

# 气相爆轰波胞格结构数值研究\*

王刚<sup>1</sup>, 张德良<sup>2</sup>, 刘凯欣<sup>1</sup>

(1 北京大学工学院 北京; 2 中国科学院力学研究所 北京)

**摘要:** 本文采用我们提出的改进的 CE/SE 算法和新的考虑组分的二阶段化学反应模型对爆轰波的传播和反射过程进行了数值模拟。考虑组分的二阶段化学反应模型中的组分数据是由基元化学反应模型计算求得的。得到的爆轰波胞格结构与实验结果的胞格结构十分吻合。而且数值结果能够准确地反映马赫反射前后胞格结构的变化。因此, 将我们改进的 CE/SE 算法运用到爆轰波传播和反射问题等的化学反应流动问题中是可行的。

**关键词:** CE/SE 算法 爆轰波 胞格结构 数值模拟 马赫反射 基元反应

## 1 引言

非定常爆轰传播和马赫反射过程是十分复杂的现象, 对它们的研究也已经有相当长的历史。上世纪 50 年代末 60 年代初, 发现了爆轰波胞格结构。但是, 关于爆轰波马赫反射问题直到上世纪 90 年代才引起学者的关注, 成为研究的热点。长期以来, 有关爆轰波传播和马赫反射的研究主要是通过实验手段进行研究; 从 80 年代开始, 随着计算机技术的进一步发展, 对于爆轰波的数值模拟开始发展起来。然而, 至今爆轰波胞格结构机理仍然没有完全解决。从上世纪 90 年代开始, 国内对爆轰波胞格结构机理展开了研究。中科院力学所的张德良<sup>[1-5]</sup>和姜宗林<sup>[1]</sup>, 中国科技大学的郭长铭<sup>[2-7]</sup>和徐胜利<sup>[6-8]</sup>等, 在气相爆轰方面做了很多有价值的实验和数值模拟方面的工作。

对带有化学反应的爆轰波胞格结构计算是非常困难的, 必须对物理模型和化学反应模型进行简化。目前普遍使用的化学反应模型为 ZND 模型。ZND 模型假设由非常薄的前导冲击波和具有一定厚度的后续化学反应区组成, 并且前导冲击波和化学反应区以相同的有限化学反应速率在可燃气体中传播。目前 ZND 模型主要有三种: 一阶段化学反应模型、二阶段化学反应模型和基元化学反应模型。一阶段化学反应模型过于简单, 而基元化学反应模型计算准确但计算量太大, 二阶段化学反应模型是实际应用中常用的一种 ZND 模型。

二阶段化学反应模型是一种简化的 ZND 化学反应历程的模型。这种模型将复杂的反应过程简化为两个阶段: 诱导阶段和放热阶段。早期的二阶段化学反应模型<sup>[9]</sup>没有考虑化学组分在反应前后的变化, 计算中某些气体动力学参数(例如温度)常常是错误的。为弥补这一缺陷, Sichel M<sup>[10]</sup>等人提出了一种考虑化学反应前后化学组分的变化, 多个组分二阶段化学反应模型, 这种方法需要以基元化学反应模型为基础来求得各组分在爆轰过程的变化。目前采用这种新的二阶段化学反应模型来计算和研究爆轰波胞格结构的报告不多。

80 年代以来, 高精度算法得到迅速发展, 时空守恒元解元算法<sup>[11,12]</sup>(The Space-Time Conservation Element and Solution Element Method, CE/SE Method)就是一种全新概念的高精度算法。这种算法无论从概念上还是从格式的构造方法上, 都与传统的数值方法有很大的不同。大量的数值实践表明 CE/SE 算法在流体力学中应用是成功的。但由于原 CE/SE 算法的网格结构较为复杂, 导致推导出来的 CE/SE 格式也较为复杂, 严重影响了 CE/SE 格式的应用和发展。为此, 国内外学者对 CE/SE 格式进行不同的改进<sup>[4,13,14]</sup>, 并取得了一定的进展。近年来 CE/SE 格式在计算流体力学中已经得到广泛应用<sup>[15]</sup>, 但是在化学反应流动中应用并不多见, 目前尚未见到在爆轰波传播和马赫反射方面的应用。

