PRACE INSTYTUTU LOTNICTWA
229, s. 26-36, Warszawa 2013

ZASTOSOWANIE METOD WENO DO OBLICZEŃ PROPAGACJI FALI DETONACYJNEJ

KAROL ŚWIDERSKI

Instytut Lotnictwa

Streszczenie

W pracy przedstawiono opis metody podwyższenia rzędu dokładności rozwiązania za pomocą rekonstrukcji WENO 5-tego rzędu. Na przykładzie propagacji płaskiej fali uderzeniowej w przypadku jednowymiarowym dokonano porównania rozwiązania uzyskanego metodą WENO i schematem 2-ego rzędu dokładności w czasie i przestrzeni.

WSTĘP

Hiperboliczne układy równań różniczkowych stosowane są w wielu obszarach nauki takich jak dynamika przepływów ściśliwych, modelowanie turbulencji, predykcja stanu pogody, modelowanie plazmy i wielu innych. Rozwiązania analityczne dostępne są tylko dla niewielu specjalnych przypadków i dlatego metody numeryczne muszą być stosowane w praktyce. Współczesne metody numeryczne powinny umożliwiać dokładne rozwiązanie przepływu, w którym mogą wystąpić obszary nieciągłe.

Metoda rekonstrukcji rozwiązania WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory Scheme) [1] należy do nieliniowych metod interpolacji. Jej największą zaletą jest to, że powstały przez rekonstrukcję rozwiązania schemat numeryczny jest bezoscylacyjny – dzięki zastosowaniu nieliniowym wagom schematu interpolacji, które dodatkowo adaptują się do lokalnego rozwiązania.

METODA BILANSÓW ELEMENTARNYCH

Równania Eulera opisują ruch płynu nielepkiego, nieprzewodzącego ciepła, ściśliwego. Układ równań Eulera zawiera 5 równań nieliniowych, opisujących zachowanie masy, pędu i energii.

Dana jest domena Ω o brzegu A=∂Ω. Równania Eulera w formie całkowej zapisać można, jako:

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_{\Omega}\mathbf{U}\,d\Omega+\iint_{A}\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right)\cdot\vec{\mathbf{n}}\,dA=\mathbf{0} \tag{1}$$

gdzie $\mathbf{U} = \left[\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E\right]^T$ jest wektorem zmiennych zachowawczych (macierz stanu), a ρ gęstością, $\vec{\mathbf{V}} = \left[u, v, w\right]^T$ wektorem prędkości, $E = \rho e + \frac{1}{2}\rho\vec{\mathbf{V}}\cdot\vec{\mathbf{V}}$ energią całkowitą oraz e energią wewnętrzną. Skierowany na zewnątrz jednostkowy wektor normalny $\vec{\mathbf{n}} = \left[n_x, n_y, n_z\right]^T$ określa orientację powierzchni (brzegu) A. Tensor strumieni $\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right)$ zapisać można jako $\left[\mathbf{F}_x\left(\mathbf{U}\right), \mathbf{F}_y\left(\mathbf{U}\right), \mathbf{F}_z\left(\mathbf{U}\right)\right]$:

$$\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right) = \begin{bmatrix} \rho u & \rho v & \rho w \\ \rho u^2 + p & \rho vu & \rho wu \\ \rho uv & \rho v^2 + p & \rho vw \\ \rho uw & \rho vw & \rho w^2 + p \\ u\left(E+p\right) & v\left(E+p\right) & w\left(E+p\right) \end{bmatrix} \tag{2}$$

gdzie p jest ciśnieniem statycznym. Nielepki strumień $\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right)\cdot\vec{\mathbf{n}}$ w równaniu (1) można wyrazić jako $\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right)\cdot\vec{\mathbf{n}} = \mathbf{F}_x\left(\mathbf{U}\right)n_x + \mathbf{F}_y\left(\mathbf{U}\right)n_y + \mathbf{F}_z\left(\mathbf{U}\right)n_z$ czyli:

