

密级 \_\_\_\_\_



**中国科学院大学**  
University of Chinese Academy of Sciences

## 博士学位论文

可压缩流动中间断问题的高分辨率数值求解方法及应用

作者姓名 \_\_\_\_\_ 刘利

指导教师 \_\_\_\_\_ 申义庆 研究员

\_\_\_\_\_ 中国科学院力学研究所

学位类别 \_\_\_\_\_ 理学博士

学科专业 \_\_\_\_\_ 流体力学

培养单位 \_\_\_\_\_ 中国科学院力学研究所

2017 年 4 月

Typeset by L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> at September 8, 2017

With package C<sup>A</sup>Sthesis v0.2 of C<sup>T</sup>E<sub>X</sub>.ORG

A Study of High-Resolution Algorithms  
for Discontinuous Problems in Complex  
Compressible Flows and Their Applications

By  
Li Liu

A Dissertation Submitted to  
University of Chinese Academy of Sciences  
In partial fulfillment of the requirement  
For the degree of  
Doctor of Fluid Mechanics

Institute of Mechanics  
University of Chinese Academy of Sciences

April, 2017



## 摘要

在计算流体力学研究中, 各种间断问题的高分辨率数值求解方法一直是一个重要的课题。如超声速、高超声速流动中的激波, 高速化学反应流动中的爆轰波, 多相物质间的界面等的存在, 都给数值模拟研究带来各种不同的挑战。本文正是针对求解这些问题时遇到的一些困难, 发展了相关的数值求解方法。

- (1) 激波是可压缩流动中的一个重要现象, 激波捕捉格式也经历了半个多世纪的发展。近年来, WENO 格式由于既能捕捉激波, 在光滑区有具有一致高阶的精度而得到越来越多的应用。但是, 已有的一些 WENO 格式主要是针对极值点格式精度降低的问题来进一步发展性能更好的 WENO 格式, 如 WENO-M, WENO-Z 等格式。我们针对 WENO 格式在过度点所表现的不足, 提出多步加权思想及多步加权格式 (Multistep WENO), 有效提高了 WENO 在激波附近的计算精度。除此之外, 考虑到对某些问题, 光滑区域需要更高的精度来提高短波分辨能力, 构造杂交格式是一个兼顾激波捕捉和高精度低耗散的有效手段。对于杂交格式, 如何有效识别间断是关键问题, 文中对比了现存的不同激波识别方法, 得出基于  $\tau_5$  系数的 SZ 识别方法最为有效。我们还将有限紧致格式应用在有限磁流体求解中。
- (2) 界面是性质不同于激波的另一类的间断问题, 界面广泛的存在于如燃烧室混合、射流等流动中。除了传统的无厚度的界面以外, 我们往往还需要处理超过三相以上的多相界面和存在一定界面厚度的耗散界面, 耗散界面产生的原因包括不可忽略的相间扩散、相变和化学反应等。考虑到常用的界面方法, 如 Level-Set 方法, VOF 方法等在守恒性方面和非传统型界面推广中的困难, 我们提出一种新型的粒子类界面方法—双信息保存方法。该方法的主要思想是: 在 Euler 单元内引入两类 Lagrange 信息点, 一类限制在单元内移动, 称为单元信息点, 用来传信息点和单元间信息, 另外一类全域追踪, 称为粒子信息点, 用来修正单元点更新过程中引入的误差。新的方法直接求解对流方程本身, 可以很好的模拟各类界面问题。
- (3) 在高速化学反应流动中, 爆轰波是最常见的物理现象之一, 爆轰波由诱导激波和化学反应区域构成, 而化学反应是一类耗散界面问题, 因此爆轰波

是结合了激波和界面两类间断类型的间断问题。由于化学反应（如爆轰波）和流动的尺度差距，在采用了简单的化学反应模型的计算中，经常会存在空间刚性问题，不采用界面模型的传统求解方法难以准确计算爆轰波波速甚至可能产生非物理的结构。我们将双信息保存方法应用在组分对流方程求解中，能有效避免由于数值耗散而导致的错误的化学反应激发，因而能够克服化学反应刚性问题。在采用基元反应模型的更精细的爆轰反应求解中，采用了双信息保存方法的新的求解方法可以有效保持总组分的守恒性，在总的精度方面相比于传统的求解方法同样有所很大的提高，数值结果表明所发展方法的有效性。

- (4) 本文还针对高速化学反应流动的时间刚性问题，发展了常微分方程（ODE）求解的数值摄动格式，提高了计算的稳定性和计算效率。

**关键词：** 激波捕捉格式，多步加权 WENO 格式，双信息保存方法，数值摄动方法，刚性化学反应流动

## Abstract

The numerical studies of the discontinuous problems are always one of the most important topics in the CFD field. Different challenges come from those discontinuities, such as, the shocks in the supersonic and hypersonic flows, the interfaces in the multi-component flows and the detonation wave in the high speed reaction flows. The goal of this paper is to develop corresponding numerical methods to solve some problems in simulating different types of discontinuities.

Shock is one of the main characters in the compressible flows, although the shock-capture methods have developed for nearly half a century, it is still a dramatic topic. Recent years, the weighted essentially non-oscillatory (WENO) schemes have been widely used as those schemes can capture the shocks stably and get high-order accuracy in the smooth regions. However, the existing modified schemes such as WENO-Z and WENO-M, are all constructed to obtain the optimal order at critical points, but those methods cannot obtain the optimal accuracy at the transition points, which connect a smooth region and a discontinuity. A new multi-step method is developed and a new fifth-order WENO scheme is constructed to improve the accuracy at transition points. Besides, in some problems, such as compressible turbulence flows, we need higher order accuracy in the smooth region to resolve the high frequency waves. Hybrid scheme is an ideal idea to obtain both the advantages of shock-capturing and low dissipation in the smooth regions. The key of the hybrid method is how accurately we can detect the shocks. In this paper, we compare different existing shock detectors, and get the result that the SZ detector is the most exact one. Furthermore, one kind of hybrid scheme with the use of SZ detector—finite compact scheme is extended to solve the ideal magnetohydrodynamics (MHD) equations in this paper.

Interface is another kind of discontinuity which appears in the compressible multi-component flows, such as in the mixing of the combustion chamber and jet-flows. Besides the traditional two-phases interface, in some problems we also need

to solve the interface with more than three phases or with the diffusive interface model. The diffusive interface is used when the thickness of the interface region can not be ignored such as in the cases with diffusion, phase changing or chemical reaction. Considering that, the existed interface methods such as Level-set method and VOF method are all have problems when used in the diffusive interface, in this paper, a new Euler-Lagrange method — dual information preserving (DIP) method is constructed, In the DIP method, two kinds of Lagrangian points are introduced into the Eulerian mesh, one kind of points is limited in every cell called cell-point to transmit the information between the Eulerian cells and the Lagrangian points. Another kind of point named as particle-point is traced in the whole computation to keep the accuracy and sharp outline of the surface by correcting the information of the cell-points every time step. The new method can be used in the problems with traditional interface, multi-phases interface or diffusive interface.

In the high speed reacting flows, the detonation wave is a combination phenomenon of the shock and the reaction which can be treat as a diffusive interface. With a simple reaction model, the difference in the scales between the reaction and convection may cause huge spatial stiff problems. Without a suitable method, a wrong detonation speed or unphysical wave structure may appear in the result. As the DIP method can compute the diffusive interface, in this paper, DIP method is used to restrict the incorrect reaction activation caused by the numerical dissipation. In the reacting flows with elementary reaction model, with the new method, the results also show significantly improvment in the conservation and accuracy.

In this paper, we also construct a numerical perturbation method for the ordinary difference equation(ODE) to solve the reaction flows which may has temporal stiff problem.

**Keywords:** shock-capturing scheme, interface tracking method, chemical reacting flow, numerical perturbation



# 目录

摘要 .....	i
Abstract .....	iii
目录 .....	v
第一章 引言 .....	1
1.1 本文研究的范围及其方程系统 .....	2
1.1.1 单介质 Euler 方程 .....	2
1.1.2 理想磁流体方程 .....	3
1.1.3 多介质 Euler 方程 .....	5
1.1.4 高速化学反应 Euler 方程 .....	6
1.2 可压缩流中间断问题的理论研究简介 .....	10
1.2.1 Euler 方程弱解及解存在性的研究 .....	10
1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解 .....	12
1.3 计算流体力学和数值方法发展 .....	13
1.3.1 计算流体力学简介 .....	13
1.3.2 数值方法的发展 .....	14
1.4 间断问题数值研究现状和不足 .....	19
1.4.1 激波捕捉格式和激波分辨率 .....	19
1.4.2 物质界面和界面追踪方法 .....	20
1.4.3 气相爆轰波 .....	22
1.5 本文所开展研究内容 .....	31
第二章 双信息保存方法在基元反应模型爆轰中的应用 .....	33
2.1 基元反应模型中的热力学参数 .....	33

2.2	温度求解方法 .....	34
2.3	数值算例 .....	36
2.3.1	新方法有效性的验证 .....	36
Appendix A	化学反应中相关尺度的探讨 .....	37
A.1	化学反应时间尺度分析方程和空间尺度分析方程 .....	37
A.2	尺度分析 [221] .....	39
Appendix B	二维 DIP 方法伪代码 .....	41
Appendix C	化学反应不同组分热力学拟合参数 .....	45
参考文献	.....	47

## 表格

2.1	不同 ODE 格式精度分析.....	36
C.1	不同 ODE 格式精度分析.....	46



## 插图

1.1	过渡点示意图 [243]。 .....	20
1.2	典型爆轰波压力曲线 [247] .....	23
1.3	二维胞格结构示意图 [247]。 .....	24
1.4	一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [287] .....	27
1.5	$2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [221]	29
1.6	$2H_2 + O_2 + 7Ar$ 反应不同特征值空间尺度和激波前沿距离间关系 [221] .....	30



## 第一章 引言

间断问题是计算流体力学中，乃至整个计算数学中长久存在的难点。在数学上，间断问题体现为，对流方程不存在无限可微的经典解而只能在更广义的不连续函数空间寻求弱解。弱解是普遍存在的，实际上，对于几乎所有连续力学模型都遵循的非线性双曲守恒方程的初值问题 (Cauchy 问题) 来说，即使初始值是光滑的，解在有限时间内也会发展出奇异性 [226, 255, 325]。从物理角度上看，间断体现为某些物理量在空间上的不连续性。流体力学中，间断主要体现为激波、接触间断、物质界面、爆轰（燃）波等。

激波在可压缩流体中就像衣服上的褶皱一样随处可见，是可压缩流中最主要的一类间断，所有和可压缩流动有关的问题都躲不开激波。在物理上，激波成因已经得到极为充分的研究 [197, 207]，然而更复杂的激波间或是激波与其他结构如激波/边界层、激波/界面间的相互作用等仍是当今理论研究 [14, 126, 202, 318]、实验研究 [5, 192, 275] 和数值模拟 [108, 293, 295] 的热点，有很强的工程背景。除此之外，在化学反应流中，激波和化学反应相互作用还能形成如爆燃波、爆轰波等衍生的间断类型，其中爆轰波 [90, 98, 163] 的研究在诸如发动机 [38, 39]、高能炸药爆炸 [49, 76, 163] 等诸多领域均有重要应用。

当流体中存在压强无法匹配时，根据特征线是汇聚或是发散的，会形成激波或稀疏波，当压力可以匹配而密度无法匹配时或存在不同状态的物质时，就会出现接触间断或界面 [322]，事实上界面是不同状态的物质间存在的一种特殊的接触间断类型 [53]，因此有些学者也把接触间断称为接触界面 [7, 270]。通过接触间断，压力和法向速度连续而密度、切向速度以及物质状态可能存在间断。界面问题集中体现在各种多相流研究中，是其中最为关键问题，也是难点所在。多相流在高速可压缩流动中同样有广泛应用 [35]，如空化 [23, 112, 300]、燃烧室混合 [162]、反应堆蒸汽发生器 [153] 和发电厂锅炉等方面。

激波和接触间断是孤立存在的吗？恰恰相反，可压缩多相流中广泛存在激波，而激波/界面相互作用极大增加了界面问题研究的难度 [181, 193, 230]。

## 1.1 本文研究的范围及其方程系统

本文将从数值方法角度对高速可压缩流中的各类间断问题进行较为系统的研究，其中包括先进的激波捕捉格式和激波识别方法、高精度低耗散的杂交格式及其在磁流体中的应用、界面追踪方法和刚性化学反应流及爆轰波相关研究等。

本文研究涉及四种方程系统，包括可压缩单介质理想气体、理想磁流体、存在界面的多介质流体以及存在化学反应的可压缩多组分气体混合物。下面分别给出具体的方程系统。

### 1.1.1 单介质 Euler 方程

研究各种常见单介质可压缩流动问题时，我们常采用无黏、无导热的 Euler 方程，它是 Navier-Stokes(NS) 方程的简化方程，既是 NS 方程分层次求解的一层，也能满足很多物理问题的求解要求，同时，Euler 方程研究也是其它如磁流体、多相流及化学反应流等复杂方程系统研究的基础。下面给出二维守恒型 Euler 方程：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \quad (1.1)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{pmatrix},$$

其中  $\rho$  为密度， $u$  为  $x$  方向速度， $v$  为  $y$  方向速度， $p$  是流体的压力， $E$  是总能量，对于理想气体有如下形式状态方程

$$p = (\gamma - 1)[E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2)], \quad (1.2)$$

其中  $\gamma$  为比热比。

虽然 Euler 方程形式较 NS 方程大大简化，但是采用 Euler 方程至少有四



点实际意义:

1. 可以认为 Euler 方程是 NS 方程在大雷诺数下的一种特例情况 [334]。
2. 在气体动力学中, 求解无分离流动问题时, 将无黏流动理论和边界层理论结合, 可以很好解决这类工程问题。
3. 很多流动现象的机理研究都可以采用 Euler 方程, 比如激波结构, 由于系统简单, 更容易分析和研究。
4. 由于 Euler 方程是 NS 方程的对流部分, 数值上对流部分的方法设计更为困难, 通常在 Euler 方程上设计算法, 然后推广应用在 NS 方程中。

基于这些考虑, 针对我们要研究的方法和问题来说, 本文主要采用无黏 Euler 方程系统。

### 1.1.2 理想磁流体方程

磁流体 (MHD) 在气体动力学中主要出现在如飞行器再入、燃烧室等存在等离子体的超高温情况中。理想磁流体方程是磁流体研究中最简单的模型方程, 它和 Euler 方程有类似的波动结构, 但是它同时具有非严格的双曲性质、更复杂的特征值系统和流场结构。本文并不深入研究磁流体, 只将 Euler 的数值方法推广于理想 MHD 方程求解中, 验证方法的适用性。下面给出三维理想磁流体控制方程:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = 0, \quad (1.3)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p_t - B_x^2 \\ \rho uv - B_x B_y \\ \rho uw - B_x B_z \\ (E + p_t)u - B_x(uB_x + vB_y) \\ 0 \\ uB_y - vB_x \\ uB_z - wB_x \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv - B_y B_x \\ \rho v^2 + p_t - B_y^2 \\ \rho uw - B_y B_w \\ (E + p_t)v - B_y(uB_x + vB_y) \\ vB_x - uB_y \\ 0 \\ vB_z - wB_y \end{pmatrix}, H = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw - B_z B_x \\ \rho vw - B_z B_y \\ \rho w^2 + p_t - B_z^2 \\ (E + p_t)w - B_z(uB_x + vB_y + wB_z) \\ wB_x - uB_z \\ wB_y - vB_z \\ 0 \end{pmatrix},$$

和  $p_t = p + (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)/2$ , 其中  $\mathbf{B}$  为磁场强度,  $\mathbf{E}$  为电场强度, 对于磁场有限制条件

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.4)$$

状态方程为

$$p = (\gamma - 1)[E - \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) - \frac{1}{2}(B_x^2 + B_y^2 + B_z^2)].$$

理想磁流体方程将流体看成完美的导体, 具有无限大的电导率, 并且忽略了位移电流。该方程是模拟磁流体最简化的自恰系统, 多用在研究等离子体的宏观稳定性和平衡性等方面, 尤其在磁约束核聚变中, 该方程有重要作用 [91]。

理想磁流体方程 (1.3) 和 Euler 方程 (1.1) 相比, 增加了前麦克斯韦 (Pre-Maxwell) 方程 [194], 对于一维来说特征根从 3 个增加到 7 个, 从小到大分别为

$$\lambda_{1,2,3,4,5,6,7} = u - c_f, u - c_a, u - c_s, u, u + c_s, u + c_a, u + c_f.$$

可见从原本一个声速量增加到了三个, 分别可以称为快波, 中速波 (Alfvén) 和慢波。Alfvén 波为

$$c_a = \frac{|B_x|}{\sqrt{\rho}},$$

快波和慢波为

$$c_{f,s} = \sqrt{\frac{1}{2} \left[ c^2 + b^2 \pm \sqrt{(c^2 + b^2)^2 - 4c^2 c_a^2} \right]},$$

其中  $c$  为声速,  $b^2 = \frac{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}{\rho}$ 。

对于一维方程系统来说, 如果任意  $u$  的特征根都不相同, 则认为该双曲系统为严格的双曲系统 [233], 而方程 (1.3) 中, 三个波速在特殊情况下可能等值, 因此该系统为非严格双曲 (non-strictly hyperbolic) 系统 [67, 228, 233]。

由于理想磁流体中波速更多、特征值系统更为复杂以及其非严格双曲的特性都为数值方法的构造带来很多困难, 流场中更为丰富的激波结构也对数值方法的稳定性提出考验。由于方程相似, 很多 Euler 方程求解方法都曾推广到理想磁流体方程研究中。限于主题, 本文并不对该方程系统做深入研究, 只将构造的数值方法做初步推广工作。

### 1.1.3 多介质 Euler 方程

界面问题是多介质、多相流中最基本问题, 在多介质可压缩流中同样具有重要地位, 界面出现在存在明确分界面的流体中, 本文采用无相变、无扩散的多介质 Euler 方程描述这一问题, 该方程系统也是描述界面问题的最简单系统。多介质 Euler 方程和单介质方程 (1.1) 相似, 只是增加一个标记不同介质的方程, 和界面相关的方程多采用非守恒形式,

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (1.5)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \mathbf{E} \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{pmatrix}.$$

不同介质具有不相同的状态方程形式和参数, 以两介质问题为例,

$$\begin{cases} \text{状态 1} & \text{当 } z = z_1, \\ \text{状态 2} & \text{当 } z = z_2. \end{cases} \quad (1.6)$$

本文主要研究理想气体和水, 理想气体状态方程在公式 (1.2) 中已经给出去, 水的状态方程为

$$p = (\gamma - 1)\rho e - \gamma B, \quad (1.7)$$

其中  $\gamma = 7.15$ ,  $B = 3309$ 。

该方程系统忽略了粘性、热传导以及表面张力效应, 是研究界面问题的极为简化的模型方程, 可能只在高速问题中才有定量的研究的意义, 如激波/气泡相互作用 [2, 253]、水下爆炸 [203] 等方面。但是该方程系统仍然在界面问题的数值方法研究以及定性分析等方面有广范应用。

#### 1.1.4 高速化学反应 Euler 方程

在化学反应流动中, 激波会带来新的物理问题, 如爆燃和爆轰。爆燃波和爆轰波是化学反应流中具有代表性的间断结构, 它们的相关理论、实验以及数值研究在如炸药、发动机等极多高温、高超气体动力学领域中有重要意义。本文采用如下的无粘、无传热的 Euler 反应方程系统

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S} \quad (1.8)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho z_1 \\ \rho z_2 \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \\ \rho z_1 u \\ \rho z_2 u \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} u \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \\ \rho z_1 v \\ \rho z_2 v \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} v \end{pmatrix}, \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{pmatrix},$$

