta_1 \\ r = h_2 + a(\eta - \eta_1)^3 + \frac{b}{2}(\eta - \eta_1)^2 + c(\eta - \eta_1), \eta_1 < \eta \leq \eta_2 \end{cases} \quad (2-18)$$

式 2-18 中, η_1 、 η_2 为计算空间内喷嘴出口内环曲面的径向坐标和计算域远场曲面的径向坐标, β_2 为控制网格加密程度的变量, 当 β_2 逐渐趋近于 1 时, 计算网格逐步向喷嘴内环曲面集中加密。

A_2 、 b_1 表达式如下所示:

$$A_2 = b_2^{1-(\eta_1 - \eta)}, b_2 = \frac{\beta_2 + 1}{\beta_2 - 1}$$

为了满足计算网格的连续性, 其余参数表达式如下^[35]:

$$a = -\frac{\frac{b}{2}\left(\frac{\eta_2 - \eta_1}{3}\right)^2 - c(\eta_2 - \eta_1) - H_2}{\left(\frac{\eta_2 - \eta_1}{3}\right)^3},$$

$$b = -2\beta_2 h_2 (\ln b_2)^2 \frac{b_2(b_2 - 1)}{(b_2 + 1)^3},$$

$$c = 2\beta_2 h_2 \ln b_2 \frac{b_2}{(b_2 + 1)^2}$$

式 2-17、2-18 中, 参数 x_1 、 h_1 、 h_2 、 H_1 、 H_2 均为喷嘴和计算域相关的几何参数。其中 x_1 为喷嘴长度, h_1 为喷嘴外环半径, h_2 为喷嘴内圈半径, H_1 为轴向远场

边界与喷嘴的距离， H_2 为圆柱计算域半径。本文中，这些几何参数设置如下：

$$x_1 = 2, h_1 = 2, h_2 = 0.5, H_1 = 30, H_2 = 9.5$$

其余参数均为网格密度调整参数，本文中设置如下：

$$\xi_1 = 1, \xi_2 = 18, \eta_1 = 1, \eta_2 = 4$$

经过验证，可知上述计算网格坐标变换公式满足导数连续性条件，即其一次导数连续可导、二次导数连续的条件^[35]。

本文研究问题的计算域为圆柱形计算域，其横截面示意图如图 2.2 所示

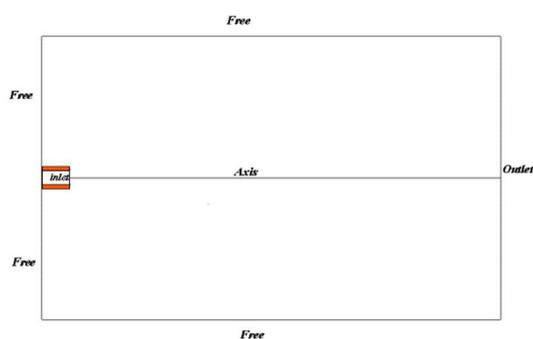


图 2.2 计算域截面示意图

使用上述网格生成方法，生成了如图 2.3 所示的网格示意图。为了展示清晰，该网格的网格数为 $180 \times 16 \times 60$ ，在实际计算过程中所使用的的网格数更大。其横截面示意图如图 2.4，中心轴线附近加密区域示意图如图 2.5 所示。