$$\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right)\cdot\vec{\mathbf{n}} = \begin{bmatrix} \rho\hat{u} \\ \rho\hat{u}u + pn_x \\ \rho\hat{u}v + pn_y \\ \rho\hat{u}w + pn_z \\ \hat{u}\left(E+p\right) \end{bmatrix} \tag{3}$$

gdzie $\hat{u}$ jest kontrawariancyjną składową prędkości normalną do A, zdefiniowaną jako $\hat{u} = \vec{\mathbf{V}}\cdot\vec{\mathbf{n}}$. Układ równań nie jest zamknięty i odpowiednie równanie zachowania stanu jest potrzebne. Zapewnia ono hiperboliczność układu. Dla wieloskładnikowych gazów, w których mogą zachodzić reakcje chemiczne, przyjmuje się model gazu półdoskonałego.

Aby określić metodę bilansów elementarnych równanie (1) może być rozważone dla każdej objętości kontrolnej V_i o brzegu ∂V_i:

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_{V_i}\mathbf{U}dV + \iint_{\partial V_i}\vec{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}\right)\cdot\vec{\mathbf{n}}_{ij}d\partial V_i = \mathbf{0} \tag{4}$$

Definiując średnią wartość dla każdej objętości $\bar{\mathbf{U}}_i = \frac{1}{|V_i|}\iiint_{V_i} \mathbf{U} dV$, gdzie $|V_i|$ oznacza objętość elementu V_i oraz $\partial V_i = \sum_{j=1}^{N_{fi}} S_{ij}$ gdzie N_{fi} oznacza liczbę ścianek S_{ij} elementu V_i, można sprowadzić układ równań do formy:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}_i}{\partial t} + \frac{1}{|V_i|}\sum_{j=1}^{N_{fi}} \iint_{S_{ij}} \vec{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) \cdot \vec{\mathbf{n}}_{ij} dS_{ij} = \mathbf{0} \tag{5}$$

Strumień można zapisać jako:

$$\mathbf{F}_x(\mathbf{U})n_x + \mathbf{F}_y(\mathbf{U})n_y + \mathbf{F}_z(\mathbf{U})n_z = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{F}_x(\mathbf{TU}) \tag{6}$$

gdzie $\mathbf{T}$ jest macierzą obrotu (transformacji) oraz $\mathbf{T}^{-1}$ jest jej odwrotnością:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_x & n_y & n_z & 0 \\ 0 & t_{1,x} & t_{1,y} & t_{1,z} & 0 \\ 0 & t_{2,x} & t_{2,y} & t_{2,z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{T}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_x & t_{1,x} & t_{2,x} & 0 \\ 0 & n_y & t_{1,y} & t_{2,y} & 0 \\ 0 & n_z & t_{1,z} & t_{2,z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

gdzie wektory jednostkowe $\vec{\mathbf{n}}, \vec{\mathbf{t}}_1, \vec{\mathbf{t}}_2$ tworzą ortogonalny układ współrzędnych oraz $\vec{\mathbf{n}} = \vec{\mathbf{t}}_1 \times \vec{\mathbf{t}}_2$.

Strumień wyznaczyć można aplikując macierz obrotu **T** do macierzy stanu **U** otrzymując nową macierz stanu w lokalnym układzie współrzędnych związanych z daną objętością kontrolną $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{TU}$. $\hat{\mathbf{U}}$ jest związane z nowym układem współrzędnych kartezjańskich $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ gdzie $\hat{x}$ leży na kierunku normalnym do S_{ij} i skierowany jest jak $\vec{\mathbf{n}}$ a $\hat{y}$, $\hat{z}$ położone są w kierunkach stycznych do S_{ij}.