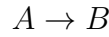
其中  $ns$  为多组分流体中的组分数,  $z_i$  和  $\omega_i$  分别为  $i$  组分质量分数和生成率。由于总的质量分数为 1, 则第  $ns$  组分为

$$z_{ns} = 1 - \sum_{i=1}^{ns-1} z_i.$$

不同的反应模型下生成率有不同形式，本文主要采用三种形式，从简单到复杂分别为固定比热比的单步总包反应模型，固定比热比的多步反应模型和变比热比的基元反应模型。

### 固定比热比单步总包反应模型

对于固定比热比的单步总包反应模型



其中 A 代表反应物，B 代表生成物，反应源项为

$$\omega_1 = -K(T)\rho z, \quad (1.9)$$

其中  $K$  为反应率可以通过 Arrhenius 率

$$K(T) = K_0 e^{-T_{ign}/T} \quad (1.10)$$

或者如下 Heaviside 率求得

$$K(T) = \begin{cases} 1/\epsilon, & T \geq T_{ign}, \\ 0, & T < T_{ign}, \end{cases} \quad (1.11)$$

其中  $K_0$  是反应率常数， $T_{ign}$  是燃点和  $\epsilon$  是反应时间。状态方程为

$$p = (\gamma - 1) \left( E - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) - \frac{1}{2} \rho u^2 - q_0 \rho z \right).$$

其中  $q_0$  为反应热。

### 固定比热比多步反应模型

对于固定比热比多步反应模型，考虑有  $ns$  组分的可逆反应

$$\sum_{i=1}^{ns} \mu'_{i,j} \chi_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{ns} \mu''_{i,j} \chi_i \quad (j = 1, \dots, nr) \quad (1.12)$$

其中  $nr$  为反应方程数，化学计量数  $\mu$  为整数， $\chi_i$  代表第  $i$  组分，上标 ' 正

向反应化学计量数， $\prime\prime$  代表反方向反应化学计量数。 $i$  组分反应率可以写成

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{nr} (\mu''_{i,k} - \mu'_{i,k}) K_k \prod_j^{ns} \left( \frac{\rho z_j}{W_j} \right)^{\mu'_{j,k}}, \quad (1.13)$$

其中  $nr$  为反应数， $W_i$  为  $i$  组分的摩尔质量，反应率  $K_i$  采用 Heaviside 形式

$$K_i(T) = \begin{cases} 1/\epsilon_i, & T \geq T_{ign}, \\ 0, & T < T_{ign}. \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, nr$$

状态方程为

$$p = (\gamma - 1) \left( E - \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) - \frac{1}{2} \rho u^2 - q_1 \rho z_1 - q_2 \rho z_2 - \dots - q_{ns} \rho z_{ns} \right). \quad (1.14)$$

其中  $q_i$  为  $i$  组分反应热。

### 多步基元反应模型

根据物理问题不同和对计算精准度要求不同，模拟可能需要了解详细的化学反应动力学过程，基元反应模型就是针对这样的要求提出的，这里的基元反应就是指反应物微粒（原子、分子、离子和自由基等）一步实现的化学变化。区别于多步简化模型，基元反应模型中的混合物各种热力学参数如焓、熵和比热比等会随着温度变化而改变。基元反应模型研究的气体对象为理想气体方程控制下的热完全气体 ( $T < 4000K$ )。关于量热完全气体 (Calorically perfect/Perfect)、热完全气体 (Thermally perfect/Semi-perfect)、理想气体 (Ideal) 和真实气体 (Imperfect) 的详细概念可以参照 [6]。

我们同样可以采用公式 (1.12) 来代表所有基元反应，其中  $ns$  代表所有反应物和三体的数目。第  $i$  组分的质量生成率为

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^{nr} (\nu''_{k,i} - \nu'_{k,i}) \left\{ K_{f,k}(T) \prod_{j=1}^{ns} \gamma_j^{\nu'_{j,k}} - K_{b,k}(T) \prod_{j=1}^{ns} \gamma_j^{\nu''_{j,k}} \right\} \quad (1.15)$$

其中， $K_{f,k}$ 、 $K_{b,k}$  分别为第  $k$  个反应的正向和逆向反应速率常数，可以通过 Arrhenius 公式求得

$$K_{f,k} = A_k T^{b_j} \exp \left( -\frac{E_{a,k}}{R_u T} \right) \quad (1.16)$$

参数  $A_k, b_k$  和  $E_{a,k}$  分别为第  $k$  个基元反应的指前因子、温度系数和活化能。逆反应速率常数  $K_{b,k}$  可以通过下面方式求得

$$K_{b,k} = \frac{K_{f,k}}{K_{c,k}}, K_{c,k} = K_{p,k} \left( \frac{p_{atm}}{R_u T} \right)^{\sum_{i=1}^{ns} (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k})} \quad (1.17)$$

其中,  $p_{atm}$  为标准大气压,  $K_{p,k}$  为压力平衡常数

$$K_{p,k} = \exp \left( \sum_{i=1}^{ns} (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) \left( \frac{S_i}{R_u} - \frac{H_i}{R_u T} \right) \right) \quad (1.18)$$

$S_k$  和  $H_k$  为  $k$  组分的摩尔熵和焓, 具体表达见正文。

热完全气体混合物遵从道尔顿分压定律, 混合气体压力等于各组分压力之和, 而各组分气体仍然满足热完全气体假设。混合气体的理想气体方程为

$$p = \rho R T = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T = \sum_{i=1}^{ns} z_i \rho_i T = \rho \frac{R_u}{\bar{W}} T \quad (1.19)$$

其中,  $\bar{W}$  为平均摩尔质量

$$\bar{W} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{ns} z_i / W_i}$$

需要注意的是, 公式 (1.19) 中的  $R$  为混合气体的特定气体常数 (Special gas constant)

$$R = \sum_{i=1}^{ns} z_i R_i \quad (1.20)$$

$R_i$  为第  $i$  个组分的气体常数

$$R_i = \frac{R_u}{W_i} \quad (1.21)$$

其中  $R_u$  为气体常数 (又被称为摩尔气体常数、普世气体常数、理想气体常数) 其值为  $R_u = 8.3144598 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$ 。每一气体组分均遵从热完全气体假设, 工程上通常采取拟合公式来得到每一组分的热力学参数, 如等压比热  $C_p$  等, 会在正文中详细说明。

## 1.2 可压缩流中间断问题的理论研究简介

随着计算机技术的发展, 数值求解已经慢慢成为研究各类方程的最主要工具。同时, 伴随着学科的细化, 数值研究和理论研究已经俨然成为两个相去甚远的方向。但是, 数学理论一直都是数值方法的源头, 也是数值研究的合理性所在。所以, 尽管本文并不开展这方面理论性研究, 然而仍有必要在引入数值方法之前简单介绍相关的数学理论的发展历史和现状。

### 1.2.1 Euler 方程弱解及解存在性的研究

Euler 方程遵循双曲守恒率, 关于非线性双曲守恒率方程的理论研究基本上是从广义函数和弱解的概念被学者们熟知后才开始。1950 年 E.Hopf [130] 给出关于 Burgers 方程的严格数学理论研究, 被认为是双曲率数学研究的奠基性工作, 这之后有了这方面一系列重要工作 [158, 159, 204–206] 等。如, 由于弱解定义不能保证问题解的唯一性, Lax [159] 和 Oleinik [204] 分别提出的保证解唯一性的熵条件。第二次世界大战中, 跨音速飞行器出现, 使人们越来越多的关注空气动力学研究及激波现象, 也推动了守恒率方程研究的发展。

理论上, 对于非线性双曲守恒率方程, 即便初值充分光滑, 在足够长的时间内, 解都会失去光滑出现奇异性, 这一现象被称为解的爆破。弱解的定义可针对于如下一般形式的双曲守恒率方程

$$u_t + \nabla_x f(u) = 0, \quad (1.22)$$

其中  $t \in R_+$ ,  $x \in R^d$ ,  $d \geq 1$ ,  $u = u(t, x) \in R^n$ ,  $n \geq 1$ ,  $f(u) = (f_i^j(u))_{n \times d}$  是  $n \times d$  的矩阵。

弱解定义 [336]: 如果可测向量函数  $u = (u^1, \dots, u^n) : \Omega \subset R_+ \times R_x^d \rightarrow R^n$  满足

1.  $u \in L_{loc}^1(\Omega)$ ,
2.  $f(u) \in L_{loc}^1(\Omega)$ ,
3. 对于所有  $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$  都满足

$$\int \int_{\Omega} u^j \phi_t + f^j(u) \cdot \Delta_x \phi dx dt = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$



则称  $u$  在分布的意义下满足双曲守恒率方程 (1.22), 或称  $u$  为方程 (1.22) 的一个弱解。其中  $R$  为实数空间,  $L_{loc}^1$  为强可测一阶可积空间 [331],  $C$  为复数空间。

然而, 由于缺乏针对于弱解有效的数学工具, 如泛函分析等常用的标准微分工具都不再奏效, 当前仅对单守恒率方程有完善的理论研究 [64, 158, 206], 而对于方程组理论的研究, 目前主要停留在一维问题, 及两方程的二维问题。研究内容也从奢求理论解转移到证明方程解的存在性及数值解的收敛性上来。目前理论研究方法主要包括 Glimm 格式 [99] 和补偿列紧理论 [323, 328]。Glimm 格式曾经是研究方程组解存在性定理的唯一方法, 1965 年 Glimm 采用该方法证明了一维单方程的一般形式下“小初值”和特殊形式下“大初值”解得存在性, 其中“小初值”指的是初始值总变差  $TV(u_0)$  充分小, 并和 Lax [101] 证明了  $2 \times 2$  方程组在严格双曲, 非线性情况下, 初始扰动充分小假设下弱解的存在性。然而该方法依然存在有很多局限性 [182]。补偿列理论在 80 年代由 Tartar 提出 [266, 267], 之后得到广泛研究和应用, 尤其在气体动力学方程中, 如 1983 年 DiPerna 等 [72], 1985 年 Ding 等人 [47, 71], 1994 年和 1996 年 Lions 等 [172, 173] 的一系列工作解决了气体动力学方程组在不同比热比  $\gamma$  下如下形式的等熵流动方程的解存在性问题。

$$\begin{cases} \rho_t + (\rho u)_x = 0, \\ (\rho u)_t + (\rho u^2 + p(\rho))_x = 0, \end{cases}$$

其中,  $p = p_0 \rho^\gamma$ 。但是我们知道, 尽管在无黏、无传热流体中, 流体穿过激波也并不是等熵过程, 虽然后续工作, 如 Huang 等人对等温过程也给出了存在性证明, 但是目前补偿列紧理论只能适用于严格双曲  $2 \times 2$  方程组

$$\begin{cases} u_t + f(u, v)_x = 0, \\ v_t + g(u, v)_x = 0. \end{cases}$$

该方法也尚不能给出 Euler 方程解存在性证明。对于高维问题, 目前是数学上的一个热点问题, 当然也是难点, 尚缺乏充分的理论结果 [211, 246, 265]。不过我们都坚信, 欧拉方程乃至 NS 方程解的存在性和唯一性终有一天都会得到完善的数学证明。

### 1.2.2 黎曼问题和 Euler 方程近似解

尽管欧拉方程的解在数学上缺乏足够的存在性证明，但是我们仍然需要通过一定方式求得它的近似解，甚至近似解本身要比解的存在性研究更为久远。我们可以一直追溯到伟大的数学家、物理学家伯恩哈德·黎曼。1858 年，黎曼 [226] 在研究激波管问题时，巧妙的构造了 Euler 方程在一组特殊初值条件下的理论解，这组初值设定为任意间断值的阶跃函数，即

$$U = \begin{cases} U_L & x < x_0 \\ U_R & x \geq x_0 \end{cases}$$

根据间断不同，黎曼构造出了四类解，分别由向前、向后稀疏波和向前、向后激波组成，并利用相平面分析方法给出了判别条件。该类 Cauchy 问题被称为黎曼问题。尽管黎曼问题在黎曼所有伟大工作中并不是那么显眼，但是该问题在求解拟线性双曲方程尤其在求解空气动力学方程中起到了第一块基石的作用 [94]，并且开创了“微分方程广义解”概念及“相平面分析”方法之先河，具有的超前性。1957 年 Lax [159, 212, 213] 对一维黎曼解存在性和唯一性给出了证明。至此，一维黎曼问题得到彻底解决，它的理论解由冲击波，中心稀疏波和接触间断三类基本波构成。

二维黎曼问题由于复杂性，到了 80 年代，甚至它问题的提法都尚未澄清。85 年，张同和郑玉玺分析最简二维模型黎曼问题，成为二维问题的一个实质性突破。1990 年他们在文献 [317] 中给出一套分析和猜想，他们假设初始间断线在  $t > 0$  时发出一道平面基本波，这样四道波相互作用会形成 16 类不同问题。随着数值计算的发展，Schulz 和 Carsten [235]，Chang [44, 45] 等，Lax 和 Liu [161] 对这一猜想进行了数值模拟，并最终将二维黎曼问题完善为 19 类。目前为止，尚没有一类情况被完善证明 [335]。

黎曼问题的重要意义并不仅在于它是对流方程的一组理论解，而在于它是构造更一般 Cauchy 问题近似解的基础，通过将一般的初值离散成有限个黎曼问题，然后采用拼接的方式得到下一时刻值的分布，以此来推进时间的发展，使得近似求解一般初值 Euler 方程乃至所有非线性对流方程成为可能。

### 1.3 计算流体力学和数值方法发展

理论研究虽然非常严谨，但是远远无法满足多变的工程需要。尤其在流体力学领域，早期工程研究主要通过实验模拟完成。随着计算机技术发展，数值研究的优点不断彰显，如，省钱、省人力、模拟更为灵活，同时能给出更为详细的计算资料，又如，数值模拟可以免受研究问题尺度、环境限制等。

#### 1.3.1 计算流体力学简介

采用数值离散逼近方法求解和研究方程原本就是数学中的常用手段，如有限差分方法早在 19 世纪前就经常用来分析方程性质。伴随着非线性双曲型守恒率方程理论的完善，以及人类计算能力的极大提高，通过数值方法求解双曲率方程成为数学研究的一大分支。尤其在流体力学研究中，通过数值方法求解流体力学控制方程已经发展成了独立且庞大的一门学科——计算流体力学 (CFD)。

学者们普遍将 1922 年 Lewis Fry Richardson 采用数值方法预测天气的工作 [224] 作为 CFD 开始的标志，在同时期，美国学者也曾采用世界上第一台通用计算机 ENIAC 进行了类似的 CFD 计算。实际上 CFD 尚未真正出现前，相关理论工作早已开始，我们上节已经讲述了大量此类工作，包括 CFD 出现后的大量工作，都可以被划归在数学范围内，我们当然也可以称它们为 CFD 的早期理论研究。如 1928 年，Coutant、Friedrichs 和 Lewy [60] 提出有限差分方法求解偏微分方程时收敛的 Courant-Friedrichs-Lewy(CFL) 条件，值得注意的是 CFL 条件只是数值解收敛的一个必要条件，并非充分条件，很多论文甚至书籍提到这项工作时会曾出现错误。

计算流体力学成为了独立学科以后，研究重点也有了很大偏移，基于其工程背景的要求，区别于数学理论研究，CFD 绝大部分工作都集中于数值方法的发展、工程应用的推广以及以 CFD 为工具的物理机理性研究上。从 70 年代开始，伴随着数值方法、模型方程、网格划分以及计算机软硬件能力不断提升，CFD 真正得到了广泛应用，从航空、气象、船舶、化工到体育、动画等等各个领域都慢慢有了 CFD 的身影。1981 年第一代商业化软件 PHONICS 出现，标志着 CFD 从科研向工程应用的延伸。进入 90 年代，一大批优秀的商业软件涌现，如 FLUENT, CFX, STAR-CD 等等，在此基础上，CFD 工程师也成为许多行业中不可或缺的角色，推动着其他相关学科的研究和工业化的发展。

### 1.3.2 数值方法的发展

流体力学方程的数值方法从大的框架可以分为有限差分法、有限体积法、有限元法、边界元法和有限分析法等。各个方法具有不同的求解区域离散方式和控制方程离散方式，具有各自的优缺点，本文采用有限差分方法。

有限差分方法使用有限个网格节点代替连续的计算域，以泰勒级数展开等方法，将控制方程中的导数用节点函数值的差商代替进行离散。有限差分方法是一种直接将微分方程变为代数问题的数值方法，直观且简单，发展较为成熟。下面简单的回顾数值方法的发展和现状。

1959 年，Godunov [102] 首先采用数值方法求解非线性偏微分方程，文中他证明，想要保持方程的解是单调的，那么线性对流格式最多只有一阶精度，同时他认为一阶迎风格式在某种意义上是最好的，并且给出了如何将迎风格式应用在线性守恒方程系统的方法。在 Godunov 的方法中，在每一个时刻，每个计算单元当成一个值，经过一个很短时间后，通过在单元交界面求解黎曼问题

$$U_0(x) = \begin{cases} U_L = U_i & x < x_{i+\frac{1}{2}} \\ U_R = U_{i+1} & x > x_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (1.23)$$

在该时间步结束时进行单元平均，可以得到新的分段的分布，以此推进方程的发展。Godunov 方法整体具有一阶精度，即便处理间断时也能得到非常稳定计算结果。

从 Godunov 之后数值方法的研究变得更为清晰，Godunov 类方法主要包括，近似黎曼求解器、空间离散方法和时间离散方法。

#### 1.3.2.1 空间离散方法

尽管 Godunov 定理将线性方法的稳定性和一阶格式紧紧的绑定，但是在西方学术圈，该研究并没有得到足够的重视，60 和 70 年代，学者们仍然试图构造了一系列更高阶的格式。P.D.Lax 和 B.Wendroff [157] 在 1960 年合作构造了二阶差分格式—Lax-Wendroff 格式，尽管该格式由于耗散不足会导致计算激波时出现严重的振荡，但是仍然具有深远影响。Lax-Wendroff 格式和它的一系列二阶、三阶改进格式 [37, 186, 229, 231] 主导了对流方程研究领域超过了 10 年之久。

直到 70 年代,才有人开始意识到 Godunov 定理的重要性并试图将其避开,这之后不到一年时间,就出现了两种无振荡的高精度对流格式,分别是 Boris 和 Book 提出的通量修正输运方法 (Flux-Corrected Transport/FCT) 方法和接下来 Van Leer 提出的 MUSCL (Monotone Upstream Scheme for Conservation Laws) 格式。FCT 方法依然采用 Lax-Wendroff 方法类似的预估-校正结构,第一步采用一阶格式预估时间发展后的解,然后在校正步通过反扩散的方式移除大量的耗散误差,达到二阶或三阶精度。在第二步,修正的通量会和临时解进行比较,并且在需要的地方进行限制,保证没有新的极值点出现也没有极值增加。其中的对比过程让该方法成为非线性方法。经过 1973 年到 1979 年的发展 [27,29,30,305], FCT 方法得到较广泛的应用,但是其并没有对后期的 Godunov 型高精度格式发展起到太大影响。同时期, Van Leer 认为振荡是由于非单调插值引起的,他继承了 Godunov 方法的特点,将单元内的常值分布变为线性分布或二次分布,然后非线性限制分布函数的一阶和二阶导数值,以此得到二阶精度的稳定 MUSCL 格式 [?, 277, 278, 280, 280, 281]。MUSCL 类格式在 80 年代继续发展并成为当时最为流行的格式。FCT 方法和 MUSCL 格式虽然相去甚远,但是它们都是通过方法中的非线性性质来防止计算中大梯度带来的数值振荡,在对流方法接下来的发展中这一特点一直得到了保存。

同一时期, Harten 在 ICASE 做访问学者,在这里他受到 Roe 关于迎风格式工作的影响 [122],他考虑到无振荡插值只适用在一维空间,所以并不太接受无振荡插值的概念。实际上,他更多的受到 Glimm 和 Lax 关于一维标量守恒方程的解的总变差是不增的这一研究结果启发 [160]。通过分析, Harten 引入离散方程的总变差作为其振荡性质的度量 [105, 118],总变差同样可以应用在更高纬度求解上。由此, Harten 提出了总变差不增 (Total-Variation-Diminishing/TVD) 方法,并推导出保证 TVD 性质的充分条件。之后学者们证明了 TVD 性质在线性方程中可以推导出单调插值条件。在当时, TVD 方法迅速成为了高精度迎风格式的代名词。

随着算法研究的发展, TVD 类格式暴露出了它们固有的不足,如无法区分激波和光滑的极值点,导致光滑区域精度过低。在不久之后, Goodman 和 LeVeque [105] 认为 TVD 在高维离散中过于呆板,导致高维 TVD 对流格式精度不会高于一阶。Harten 因此重新审视了曾被忽视的无振荡插值方面的工作,并和 Osher 合作提出了基本无振荡 (Essentially Non-Oscillatory/ENO) 格式 [120, 123]。ENO 格式的基本思想是在构造插值多项式时采用自适应选取最光