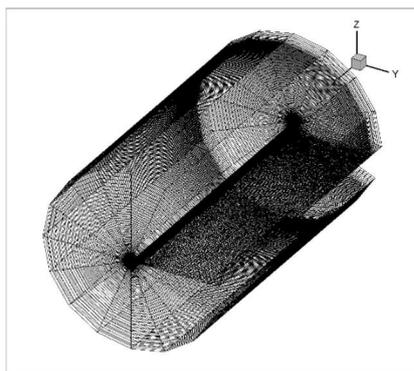


图 2.3 计算网格三维示意图

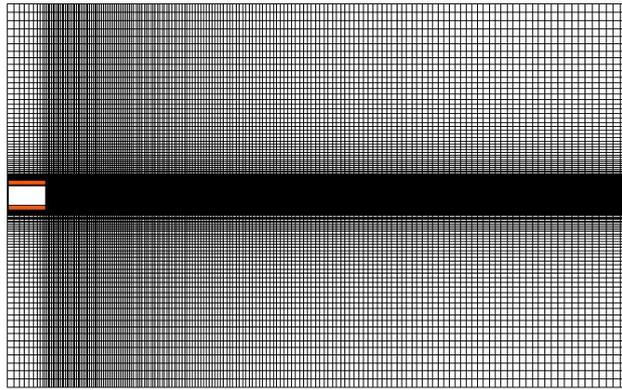


图 2.4 计算网格截面示意图

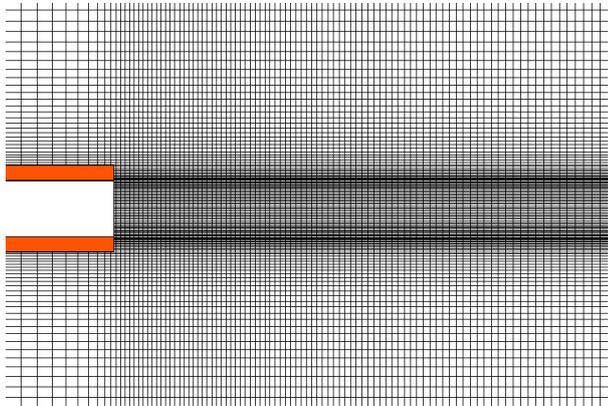


图 2.5 计算网格加密区域示意图

由上述各图中可以看出，本文使用的计算网格在射流核心区、剪切层、喷嘴平面等区域加密效果较好，符合数值模拟的计算要求。

2.3 控制方程的空间离散与时间推进方法

本文所研究流动问题的控制方程是一个向量形式的守恒方程，可以分解成为多个标量联立方程，可统一简化成如下的形式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (2-19)$$

在空间域内对 $\frac{\partial f(u)}{\partial x}$ 进行半离散分解，则式 2-19 可以写成如下的形式^[1]：

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j = -\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (2-20)$$

在大涡模拟过滤后的 N-S 方程中，需要进行空间离散的项有对流项和粘性项两部分，这两部分分别使用不同的方法进行离散。

对于对流项，本文参考了 2000 年 Dinshaw S. Balsara 等人的论文^[36]，采用七阶 WENO 格式进行空间离散，其表达式如下：

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{140} f_{j-3} + \frac{5}{84} f_{j-2} - \frac{101}{420} f_{j-1} + \frac{319}{420} f_j + \frac{107}{210} f_{j+1} - \frac{19}{210} f_{j+2} + \frac{1}{105} f_{j+3} \quad (2-21)$$

WENO 方法的基本思想是将待求参数点附近的模块点均视为候选模块点，对其进行加权组合，并进行组合重构，得到待求参数点的离散形式^{[1][36]}。

对于粘性项，本文采用简单地六阶中心差分方法进行空间离散，其表达式如下所示：

$$f'_i = \frac{1}{24\Delta x} (-f_{i+3} + 8f_{i+2} - f_{i+1} + f_{i-1} - 8f_{i-2} + f_{i-3}) \quad (2-21)$$

关于时间推进格式，由于本文研究问题计算量较大、非定常性较强，因此对时间推进稳定性的要求很高。因此，为满足稳定性要求，本文选择经典的四步三阶的 Runge-Kutta 格式^[37]来实现时间项的推进。

其具体表达式如下：

$$\begin{cases} U^{(1)} = U^n + \frac{1}{2} D_t F(U^n) \\ U^{(2)} = U^{(1)} + \frac{1}{2} D_t F(U^{(1)}) \\ U^{(3)} = \frac{2}{3} U^n + \frac{1}{3} U^{(2)} + \frac{1}{6} D_t F(U^{(2)}) \\ U^{n+1} = U^{(3)} + \frac{1}{2} D_t F(U^{(3)}) \end{cases} \quad (2-22)$$