Następnie strumień $\mathbf{F}_x(\hat{\mathbf{U}})$ może być wyznaczony i sprowadzony z powrotem do układu (x, y, z) poprzez zastosowanie odwrotnej macierzy obrotu. Równanie (5) można więc zapisać jako:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}_i}{\partial t} + \frac{1}{|V_i|}\sum_{j=1}^{N_{fi}} \iint_{S_{ij}} \mathbf{T}^{-1}\mathbf{F}_x(\mathbf{TU}) dS_{ij} = \mathbf{0} \tag{7}$$

Strumień $\mathbf{F}_x(\mathbf{TU})=\begin{bmatrix} \rho\hat{u} \\ \rho\hat{u}^2+p \\ \rho\hat{u}\hat{v} \\ \rho\hat{u}\hat{w} \\ \hat{u}(E+p) \end{bmatrix}$ można przybliżyć numerycznie jako funkcję dwu macierzy stanów $\mathbf{F}(\mathbf{TU}_L,\mathbf{TU}_R)$: $\mathbf{F}_x(\mathbf{TU})\approx\mathbf{F}(\mathbf{TU}_L,\mathbf{TU}_R)$.

W niniejszej pracy strumień numeryczny obliczony został za pomocą schematu drugiego rzędu dokładności w czasie i przestrzeni WAF (Weighted Average Flux) [2; 3] na bazie solvera HLLC (Harten-Lax-Leer-Contact) [4]. Schemat drugiego rzędu ograniczony został metodą TVD (Total Variation Diminishing). Jako funkcję limitującą przyjęto Superbee.

METODA WENO

Wartość średnia zmiennej q_i (może być zmienną zachowawczą: masa, pęd, energia lub prymitywną: temperatura, prędkość, ciśnienie) zapisana może być jako

$$q_i=\frac{1}{\Delta\xi}\int_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} q(\xi)d\xi$$

gdzie $\Delta\xi$ jest długością komórki $\Delta\xi=\xi_{i+1/2}-\xi_{i-1/2}$.

Dla uzyskania $(2r - 1)$ rzędu dokładności odwzorowania istnieje r możliwych do zbudowania ‘stencili’ (są to sąsiedztwa komórek używane do stworzenia wielomianu interpolacyjnego). Dla każdego ‘stencila’ zbudowanego z r komórek istnieje $(r - 1)$ stopnia wielomian $p_l(\xi)$, $l=0,\dots,r-1$.

Poszukiwana wartość funkcji $q(\xi)$ wyrażona jest jako kombinacja liniowa wartości wielomianów interpolacyjnych w punkcie ξ przemnożonych przez odpowiednie wagi:

$$q(\tilde{\xi})=\sum_{l=0}^{r-1} p_l(\tilde{\xi})w_l$$

Wagi $w_k=\dfrac{\alpha_k}{\sum_{l=0}^{r-1}\alpha_l}$, $\quad k=0,\dots,r-1$, gdzie $\alpha_l=\dfrac{d_l}{(\varepsilon+\beta_l)^2}$, $\quad l=0,\dots,r-1$.

Wagi d_l to dodatnie współczynniki określające udział danego wielomianu do rekonstrukcji WENO, z tym, że $\sum_{l=0}^{r-1} d_l=1$.

ε jest małą liczbą, zwykle $\varepsilon=10^{-12}$, dodawaną do mianownika, aby uniknąć dzielenia przez zero, gdy $\beta_l \equiv 0$.

β_l to tzw. funkcje gładkości określone jako:

$$\beta_l = \sum_{m=1}^{r-1} \int_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} \left(\frac{d^m}{dx^m} p_l(\xi) \right)^2 \Delta\xi^{2m-1} d\xi, \qquad l = 0,\dots,r-1$$

Rekonstrukcję należy przeprowadzić dla tzw. zmiennych charakterystycznych. W przypadku wystąpienia nieciągłości w przepływie obniża się rząd rekonstrukcji.