滑插值模板的方式来避免引入数值振荡。ENO 格式不再满足 TVD 性质, 允许总变差有微小的增加, 但是仍需满足总变差有界 (Total-Variation-Bounded/TVB)。

ENO 格式单一选取模板的策略虽然能够达到无振荡的目的, 然后由于光滑区模板的浪费造成精度仍然不足。1994 年 Liu 等人 [183] 提出了加权的思想, 将 ENO 的所有子模板进行凸组合加权取代原有的选取最光滑的模板的方法, 以此来构造光滑区的高精度并保持间断区域 ENO 的性质。该文章中构造了最早的三阶有限体积 WENO 格式。随后, 1996 年 Jiang 和 Shu [251] 构造了经典的五阶 WENO 格式并给出了光滑因子和非线性权重构造的基本框架。

进入新世纪, 以 WENO 格式为代表的高精度激波捕捉格式应用更为广泛, WENO 本身也在不断地发展和完善中。2005 年, Henrick [125] 指出 Jiang 和 Shu 所构造的经典的五阶 WENO 格式 (WENO-JS) 在导数为零的极值点达不到理想精度。他构造了一个映射函数来使极值点达到理想精度 (WENO-M), 在 2008 年, Borges 等人建议采用五点模板来构造高阶的光滑因子, 并发展了 WENO-Z 格式。另一方面, 更高阶的 WENO 格式也得到发展, 如七阶、九阶甚至十一阶 WENO [17, 95] 以及中心型 WENO 格式等 [169, 188]。

从以上回顾可以看出, 空间格式的研究主要关注点是保证间断稳定性情况下提高光滑区域的精度。然而, 保证稳定性, 一定数值耗散是不可避免的, 因此协调、处理这一对矛盾是格式研究发展的重点。尽管通过构造更高阶的 WENO 格式可以提高光滑区域的精度, 但在在计算如可压缩湍流等问题时, 耗散仍然可能过大不足以捕捉小尺度的快波 [144, 316]。另外, WENO 格式本身需要较高的计算量, 通过这种方式提高精度往往是得不偿失的。

目前提高光滑区精度主要有两种方法, 一种方法是借鉴有近似谱方法分辨特性的紧致格式 [164] 的优点, 构造紧致重构 WENO (CRWENO) 格式; 另一种方法是结合高精度线性格式构造杂交格式或称混合格式 (Hybrid Scheme)。CRWENO 格式的思想是将低阶紧致模板做 WENO 格式的非线性加权重构得到激波稳定的高阶紧致格式, 这部分工作主要见于文献 [70, 96, 143] 等。研究表明 CRWENO 和传统 WENO 格式相比, 的确具有更好的小尺度分辨能力 [316]。值得一提的是, 2015 年 Peng 和 Shen [214] 在 Shen 等人 [239, 243] 的多步加权 WENO 思想基础上, 构造了多步加权的 CRWENO 格式, 该格式基于紧致格式的隐式特性, 通过改善间断附近过渡点精度来改善全局精度, 取得了良好的效果。杂交格式和 CRWENO 格式相比, 由于它思想简单, 有丰富的选择, 因此应

用和研究都更为广泛。杂交格式采用间断识别方法来区分光滑区域和间断区域,然后采用激波捕捉格式和其他低耗散、计算量小的线性格式在不同区域求解,达到兼顾两者优点的目的。常用的杂交格式有混合中心-WENO 格式 [127, 147], 混合紧致-WENO 格式 [216, 223]、混合谱方法-WENO 格式 [59] 等。由于间断识别方法在杂交格式中至关重要,发展间断识别器也是杂交格式研究的一个热门领域。2006 年 Shen 和 Zha [242] 以 WENO-JS 和 WENO-Z 格式的光滑因子为基础,提出了一种无参数的间断识别方法,并且构造了有限紧致格式。

### 1.3.2.2 近似黎曼求解器

近似黎曼求解器的发展是和空间离散方法同步进行的。黎曼求解器的作用是为了解决非线性方程线性化近似的问题。在 Godunov 等的早期工作中,学者们采用基于理论解的“精确黎曼求解器”,但是这过于耗费计算量,并且和近似黎曼求解器比也并没有优势。因此,发展黎曼问题的数值解或称为“近似黎曼求解器”成为 CFD 算法研究的另一大主要方面。由于黎曼求解器主要工作就是将非线性方程分裂为正向传播和负向传播的波,以便于采用迎风格式,所以也将其称为分裂方法。分裂方法并没有和空间离散方法类似的清晰的时间脉络,种类也比较繁多,具体可以分为通量差分分裂 (flux-difference splitting)、流通矢量分裂 (flux-vector splitting)、特征重构方法和对流迎风分离压力 (Advection upstream splitting method/AUSM) 等。

通量差分分裂方法基于对精确黎曼求解器的模拟,该类方法又称为 Godunov 类方法,如最经典也最为常用的基于当地 Jacobian 矩阵线化的 Roe 求解器 [227]、基于简单波分解的 Osher 求解器 [210]、基于两波假设的 HLL 求解器 [121] 以及可以模拟接触间断的基于三波假设的 HLLC 求解器 [270]、需要迭代的双激波近似黎曼求解器 [180] 和为了避免红玉现象而提出的旋转混合求解器等。

流通矢量分裂方法基于无碰撞 Boltzmann 方程,因此该类方法也称为 Boltzmann 类方法 [122],流通矢量分裂方法将相邻单元间的分布函数进行抹平,因此较通量差分分裂有较大的误差,但是由于它们通常形式简单、易于实现,所以仍然有较多的应用。常用的流通矢量分裂方法有 Lax-Friedrichs (LF) 分裂 [158], Steger-Warming (SW) 分裂 [259] 和 Van-Leer 分裂 [282] 等。

特征分裂方法 (特征重构方法) 不同于在物理空间进行分裂的 FDS 和 FVS 方法,它的所有分裂和重构都在特征空间进行。在特征空间求得导数的近似后

再变换回物理空间。该类方法具有最好的求解质量，严格保证了局部特征方向，然而由于其过大的矩阵运算，目前仅常用在一维问题的求解中。所有流通矢量分裂的分裂方法都可以应用在特征分裂中。

对流迎风分离压力方法是从 Van Leer 分裂方法发展而来的，它们将无粘通量分裂为与特征速度相关的对流项和与特征声速相关的压力项，对其进行分别处理。该类方法兼具了 FVS 和 FDS 的一些优势，具有 FVS 的简单性和效率，又具有 FVS 的精准性，自 Liou 在 1993 年 [178] 提出以来就得到了广泛的关注和发展。目前应用较为广泛的有可以避免“Carbuncle”现象的 AUSM+ 格式 [175, 177]、激波计算稳定的 AUSMDV 格式 [284]，以及结合了它们优点的 AUSMPW [150] 和 AUSMPW+ [149] 格式。以上这些方法由于将总焓从能量方程分出，所以也可以统称为 H-CUSP (Total enthalpy convective upwind and split pressure) 方法，然而从特征值系统看的话，总焓并不能沿着传播方向保持守恒 [311, 311]，而总能却保持守恒，据此 Zha 提出了在对流项使用总能的 E-CUSP 格式 [308, 309, 312]，该格式同样具有低耗散而且更为稳定。

### 1.3.2.3 时间离散方法

在 Godunov 类方法推广开之前的 60-70 年代，学者们往往将时间和空间统一离散，如当时经典的 Lax-Wendroff 格式等，时间和空间精度也需要统一分析。随着 Godunov 类方法普及，由于它们属于半离散方法，时间离散和空间离散需要独立进行，因此对流方程的时间离散方法也得到发展。

时间离散方法其实是一个极为古老的问题，它们基本上都是来源于 20 世纪以前对如下的常微分方程的求解，

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, \quad (1.24)$$

如最早的一阶 Euler 方法 (1768 年)。1895 年 Runge 和 1900 年 Heun 尝试在 Euler 方法中增加子时间步，到 1901 年 Kutta 最终给出了显式 Runge-Kutta 方法的一般形式。隐式方法的发展同样可以追溯到 1824 年，Cauchy 为了进行误差估计，在 Euler 方法中引入中间变量，间接的构造了隐式 Euler 格式。但是直到 1955 年才由 Hammer 和 Hollingsworth 在 Radau 格式基础上构造了第一个二阶的隐式 Runge-Kutta 类格式 [111]。

Runge-Kutta 格式并不单指一种格式，而是一系列的总称，如三阶 Runge-



Kutta 就可以有无数种系数组合。1988 年, Shu [250] 根据对流方程解的 TVD 性质, 给出了一组三阶 Runge-Kutta 的系数组合, 该格式被称为 TVD Runge-Kutta 格式。TVD Runge-Kutta 格式在对流方程数值模拟中得到了广泛的应用。

## 1.4 间断问题数值研究现状和不足

在 1.2 节我们笼统的回顾了一般流体力学的数值方法, 通过这些脉络性的介绍, 我们从单介质流体力学角度了解了 Euler 方程数值求解体系的发展过程, 但是这些介绍远没有触及本文所要关注的间断问题研究现状和遇到的问题。本小结将分别介绍和总结和激波、物质界面以及爆轰波相关的研究前沿。

### 1.4.1 激波捕捉格式和激波分辨率

在 Godunov 求解体系中, 数值稳定性一直是处在第一位的。无论是早期的无振荡插值、总变差不增还是现在 WENO 格式的基本无振荡思想的提出, 都是为了保证计算的稳定性。在保证稳定性基础上, WENO 格式改进的主要工作集中在提高光滑区域的精度, 尤其关注非线性权重容易出问题的极值点。对于激波, 尽管光滑区域精度提高的确能改善激波的分辨效果, 但是这只是高精度带来的间接作用。很少有人关注改善激波区域或附近区域精度而直接改善激波的分辨率。

2014 年, Shen 和 Zha [243] 分析了现存的五阶 WENO 格式发现, 在如图 1.1 所示的连接光滑区和间断区的过渡点  $i - 1$ , 传统 WENO 格式的精度只有一阶, 激波分辨率不足可能对激波引起的分离流、激波/湍流相互作用等问题的计算结果产生影响。在该文章中, 他们在两个临近四阶模板上构造了两个四阶通量和一个光滑/间断识别器来提高过渡点精度。在更早的工作中 [245], Shen 等人曾提出多步重构的思想, 并试图用来解决传统 WENO-JS 格式的光滑因子在极值点不满足  $\beta_k = D(1 + O(\Delta x^2))$  的问题。尽管该方法并不能满足极值点五阶收敛的充分必要条件 [125], 但是多步重构的思想仍然有重要的意义。

本文基于 [243] 的研究, 给出了一种新的 WENO 格式构造方法, 该方法结合了 Henrick 的投影函数, 并通过逐阶构造的方法来提高 WENO-Z 在过渡点精度、降低耗散, 进而改善方法对于激波的分辨率, 第四章对此有详细的研究, 并通过算例验证了该方法在求解和激波相关的问题时, 的确有更好的效果。

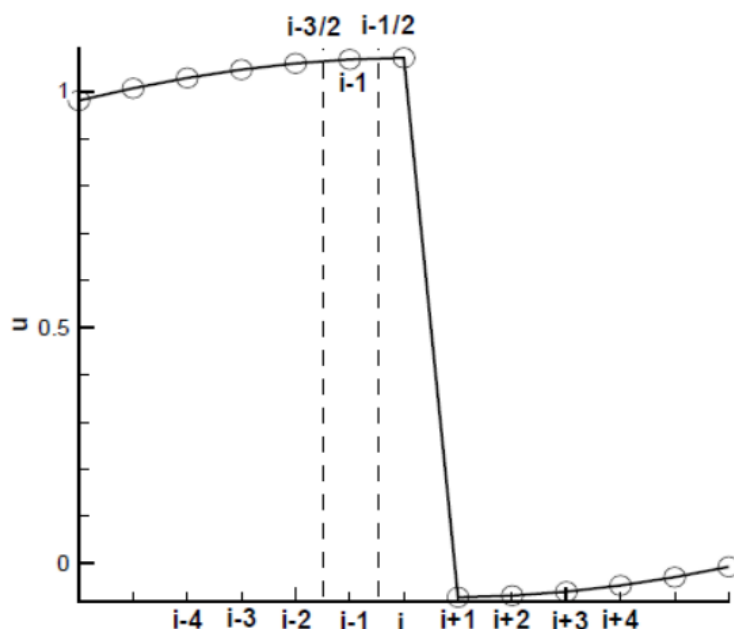


图 1.1: 过渡点示意图 [243]。

### 1.4.2 物质界面和界面追踪方法

在物理上, 界面一般定义为不同物质或物质不同物理状态间分界面。根据是否考虑界面厚度, 可以将界面分为传统界面和耗散界面两类。

#### 1.4.2.1 传统界面

虽然理论上界面存在一定厚度, 但在多相流体力学中, 由于界面真实厚度只有分子的量级, 在绝大多数模拟中, 我们将界面当成没有厚度的几何分界面, 同时忽略跨过界面的扩散作用。

我们知道, 数值耗散会抹平原本清晰的分界面, 如果想要得到准确的界面位置就需要使用界面方法或称为界面模型。目前, 尽管界面方法有多种分类方式 [274], 但是多数学者都将其分为界面追踪方法和界面捕捉方法两类 [26]。

界面追踪方法是借助拉格朗日技术, 采用运动网格或标记粒子来实时跟踪界面位置的变化。如锋面追踪(Front-tracking)方法 [69,274,276] 和标记(Marker) [219] 方法就是通过引入第二套移动网格来高准确度的给出界面位置和曲率。该类方法的难点是在于对界面破碎和合并的模拟较为复杂 [248,271]。Particle-in-

Cell (PIC) 方法 [34,116] 和 Marker-and-Cell (MAC) 方法 [189,268,269,299] 是通过在界面附近引入拉格朗日粒子, 然后追踪粒子的运动来跟踪界面位置。粒子类方法是最为古老的界面方法 [189], 但是应用非常有限, 究其原因, 计算量和存储量过大是粒子类方法的一个限制, 在流场压缩和膨胀的时候粒子点的管理是另外一个难点 [276], 除此之外, 粒子类方法还难以给出准确的几何界面线(面)。

另一类界面方法完全是基于欧拉技术, 该类方法在欧拉网格内引入界面方程的形式来定义界面的位置。最典型的方法当属水平集 (Level Set) 方法和流体体积分数 (Volume of Fluid/VOF) 法。Level Set 方法 [209,236,264] 采用一个光滑的距离函数, 用距离函数为零的位置来定义界面。自从该方法提出后, 由于它优美的数学理论、漂亮的计算结果, Level Set 方法得到极为广泛的发展和应用。当然, Level Set 也有诸多不足, 如鲁棒性差, 重新初始化计算量大, 耗散大等, 尤其被学者们诟病的是它的守恒性较其它界面方法都要更差。VOF 方法 [128,156,301] 也属于欧拉的框架, 该方法在每个单元间引入一个代表某一相流体的体积分数, 当体积分数介于 0 和 1 之间则认为该单元跨过界面, 通过捕捉体积分数来获得界面位置。不同于 Level Set 方法, VOF 方法具有精确的守恒性。该方法难点在于每一步需要有效的界面重构方法。界面重构决定于当地的体积分数和梯度方向, 界面可以通过分段线性插值得到 [232], 但该过程目前仍然过分复杂也难以取得预想的效果。

整体来讲, 界面追踪方法更直观, 在处理界面的融合和破裂时有其优势; 界面捕捉方法更易于实现, 在处理界面伴随流场压缩或膨胀时有优势 [171]。将它们彼此结合来避免它们各自的缺陷是目前一个比较流行的思路, 其中应用最多的是和粒子类方法相结合, 比如利用粒子方法的守恒性和 Level Set 方法的光滑性的粒子-水平集 (Particle Level Set) 方法 [83,84]。然而这种结合即增加了方法实现的难度, 在复杂问题时也并不那么奏效。

#### 1.4.2.2 耗散界面

通常的界面方法都不考虑界面厚度, 然而, 在研究某些物理问题, 如研究物质间的扩散、相变 (尤其对于三相点流体混合物) [135,138]、晶体生长 [58] 及化学反应等时, 界面厚度都是至关重要。这一类无法忽略厚度的界面被称为耗散界面 (diffuse interface) [?]

对于耗散界面,学者主要采用 Cahn-Hilliard 方程 [81,304] 进行模拟。模拟过渡界面的方法主要有如下几种 [137], 锋面追踪方法 [276] 在界面两侧采用光滑的分布, 所以可以追踪耗散界面, 然而这种界面厚度主要是由数值耗散造成, 并非可控的。Du 等人 [77,288] 采用三条 level set 线的方法来追踪耗散界面, 这种方式并不能得到界面内真实的分布, 只能应用在界面厚度变化不大的情况中。还有其它方法, 如连续界面力模型 (continuum surface force model) [32]、相场模型 (phase-field) [4,8] 等。

本文提出一种基于欧拉网格, 具有界面追踪思想的粒子方法—双信息保存方法 (Dual information preseving method/DIP)。该方法既可以用来追踪传统界面也可以追踪耗散界面, 模拟界面厚度变化。DIP 方法直接用来求解对流方程

$$\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \quad (1.25)$$

在该方法中, 引入两类拉格朗日信息点, 分别称为单元点 (Cell-Point) 和粒子点 (Particle-Point) 信息点, 单元点限定在单元内运动, 粒子点全计算域追踪。在计算开始, 每个单元分别在单元中心引入一个单元点和一个粒子点, 计算中根据速度场进行位置更新。

信息点并不同于 MAC 方法中的标记粒子, 也不同于 PIC 方法中携带全部流体信息的真实粒子。主要有两点区别:

1. 信息点既是虚拟例子, 又同时携带有位置信息和对流信息  $z$ 。由于单元点是虚拟的, 所以在每一步我们都可以随时生成或抹去; 信息点上携带有对流信息  $z$  又可以用来更新当地节点上的对流值。
2. 信息点是布置在全计算域的, 并不是通过追踪信息点来达到追踪界面的目的, 而是通过粒子点上的对流信息  $z$  来捕捉出界面的位置、曲率等各种信息。

该部分工作我们将在第五章进行详细探讨。

### 1.4.3 气相爆轰波

爆轰波是高速化学反应流和爆炸中常见的一类间断问题, 爆轰波的传播是物理化学强耦合过程, 是激波和化学反应系统相互作用的结果。随着爆轰波经过, 波后反应物随即发生高速的化学反应, 形成高温、高压爆轰产物并释放大

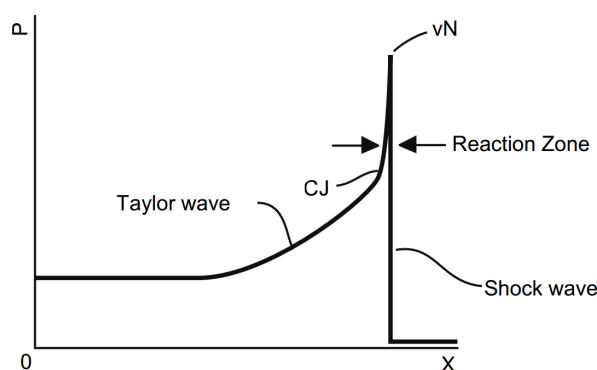


图 1.2: 典型爆轰波压力曲线 [247]

量化学反应热用以维持爆轰波的传播，这种过程称为自持爆轰。爆轰过程根据反应物状态可以分为气相、液相和固相爆轰，它们本质上是一致的，但是气相爆轰由于本身机理最为简单，研究也最为丰富，本文只涉及气相爆轰方面的研究工作。

#### 1.4.3.1 爆轰波理论

关于爆轰波的理论包括最早期的平衡爆轰 Chapman-Jouguet(C-J) [46, 146] 理论以及 ZND 理论。

C-J 理论将爆轰波模拟成一维稳态的没有厚度的强间断，反应热的释放是瞬间完成，通过爆轰波前后守恒关系式、能量方程和爆轰波稳定传播的 C-J 条件得到波后状态。C-J 理论中所有状态都是平衡态，对应的模型为无限速率反应模型，因此无法考虑爆轰波结构，也不能解释传播机理。