本文采用我们提出的 CE/SE 改进算法<sup>[7]</sup>, 结合基元反应模型求得考虑化学组分的二阶段模型需

\* 国家自然科学基金资助项目 (10572002)

要的数据,进而使用考虑组分的二阶段化学反应模型对爆轰波传播和马赫反射过程进行了数值模拟,并将计算得到的爆轰波胞格结构及实验的胞格结构进行了对比。

## 2、控制方程

不考虑扩散效应、忽略热传导和粘性作用的条件下,二维笛卡儿坐标系中二阶段化学反应模型和基元反应模型的基本方程组均为:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} = \mathbf{S} \quad (1)$$

在二阶段化学反应模型中:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho \alpha \\ \rho \beta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E+p)u \\ \rho \alpha u \\ \rho \beta u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E+p)v \\ \rho \alpha v \\ \rho \beta v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \dot{\omega}_\alpha \\ \rho \dot{\omega}_\beta \end{pmatrix},$$

其中:  $\rho$ 、 $u$ 、 $v$ 、 $p$  分别是密度、 $x$  方向的速度分量、 $y$  方向的速度分量、压强,  $\dot{\omega}_\alpha$  和  $\dot{\omega}_\beta$  为二阶段化学反应模型中诱导反应进行速率和化学反应进行速率,  $E$  为单位体积的总能:

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

$h$  为混合气体比焓。在基元反应模型中:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho C_1 \\ \rho C_2 \\ \vdots \\ \rho C_{ns} \\ m \\ n \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} m C_1 \\ m C_2 \\ \vdots \\ m C_{ns} \\ m^2 / \rho + p \\ mn / \rho \\ (E+p)m / \rho \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} n C_1 \\ n C_2 \\ \vdots \\ n C_{ns} \\ mn / \rho \\ n^2 / \rho + p \\ (E+p)n / \rho \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \dot{\omega}_2 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_{ns} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

其中:  $ns$  为组分数;  $C_i$  ( $i=1, \dots, ns$ ) 为第  $i$  种组分的质量分数; 混合气体的总密度为

$$\rho = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i = \sum_{i=1}^{ns} \rho C_i; \quad \rho_i \text{ 为第 } i \text{ 种组分的分密度; } m = \rho u, \quad n = \rho v; \quad u, v \text{ 分别为 } x \text{ 和 } y \text{ 方向的速度}$$

分量;  $E$  为单位体积总能, 表达式同(2); 混合气体比焓  $h = \sum_{i=1}^{ns} C_i h_i$ , 第  $i$  种组分的焓值  $h_i$  由文献[16]

给出;  $p$  为混合气体的压力, 由道尔顿分压定律和组分气体的状态方程给出:

$$p = \sum_{i=1}^{ns} \rho_i R_i T \quad (3)$$

其中： $R_i$ 为第*i*种组分的气体常数， $T$ 为混合气体的温度； $\dot{\omega}_i$ 为第*i*种组分的单位体积的质量生成率。

### 3、温度的求解

本文采用考虑组分的二阶段化学反应模型<sup>[10]</sup>。在求解温度时需要考虑化学反应前后化学组分，因此必须首先采用基元化学反应模型来计算化学反应前后化学组分。设可燃混合气体第*i*种组分的摩尔质量为 $W_i$ ； $R_0 = 8.314\text{J/mol/K}$ 为普适气体常数。

第*i*种组分的焓值 $h_i$ 和定压比热 $C_{p_i}$ 由文献[16]中的多项式拟合的方法得到：

$$\frac{C_{p_i}}{R_i} = a_{1i}T^{-2} + a_{2i}T^{-1} + a_{3i} + a_{4i}T + a_{5i}T^2 + a_{6i}T^3 + a_{7i}T^4 \quad (4)$$

$$\frac{h_i}{R_i T} = -a_{1i}T^{-2} + a_{2i}T^{-1} \ln T + a_{3i} + \frac{a_{4i}}{2}T + \frac{a_{5i}}{3}T^2 + \frac{a_{6i}}{4}T^3 + \frac{a_{7i}}{5}T^4 + \frac{b_{1i}}{T} \quad (5)$$