Na przykład dla siatki strukturalnej o równym podziale (siatka regularna) można wyprowadzić równania wielomianu interpolacyjnego WENO 5-tego rzędu aproksymującego rozwiązanie w punkcie $\left(i + \frac{1}{2} \right)^-$:

$$q^L_{i+1/2} = w_0 p_0 + w_1 p_1 + w_2 p_2,$$

gdzie p_k jest wartością ekstrapolowaną uzyskaną z uśrednienia wartości w środkach komórek w *k-tym* stencilu $S_k = (i-k, i-k+1, i-k+2)$:

$$p_0 = \frac{1}{6}(-q_{i+2} + 5q_{i+1} + 2q_i)$$

$$p_1 = \frac{1}{6}(2q_{i+1} + 5q_i - q_{i-1})$$

$$p_2 = \frac{1}{6}(11q_i - 7q_{i-1} + 2q_{i-2})$$

Współczynniki d_k wynoszą odpowiednio $d_0 = 0.3$, $d_1 = 0.6$, $d_2 = 0.1$, natomiast funkcje β_k dane są zależnościami:

$$\beta_0 = \frac{13}{12}(q_i - 2q_{i+1} + q_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3q_i - 4q_{i+1} + q_{i+2})^2$$

$$\beta_1 = \frac{13}{12}(q_{i-1} - 2q_i + q_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(q_{i-1} - q_{i+1})^2$$

$$\beta_2 = \frac{13}{12}(q_{i-2} - 2q_{i-1} + q_i)^2 + \frac{1}{4}(q_{i-2} - 4q_{i-1} + q_i)^2$$

Wartość rekonstrukcji w punkcie $\left(i - \frac{1}{2} \right)^+$: $q^R_{i-1/2} = w_0 p_0 + w_1 p_1 + w_2 p_2$ można otrzymać poprzez symetrię. Wówczas współczynniki d_k wynoszą odpowiednio $d_0 = 0.1$, $d_1 = 0.6$, $d_2 = 0.3$, a wartości p_k:

$$p_0 = \frac{1}{6}\left(11q_i - 7q_{i+1} + 2q_{i+2}\right),\ p_1 = \frac{1}{6}\left(2q_{i-1} + 5q_i - q_{i+1}\right),\ p_2 = \frac{1}{6}\left(-q_{i-2} + 5q_{i-1} + 2q_i\right).$$

Funkcje β_k pozostają nie zmienione.

Dla schematu WENO 3-ego rzędu rozwiązanie w punkcie $\left(i+\frac{1}{2}\right)^-$ można zapisać jako:

$$q^L_{i+1/2} = w_0 p_0 + w_1 p_1$$

a wartości wielomianów interpolacyjnych wynoszą:

$$p_0 = \frac{1}{2}\left(q_i + q_{i+1}\right)$$

$$p_1 = \frac{1}{2}\left(-q_{i-1} + 3q_i\right)$$

Współczynniki d_k wynoszą odpowiednio $d_0 = 2/3$, $d_1 = 1/3$, natomiast funkcje β_k dane są zależnościami:

$$\beta_0 = \left(q_{i+1} - q_i\right)^2$$

$$\beta_1 = \left(q_i - q_{i-1}\right)^2$$

W przypadku interpolacji dla $\left(i-\frac{1}{2}\right)^+$: $q^R_{i-1/2} = w_0 p_0 + w_1 p_1$ współczynniki d_k wynoszą odpowiednio $d_0 = 1/3$, $d_1 = 2/3$, a wartości p_k: $p_0 = \frac{1}{2}\left(-q_{i+1} + 3q_i\right)$, $p_1 = \frac{1}{2}\left(5q_i + q_{i-1}\right)$.

Funkcje β_k pozostają nie zmienione.