直到上世纪 40 年代，Zeldovich [306], Doring [75] 和 Von Neumann [283] 对 C-J 理论进行改进提出 ZND 理论。ZND 理论中，爆轰波由前导激波和被激波诱导的反应区组成，前导激波提供一个绝热压缩过程，导致反应物温度、压力升高，分子活化，这个阶段称为诱导阶段。诱导阶段过后化学反应开始，热量大量释放，产生向后膨胀作用，驱使爆轰波传播。图 1.2 是一个典型爆轰波压力曲线，在前导激波过后压力突越到  $p_N$  (称为 Von Neumann 峰)，随着反应进行，压力急剧下降，在反应终了，压力降至  $p_{CJ}$ ，经过 C-J 面，爆轰产物进入等熵膨胀的 Taylor 膨胀区。

ZND 理论假设反应流动是一维均匀且不可逆的，并假设反应区的每一个断



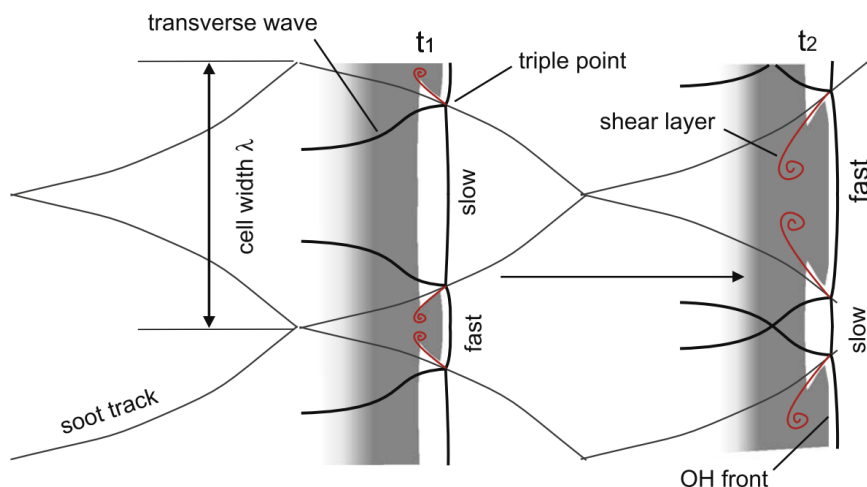


图 1.3: 二维胞格结构示意图 [247]。

面都处在热力学平衡状态。该理论虽然能描述爆轰波的一维稳态结构，并能预测爆轰波的波速，但是仍然不是完美的模型，ZND 理论将爆轰看成一维均匀不可逆的，只能解释一维稳态爆轰结构。实际上，对于几乎所有可燃气体，爆轰波波阵面都是本质不稳定的。不稳定性会产生更复杂的一维和高维的物理现象。这种不稳定性主要取决于反应的活化能  $E_a/(RT)$ 。

在一维上，不稳定性会造成爆轰波在传播方向上的脉动振荡，表现为压力峰值随时间在 Von Neuman 峰值附近有规律的上下脉动 [87, 163]。对于活化能较低的爆轰，脉动通常在  $0.8-1.6P_{vn}$  之间。对于高活化能的强不稳定爆轰，脉动更为剧烈，可能会存在熄火和重新起爆过程。

在高维上，除了有径向不稳定性外，横向也会叠加脉动，产生横向波，造成波阵面的三波点。三波点在空间上运动碰撞，反射的轨迹，构成了鱼鳞状的胞格结构。和一维类似，对于活化能较低的爆轰，横向波很弱，甚至可以看成声波。因此波阵面上过驱的马赫杆和欠驱的入射激波差别很小，都是爆轰波，分布也非常规则，产生的胞格非常均匀。相反，如果爆轰波不稳定性较强，横向波也同样变强，造成马赫杆和入射波强度差别较大。入射波甚至会衰减到局部熄火，然后在下一次三波点碰撞中重新起爆。对于这种情况，胞格结构会非常不规则。图 1.3 是二维均匀的胞格结构示意图。

目前，相比理论分析无法解释不稳定性和空间结构等问题，爆轰波的数值模拟变得更加主流，尤其是采用能反映化学动力学细节的基元反应模型进行

计算, 可以定性与定量的再现爆轰波的胞格 [324, 332]、旋转爆轰 [40, 327]、熄火区 [329]、以及一维或高维的不稳定现象等。尽管数值模拟具有便于实现, 可以模拟复杂工况等优点, 然而在爆轰的计算中仍然有一些问题和难点, 其中比较显著的是化学反应时间尺度和空间的尺度过小的问题, 尺度为系统特征的一种度量, 详细的解释见附录A。除传统的源项造成的时间刚性外, 还可能存在更为复杂的空间刚性问题。除此, 还包括组分守恒性和反应区耗散等问题。

### 1.4.3.2 源项数值刚性问题的时间方法

在高速化学反应流模拟中, 经常会遇到化学反应源项存在刚性的问题, 这种刚性体现为反应时间尺度远小于流动所采用的时间步长。例如, 很多燃烧反应精确计算所需的时间步要精确到纳秒的量级 [199, 256], 在真实计算中, 由于计算能力的限制, 我们无法将总体的时间步长缩小到该量级。如果采用和对流过程统一的时间方法而不做特殊处理, 如采用最常用的显式的 Runge-Kutta 格式时, 可能会造成计算不准确或存在较为严重的数值振荡甚至发散。

对于时间尺度差异带来的求解问题, 目前主要有两种解决方法。一种方法采用源项点隐 (Point implicit) [78] 或者全隐式的方式 [86] 整体求解, 这种方法称为耦合方法。另一种方法通过算子分裂将源项分裂出来, 然后采用独立的时间方法和时间步长进行处理, 这种方法通常称为解耦的方法。两种方法各有优势, 耦合方法主要优点在于避免解耦误差。然而该类方法需要求解大型矩阵, 随着反应模型复杂, 矩阵也会更加复杂。另外耦合方法由于简化矩阵运算会引入一系列的近似, 结果上耦合方法和解耦方法并不能体现出太多的优势 [152], 因此, 目前更多学者都采用解耦方法。

解耦方法通过算子分裂, 将化学反应流动方程在时间步内解耦成对流和反应两个子步, 然后分别采用与各自的特征时间尺度相匹配的时间步长进行计算。这样处理由于较为灵活, 也比较符合物理直观, 因而得到广泛的应用 [167, 190, 191]。分裂方法通常采用 Strang 分裂, 既能有二阶的精度, 又可以减小反应步时间步长, 但是也有学者指出 Strang 分裂在计算间断问题时只有一阶精度, 且没有一阶分裂方法准确 [62]。

对流子步的计算仍采用常用的 Euler 方程求解, 反应子步通常具有如下 ODE 方程形式

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), x(0) = x_0, (x \in \mathbb{R}^s, t \leq 0). \quad (1.26)$$

关于该方程的研究早在 80 年代就已经较为成熟 [109, 290], 最为著名和常用的当属单步的 Runge-Kutta 格式, 包括各类显式 RK 和隐式 RK 格式, 而且同样可以应用在如对流方程求解中, 这在前文对流方程时间方法中有指出, 不再赘述。

传统处理刚性 ODE 方程的方法主要包括减小时间步长和采用隐式格式两类方法。如采用刚性不稳定格式在每一步对流步采用很多的子时间步进行稳定的计算, 这里由于考虑到计算量通常采用最简单的一阶显式 Euler 格式, 时间步长选取可以采用固定步长或自适应步长两种方式。采用固定步长需要预设步长, 并且不能随着刚性的变化采用最节约计算的步长。采用自适应步长 [145] 避免了固定步长的一系列问题, 但是在计算刚性不强的问题上时由于精度不足会存在过大的误差。

隐式类格式通常具有较好的刚性稳定性 [199], 可以构造一致高精度的刚性稳定隐式格式, 然而, 隐式格式避免不了需要进行大量的收敛迭代和矩阵运算, 在求解形式简单的 ODE 方程中鲜有应用。

除上述两类方法外, 也有极为稀少的具有显形式的刚性稳定格式, 如目前较为常用的线化梯形公式 (linearised Trapezoidal method/LT) [287, 315], 该方法具有二阶精度, 且在一定程度上刚性稳定, 通常都不需要进行迭代。但是线化梯形公式也仅有二阶精度, 相比于对流步的三阶、四阶 Runge-Kutta 时间精度, 这远远是不够的。另外, 线化梯形公式也并非绝对稳定的, 在道刚性更强的计算中, 仍可能崩溃。

在本文中的第七章中, 基于数值摄动的思想 [93, 302, 319], 构造了仅针对于 ODE 方程的三阶摄动格式, 该格式具有显式形式因此无需迭代, 具有更好的刚性稳定性, 在求解 ODE 方程中较传统格式具有优势。

#### 1.4.3.3 刚性化学反应流动的空间刚性问题

上面我们介绍了源项刚性带来的时间尺度问题, 该问题可以通过算子分裂结合有效的 ODE 求解方法来避免。但是如果工况中刚性进一步加大, 这种影响会在空间求解上也有所体现。最具有代表性的问题是模拟高速化学反应流时爆轰波的虚假传播问题。这一问题最早出现在 Colella 1986 年的研究 [57] 中。他在数值模拟反应欧拉方程时发现, 如果存在间断, 如爆轰波, 计算结果中经常出现错误的波速和结构。1990 年, LeVeque 和 Yee 发现即便在含源项的线性



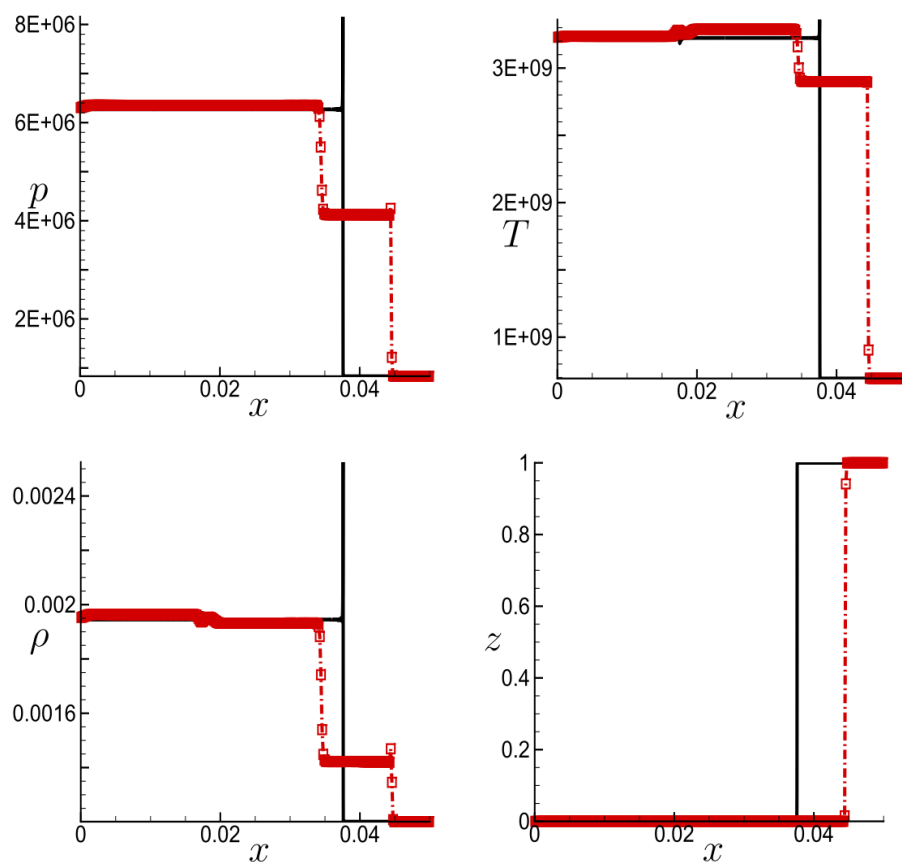


图 1.4: 一个典型的爆轰波虚假传播计算结果 [287]

波动方程中也可能存在相似的间断虚假传播问题。这一问题在接下来二十年时间内得到广泛的关注和研究 [19–21, 42, 287, 315]。图 1.4 给出一组典型的爆轰波虚假传播的计算结果。这一类由于源项刚性而导致爆轰波空间数值求解问题的流动又被称为刚性化学反应流 (Stiff reacting flow)。

刚性化学反应流产生根本原因是由于极快的反应速度造成空间上的反应区域也极为狭窄，化学反应时间尺度和空间尺度间具有复杂的相关性。我们如果采用达到小于反应区域尺度的空间网格来数值模拟自然可以避免所有的空间刚性问题，这种求解通常称为完全求解 (fully resolved)。然而这个尺度往往是达不到的，例如，在尚不存在空间刚性的氢氧爆轰求解中，最理想的求解尺度已经达到  $10^{-7}m$  量级 [221]，刚性化学反应流的完全求解尺度会更小。因此，我们一般只能采用网格尺度远大于反应尺度的网格进行求解，这种求解称为不完全

求解 (Underresolved) [19]。在不完全求解情况下, 如果不采用特殊的方法, 我们将无法在网格内追踪反应的传播。格式的耗散不可避免会抹平组分和温度曲线, 造成部分反应在激波前激活, 这种激活会产生非物理的状态。该状态随着计算累计就会造成虚假传播现象。关于该问题, 在正文中会有详细的分析。

2012 年 Wang [287] 对这 20 年关于避免刚性化学反应流中虚假传播现象的研究进行了回顾。Bao 和 Jin 在刚性流假设下, 在源项中发展了一种随机投影的方法来捕捉爆轰波 [19-21], 但是该类方法无法应用在无刚性问题中。Zhang 等人提出了一种平衡态的方法 (ESM) [315] 来抑制虚假状态的产生, 然而该方法是和空间格式相关的, 难以推广到高阶格式, 除此之外该方法最大的问题是, 对于复杂的化学反应, 往往没法预先知道平衡态。Chang 基于 HartenENO 子网格重构的思想 [119], 发展了对流步的有限体积 ENO 方法 [42], Wang 等人 [286, 287] 提出了结合了反应步子网格重构思想的高阶有限差分格式。然而, Yee 等人 2013 年指出 [296], 子网格重构方法和他们自己提出的非线性限制器方法 [298], 只能在一定稀疏的网格和适度的源项刚性情况下推迟非物理传播现象的出现, 但是随着网格稀疏或是刚性进一步加强, 虚假传播现象仍然会出现。

理论上, 在不完全求解情况下, 可以将反应面看成反应和未反应两项之间的几何界面, 因此可以应用上文所列的各种界面追踪方法进行模拟。如 VOF 方法、Level set 方法以及锋面追踪方法等都曾用来追踪预混火焰面 [198, 218]。也有人尝试采用追踪激波面的方法来抑制虚假传播这一非物理现象 [200]。然而, 对于更精细的化学反应模型, 由于反应速度并不是恒定的, 反应区域中既可能存在刚性区域又存在非刚性的区域, 反应面是有一定厚度和内部结构的, 因此界面类方法在化学反应流中, 难以有很好的推广。

近些年, 有人尝试采用结合了拉格朗日粒子和欧拉背景网格的拉格朗日-欧拉 (Lagrangian-Euler/LE) 方法来求解线性对流-扩散方程 [74, 179, 196, 254], 取得了较好的效果。LE 类方法基本思想是采用适当的算子分裂技术将模型方程分成不同的部分, 然后选用欧拉方法或是拉格朗日方法来对应求解 [179]。2007 年 Shipilova 等人 [249] 尝试用一种 LE 方法 (PTM 方法) 求解对流-扩散-反应方程, 数值结果显式 PTM 方法即便在很稀疏的网格下也可以有效的抑制数值振荡。这种 LE 的思想并不新颖, 实际上所有界面追踪类界面方法都是采用的同样的思想, 只是他们仅将拉格朗日粒子或网格用来追踪界面, 当时并没有人将这种思想用来直接求解方程本身。目前, 这种 LE 方法仅用来求解简单的方

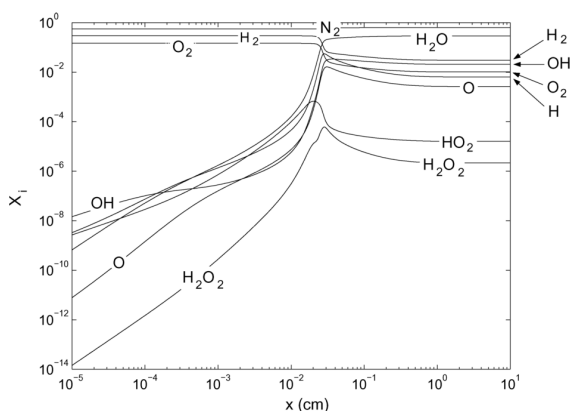


图 1.5:  $2H_2 + O_2 + 7Ar$  反应组分摩尔比变化和激波前沿距离间关系 [221]

程、方程组，尚没有人采用类似的思想求解化学反应方程系统。

在论文中第八章中，我们采用算子分裂方法，将化学反应欧拉方程分裂为 Euler 方程和组分方程，然后再将组分方程进一步分裂为组分对流方程和反应 ODE 方程，组分对流方程采用 DIP 方法直接求解。由于 DIP 方法的拉格朗日特性，可以追踪界面的连续运动，同时又由于该方法继承了针对于方程本身求解的 LE 思想，对于有反应区域厚度的问题同样可以模拟。通过一些列的算例，我们验证了该方法的有效性。

#### 1.4.3.4 基元反应模型下爆轰波的数值模拟

空间刚性问题一般只出现在总包反应的单方程模型和较为简单的多步反应模型中或是更为严苛的反应条件下。为了更准确的模拟反应动力学过程，我们通常会采用能反映化学动力学细节的基元反应模型进行计算。基元反应模型的求解中，空间刚性问题在并不是常见现象，但是其中仍存在空间分辨率不足等问题。实际上，每种组分的反应率相差很大，图 1.5 给出氢氧爆轰过程不同组分变化和诱导激波前沿距离的对数曲线，可以看到在距离诱导激波  $10^{-4}cm$  左右，某些曲线如  $OH$  就开始变化；对于绝大多数组分都在距离诱导激波  $10^{-4}cm$  和  $10^{-2}cm$  之间出现变化；到了  $x \approx 10^{-2}cm$  后所有组分都会有剧烈变化。图 1.6 是通过特征分析给出的化学反应各组分空间尺度和激波前沿距离之间的关系，从中也可以看出，同一空间位置不同组分空间尺度之间差异、同一组分不同空间位置空间尺度同样存在巨大差异。

对于爆轰空间尺度问题，目前除加密网格外，并没有其它特别完善的解决

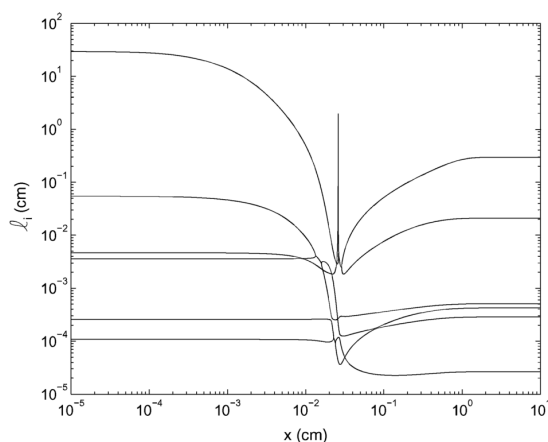


图 1.6:  $2H_2 + O_2 + 7Ar$  反应不同特征值空间尺度和激波前沿距离间关系 [221]

办法。如自适应网格加密技术可以通过在不同空间尺度的区域实时采用不同大小的网格，似乎非常适合爆轰波的计算 [41, 141]，但是目前该类技术在爆轰计算仍有很多困难，因此也并不常用。在固定网格和有限的计算资源下，想要达到完全求解每一空间尺度几乎是不可能的，其中空间尺度较小的组分曲线会由于网格分辨率不足导致的过度耗散而抹平、对应的反应区拉长。爆轰波和激波不同，耗散对于激波而言并不能改变激波前后状态，但是爆轰波组分计算不准确会导致不精确的化学反应结果，得到错误的反应产物，进而影响整体的结果。对此，Powers [221] 等人总结出三点：