其中，

$$F(u_i) = -\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}} \right)$$

2.4 初边值条件设置

根据本文研究问题的物理模型以及计算域设置，计算边界条件如图 2.6 所示。

由于本文研究问题没有流量要求和流域限制，因此不必设置所谓出口边界条件，计算域的边界均为远场边界条件^[4]。而喷嘴出口边界为流场的入口边界，喷嘴的表面为固壁边界。值得注意的是，由于本文控制方程是基于柱坐标下的 N-S 方程，因此无法直接计算 $r=0$ 的中轴线上数据，需要使用插值法进行计算。

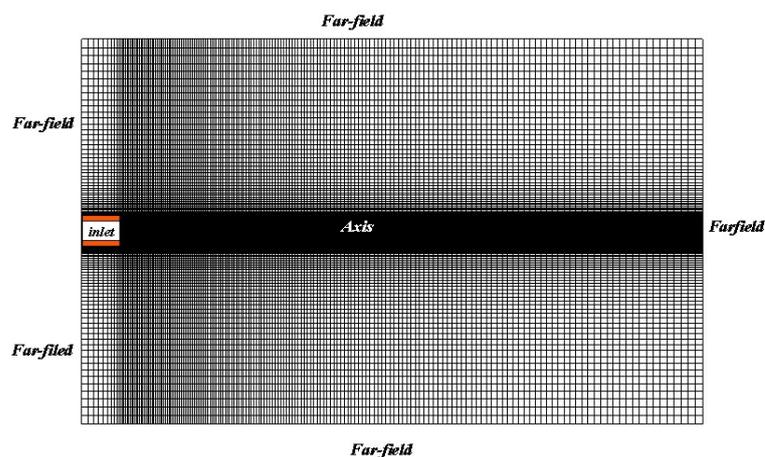


图 2.6 计算边界条件示意图

边界条件具体设置如下：

- (1) 远场边界条件：无反射边界条件。
- (2) 入口边界条件：

由于设计的喷嘴出口马赫数为 1，根据理想气体等熵关系式，可以得到马赫数为 1 的喷口处压强与总压的关系，如下所示：

$$p_e = \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} p_0 \quad (2-22)$$

再根据气体的等熵关系式以及理想气体状态方程可以推算出喷嘴出口处的密度、温度及速度，表达式如下所示

$$\rho_e = \frac{\gamma(\gamma + 1)p_e}{2T_0} \quad (2-23)$$

$$T_e = \frac{\gamma p_e}{2\rho_e} \quad (2-24)$$

$$u = \left(\frac{2T_0}{\gamma + 1} \right)^{1/2}, v = w = 0 \quad (2-25)$$

再根据增压比 $NPR = P_0 / P_a$ 的关系以及参考参数的选择, 可以得到仅和增压比 NPR、总温 T_0 相关的边界条件关系式:

$$p_e = \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} \frac{NPR}{\gamma} \quad (2-26)$$

$$\rho_e = \frac{\gamma(\gamma + 1)p_e}{2T_0} \quad (2-27)$$

$$T_e = \frac{\gamma p_e}{2\rho_e} \quad (2-28)$$

$$u = \left(\frac{2T_0}{\gamma + 1} \right)^{1/2}, v = w = 0 \quad (2-29)$$

(3) 中轴线边界条件:

由于中轴线为柱坐标下 N-S 方程的奇心轴, 故中轴线上参数需要用周围的参数插值求解。本文中, 中轴线的插值方法借鉴了 Eggels 等人的方法^[38], 具体形式如下:

$$\begin{cases} w(x, \theta_j, 0) = \hat{w}(x, \theta_j, 0) \\ \hat{w}(x, \theta_j, 0) = [w(x, \theta_j, r_1) - w(x, \theta_j + \pi, r_1)] / 2 \end{cases} \quad (2-30)$$

为保证轴线上速度的单值性, 需要对速度进行如下的坐标转化:

$$\begin{cases} w(x, \theta_j, 0) = \overline{u}_y(x) \cos \theta_j + \overline{u}_z(x) \sin \theta_j \\ v(x, \theta_j, 0) = -\overline{u}_y(x) \sin \theta_j + \overline{u}_z(x) \cos \theta_j \end{cases} \quad (2-31)$$