WYNIKI

Wybrano rekonstrukcję 5-tego rzędu dokładności w przestrzeni. Ze względu na występowanie w przepływie nieciągłości schemat rekonstrukcji musiał być ograniczony w pobliżu fali. Pierwsze ograniczenie obejmowało schemat WENO 3-ego rzędu dokładności. Drugie natomiast schemat MUSCL rekonstrukcji:

$$q^L_{i+1/2} = q_i + \frac{\Delta\xi}{2} S,\ q^R_{i-1/2} = q_i - \frac{\Delta\xi}{2} S.$$

S jest limitowanym odchyleniem, np. typu MINMOD:

$$S=\frac{1}{2}\left(sign\left(\Delta_{-}\right)+sign\left(\Delta_{+}\right)\right)\min\left(\left|\Delta_{-}\right|,\left|\Delta_{+}\right|\right),\ \Delta_{-}=\frac{q_i-q_{i-1}}{\Delta\xi},\ \Delta_{+}=\frac{q_{i+1}-q_i}{\Delta\xi}.$$

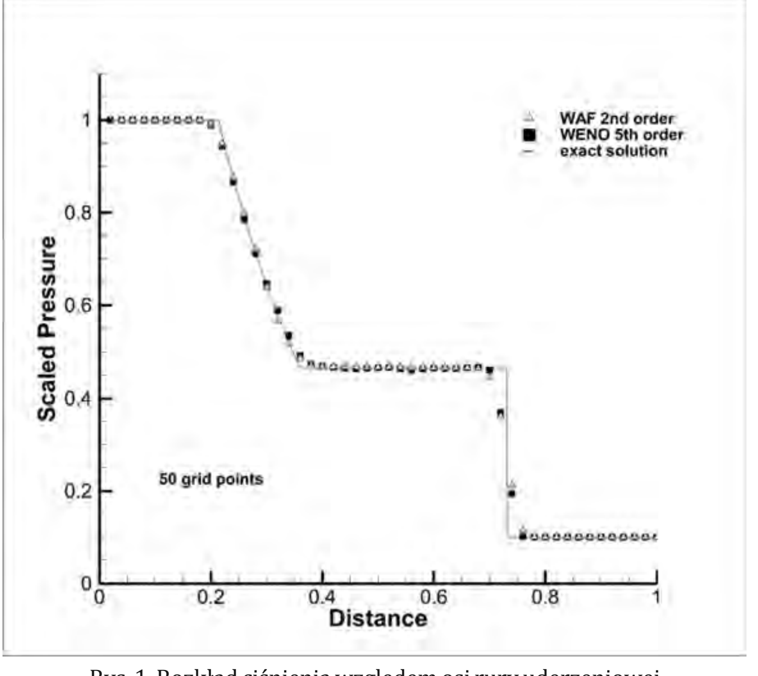
Warunkiem, który musi być spełniony aby ograniczyć rząd schematu został ustalony:

$$\left\{\left|\rho_{i+1/2}^{L}-\rho_i\right|\geq 0.9\rho_i \quad \vee \quad \left|p_{i+1/2}^{L}-p_i\right|\geq 0.9p_i\right\} \text{ dla rekonstrukcji w punkcie } \left(i+\frac{1}{2}\right)^{-}.$$