- 1) 想要准确预诱导区尺度就需要对引起这一强非线性现象的物理问题在恰当的尺度合理的求解。但是目前没有发现任何文献对诱导区尺度做过网格收敛分析，所以很难说这些物理问题是否被合理求解了。
- 2) 对于弯曲的爆轰波，新的几何尺度会和反应区尺度竞争决定整体的波动特性。能否准确的捕捉爆轰波的多维问题很大程度取决于对于反应区尺度和曲率尺度等物理问题的准确计算。
- 3) 在非定常的计算中，任何瞬态爆轰波的高波束波长应该和定常结构中的最佳特征尺度在同一量级。在任何情况下，尤其是在非稳定问题中，想要完全捕捉非定常动力学过程，所用的长度尺度需要等于或者小于最佳定常空间尺度。

和刚性化学反应流问题相似，我们无法采用欧拉方法在不完全求解下准确计算化学反应组分，但是我们可以通过拉格朗日-欧拉的思想进行计算来消除由

于网格不足产生的数值耗散的影响。基于这样的考虑，在第九章，我们将 DIP 方法推广到基元反应模型下的爆轰波模拟中，结合算子分裂方法将方程分裂为 Euler 方程部分、组分对流部分和源项部分，针对每一部分的特征分别采用欧拉体系的高精度方法、拉格朗日体系的 DIP 方法和数值摄动方法进行求解。数值结果表明新的方法能准确的计算如爆轰波速等问题，并且相比于传统方法在组分守恒性，组分曲线的耗散性上有更大的优势。

## 1.5 本文所开展研究内容

本文研究内容主要分为上下两部分。在上部分中，我们研究欧拉方程激波相关的空间方法，包括

- 1) 针对间断附近过渡点降阶问题，我们提出一种多步加权的思想，并构造了五阶多步加权 WENO 格式，结果显示新格式在激波附近区域的精度得到较大提高。
- 2) 针对混合格式的关键问题—间断识别，我们对比了现存的大部分识别方法，认为基于  $\tau_5$  函数的 SZ 识别方法无人参为参数，方便使用，且有较好的表现，是本文最推荐的识别方法。
- 3) 本文将采用了 SZ 识别方法的杂交格式—有限紧致格式推广到理想磁流体求解中，考虑到磁流体方程有复杂的特征值系统和波系，本文结合无需特征系统求解的 E-CUSP 类格式，可以高精度低耗散的求解理想磁流体方程。

区别与上部分的纯欧拉体系的方法，下部分内容主要是欧拉-拉格朗日结合的方法，包括以下内容：

- 1) 由于传统界面方法无法处理耗散界面、界面守恒性不好等问题，本文提出一种基于欧拉背景网格的拉格朗日粒子类方法—双信息保存方法，并验证了该方法良好的守恒性。
- 2) 本文结合避免界面附近振荡的虚拟流体方法，将双信息保存方法应用在两相流界面问题求解中，取得了较好的结果。
- 3) 针对于化学反应流动方程中的反应源项 ODE 方程时间刚性，本文基于数值摄动思想，构造了一系列高阶、显式且稳定的单步数值摄动方法，可以较好的避免时间刚性造成的 ODE 求解困难。

- 4) 在刚性化学反应流求解中, 由于爆轰波附近的数值耗散会产生爆轰波虚假传播现象, 本文将双信息保存方法应用在刚性化学反应流求解中, 通过抑制组分对流方程耗散来避免这一非物理的数值现象。
- 5) 在应用了基元反应模型的化学反应求解中, 由于组份之间尺度相差很大, 在求解网格不够精细情况下, 经常遇到某些反应速度快的组分求解不准确的问题。本文将双信息保存方法应用在基元反应的反应欧拉方程求解中, 由于该方法的拉格朗日特性, 即便在较稀疏网格也能很好的计算组分对流过程, 保持组分求解的守恒性。

## 第二章 双信息保存方法在基元反应模型爆轰中的应用

上一章我们探讨了在固定比热比的总包反应模型和多步反应模型中的空间刚性问题。如果计算需要更准确的模拟化学反应动力学过程时，我们一般采用基元反应模型进行模拟。在应用了基元反应模型的化学反应的计算中，通常不会出现上一章所遇到的非物理解，但是问题并没有因此变得简单，基元反应模型求解中会遇到更多的难点：

1. 首先不同组分间的空间尺度相差很大，如果网格不足，空间尺度较小的组分就难以准确计算，想要达到完全求解具有最小空间尺度的组分是极为困难的。关于尺度问题见附录A。
2. 采用差分格式计算组分对流过程时，由于数值耗散，并不能保证组分的守恒。这体现在，如果方程是超定的，所求解组分质量分数之和不能保持不变，这将在下文中进行较详细分析。
3. 基元反应模型中的源项 ODE 方程时间刚性问题比上一章采用简单反应模型时更为严重。

针对于以上的各种问题，我们在前言1.4.3.4中有更详细的介绍。考虑到无论是固定比热比的多步反应模型，还是基元反应模型，方程并没有本质变化，只是源项形式有所区别，而遇到的空间问题归根结底也都是由于网格不足和方法中的数值耗散造成的。因此，我们将上一章提出的求解方法应用在基元反应模型爆轰求解中。

### 2.1 基元反应模型中的热力学参数

在前言1.1.4中，我们给出了基元反应模型的源项形式和状态方程，但是在基元反应模型中，每种组分的热力学属性并不相同，这导致了整体的热力学状态的变化，而每种组分的热力学属性通常由实验和拟合得到，本文采用 JANAF [261] 给出数据和拟合公式。



摩尔热容为

$$C_{p,i} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (2.1)$$

摩尔焓和摩尔熵都可以通过摩尔热容积分得到

$$\begin{aligned} H_i(T) &= H_i^f + \int_0^T C_{p,i}(s)ds \\ S_i(T) &= S_i^f + \int_0^T \frac{C_{p,i}(s)}{T}ds \end{aligned} \quad (2.2)$$

将方程 (C.1) 带入 (2.2) 可以得到摩尔焓

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (2.3)$$

同理，可以得到摩尔熵

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i}\ln T + a_{2,i}T + \frac{a_{3,i}}{2}T^2 + \frac{a_{4,i}}{3}T^3 + \frac{a_{5,i}}{4}T^4 + a_{7,i} \quad (2.4)$$

不同的拟合参数  $a_1$   $a_7$  可参见附录??。

## 2.2 温度求解方法

对于热完全气体混合物，温度并不存在显式的表达式，通常都需要采用迭代方法求解状态方程求得。对于混合气体，总能为

$$E = -p + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) + \rho h \quad (2.5)$$

将上式与公式 (1.19) 联立，可以得到一个新的函数

$$f(T) = -E + \frac{1}{2}\rho u^2 + \rho h(T) - \rho RT \quad (2.6)$$

问题转换成求解  $f(T) = 0$ ，本文采用牛顿迭代法进行求解。

由于采用分裂方法 (章节 ??)，对流过程和反应过程是独立的，因此化学反应过程可以看成是一个定容过程 [234]。这样在反应步求解温度时不需要迭



代过程，进一步简化。根据定容假设，化学反应过程中内能保持不变，即

$$\begin{cases} \frac{de}{dt} = 0 \\ \frac{d\rho_i}{dt} = \omega_i \end{cases} \quad (2.7)$$

内能是温度和质量分数的函数：

$$e = e(T, z) = \sum_{i=1}^{ns} z_i e_i(T) \quad (2.8)$$

对内能进行微分有

$$\begin{aligned} de &= \sum_{i=1}^{ns} e_i dz_i + dT \sum_{i=1}^{ns} z_i \frac{de_i(T)}{dT} \\ &= \sum_{i=1}^{ns} e_i dz_i + dT \sum_{i=1}^{ns} z_i c_{v,i} \end{aligned} \quad (2.9)$$

上式可以简化为

$$de = \sum_{i=1}^{ns} e_i dy_i + c_v dT \quad (2.10)$$

将  $de/dt = 0$  带入上式

$$c_v \frac{dT}{dt} = - \sum_{i=1}^{ns} e_i \frac{dy_i}{dt} = - \sum_{i=1}^{ns} e_i \frac{\omega_i}{\rho} \quad (2.11)$$

最后可得到

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^{ns} e_i \frac{\omega_i}{\rho}, \quad c_v = \sum_{i=1}^{ns} z_i c_{v,i} \quad (2.12)$$

利用公式 (2.12) 可以显式的求出下一步时间的温度，无需采用迭代。但是这里要特别注意的是，定容假设只适用在反应步的计算中，而在对流步计算中，我们仍然需要迭代过程求解温度。

## 2.3 数值算例

本节中，我们将上一章构造的数值方法应用在氢氧爆轰的基元反应模型化学反应流动方程求解中。以下的算例采用 9 组分  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $O$ ,  $H$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $H_2O$  和  $Ar$ , 21 反应的 BW 氢氧爆轰模型 [15], 具体参数见表 2.1。

表 2.1: 不同 ODE 格式精度分析

1.	$H+O_2=OH+O$	$3.52 \times 10^{16}$	-0.7	17.07	
2.	$H_2+O=OH+H$	$5.06 \times 10^4$	2.67	6.29	
3.	$OH+OH=H_2O+O$		$k=5.46 \times 10^{11} \exp(0.00149T)$		
4.	$H_2+OH=H_2O+H$	$1.17 \times 10^9$	1.3	3.626	
5.	$H+O_2+M=HO_2+M$	$6.76 \times 10^{19}$	-1.42	0.0	b
6.	$H+HO_2=OH+OH$	$1.70 \times 10^{14}$	0.0	0.874	
7.	$H+HO_2=H_2+O_2$	$4.28 \times 10^{13}$	0.0	1.411	
8.	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	$2.89 \times 10^{13}$	0.0	-0.497	
9.	$H+H+M=H_2+M$	$1.80 \times 10^{18}$	-1.0	0.0	c
10.	$H+OH+M=H_2O+M$	$2.20 \times 10^{22}$	-2.0	0.0	b
11.	$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	$3.02 \times 10^{12}$	0.0	1.39	
12.	$H_2O_2+M=OH+OH+M$	$1.20 \times 10^{17}$	0.0	45.50	d
13.	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	$7.08 \times 10^{12}$	0.0	1.43	
14.	$O+HO_2=OH+O_2$	$2.00 \times 10^{13}$	0.0	0.0	
15.	$H+HO_2=O+H_2O$	$3.10 \times 10^{13}$	0.0	1.72	
16.	$H+O+M=OH+M$	$6.20 \times 10^{16}$	-0.6	0.0	b
17.	$O+O+M=O_2+M$	$6.17 \times 10^{15}$	-0.5	0.0	b
18.	$H_2O_2+H=H_2O+OH$	$1.00 \times 10^{13}$	0.0	3.59	
19.	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	$4.79 \times 10^{13}$	0.0	7.95	
20.	$O+OH+M=HO_2+M$	$1.00 \times 10^{16}$	0.0	0.0	
21.	$H_2+O_2=OH+OH$	$1.70 \times 10^{13}$	0.0	47.78	

### 2.3.1 新方法有效性的验证

首先为了验证新方法的有效性，我们

## Appendix A 化学反应中相关尺度的探讨

尺度在英文中对应于“scale”，而“scale”是一个较常用而且意义宽泛的名词和动词。作为名词，尺度主要包含以下两层含义：

1. 主观的度量，《Cambridge Dictionary》解释为“a set of numbers, amounts, etc., used to measure or compare the level of something”。在本文可以对应于网格尺度、时间步长，是我们主观观察问题所采用的度量的大小。
2. 客观事物特征与变化的空间和时间范围，《Cabridge Dictionary》解释为“the size or level of something”。文中对应于时间尺度、空间尺度和特征尺度等等。

### A.1 化学反应时间尺度分析方程和空间尺度分析方程

除了对尺度概念简单的字面理解，在研究中，每种尺度都应该有更明确的数学定义。为了便于理解全文，下面对空间尺度和时间尺度进行简单的分析和解释，更准确、详细的理论工作请参阅 [106, 221]。

各种尺度的分析都是针对如下形式 ODE 方程展开的。

$$\frac{dY_i}{dx} = f_i(Y_1, Y_2, \dots, Y_n) \quad (\text{A.1})$$

对于化学反应时间尺度分析，采用反应 ODE 方程

$$\frac{dz_i}{dt} = \frac{\omega_i}{\rho_i}, \quad i = 1, \dots, ns - 1 \quad (\text{A.2})$$

明显满足方程 (A.1) 的形式，

对于化学反应的空间尺度分析，我们需要对反应 Euler 方程做一些特殊的处理，以一维反应 Euler 方程为例

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = S \quad (\text{A.3})$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \\ \rho z_1 \\ \rho z_2 \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \\ \rho z_1 u \\ \rho z_2 u \\ \vdots \\ \rho z_{ns-1} u \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{ns-1} \end{pmatrix},$$

跨过激波, 如果采用随体坐标, 流体满足如下形式方程

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(\rho u) = 0 \\ \frac{d}{dx}(\rho u^2 + p) = 0 \\ \frac{d}{dx}[u(E + p)] = 0 \\ \frac{d}{dx}(\rho u z_i) = \omega_i, \quad i = 1, \dots, ns - 1 \end{cases}$$

如果假设波前的状态为

$$(\rho, u, p, z_i, E, T) = (\rho_0, D, p_0, z_{i0}, E_0, T_0), \quad i = 1, \dots, ns - 1$$

既可得到爆轰波的 Rankine-Hugoniot 关系

$$\rho u = \rho_0 D \quad (\text{A.4})$$

$$\rho u^2 + p = \rho_0 D^2 + p_0 \quad (\text{A.5})$$

$$E + p = E_0 + p_0 \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{dz_i}{dx} = \frac{\omega_i}{\rho_i D}, \quad i = 1, \dots, ns - 1 \quad (\text{A.7})$$

我们可以看到反映化学反应的时间尺度的方程 (A.2) 和空间尺度的方程 (A.7) 非常接近, 实际上仅相差一个爆轰波波速  $D$ 。

## A.2 尺度分析 [221]

对方程 (A.2) 进行经典的特征分析, 为了方便我们将方程写为

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$$

其中  $\mathbf{y} = (Y_1, \dots, Y_n)$ ,  $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)$ 。然后, 我们在点  $(x, \mathbf{y}) = (x^*, \mathbf{y}^*)$  进行线化处理

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{J} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}^*) + \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}(x^*) = \mathbf{y}^* \quad (\text{A.8})$$

其中  $\mathbf{J} = \partial f_i / \partial Y_j|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}^*}$ , 而  $\mathbf{b}$  为一个常数向量。

然后我们定义一个新量  $\zeta = \mathbf{y} - \mathbf{y}^* + \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{b}$ , 方程 (A.8) 变为

$$\frac{d\zeta}{dx} = \mathbf{J} \cdot \zeta, \quad \zeta(x^*) = \mathbf{J} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.9})$$

假设  $\mathbf{J}$  是  $n$  维线性无关矩阵, 可以将  $\mathbf{J}$  特征分解为  $\mathbf{J} = \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{P}^{-1}$ , 假设  $\omega = \mathbf{P}^{-1} \cdot \zeta$ , 则上式可以化为

$$\frac{d\omega}{dx} = \boldsymbol{\Lambda} \cdot \omega, \quad \omega(x^*) = \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.10})$$

该方程的解为

$$\omega(x) = e^{\boldsymbol{\Lambda}(x-x^*)} \cdot \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.11})$$

第  $i$  项的当地  $x = x^*$  特征尺度可以定义为

$$l_i = 1/|\text{Re}(\lambda_i)|, \quad (\text{A.12})$$

对于方程 (A.7) 可以认为  $l_i$  为  $i$  组分的当地空间尺度  $\mathcal{L}_i$ , 对于方程 (A.2) 可以认为其为当地时间尺度  $\mathcal{T}_i$ 。同样我们可以定义, 所有组分当地最小特征尺度为当地最佳空间尺度  $\mathcal{L}^{\text{local}}$  和当地最佳时间尺度  $\mathcal{T}^{\text{local}}$ 。对于组分  $i$ , 全局最小的特征尺度可以定义为该组分的最佳空间尺度  $\mathcal{L}_i^{\text{global}}$  和最佳时间尺度  $\mathcal{T}_i^{\text{global}}$ 。根据方程 (A.2) 和 (A.7) 关系我们可以推知  $\mathcal{L}_i^{\text{global}} \propto D\mathcal{T}_i^{\text{global}}$ 。由此我们也可以看出时间尺度和空间尺度间复杂的相关性。



## Appendix B 二维 DIP 方法伪代码

初始化

```
DO  $i = 0, Nx$ 
  DO  $j = 0, Ny$ 
     $X(i, j) = 0$ 
     $Y(i, j) = 0$  ! 单元点初始化
     $\bar{z}(i, j) = z(i, j)$ 
  ENDDO
ENDDO

 $N_px = Nx, N_py = Ny$  ! 粒子点总数可能变化
DO  $i = 0, Nx$ 
  DO  $j = 0, Ny$ 
     $ip(i, j) = i$ 
     $jp(i, j) = j$ 
     $X_p(i, j) = 0$  ! 粒子点初始化
     $Y_p(i, j) = 0$ 
     $\bar{z}_p(i, j) = z(i, j)$ 
  ENDDO
ENDDO

DO  $it = 1, it$  ! 时间循环
  DO  $i = 0, Nx$ 
    DO  $j = 0, Ny$ 
       $Mrk(i, j) = 0,$ 
       $Mrk_p(i, j) = 0$  ! 记录单元内信息点和单元点数
    END DO
  END DO
```

### 1. 单元点运动追踪

```
DO  $i = 0, Nx$ 
  DO  $j = 0, Ny$ 
     $s_x = \text{sign}(X(i, j)), s_y = \text{sign}(Y(i, j))$ 
     $\bar{u}(i, j) = (1 - |X|)u(i, j) + |X|u(i + s_x, j)$ 
     $\bar{v}(i, j) = (1 - |Y|)v(i, j) + |Y|v(i, j + s_y)$  ! 插值单元点速度
     $L_x = X(i, j) + \bar{u}(i, j)\Delta t/\Delta x$ 
     $L_y = Y(i, j) + \bar{v}(i, j)\Delta t/\Delta y$  ! 临时相对坐标变化
     $M = i + \text{floor}(L_x + 0.5),$ 
     $N = j + \text{floor}(L_y + 0.5).$ 
     $X(i, j) = L_x - \text{floor}(L_x + 0.5)$ 
     $Y(i, j) = L_y - \text{floor}(L_y + 0.5)$  ! 新的所在单元和相对坐标
```

### 2. 单元点的更新

```

IF Mrk(M, N) = 0 THEN
    X'(M, N) = X(i, j)
    Y'(M, N) = Y(i, j)
    z'(M, N) = z(i, j)
ELSE
    IF z(i) < z'(M) THEN
        X'(M, N) = X(i, j)
        Y'(M, N) = Y(i, j)          ! 多个单元点, 选取 z 值小的点
        z'(M, N) = z(i, j)
    ENDIF
ENDIF
X'(M, N) = [X(i, j) + Mrk(M, N)X'(M, N)]/[Mrk(M, N) + 1]
Y'(M, N) = [Y(i, j) + Mrk(M, N)Y'(M, N)]/[Mrk(M, N) + 1]    ! 多个单元点, 进行平均
z'(M, N) = [z(i, j) + Mrk(M, N)z'(M, N)]/[Mrk(M, N) + 1]
Mrk(M, N) = Mrk(M, N) + 1
END DO
END DO

```

### 3. 粒子点的运动追踪

```

DO i = 0, Npx
    DO j = 0, Npy
        sx = sign(Xp(i, j)), sy = sign(Yp(i, j))
        up(i, j) = (1 - |Xp|)u(ip, jp) + |Xp|u(ip + sx, J)
        vp(i, j) = (1 - |Yp|)v(ip, jp) + |Yp|v(ip, jp + sy)    ! 插值粒子点速度
        Lx = Xp(i, j) + up(i, j)Δt/Δx
        Ly = Yp(i, j) + vp(i, j)Δt/Δy    ! 临时相对坐标变化
        ip(i, j) = ip(i, j) + floor(Lx + 0.5)
        jp(i, j) = jp(i, j) + floor(Ly + 0.5)
        Xp(i, j) = Lx - floor(Lx + 0.5)
        Yp(i, j) = Ly - floor(Ly + 0.5)    ! 新的所在单元和相对坐标
    END DO
END DO