其中,

$$\overline{u}_y(x) = \frac{2}{N_\theta} \sum_{j=0}^{N_\theta-1} \hat{w}(x, \theta_j, 0) \cos \theta_j, \overline{u}_z(x) = \frac{2}{N_\theta} \sum_{j=0}^{N_\theta-1} \hat{w}(x, \theta_j, 0) \sin \theta_j \quad (2-32)$$

而中轴线上的其他参数均可以通过距离中轴线最近的网格点上数据进行数值平均得到。

(4) 喷嘴壁面边界条件:

喷嘴壁面为固体壁面, 假设表面绝热且粘性不可忽略, 故采用绝热固壁无滑移的边界条件条件, 满足如下关系式:

$$u=0, v=0, w=0, \frac{\partial T}{\partial n}=0 \quad (2-33)$$

另外，为使方程封闭，需要在固壁处补充压力边界条件。本文中，简单认为壁面边界上的压力与其邻近网格点上压力相等。

至此，本文研究问题的边界条件设置完备。

关于初值条件，本文假设初始场为环境流场。根据设定的参考参数，可以得到处理喷嘴出口平面外其余空间内的初始流场数据，如下所示：

$$\rho=1, p=\frac{1}{\gamma}, T=1, u=v=w=0, a=1 \quad (2-34)$$

而在喷嘴出口平面，仍然要按照边界条件的方式进行设置，具体见式 2-26~式 2-29。

2.5 计算程序结构与并行实现

由于本文研究问题为三维非定常问题，网格数较多，所需计算的时间步数也较多，采用大涡模拟的方法计算，故需求的计算量很大。因此，本文选择使用数值计算速度较快的 Fortran 语言进行编程，并采用并行计算的方式进行计算。

本文调用 MPI 函数库实现程序的并行运算。简单来说，并行计算的原理^[1]是将网格分块，各块网格数据在不同的处理器上同时进行计算，每步过后各个网格分块数据之间需要进行数据互通。由于空间离散格式的选择，每个数据块需要在每个边界网格处增加 6 个网格点用于不同网格分块内的数据交换，从而实现并行运算。

本文所使用的程序的基本结构总结如下：

- (1) 声明模块：声明网格基本参数和分区信息；
- (2) MPI 初始化模块：建立 MPI 虚拟拓扑构型；
- (3) 读写模块：读入基本参数及分区网格参数；
- (4) 初值模块：流场赋初值，并将参数转化到计算空间内；
- (5) 转化模块：将非守恒参数转化为守恒参数；
- (6) 时间推进模块：将方程空间离散，并使用 Runge-Kutta 方法实现时间推进；
- (7) 边值模块：使用插值法计算边界条件；
- (8) 转化模块：将参数转化为非守恒物理参数，并进行 MPI 通讯；
- (9) 输出模块：输出该时刻计算结果，并进行时间推进的循环；

(10) 结束循环, MPI 关闭;

2.6 本章小结

本章介绍了本文研究问题所使用的数值方法。

首先, 本章介绍了本文所研究的计算模型, 并简要推导了研究问题的数学控制方程, 包括守恒性 N-S 方程、大涡模拟滤波以及亚格子模式的选择, 证明了本文数值模拟所选用的控制方程的合理性和高效性。

其次, 本章提出了计算所用网格的生成方法, 验证了其连续性条件, 并证明了计算网格的合理性。

再次, 本章介绍了计算所用控制方程的空间离散以及时间推进格式, 说明了所选用格式对本问题的实用性。

另外, 本章说明了本文数值模拟计算所设置的初边值条件, 推导出仅与自变量参数 (来流压比、入口总温) 相关的初边值条件。

最后, 本章简要介绍了本文计算所使用的程序结构以及并行原理。

本文将采用本章所介绍的数值计算方法对一定来流压比和入口总温的超声速欠膨胀热射流问题进行数值模拟, 对欠膨胀热射流的流场特性与声学性质做进一步研究。