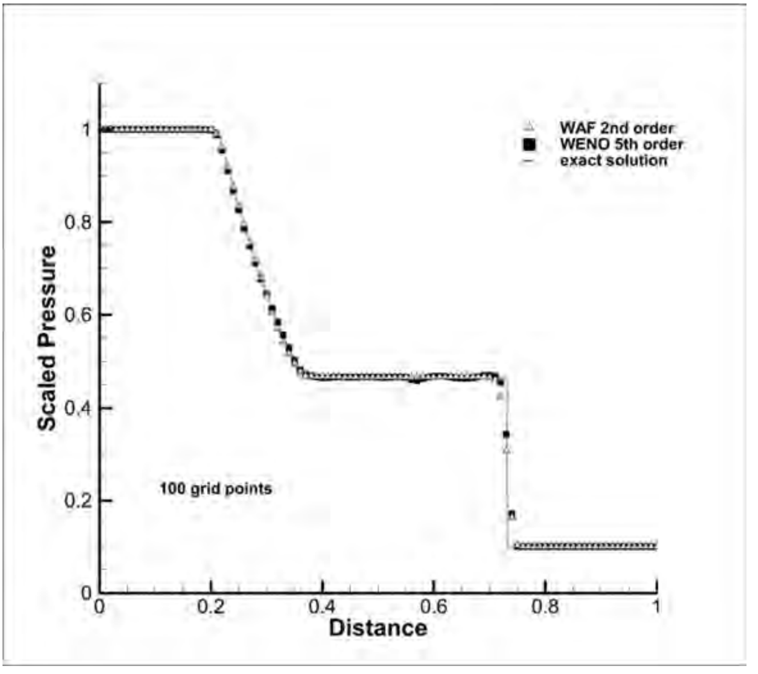
Natomiast w punkcie $\left(i-\frac{1}{2}\right)^{+}$: $\left\{\left|\rho_{i-1/2}^{R}-\rho_i\right|\geq 0.9\rho_i \quad \vee \quad \left|p_{i-1/2}^{R}-p_i\right|\geq 0.9p_i\right\}$.

Rozwiązanie bazowe (w środkach komórek obliczeniowych) otrzymano za pomocą solvera HLLC (Harten-Lax-Leer-contact) wraz ze schematem 2-ego rzędu w czasie i przestrzeni WAF (Weighted Average Flux) typu TVD (Total Variation Diminishing) z funkcją limitującą SUPERBEE. Za kroczenie w czasie odpowiadał jawny schemat Eulera 1-ego rzędu. Wszystkie powyższe metody numeryczne zostały zaimplementowane do kodu o nazwie REFLOPS1_WENO [5].

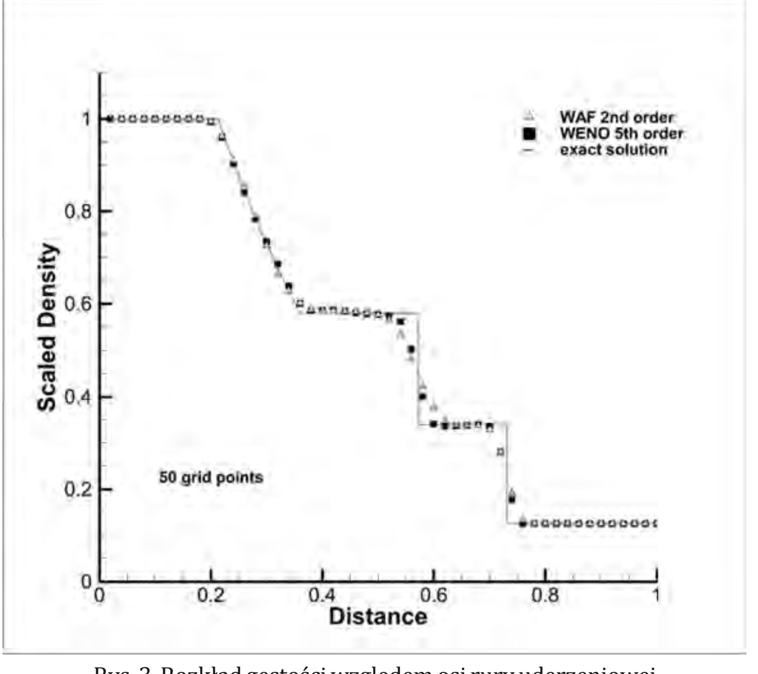
Test schematu WENO został przeprowadzony dla przypadku płaskiej fali uderzeniowej propagującej w prostym kanale zdyskretyzowanym geometrycznie za pomocą siatki regularnej. Jest to przypadek jednowymiarowy zastosowania rekonstrukcji rozwiązania metodą WENO. W chwili początkowej istnieją dwa obszary: o niskim i o wysokim ciśnieniu. Prędkości początkowe są zerowe. Po pewnym czasie tworzy się układ fal zobrazowany na rysunkach 1-6.