```

### 4. 粒子点修正单元点

```

IF Mrkp(ip, jp) = 0 THEN
    X'(ip, jp) = Xp(i, j)
    Y'(ip, jp) = Yp(i, j)
    z'(ip, jp) = zp(i, j)
ELSE
    IF zp(i) < z'(ip, jp) THEN
        X'(ip, jp) = Xp(i, j)
        Y'(ip, jp) = Yp(i, j)
        z'(ip, jp) = zp(i, j)    ! 多个粒子点, 选取 z 值小的点
    ENDIF
ENDIF
X'(ip, jp) = [Xp(i, j) + Mrkp(ip, jp)X'(ip, jp)]/[Mrkp(ip, jp) + 1]
Y'(ip, jp) = [Yp(i, j) + Mrkp(ip, jp)Y'(ip, jp)]/[Mrkp(ip, jp) + 1]    ! 多个粒子点, 进行平均
z'(ip, jp) = [zp(i, j) + Mrkp(ip, jp)z'(ip, jp)]/[Mrkp(ip, jp) + 1]
Mrkp(ip, jp) = Mrkp(ip, jp) + 1
END DO
END DO

```



### 5. 在空单元生成单元点

@Fortran 程序地址: <https://www.github.com/bfly123/DIP2D>



## Appendix C 化学反应不同组分热力学拟合参数

对于热完全气体混合物，气体分子的热力学性质随温度的变化而变化，气体的比热、焓和熵都需要通过实验数据拟合得到，本文使用 JANAF 给出的七系数拟合多项式 [261]，其中第  $i$  组分气体热力学参数具体表达式为：

$$\frac{C_{p,i}}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{H_{p,i}}{R_u T} = a_{1,i}\ln T + a_{2,i}T + \frac{a_{3,i}}{2}T^2 + \frac{a_{4,i}}{3}T^3 + \frac{a_{5,i}}{4}T^4 + a_{7,i} \quad (\text{C.3})$$

在 JANAF 的拟合系数中，每个组分的拟合参数根据温度分为两个区间，在每个温度区间，本文计算所涉及的气体拟合参数如下表。

表 C.1: 不同 ODE 格式精度分析

组份	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7
H2							
200-1000 K	2.34E+00	7.98E-03	-1.95E-05	2.02E-08	-7.38E-12	-9.18E+02	6.83E-01
1000-5000 K	3.34E+00	-4.94E-05	4.99E-07	-1.80E-10	2.00E-14	-9.50E+02	-3.21E+00
O2							
200-1000 K	3.78E+00	-3.00E-03	9.85E-06	-9.68E-09	3.24E-12	-1.06E+03	3.66E+00
1000-5000 K	3.28E+00	1.48E-03	-7.58E-07	2.09E-10	-2.17E-14	-1.09E+03	5.45E+00
O							
200-1000 K	3.17E+00	-3.28E-03	6.64E-06	-6.13E-09	2.11E-12	2.91E+04	2.05E+00
1000-5000 K	2.57E+00	-8.60E-05	4.19E-08	-1.00E-11	1.23E-15	2.92E+04	4.78E+00
H							
200-1000 K	2.50E+00	7.05E-13	-2.00E-15	2.30E-18	-9.28E-22	2.55E+04	-4.47E-01
1000-5000 K	2.50E+00	-2.31E-11	1.62E-14	-4.74E-18	4.98E-22	2.55E+04	-4.47E-01
OH							
200-1000 K	3.99E+00	-2.40E-03	4.62E-06	-3.88E-09	1.36E-12	3.62E+03	-1.04E-01
1000-5000 K	3.09E+00	5.48E-04	1.27E-07	-8.79E-11	1.17E-14	3.86E+03	4.48E+00
HO2							
200-1000 K	4.30E+00	-4.75E-03	2.12E-05	-2.43E-08	9.29E-12	2.95E+02	3.72E+00
1000-5000 K	4.02E+00	2.24E-03	-6.34E-07	1.14E-10	-1.08E-14	1.12E+02	3.79E+00
H2O							
200-1000 K	4.20E+00	-2.04E-03	6.52E-06	-5.49E-09	1.77E-12	-3.03E+04	-8.49E-01
1000-5000 K	3.03E+00	2.18E-03	-1.64E-07	-9.70E-11	1.68E-14	-3.00E+04	4.97E+00
CH3							
200-1000 K	3.67E+00	2.01E-03	5.73E-06	-6.87E-09	2.54E-12	1.64E+04	1.60E+00
1000-5000 K	2.29E+00	7.24E-03	-2.99E-06	5.96E-10	-4.67E-14	1.68E+04	8.48E+00
CH4							
200-1000 K	5.15E+00	-1.37E-02	4.92E-05	-4.85E-08	1.67E-11	-1.02E+04	-4.64E+00
1000-5000 K	7.49E-02	1.34E-02	-5.73E-06	1.22E-09	-1.02E-13	-9.47E+03	1.84E+01
CO							
200-1000 K	3.58E+00	-6.10E-04	1.02E-06	9.07E-10	-9.04E-13	-1.43E+04	3.51E+00
1000-5000 K	2.72E+00	2.06E-03	-9.99E-07	2.30E-10	-2.04E-14	-1.42E+04	7.82E+00
CO2							
200-1000 K	2.36E+00	8.98E-03	-7.12E-06	2.46E-09	-1.44E-13	-4.84E+04	9.90E+00
1000-5000 K	3.86E+00	4.41E-03	-2.21E-06	5.23E-10	-4.72E-14	-4.88E+04	2.27E+00
HCO							
200-1000 K	4.22E+00	-3.24E-03	1.38E-05	-1.33E-08	4.34E-12	3.84E+03	3.39E+00
1000-5000 K	2.77E+00	4.96E-03	-2.48E-06	5.89E-10	-5.34E-14	4.01E+03	9.80E+00
CH2O							
200-1000 K	4.79E+00	-9.91E-03	3.73E-05	-3.79E-08	1.32E-11	-1.43E+04	6.03E-01
1000-5000 K	1.76E+00	9.20E-03	-4.42E-06	1.01E-09	-8.84E-14	-1.40E+04	1.37E+01
N2							
200-1000 K	3.30E+00	1.41E-03	-3.96E-06	5.64E-09	-2.44E-12	-1.02E+03	3.95E+00
1000-5000 K	2.93E+00	1.49E-03	-5.68E-07	1.01E-10	-6.75E-15	-9.23E+02	5.98E+00

## 参考文献

- [1] AGARWAL, R., AUGUSTINUS, J., AND HALT, D. A comparative study of advection upwind split (ausm) and wave/particle split (wps) schemes for fluid and mhd flows. In *AIAA 30th Plasmadynamics and Lasers Conference, AIAA Paper, Norfolk, VA* (1999), pp. 99–3613.
- [2] ALLAIRE, G., CLERC, S., AND KOKH, S. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics* 181, 2 (2002), 577–616.
- [3] AMSDEN, A. A., AND HARLOW, F. H. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., 1970.
- [4] ANDERSON, D., AND MCFADDEN, G. B. A diffuse-interface description of internal waves in a near-critical fluid. *Physics of Fluids* 9, 7 (1997), 1870–1879.
- [5] ANDERSON, M., VOROBIEFF, P., TRUMAN, C., CORBIN, C., KUEHNER, G., WAYNE, P., CONROY, J., WHITE, R., AND KUMAR, S. An experimental and numerical study of shock interaction with a gas column seeded with droplets. *Shock Waves* 25, 2 (2015), 107–125.
- [6] ANDERSON JR, J. D. *Fundamentals of aerodynamics*. Tata McGraw-Hill Education, 2010.
- [7] ANDRONOV, V., BAKHRAKH, S., MESHKOV, E., MOKHOV, V., NIKIFOROV, V., PEVNITSKII, A., AND TOLSHMYAKOV, A. Turbulent mixing at contact surface accelerated by shock waves. *Sov. Phys. JETP* 44, 2 (1976), 424–427.
- [8] ANTANOVSKII, L. K. A phase field model of capillarity. *Physics of fluids* 7, 4 (1995), 747–753.

- [9] ARTZI, M. B. The generalized riemann's problem for reactive flows. *Preprint* (1989).
- [10] ASHGRIZ, N., AND POO, J. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of computational physics* 93, 2 (1991), 449–468.
- [11] ASLAM, T. D. A level-set algorithm for tracking discontinuities in hyperbolic conservation laws: I. scalar equations. *Journal of Computational Physics* 167, 2 (2001), 413–438.
- [12] ASLAM, T. D. A level set algorithm for tracking discontinuities in hyperbolic conservation laws ii: systems of equations. *Journal of Scientific computing* 19, 1-3 (2003), 37–62.
- [13] AULISA, E., MANSERVISI, S., AND SCARDOVELLI, R. A mixed markers and volume-of-fluid method for the reconstruction and advection of interfaces in two-phase and free-boundary flows. *Journal of Computational Physics* 188, 2 (2003), 611–639.
- [14] BABINSKY, H., AND HARVEY, J. K. *Shock wave-boundary-layer interactions*, vol. 32. Cambridge University Press, 2011.
- [15] BALAKRISHNAN, G., AND WILLIAMS, F. Turbulent combustion regimes for hypersonic propulsion employing hydrogen-air diffusion flames. *Journal of Propulsion and Power* 10, 3 (1994), 434–436.
- [16] BALBÁS, J., TADMOR, E., AND WU, C.-C. Non-oscillatory central schemes for one-and two-dimensional mhd equations: I. *Journal of Computational Physics* 201, 1 (2004), 261–285.
- [17] BALSARA, D. S., AND SHU, C.-W. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *Journal of Computational Physics* 160, 2 (2000), 405–452.

- [18] BALSARA, D. S., AND SPICER, D. S. A staggered mesh algorithm using high order godunov fluxes to ensure solenoidal magnetic fields in magnetohydrodynamic simulations. *Journal of Computational Physics* 149, 2 (1999), 270–292.
- [19] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics* 163, 1 (2000), 216–248.
- [20] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for stiff detonation capturing. *SIAM Journal on Scientific Computing* 23, 3 (2001), 1000–1026.
- [21] BAO, W., AND JIN, S. The random projection method for stiff multispecies detonation capturing. *Journal of Computational Physics* 178, 1 (2002), 37–57.
- [22] BATTEN, P., CLARKE, N., LAMBERT, C., AND CAUSON, D. M. On the choice of wavespeeds for the hllc riemann solver. *SIAM Journal on Scientific Computing* 18, 6 (1997), 1553–1570.
- [23] BERGANT, A., SIMPSON, A. R., AND TIJSSELING, A. S. Water hammer with column separation: A historical review. *Journal of fluids and structures* 22, 2 (2006), 135–171.
- [24] BERKENBOSCH, A., KAASSCHIETER, E., AND KLEIN, R. Detonation capturing for stiff combustion chemistry. *Combustion Theory and Modelling* 2, 3 (1998), 313–348.
- [25] BISWAS, R., DEVINE, K. D., AND FLAHERTY, J. E. Parallel, adaptive finite element methods for conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 14, 1-3 (1994), 255–283.
- [26] BONOMETTI, T., AND MAGNAUDET, J. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow* 33, 2 (2007), 109–133.

- [27] BOOK, D. L., BORIS, J. P., AND HAIN, K. Flux-corrected transport ii: Generalizations of the method. *Journal of Computational Physics* 18, 3 (1975), 248–283.
- [28] BORGES, R., CARMONA, M., COSTA, B., AND DON, W. S. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 227, 6 (2008), 3191–3211.
- [29] BORIS, J. P., AND BOOK, D. Flux-corrected transport. iii. minimal-error fct algorithms. *Journal of Computational Physics* 20, 4 (1976), 397–431.
- [30] BORIS, J. P., AND BOOK, D. L. Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works. *Journal of computational physics* 11, 1 (1973), 38–69.
- [31] BOURLIOUX, A., MAJDA, A. J., AND ROYTBURD, V. Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 51, 2 (1991), 303–343.
- [32] BRACKBILL, J., KOTHE, D. B., AND ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics* 100, 2 (1992), 335–354.
- [33] BRACKBILL, J. U., AND BARNES, D. C. The effect of nonzero  $\gamma$  on the numerical solution of the magnetohydrodynamic equations. *Journal of Computational Physics* 35, 3 (1980), 426–430.
- [34] BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B., AND RUPPEL, H. M. Flip: a low-dissipation, particle-in-cell method for fluid flow. *Computer Physics Communications* 48, 1 (1988), 25–38.
- [35] BRENNEN, C. E. *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge university press, 2005.
- [36] BRIO, M., AND WU, C. C. An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics. *Journal of computational physics* 75, 2 (1988), 400–422.



- 
- [37] BURSTEIN, S. Z., AND MIRIN, A. A. Third order difference methods for hyperbolic equations. *Journal of Computational Physics* 5, 3 (1970), 547–571.
- [38] BUSSING, T., AND PAPPAS, G. An introduction to pulse detonation engines. In *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (1994), p. 263.
- [39] BUSSING, T., AND PAPPAS, G. Pulse detonation engine theory and concepts. *Developments in high-speed-vehicle propulsion systems(A 97-15029 02-07)*, Reston, VA, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc.(*Progress in Astronautics and Aeronautics. 165* (1996), 421–472.
- [40] BYKOVSKII, F. A., ZHDAN, S. A., AND VEDERNIKOV, E. F. Continuous spin detonations. *Journal of Propulsion and Power* 22, 6 (2006), 1204.
- [41] CALDER, A. C., CURTIS, B. C., DURSI, L., FRYXELL, B., MACNEICE, P., OLSON, K., RICKER, P., ROSNER, R., TIMMES, F., TUFO, H., ET AL. High performance reactive fluid flow simulations using adaptive mesh refinement on thousands of processors. In *Proceedings of the 2000 ACM/IEEE conference on Supercomputing* (2000), IEEE Computer Society, p. 56.
- [42] CHANG, S.-H. *On the application of subcell resolution to conservation laws with stiff source terms*. National Aeronautics and Space Administration, 1989.
- [43] CHANG, S.-H. On the application of eno scheme with subcell resolution to conservation laws with stiff source terms. In *Computational Fluid Dynamics Symposium on Aeropropulsion* (1991), vol. 1, pp. 215–225.
- [44] CHANG, T., CHEN, G.-Q., AND YANG, S. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations. i. interaction of shocks and rarefaction waves. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 1 (1995), 555–584.

- [45] CHANG, T., CHEN, G.-Q., AND YANG, S. On the 2-d riemann problem for the compressible euler equations ii. interaction of contact discontinuities. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 6, 2 (2000), 419–430.
- [46] CHAPMAN, D. L. Vi. on the rate of explosion in gases. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 47, 284 (1899), 90–104.
- [47] CHEN, G. Q. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas dynamics (iii). *Acta Math. Sci* 6, 1 (1986), 75–120.
- [48] CHEN, S. Stability of a mach configuration. *Communications on pure and applied mathematics* 59, 1 (2006), 1–35.
- [49] CHÉRET, R. *Detonation of condensed explosives*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [50] CHIPMAN, F. A-stable runge-kutta processes. *BIT Numerical Mathematics* 11, 4 (1971), 384–388.
- [51] CHORIN, A. J. Random choice solution of hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 22, 4 (1976), 517–533.
- [52] CHOU, C.-S., AND SHU, C.-W. High order residual distribution conservative finite difference weno schemes for convection–diffusion steady state problems on non-smooth meshes. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 992–1020.
- [53] COCCHI, J.-P., AND SAUREL, R. A riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *Journal of Computational Physics* 137, 2 (1997), 265–298.
- [54] COCKBURN, B., AND SHU, C.-W. Tvb runge-kutta local projection discontinuous galerkin finite element method for conservation laws. ii. general framework. *Mathematics of computation* 52, 186 (1989), 411–435.

- 
- [55] COCKBURN, B., AND SHU, C.-W. Nonlinearly stable compact schemes for shock calculations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31, 3 (1994), 607–627.
  - [56] COLELLA, P. Glimm’s method for gas dynamics. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 3, 1 (1982), 76–110.
  - [57] COLELLA, P., MAJDA, A., AND ROYTBURD, V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7, 4 (1986), 1059–1080.
  - [58] COLLINS, J. B., AND LEVINE, H. Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth. *Physical Review B* 31, 9 (1985), 6119.
  - [59] COSTA, B., AND DON, W. S. Multi-domain hybrid spectral-weno methods for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 224, 2 (2007), 970–991.
  - [60] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., AND LEWY, H. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen* 100, 1 (1928), 32–74.
  - [61] COURANT, R., AND FRIEDRICHS, K. O. *Supersonic flow and shock waves*, vol. 21. Springer Science & Business Media, 1999.
  - [62] CRANDALL, M., AND MAJDA, A. The method of fractional steps for conservation laws. *Numerische Mathematik* 34, 3 (1980), 285–314.
  - [63] CRANDALL, M. G. The semigroup approach to first order quasilinear equations in several space variables. *Israel Journal of Mathematics* 12, 2 (1972), 108–132.
  - [64] DAFERMOS, C. M. Generalized characteristics and the structure of solutions of hyperbolic conservation laws. Tech. rep., DTIC Document, 1976.
  - [65] DAHLQUIST, G. G. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics* 3, 1 (1963), 27–43.

- [66] DAI, W., AND WOODWARD, P. R. An approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 111, 2 (1994), 354–372.
- [67] DAMEVIN, H.-M., AND HOFFMANN, K. Development of a modified runge-kutta scheme with tvd limiters for ideal three-dimensional magnetogasdynamics. In *32nd AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference* (2001), p. 2739.
- [68] DAVIS, S. F. An interface tracking method for hyperbolic systems of conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 10, 6 (1992), 447–472.
- [69] DE SOUSA, F., MANGIAVACCHI, N., NONATO, L., CASTELO, A., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J., AND MCKEE, S. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. *Journal of Computational Physics* 198, 2 (2004), 469–499.
- [70] DENG, X., AND MAEKAWA, H. Compact high-order accurate nonlinear schemes. *Journal of Computational Physics* 130, 1 (1997), 77–91.
- [71] DING, X. X., CHEN, G. Q., AND LUO, P. Z. Convergence of the lax-friedrichs scheme for isentropic gas-dynamics. 1. *Acta Mathematica Scientia* 5, 4 (1985), 415–432.
- [72] DIPERNA, R. J. Convergence of the viscosity method for isentropic gas dynamics. *Communications in mathematical physics* 91, 1 (1983), 1–30.
- [73] DIRAC, P. The lorentz transformation and absolute time. *Physica* 19, 1–12 (1953), 888–896.
- [74] DONG, L., AND WANG, B. Trajectory-tracking scheme in lagrangian form for solving linear advection problems: preliminary tests. *Monthly Weather Review* 140, 2 (2012), 650–663.
- [75] DÖRING, W. On detonation processes in gases. *Ann. Phys* 43, 421–436 (1943), 9.

- 
- [76] DREMIN, A. N., SAVROV, S., TROFIMOV, V. S., AND SHVEDOV, K. Detonation waves in condensed media. Tech. rep., DTIC Document, 1972.
- [77] DU, Q., LIU, C., AND WANG, X. Retrieving topological information for phase field models. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 65, 6 (2005), 1913–1932.
- [78] EBERHARDT, S., AND IMLAY, S. Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* 6, 2 (1992), 208–216.
- [79] EDWARDS, J. R. A low-diffusion flux-splitting scheme for navier-stokes calculations. *Computers & Fluids* 26, 6 (1997), 635–659.
- [80] ELLING, V., AND LIU, T.-P. Supersonic flow onto a solid wedge. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 61, 10 (2008), 1347–1448.
- [81] ELLIOTT, C. M., AND SONGMU, Z. On the cahn-hilliard equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 96, 4 (1986), 339–357.
- [82] ENGQUIST, B., AND SJÖGREEN, B. *Robust difference approximations of stiff inviscid detonation waves*. Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1991.
- [83] ENRIGHT, D., FEDKIW, R., FERZIGER, J., AND MITCHELL, I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational physics* 183, 1 (2002), 83–116.
- [84] ENRIGHT, D., LOSASSO, F., AND FEDKIW, R. A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Computers & structures* 83, 6 (2005), 479–490.
- [85] EVANS, M. W., HARLOW, F. H., AND BROMBERG, E. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Tech. rep., DTIC Document, 1957.