其中： $a_{ki}$ 和 $b_{ki}$  ( $k=1, \dots, 7$ )为多项式系数，可以查表获得<sup>[16]</sup>。

比焓和比热的关系：

$$h_i = \int C_{p_i} dT + h_{0i} \quad (6)$$

可燃混合气体的绝热指数和比热：

$$\hat{\gamma} = \frac{C_p}{C_p - R} \quad (7)$$

$$C_p = \sum_{i=1}^N C_i C_{p_i} \quad (8)$$

联合单位体积总能公式(2)和状态方程(3)可以推出关于温度 $T$ 的函数：

$$F(T) = \rho \sum_{i=1}^{ns} C_i h_i - \left( E - \frac{\rho}{2}(u^2 + v^2) \right) - \rho \sum_{i=1}^{ns} C_i R_i T = 0 \quad (9)$$

在化学反应源项的计算过程中，通过求解非线性方程(9)式得到温度。本文采用Newton迭代法，迭代公式如下：

$$T_{n+1} = T_n - \frac{F(T_n)}{F'(T_n)} \quad (10)$$

其中： $F'(T_n) = \frac{d(F(T))}{dT} = \rho \sum_{i=1}^{ns} (C_i C_{p_i} - C_i R_i) = \rho(C_p - R)$ ，当 $T_{n+1} - T_n$ 和 $F(T_{n+1}) - F(T_n)$ 同时达

到某个小值（本文为 $1.0 \times 10^{-4}$ ）时停止迭代。

## 4、CE/SE 方法的改进

自从 1995 年 Chang 提出 CE/SE 算法以来<sup>[11]</sup>, CE/SE 算法在计算流体力学中得到广泛应用。我们在原有的 CE/SE 算法基础上,提出了一种新的改进的 CE/SE 算法<sup>[4]</sup>。在我们改进的 CE/SE 算法中我们直接采用四个守恒元来求解 Euler 方程组,改进后的 CE/SE 算法易于直接求解激波间断,并具有单元结构简单、清晰,编程方便、计算时间少和便于向三维问题推广的特点。图 1 给出了 Chang 提出 CE/SE 算法中的解元和守恒元的结构,而图 2 给出了我们改进的 CE/SE 算法的解元和守恒元结构。