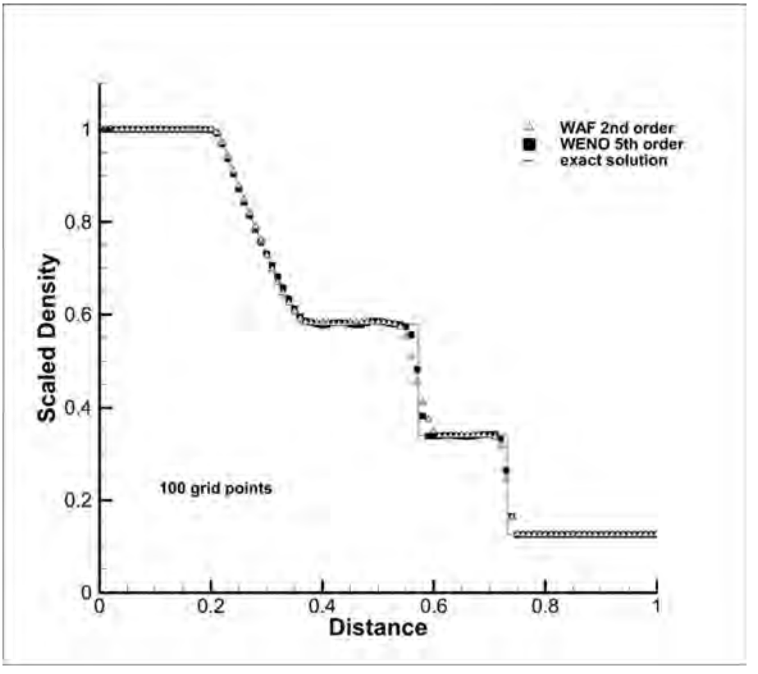
Rys. 1. Rozkład ciśnienia względem osi rury uderzeniowej dla siatki o 50 objętościach kontrolnych



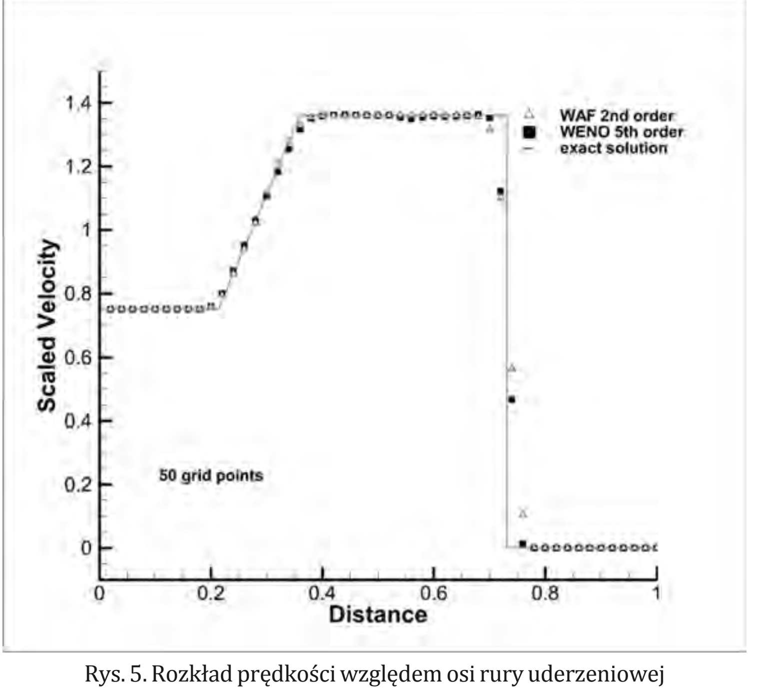
Rys. 2. Rozkład ciśnienia względem osi rury uderzeniowej
dla siatki o 100 objętościach kontrolnych