- [86] FAN, Y., DURLOFSKY, L. J., AND TCHELEPI, H. A. A fully-coupled flow-reactive-transport formulation based on element conservation, with application to co 2 storage simulations. *Advances in Water Resources* 42 (2012), 47–61.
- [87] FAY, J. A. Two-dimensional gaseous detonations: Velocity deficit. *The Physics of Fluids* 2, 3 (1959), 283–289.
- [88] FEDKIW, R. P., ASLAM, T., MERRIMAN, B., AND OSHER, S. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of computational physics* 152, 2 (1999), 457–492.
- [89] FEYNMAN, R., AND VERNON JR., F. The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system. *Annals of Physics* 24 (1963), 118–173.
- [90] FICKETT, W., AND DAVIS, W. C. *Detonation: theory and experiment*. Courier Corporation, 2012.
- [91] FREIDBERG, J. P. Ideal magnetohydrodynamics.
- [92] GAITONDE, D. V. Development of a solver for 3-d non-ideal magnetogas-dynamics. *AIAA paper* 99 (1999), 3610.
- [93] GAO, Z. Numerical perturbation algorithm and its cfd schemes. *Advances in Mechanics* 40 (2010), 607–633.
- [94] GELFAND, I. Some problems in the theory of quasilinear equations. *Amer. Math. Soc. Transl* 29, 2 (1963), 295–381.
- [95] GEROLYMOS, G., SÉNÉCHAL, D., AND VALLET, I. Very-high-order weno schemes. *Journal of Computational Physics* 228, 23 (2009), 8481–8524.
- [96] GHOSH, D., AND BAEDER, J. D. Weighted non-linear compact schemes for the direct numerical simulation of compressible, turbulent flows. *Journal of Scientific Computing* 61, 1 (2014), 61–89.

- 
- [97] GLAISTER, P. An approximate linearised riemann solver for the euler equations for real gases. *Journal of Computational Physics* 74, 2 (1988), 382–408.
- [98] GLASSMAN, I., YETTER, R. A., AND GLUMAC, N. G. *Combustion*. Academic press, 2014.
- [99] GLIMM, J. Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 18, 4 (1965), 697–715.
- [100] GLIMM, J., GROVE, J. W., LI, X., AND ZHAO, N. Simple front tracking. *Contemporary Mathematics* 238, 2 (1999), 133–149.
- [101] GLIMM, J., AND LAX, P. D. Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws.
- [102] GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik* 89, 3 (1959), 271–306.
- [103] GOMES, J., AND FAUGERAS, O. Reconciling distance functions and level sets. In *Biomedical Imaging, 2002. 5th IEEE EMBS International Summer School on* (2002), IEEE, pp. 15–pp.
- [104] GOODMAN, J., AND XIN, Z. Viscous limits for piecewise smooth solutions to systems of conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis* 121, 3 (1992), 235–265.
- [105] GOODMAN, J. B., AND LEVEQUE, R. J. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Mathematics of computation* (1985), 15–21.
- [106] G.STRANG. *Linear Algebra and its Applications*, 3rd ed. Fort Worth, TX: Harcourt Brace Jovanovich, 1988.

- [107] GURSKI, K. F. An hllc-type approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Scientific Computing* 25, 6 (2004), 2165–2187.
- [108] HADJADJ, A., PERROT, Y., AND VERMA, S. Numerical study of shock/boundary layer interaction in supersonic overexpanded nozzles. *Aerospace Science and Technology* 42 (2015), 158–168.
- [109] HAIER, E., NORSETT, S., AND WANNER, G. Solving ordinary differential equations i, nonstiff problems. *Section III* 8 (1987).
- [110] HAIRER, E., AND WANNER, G. Stiff differential equations solved by radau methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 111, 1 (1999), 93–111.
- [111] HAMMER, P. C., AND HOLLINGSWORTH, J. W. Trapezoidal methods of approximating solutions of differential equations. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation* (1955), 92–96.
- [112] HAMMITT, F. G. *Cavitation and multiphases flow phenomena*. McGraw-Hill, 1980.
- [113] HAN, S.-H., LEE, J.-I., AND KIM, K. H. Accurate and robust pressure weight advection upstream splitting method for magnetohydrodynamics equations. *AIAA journal* 47, 4 (2009), 970.
- [114] HÄNEL, D., SCHWANE, R., AND SEIDER, G. On the accuracy of upwind schemes for the solution of the navier-stokes equations. *AIAA paper 1105* (1987), 1987.
- [115] HARLOW, F. H. Hydrodynamic problems involving large fluid distortions. *Journal of the ACM (JACM)* 4, 2 (1957), 137–142.
- [116] HARLOW, F. H., WELCH, J. E., ET AL. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of fluids* 8, 12 (1965), 2182.



- 
- [117] HARLOW F, W. J. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface. *Phys Fluids* 8, 218 (1965), 2–9.
- [118] HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* 49, 3 (1983), 357–393.
- [119] HARTEN, A. Eno schemes with subcell resolution.[essentially nonoscillatory.
- [120] HARTEN, A., ENGQUIST, B., OSHER, S., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, iii. *Journal of computational physics* 71, 2 (1987), 231–303.
- [121] HARTEN, A., LAX, P. D., AND VAN LEER, B. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review* 25, 1 (1983), 35.
- [122] HARTEN, A., LAX, P. D., AND VAN LEER, B. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. In *Upwind and High-Resolution Schemes*. Springer, 1997, pp. 53–79.
- [123] HARTEN, A., OSHER, S., ENGQUIST, B., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Some results on uniformly high-order accurate essentially nonoscillatory schemes. *Applied Numerical Mathematics* 2, 3-5 (1986), 347–377.
- [124] HELZEL, C., LEVEQUE, R. J., AND WARNECKE, G. A modified fractional step method for the accurate approximation of detonation waves. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 4 (2000), 1489–1510.
- [125] HENRICK, A. K., ASLAM, T. D., AND POWERS, J. M. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: achieving optimal order near critical points. *Journal of Computational Physics* 207, 2 (2005), 542–567.
- [126] HILDEBRAND, N., DWIVEDI, A., SHRESTHA, P., NICHOLS, J. W., JOVANOVIC, M. R., AND CANDLER, G. V. Global stability analysis of

- oblique shock/boundary layer interactions at mach 5.92. In *APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts* (2016).
- [127] HILL, D. J., AND PULLIN, D. I. Hybrid tuned center-difference-weno method for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *Journal of Computational Physics* 194, 2 (2004), 435–450.
- [128] HIRT, C. W., AND NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics* 39, 1 (1981), 201–225.
- [129] HONKKILA, V., AND JANHUNEN, P. Hllc solver for ideal relativistic mhd. *Journal of Computational Physics* 223, 2 (2007), 643–656.
- [130] HOPF, E. The partial differential equation  $u_t + u u_x = \mu x x$ . *Communications on Pure and Applied mathematics* 3, 3 (1950), 201–230.
- [131] HU, X., ADAMS, N., AND IACCARINO, G. On the hllc riemann solver for interface interaction in compressible multi-fluid flow. *Journal of Computational Physics* 228, 17 (2009), 6572–6589.
- [132] HU, X., KHOO, B., ADAMS, N. A., AND HUANG, F. A conservative interface method for compressible flows. *Journal of Computational Physics* 219, 2 (2006), 553–578.
- [133] HU, X. Y., AND KHOO, B. C. An interface interaction method for compressible multifluids. *Journal of Computational Physics* 198, 1 (2004), 35–64.
- [134] HUANG, F., AND WANG, Z. Convergence of viscosity solutions for isothermal gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* 34, 3 (2002), 595–610.
- [135] HUANG, J., AND WEBB, W. Diffuse interface in a critical fluid mixture. *The Journal of Chemical Physics* 50, 9 (1969), 3677–3693.

- 
- [136] HWANG, P., FEDKIW, R., MERRIMAN, B., ASLAM, T., KARAGOZIAN, A., AND OSHER, S. Numerical resolution of pulsating detonation waves. *DCJ* 2 (2000), 1.
- [137] JACQMIN, D. Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics* 155, 1 (1999), 96–127.
- [138] JAMET, D., LEBAGUE, O., COUTRIS, N., AND DELHAYE, J. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 624–651.
- [139] JANHUNEN, P. A positive conservative method for magnetohydrodynamics based on hll and roe methods. *Journal of Computational Physics* 160, 2 (2000), 649–661.
- [140] JELTSCH, R., AND KLINGENSTEIN, P. Error estimators for the position of discontinuities in hyperbolic conservation laws with source terms which are solved using operator splitting. *Computing and Visualization in Science* 1, 4 (1999), 231–249.
- [141] JI, H., LIEN, F.-S., AND YEE, E. A new adaptive mesh refinement data structure with an application to detonation. *Journal of Computational Physics* 229, 23 (2010), 8981–8993.
- [142] JIANG, G.-S., AND SHU, C.-W. Efficient implementation of weighted eno schemes. *Journal of computational physics* 126, 1 (1996), 202–228.
- [143] JIANG, L., SHAN, H., AND LIU, C. Weighted compact scheme for shock capturing. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 15, 2 (2001), 147–155.
- [144] JOHNSEN, E., LARSSON, J., BHAGATWALA, A. V., CABOT, W. H., MOIN, P., OLSON, B. J., RAWAT, P. S., SHANKAR, S. K., SJÖGREEN,

- B., YEE, H., ET AL. Assessment of high-resolution methods for numerical simulations of compressible turbulence with shock waves. *Journal of Computational Physics* 229, 4 (2010), 1213–1237.
- [145] JOHNSON, C. Error estimates and adaptive time-step control for a class of one-step methods for stiff ordinary differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 25, 4 (1988), 908–926.
- [146] JOUGUET, E. On the propagation of chemical reactions in gases. *J. de mathematiques Pures et Appliquees* 1, 347–425 (1905), 2.
- [147] KIM, D., AND KWON, J. H. A high-order accurate hybrid scheme using a central flux scheme and a weno scheme for compressible flowfield analysis. *Journal of Computational Physics* 210, 2 (2005), 554–583.
- [148] KIM, J., AND LOWENGRUB, J. Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces and free boundaries* 7, 4 (2005), 435–466.
- [149] KIM, K. H., KIM, C., AND RHO, O.-H. Methods for the accurate computations of hypersonic flows: I. ausmpw+ scheme. *Journal of Computational Physics* 174, 1 (2001), 38–80.
- [150] KIM, K. H., LEE, J. H., AND RHO, O. H. An improvement of ausm schemes by introducing the pressure-based weight functions. *Computers & fluids* 27, 3 (1998), 311–346.
- [151] KIM, M. S., AND LEE, W. I. A new vof-based numerical scheme for the simulation of fluid flow with free surface. part i: New free surface-tracking algorithm and its verification. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 42, 7 (2003), 765–790.
- [152] KNIO, O. M., NAJM, H. N., AND WYCKOFF, P. S. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: Ii. stiff, operator-split formulation. *Journal of Computational Physics* 154, 2 (1999), 428–467.
- [153] KOLEV, N. I. *Multiphase flow dynamics: Fundamentals*. Springer, 2005.

- 
- [154] KOTOV, D., YEE, H., WANG, W., AND SHU, C. On spurious numerics in solving reactive equations. *Proceedings of the ASTRONUM-2012, The Big Island, Hawaii* (2012), 24–28.
- [155] KRIVODONOVA, L., XIN, J., REMACLE, J.-F., CHEVAUGEON, N., AND FLAHERTY, J. E. Shock detection and limiting with discontinuous galerkin methods for hyperbolic conservation laws. *Applied Numerical Mathematics* 48, 3-4 (2004), 323–338.
- [156] LAFAURIE, B., NARDONE, C., SCARDOVELLI, R., ZALESKI, S., AND ZANETTI, G. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics* 113, 1 (1994), 134–147.
- [157] LAX, P., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Communications on Pure and Applied mathematics* 13, 2 (1960), 217–237.
- [158] LAX, P. D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. *Communications on pure and applied mathematics* 7, 1 (1954), 159–193.
- [159] LAX, P. D. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Communications on pure and applied mathematics* 10, 4 (1957), 537–566.
- [160] LAX, P. D. *Decay of solutions of systems of nonlinear hyperbolic conservation laws*, vol. 101. American Mathematical Soc., 1970.
- [161] LAX, P. D., AND LIU, X.-D. Solution of two-dimensional riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM Journal on Scientific Computing* 19, 2 (1998), 319–340.
- [162] LECKNER, B. Fluidized bed combustion: mixing and pollutant limitation. *Progress in Energy and Combustion Science* 24, 1 (1998), 31–61.
- [163] LEE, J. H. *The detonation phenomenon*, vol. 2. Cambridge University Press Cambridge, 2008.

- [164] LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of computational physics* 103, 1 (1992), 16–42.
- [165] LEMOS, C. A simple numerical technique for turbulent flows with free surfaces. *International journal for numerical methods in fluids* 15, 2 (1992), 127–146.
- [166] LEMOS, C. M. Higher-order schemes for free surface flows with arbitrary configurations. *International journal for numerical methods in fluids* 23, 6 (1996), 545–566.
- [167] LEVEQUE, R. J. *Numerical methods for conservation laws*. Springer Science & Business Media, 1992.
- [168] LEVEQUE, R. J., AND YEE, H. C. A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms. *Journal of computational physics* 86, 1 (1990), 187–210.
- [169] LEVY, D., PUPPO, G., AND RUSSO, G. Compact central weno schemes for multidimensional conservation laws. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 2 (2000), 656–672.
- [170] LI, G., AND QIU, J. Hybrid weighted essentially non-oscillatory schemes with different indicators. *Journal of Computational Physics* 229, 21 (2010), 8105–8129.
- [171] LI, Z., JABERI, F. A., AND SHIH, T. I. A hybrid lagrangian-eulerian particle-level set method for numerical simulations of two-fluid turbulent flows. *International journal for numerical methods in fluids* 56, 12 (2008), 2271–2300.
- [172] LIONS, P.-L., PERTHAME, B., AND SOUGANIDIS, P. E. Existence and stability of entropy solutions for the hyperbolic systems of isentropic gas dynamics in eulerian and lagrangian coordinates. *Communications on pure and applied mathematics* 49, 6 (1996), 599–638.

- 
- [173] LIONS, P.-L., PERTHAME, B., AND TADMOR, E. Kinetic formulation of the isentropic gas dynamics and p-systems. *Communications in mathematical physics* 163, 2 (1994), 415–431.
- [174] LIOU, M.-S. Progress towards an improved cfd method: Ausm+. *AIAA paper 1701* (1995), 155.
- [175] LIOU, M.-S. A sequel to ausm: Ausm+. *Journal of computational Physics* 129, 2 (1996), 364–382.
- [176] LIOU, M.-S. *Ten Years in the Making: AUSM-family*. National Aeronautics and Space Administration, Glenn Research Center, 2001.
- [177] LIOU, M.-S. A sequel to ausm, part ii: Ausm+-up for all speeds. *Journal of Computational Physics* 214, 1 (2006), 137–170.
- [178] LIOU, M.-S., AND STEFFEN, C. J. A new flux splitting scheme. *Journal of Computational physics* 107, 1 (1993), 23–39.
- [179] LIU, L., AND BECERRA, M. An efficient semi-lagrangian algorithm for simulation of corona discharges: the position-state separation method. *IEEE Transactions on Plasma Science* 44, 11 (2016), 2822–2831.
- [180] LIU, T., KHOO, B., AND WANG, C. The ghost fluid method for compressible gas–water simulation. *Journal of Computational Physics* 204, 1 (2005), 193–221.
- [181] LIU, T., KHOO, B., AND YEO, K. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface. *Journal of Computational Physics* 190, 2 (2003), 651–681.
- [182] LIU, T.-P., AND SMOLLER, J. A. On the vacuum state for the isentropic gas dynamics equations. *Advances in Applied Mathematics* 1, 4 (1980), 345–359.

- [183] LIU, X.-D., OSHER, S., AND CHAN, T. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of computational physics* 115, 1 (1994), 200–212.
- [184] LOMBARD, C., BARDINA, J., VENKATAPATHY, E., AND OLIGER, J. Multi-dimensional formulation of cscm-an upwind flux difference eigenvector split method for the compressible navier-stokes equations. In *6th Computational Fluid Dynamics Conference* (1983), pp. 649–664.
- [185] MACCORMACK, R. An upwind conservation form method for ideal magnetohydrodynamics equations, aiaa, 1999.
- [186] MACCORMACK, R. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. *AIAA Paper No. 69-354* (1969).
- [187] MACCORMACK, R. W. Non-equilibrium ionized flow simulations within strong electro-magnetic fields. In *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition: Aerospace Sciences Meetings* (2010), pp. 2010–0225.
- [188] MARTÍN, M. P., TAYLOR, E. M., WU, M., AND WEIRS, V. G. A bandwidth-optimized weno scheme for the effective direct numerical simulation of compressible turbulence. *Journal of Computational Physics* 220, 1 (2006), 270–289.
- [189] MCKEE, S., TOMÉ, M., FERREIRA, V., CUMINATO, J., CASTELO, A., SOUSA, F., AND MANGIAVACCHI, N. The mac method. *Computers & Fluids* 37, 8 (2008), 907–930.
- [190] McLACHLAN, R. I., AND QUISPÉL, G. R. W. Splitting methods. *Acta Numerica* 11 (2002), 341–434.
- [191] McRAE, G. J., GOODIN, W. R., AND SEINFELD, J. H. Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows. *Journal of Computational Physics* 45, 1 (1982), 1–42.



- 
- [192] MERRITT, E. C., MOSER, A. L., HSU, S. C., LOVERICH, J., AND GILMORE, M. Experimental characterization of the stagnation layer between two obliquely merging supersonic plasma jets. *Physical review letters* 111, 8 (2013), 085003.
- [193] MESHKOV, E. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave. *Fluid Dynamics* 4, 5 (1969), 101–104.
- [194] MIKEŠ, J., STEPANOV, S., AND JUKL, M. The pre-maxwell equations. In *Geometric Methods in Physics*. Springer, 2013, pp. 377–381.
- [195] MIYOSHI, T., AND KUSANO, K. A multi-state hll approximate riemann solver for ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 208, 1 (2005), 315–344.
- [196] MORESI, L., DUFOUR, F., AND MÜHLHAUS, H.-B. A lagrangian integration point finite element method for large deformation modeling of viscoelastic geomaterials. *Journal of Computational Physics* 184, 2 (2003), 476–497.
- [197] MORETTI, G. Computation of flows with shocks. *Annual Review of Fluid Mechanics* 19, 1 (1987), 313–337.
- [198] MOUREAU, V., FIORINA, B., AND PITSCH, H. A level set formulation for premixed combustion les considering the turbulent flame structure. *Combustion and Flame* 156, 4 (2009), 801–812.
- [199] NAJM, H. N., WYCKOFF, P. S., AND KNIO, O. M. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: I. stiff chemistry. *Journal of Computational Physics* 143, 2 (1998), 381–402.
- [200] NGUYEN, D., GIBOU, F., AND FEDKIW, R. A fully conservative ghost fluid method and stiff detonation waves. In *12th Int. Detonation Symposium, San Diego, CA* (2002).

- [201] NICHOLS, B., AND HIRT, C. Improved free surface boundary conditions for numerical incompressible-flow calculations. *Journal of Computational Physics* 8, 3 (1971), 434–448.
- [202] NICHOLS, J. W., LARSSON, J., BERNARDINI, M., AND PIROZZOLI, S. Stability and modal analysis of shock/boundary layer interactions. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* (2016), 1–18.
- [203] NOURGALIEV, R. R., DINH, T.-N., AND THEOFANOUS, T. G. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics. *Journal of Computational Physics* 213, 2 (2006), 500–529.
- [204] OLEINIK, O. A. Discontinuous solutions of non-linear differential equations. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 12, 3 (1957), 3–73.
- [205] OLEINIK, O. A. On the uniqueness of the generalized solution of the cauchy problem for a non-linear system of equations occurring in mechanics. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 12, 6 (1957), 169–176.
- [206] OLEINIK, O. A. Uniqueness and stability of the generalized solution of the cauchy problem for a quasi-linear equation. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 14, 2 (1959), 165–170.
- [207] OSHER, S. Shock modelling in transonic and supersonic flow.
- [208] OSHER, S., AND FEDKIW, R. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, vol. 153. Springer Science & Business Media, 2006.
- [209] OSHER, S., AND SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics* 79, 1 (1988), 12–49.
- [210] OSHER, S., AND SOLOMON, F. Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws. *Mathematics of computation* 38, 158 (1982), 339–374.