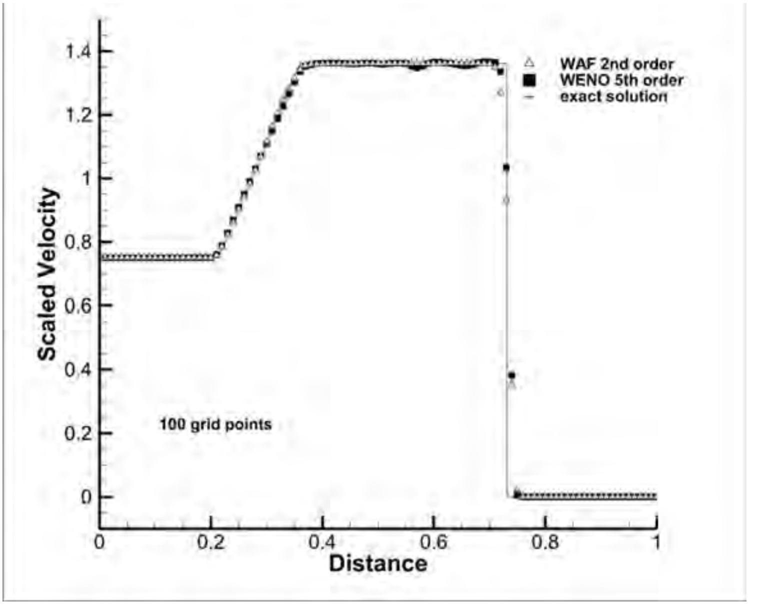
Rys. 3. Rozkład gęstości względem osi rury uderzeniowej
dla siatki o 50 objętościach kontrolnych



Rys. 4. Rozkład gęstości względem osi rury uderzeniowej
dla siatki o 100 objętościach kontrolnych



Rys. 5. Rozkład prędkości względem osi rury uderzeniowej
dla siatki o 50 objętościach kontrolnych



Rys. 6. Rozkład prędkości względem osi rury uderzeniowej
dla siatki o 100 objętościach kontrolnych

PODSUMOWANIE

Zastosowanie schematu WENO rekonstrukcji rozwiązania na siatce obliczeniowej umożliwia zwiększenie dokładności wyznaczanego strumienia numerycznego, a więc polepsza dokładność przestrzenną symulacji. W przypadku przepływów z nieciągłościami, metody WENO zmniejszają dyfuzję numeryczną rozwiązania w sąsiedztwie obszarów nieciągłych, co powoduje lepszą aproksymację fal uderzeniowych.

Metody WENO ponadto stanowią doskonałą bazę dla obecnie rozwijanych metod numerycznych typu WENO-ADER [4]. Metody te umożliwiają uzyskanie rozwiązania wysokiego rzędu w czasie i przestrzeni.

BIBLIOGRAFIA

[1] V.A. Titarev, E.F. Toro, Finite-volume WENO schemes for three-dimensional conservation laws, J. Comp. Phys. 201 (2004), pp. 238-260.
[2] E.F. Toro, A weighted average flux method for hyperbolic conservation laws, Proc. R. Soc. Lond. A 423 (1989), pp. 401-418.
[3] E.F. Toro, The weighted average flux method applied to the Euler equations, Philos. Trans. R. Soc. Lond. A 341 (1992), pp. 499-530.
[4] E.F. Toro, Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, Third edition, Springer, Berlin, 2010.
[5] M. Folusiak, K. Swiderski, Development of computer program for three-dimensional simulations of gaseous detonations on structured grids, MSc diss., Warsaw University of Technology, 2009.

THE APPLICATION OF THE WENO METHODS TO THE SIMULATION OF DETONATION WAVE PROPAGATION

Abstract

This paper describes the WENO method of the 5-th order of accuracy. A comparison between the existing solution obtained from the 2-nd order accurate in time and space scheme and the WENO solution has been made for one-dimensional blast wave propagation problem.