- 
- [211] PANG, Y., CAI, S., AND ZHAO, Y. Global solutions to the two-dimensional riemann problem for a system of conservation laws. *Journal of Mathematical Physics* 57, 6 (2016), 061501.
- [212] P.D.LAX. Shock waves and entropy, in contributions to nonlinear functional analysis (e. a. zarantonello, ed.). *Academic Press, New York* (1971), 603–634.
- [213] P.D.LAX, B. W. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Comm. Pure Appl. Math.* 13 (1960), 537–566.
- [214] PENG, J., AND SHEN, Y. Improvement of weighted compact scheme with multi-step strategy for supersonic compressible flow. *Computers & Fluids* 115 (2015), 243–255.
- [215] PILLIOD, J. E., AND PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics* 199, 2 (2004), 465–502.
- [216] PIROZZOLI, S. Conservative hybrid compact-weno schemes for shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics* 178, 1 (2002), 81–117.
- [217] PIROZZOLI, S. Numerical methods for high-speed flows. *Annual review of fluid mechanics* 43 (2011), 163–194.
- [218] POINSOT, T., ECHEKKI, T., AND MUNGAL, M. A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combustion science and technology* 81, 1-3 (1992), 45–73.
- [219] POPINET, S., AND ZALESKI, S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 30, 6 (1999), 775–793.
- [220] POWELL, K. G., ROE, P. L., LINDE, T. J., GOMBOSI, T. I., AND DE ZEEUW, D. L. A solution-adaptive upwind scheme for ideal magneto-hydrodynamics. *Journal of Computational Physics* 154, 2 (1999), 284–309.

- [221] POWERS, J. M., AND PAOLUCCI, S. Accurate spatial resolution estimates for reactive supersonic flow with detailed chemistry. *AIAA journal* 43, 5 (2005), 1088–1099.
- [222] QIU, J., AND SHU, C.-W. A comparison of troubled-cell indicators for runge–kutta discontinuous galerkin methods using weighted essentially nonoscillatory limiters. *SIAM Journal on Scientific Computing* 27, 3 (2005), 995–1013.
- [223] REN, Y.-X., ZHANG, H., ET AL. A characteristic-wise hybrid compact-weno scheme for solving hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 192, 2 (2003), 365–386.
- [224] RICHARDSON, L. F. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 2007.
- [225] RIDER, W. J., AND KOTHE, D. B. Reconstructing volume tracking. *Journal of computational physics* 141, 2 (1998), 112–152.
- [226] RIEMANN, B. *Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite*. Verlag der Dieterichschen Buchhandlung, 1860.
- [227] ROE, P. L. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics* 43, 2 (1981), 357–372.
- [228] ROE, P. L., AND BALSARA, D. S. Notes on the eigensystem of magnetohydrodynamics. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 56, 1 (1996), 57–67.
- [229] RUBIN, E. L., AND BURSTEIN, S. Z. Difference methods for the inviscid and viscous equations of a compressible gas. *Journal of Computational Physics* 2, 2 (1967), 178–196.
- [230] RUPERT, V. Shock-interface interaction: current research on the richtmyer-meshkov problem. In *Shock Waves*. Springer, 1992, pp. 83–94.

- 
- [231] RUSANOV, V. On difference schemes of third order accuracy for nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 5, 3 (1970), 507–516.
- [232] SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics* 31, 1 (1999), 567–603.
- [233] SCHECTER, S., AND SHEARER, M. Undercompressive shocks for non-strictly hyperbolic conservation laws. *Journal of Dynamics and Differential Equations* 3, 2 (1991), 199–271.
- [234] SCHULTZ, E., AND SHEPHERD, J. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation.
- [235] SCHULZ-RINNE, C. W. Classification of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics. *SIAM journal on mathematical analysis* 24, 1 (1993), 76–88.
- [236] SETHIAN, J. A. *Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*, vol. 3. Cambridge university press, 1999.
- [237] SHAMPINE, L. F. *Numerical solution of ordinary differential equations*, vol. 4. CRC Press, 1994.
- [238] SHANG, J. Recent research in magneto-aerodynamics. *Progress in Aerospace Sciences* 37, 1 (2001), 1–20.
- [239] SHEN, Y., LIU, L., AND YANG, Y. Multistep weighted essentially non-oscillatory scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 75, 4 (2014), 231–249.
- [240] SHEN, Y., YANG, G., AND GAO, Z. High-resolution finite compact difference schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 216, 1 (2006), 114–137.

- [241] SHEN, Y., AND ZHA, G. Application of low diffusion e-cusp scheme with high order weno scheme for chemical reacting flows. In *40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit* (2010), p. 4995.
- [242] SHEN, Y., AND ZHA, G. Generalized finite compact difference scheme for shock/complex flowfield interaction. *Journal of Computational Physics* 230, 12 (2011), 4419–4436.
- [243] SHEN, Y., AND ZHA, G. Improvement of weighted essentially non-oscillatory schemes near discontinuities. *Computers & Fluids* 96 (2014), 1–9.
- [244] SHEN, Y., ZHA, G., AND HUERTA, M. A. E-cusp scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics with high order weno scheme. *Journal of Computational Physics* 231, 19 (2012), 6233–6247.
- [245] SHEN, Y.-Q., WANG, R.-Q., AND LIAO, H.-Z. A fifth-order accurate weighted enn difference scheme and its applications. *Journal of Computational Mathematics* (2001), 531–538.
- [246] SHENG, W. Two-dimensional riemann problem for scalar conservation laws. *Journal of Differential Equations* 183, 1 (2002), 239–261.
- [247] SHEPHERD, J. Detonation in gases. *Proceedings of the Combustion Institute* 32, 1 (2009), 83–98.
- [248] SHIN, S., AND JURIC, D. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics* 180, 2 (2002), 427–470.
- [249] SHIPILOVA, O., HAARIO, H., AND SMOLIANSKI, A. Particle transport method for convection problems with reaction and diffusion. *International journal for numerical methods in fluids* 54, 10 (2007), 1215–1238.
- [250] SHU, C.-W. Total-variation-diminishing time discretizations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 9, 6 (1988), 1073–1084.

- 
- [251] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics* 77, 2 (1988), 439–471.
- [252] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics* 83, 1 (1989), 32–78.
- [253] SHYUE, K.-M. An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems. *Journal of Computational Physics* 142, 1 (1998), 208–242.
- [254] SMOLIANSKI, A., SHIPILOVA, O., AND HAARIO, H. A fast high-resolution algorithm for linear convection problems: particle transport method. *International journal for numerical methods in engineering* 70, 6 (2007), 655–684.
- [255] SMOLLER, J. *Shock waves and reaction—diffusion equations*, vol. 258. Springer Science & Business Media, 2012.
- [256] SMOOKE, M., PURI, I., AND SESHADRI, K. A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air. In *Symposium (International) on Combustion* (1988), vol. 21, Elsevier, pp. 1783–1792.
- [257] SOLOUKHIN, R. Multiheaded structure of gaseous detonation. *Combustion and Flame* 10, 1 (1966), 51–58.
- [258] SOO KIM, M., SUN PARK, J., AND LEE, W. I. A new vof-based numerical scheme for the simulation of fluid flow with free surface. part ii: application to the cavity filling and sloshing problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 42, 7 (2003), 791–812.

- [259] STEGER, J. L., AND WARMING, R. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *Journal of computational physics* 40, 2 (1981), 263–293.
- [260] STRANG, G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5, 3 (1968), 506–517.
- [261] STULL, D. R., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables. Tech. rep., National Standard Reference Data System, 1971.
- [262] SUSSMAN, M. A second order coupled level set and volume-of-fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. *Journal of Computational Physics* 187, 1 (2003), 110–136.
- [263] SUSSMAN, M., AND PUCKETT, E. G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics* 162, 2 (2000), 301–337.
- [264] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., AND OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics* 114, 1 (1994), 146–159.
- [265] TAN, D. C., AND ZHANG, T. Two-dimensional riemann problem for a hyperbolic system of nonlinear conservation laws: I. four-j cases. *Journal of differential equations* 111, 2 (1994), 203–254.
- [266] TARTAR, L. Compensated compactness and applications to partial differential equations. In *Nonlinear analysis and mechanics: Heriot-Watt symposium* (1979), vol. 4, pp. 136–212.
- [267] TARTAR, L. The compensated compactness method applied to systems of conservation laws. In *Systems of nonlinear partial differential equations*. Springer, 1983, pp. 263–285.
- [268] TOMÉ, M., CUMINATO, J., MANGIAVACCHI, N., MCKEE, S., ET AL. Gensmac3d: a numerical method for solving unsteady three-dimensional



- free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 37, 7 (2001), 747–796.
- [269] TOME, M. F., AND MCKEE, S. Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics* 110, 1 (1994), 171–186.
- [270] TORO, E. F., SPRUCE, M., AND SPEARES, W. Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver. *Shock waves* 4, 1 (1994), 25–34.
- [271] TORRES, D., AND BRACKBILL, J. The point-set method: front-tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics* 165, 2 (2000), 620–644.
- [272] TOSATTO, L., AND VIGEVANO, L. Numerical solution of under-resolved detonations. *Journal of Computational Physics* 227, 4 (2008), 2317–2343.
- [273] TÓTH, G. The  $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$  constraint in shock-capturing magnetohydrodynamics codes. *Journal of Computational Physics* 161, 2 (2000), 605–652.
- [274] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., AND JAN, Y.-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics* 169, 2 (2001), 708–759.
- [275] TUMUKLU, O., LEVIN, D. A., AND AUSTIN, J. M. Shock-shock interactions for a double wedge configuration in different gases. In *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting* (2015), p. 1520.
- [276] UNVERDI, S. O., AND TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics* 100, 1 (1992), 25–37.
- [277] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity. 163–168.

- [278] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics* 14, 4 (1974), 361–370.
- [279] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme iii. upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics* 23, 3 (1977), 263–275.
- [280] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. *Journal of computational physics* 23, 3 (1977), 276–299.
- [281] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of computational Physics* 32, 1 (1979), 101–136.
- [282] VAN LEER, B. Flux-vector splitting for the euler equations. In *IN: International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, 8th, Aachen, West Germany, June 28-July 2, 1982, Proceedings (A84-35301 16-34)*. Berlin, Springer-Verlag, 1982, p. 507-512. (1982), pp. 507–512.
- [283] VON NEUMAN, J. Theory of detonation waves. Tech. rep., DTIC Document, 1942.
- [284] WADA, Y., AND LIOU, M. An accurate and robust splitting scheme for shock and contact discontinuities, aiaa, 1994.
- [285] WANG, C., LIU, T., AND KHOO, B. A real ghost fluid method for the simulation of multimediuum compressible flow. *SIAM Journal on Scientific Computing* 28, 1 (2006), 278–302.
- [286] WANG, W., SHU, C.-W., YEE, H., KOTOV, D. V., AND SJÖGREEN, B. High order finite difference methods with subcell resolution for stiff multispecies discontinuity capturing. *Communications in Computational Physics* 17, 02 (2015), 317–336.

- 
- [287] WANG, W., SHU, C.-W., YEE, H., AND SJÖGREEN, B. High order finite difference methods with subcell resolution for advection equations with stiff source terms. *Journal of Computational Physics* 231, 1 (2012), 190–214.
- [288] WANG, X., AND DU, Q. Modelling and simulations of multi-component lipid membranes and open membranes via diffuse interface approaches. *Journal of mathematical biology* 56, 3 (2008), 347–371.
- [289] WANG, Z. J., AND CHEN, R. Optimized weighted essentially nonoscillatory schemes for linear waves with discontinuity. *Journal of Computational Physics* 174, 1 (2001), 381–404.
- [290] WANNER, G., AND HAIRER, E. Solving ordinary differential equations ii. *Stiff and Differential-Algebraic Problems* (1991).
- [291] WELCH, J. E., HARLOW, F. H., SHANNON, J. P., AND DALY, B. J. The mac method-a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., Univ. of California, N. Mex., 1965.
- [292] WOODWARD, P., AND COLELLA, P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of computational physics* 54, 1 (1984), 115–173.
- [293] XIANG, G., WANG, C., TENG, H., AND JIANG, Z. Investigations of three-dimensional shock/shock interactions over symmetrical intersecting wedges. *AIAA Journal* 54, 1 (2016), 1472–1481.
- [294] XU, Z., AND SHU, C.-W. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference weno schemes. *Journal of Computational Physics* 205, 2 (2005), 458–485.
- [295] YANG, G., YAO, Y., FANG, J., GAN, T., AND LU, L. Large-eddy simulation of shock-wave/turbulent boundary layer interaction and its control using sparkjet. In *International Journal of Modern Physics: Conference Series* (2016), vol. 42, World Scientific, p. 1660186.

- [296] YEE, H., KOTOV, D. V., WANG, W., AND SHU, C.-W. Spurious behavior of shock-capturing methods by the fractional step approach: Problems containing stiff source terms and discontinuities. *Journal of Computational Physics* 241 (2013), 266–291.
- [297] YEE, H., AND SJÖGREEN, B. Development of low dissipative high order filter schemes for multiscale navier–stokes/mhd systems. *Journal of Computational Physics* 225, 1 (2007), 910–934.
- [298] YEE, H., AND SJÖGREEN, B. High order filter methods for wide range of compressible flow speeds. In *Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations*. Springer, 2011, pp. 327–337.
- [299] YOON, H., PARK, I., LEE, Y., AND JEONG, J. An unstructured smac algorithm for thermal non-equilibrium two-phase flows. *International Communications in Heat and Mass Transfer* 36, 1 (2009), 16–24.
- [300] YOUNG, F. R. *Cavitation*. World Scientific, 1999.
- [301] YOUNGS, D. L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics* 24, 2 (1982), 273–285.
- [302] YU, C., GAO, Z., AND SHEU, T. W. Development of a symplectic and phase error reducing perturbation finite-difference advection scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 70, 2 (2016), 136–151.
- [303] YU, S.-H. Zero-dissipation limit of solutions with shocks for systems of hyperbolic conservation laws. *Archive for rational mechanics and analysis* 146, 4 (1999), 275–370.
- [304] YUE, P., ZHOU, C., AND FENG, J. J. Sharp-interface limit of the cahn–hilliard model for moving contact lines. *Journal of Fluid Mechanics* 645 (2010), 279–294.
- [305] ZALESAK, S. T. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of computational physics* 31, 3 (1979), 335–362.

- 
- [306] ZELDOVICH, J. To the theory of detonation propagation in gas systems. *Journal of experimental and theoretical physics* 10, 5 (1940), 542–568.
- [307] ZHA, G. Comparative study of upwind scheme performance for entropy condition and discontinuities, aiaa, 1999. Tech. rep., Paper 99-CP-3348, June 28-July 1.
- [308] ZHA, G., SHEN, Y., AND WANG, B. Calculation of transonic flows using weno method with a low diffusion e-cusp upwind scheme. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2008), p. 745.
- [309] ZHA, G.-C. Numerical tests of upwind scheme performance for entropy condition. *AIAA journal* 37, 8 (1999), 1005–1007.
- [310] ZHA, G.-C. A low diffusion e-cusp upwind scheme for transonic flows. In *34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit* (2004), p. 2707.
- [311] ZHA, G.-C. Low diffusion efficient upwind scheme. *AIAA journal* 43, 5 (2005), 1137–1140.
- [312] ZHA, G.-C., AND BILGEN, E. Numerical solutions of euler equations by using a new flux vector splitting scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 17, 2 (1993), 115–144.
- [313] ZHA, G.-C., AND HU, Z. Calculation of transonic internal flows using an efficient high-resolution upwind scheme. *AIAA journal* 42, 2 (2004), 205–214.
- [314] ZHA, G.-C., SHEN, Y., AND WANG, B. An improved low diffusion e-cusp upwind scheme. *Computers & Fluids* 48, 1 (2011), 214–220.
- [315] ZHANG, B., LIU, H., CHEN, F., AND WANG, J. H. The equilibrium state method for hyperbolic conservation laws with stiff reaction terms. *Journal of Computational Physics* 263 (2014), 151–176.

- [316] ZHANG, S., JIANG, S., AND SHU, C.-W. Development of nonlinear weighted compact schemes with increasingly higher order accuracy. *Journal of Computational Physics* 227, 15 (2008), 7294–7321.
- [317] ZHANG, T., AND ZHENG, Y. X. Conjecture on the structure of solutions of the riemann problem for two-dimensional gas dynamics systems. *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 21, 3 (1990), 593–630.
- [318] ZHELTOVODOV, A. Shock waves/turbulent boundary-layer interactions-fundamental studies and applications. In *Fluid Dynamics Conference* (1996), p. 1977.
- [319] ZHI, G. Advances in perturbation finite difference (pfd) method [j]. *Advances in Mechanics* 2 (2000), 003.
- [320] ZHOU, Q., YAO, Z., HE, F., AND SHEN, M. A new family of high-order compact upwind difference schemes with good spectral resolution. *Journal of Computational Physics* 227, 2 (2007), 1306–1339.
- [321] ZHU, H., AND QIU, J. Adaptive runge–kutta discontinuous galerkin methods using different indicators: one-dimensional case. *Journal of Computational Physics* 228, 18 (2009), 6957–6976.
- [322] 傅德薰, 马延文, ET AL. 计算流体力学. 高等教育出版社, 2002.
- [323] 刘小民. 一维非严格双曲守恒律方程的 *Riemann* 问题. PhD thesis, 中国科学院研究生院 (武汉物理与数学研究所), 2012.
- [324] 姜宗林, 滕宏辉, AND 刘云峰. 气相爆轰物理的若干研究进展. *力学进展* 42, 2 (2012), 129–140.
- [325] 应隆安, AND 滕振寰. 双曲型守恒律方程及其差分方法, 1991.
- [326] 张德良, ET AL. 计算流体力学教程. 高等教育出版社, 2010.
- [327] 张旭东, 范宝春, 潘振华, AND 归明月. 旋转爆轰自持机理的数值研究. *弹道学报* 23, 1 (2011), 1–4.

- [328] 杨瑞芳. 非齐次双曲型守恒律组的粘性解与弱解的研究. PhD thesis, 南京航空航天大学, 2007.
- [329] 潘振华, 范宝春, AND 归明月. T 型管内流动气体中爆轰绕射过程的数值模拟. 爆炸与冲击 34, 6 (2014), 709–715.
- [330] 王东红. 多介质流体界面追踪方法研究及误差分析. PhD thesis, 南京航空航天大学, 2014.
- [331] 王儒智. Banach 空间中非线性脉冲 volterra 积分方程的  $l_\infty$  (loc)  $\sim p$  解. Master's thesis, 山东师范大学, 2005.
- [332] 王昌建, AND 徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值研究. 爆炸与冲击 25, 5 (2005), 405–416.
- [333] 申义庆, 高智, AND 杨顶辉. 一阶双曲方程的摄动有限差分格式. 计算物理 22, 6 (2005), 650–656.
- [334] 童秉纲, 孔祥言, 邓国华, ET AL. 气体动力学. 高等教育出版社, 1990.
- [335] 肖伟. 气体动力学中压差方程双对称结构 *Riemann* 问题. PhD thesis, 上海大学, 2012.
- [336] 赖耕. 二维可压流体 *Euler* 方程的几类流动结构. PhD thesis, 上海大学, 2010.
- [337] 赵宁, 余彦, AND 唐维军. Rm 不稳定性数值模拟方法. 计算数学 (2001).
- [338] 高智. 对流扩散方程的高精度差分算法. 北京计算流体力学讨论会文集 (第六辑) 1223 (1994).
- [339] 高智, AND 柏威. 对流扩散方程的摄动有限体积 (pfv) 方法及讨论. 力学学报 36, 1 (2004), 88–92.