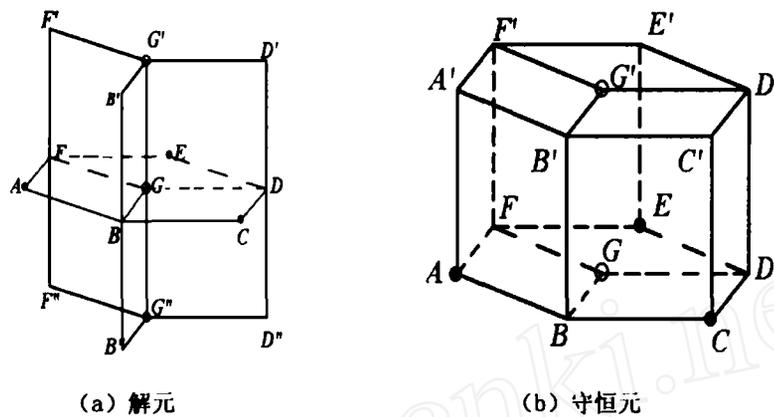


图 1 S. C. Chang 提出的 CE/SE 算法的解元和守恒元网格结构

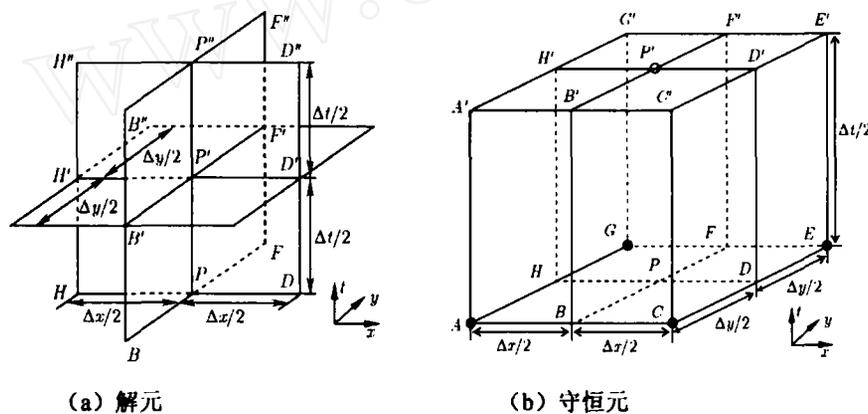


图 2 本文提出的 CE/SE 算法的解元和守恒元网格结构

## 5、数值模拟结果及分析

本文采用基元反应模型得到的数据运用考虑化学组分二阶段化学反应模型和改进的 CE/SE 算法对  $H_2$  和  $O_2$  可燃混合物的爆轰波传播和马赫反射进行了数值计算。 $H_2$  和  $O_2$  可燃混合物中  $H_2: O_2=2:1$ , 质量分数分别为 11.116% 和 88.884%。我们采用 8 组分 20 化学反应模型,模型参数如表 1 所示。

作为算法的检验,我们首先计算爆轰波在一维管道中传播问题。管道左端设一点火区域(五个网格点),在点火区域加高温高压条件,分别使用  $13T_0$  和  $28P_0$ ,其中  $T_0=298K$  和  $P_0=1atm$  分别表示为反应气体的初始压力和温度。管道四周壁面采用固壁边界条件。

数值模拟得到的爆速为 2816m/s。计算得到的在化学反应达到平衡时  $H_2$ 、 $O_2$ 、 $H$ 、 $O$ 、 $HO$ 、 $HO_2$ 、 $H_2O$  和  $H_2O_2$  的质量分数分别为: 0.01978, 0.10042, 0.00449, 0.0327, 0.14027, 0.00023209, 0.70209 和 0.000022772。这和相同的条件下文献[17]的计算结果十分接近,说明我们的计算模型和算法是可行的。

计算给出了爆轰波传播胞格结构。三波对撞过程和爆轰波传播数值胞格结构如图 3 所示,爆轰波马赫反射的数值胞格如图 5 所示。图 4 和图 6 分别表示实验所得到的爆轰波传播和马赫反射胞格结构。

通过分别与相应的实验结果进行比较,可以看出数值计算得到的胞格结构和实验结果十分吻合,能够准确地反映了马赫反射前后胞格结构的变化。这表明我们采用考虑组分的二阶段化学反应模型和改进的CE/SE算法能够精确地数值模拟爆轰波胞格结构。

表1 H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> 8组分20反应模型参数(单位: mol, s, m, K, J)

|    | 基元反应式   | $A_k$                 | $nk$ | $E_{ak}$ |    | 基元反应式   | $A_k$                 | $nk$ | $E_{ak}$ |
|----|---|-----------------------|------|----------|----|---|-----------------------|------|----------|
| 1  | H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =2OH                 | 1.70×10 <sup>7</sup>  | 0.0  | 199959   | 11 | H+H+H <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>                              | 9.20×10 <sup>4</sup>  | -0.6 | 0        |
| 2  | OH+H <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O+H               | 1.17×10 <sup>3</sup>  | 1.3  | 15175    | 12 | H+H+H <sub>2</sub> O=H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O                           | 6.00×10 <sup>7</sup>  | -1.3 | 0        |
| 3  | O+OH=O <sub>2</sub> +H                              | 4.00×10 <sup>8</sup>  | -0.5 | 0        | 13 | H+OH+M=H <sub>2</sub> O+M   | 1.60×10 <sup>16</sup> | -2.0 | 0        |
| 4  | O+H <sub>2</sub> =OH+H                              | 5.06×10 <sup>-2</sup> | 2.7  | 26324    | 14 | H+O+M=OH+M  | 6.20×10 <sup>10</sup> | -0.6 | 0        |
| 5  | H+O <sub>2</sub> +M=HO <sub>2</sub> +M              | 3.61×10 <sup>11</sup> | -0.7 | 0        | 15 | O+O+M=O <sub>2</sub> +M   | 1.89×10 <sup>7</sup>  | 0.0  | -7483    |
| 6  | OH+HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O+O <sub>2</sub> | 7.50×10 <sup>6</sup>  | 0.0  | 0        | 16 | H+HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>                               | 1.25×10 <sup>7</sup>  | 0.0  | 0        |
| 7  | H+HO <sub>2</sub> =2OH                              | 1.40×10 <sup>8</sup>  | 0.0  | 4491     | 17 | HO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> | 2.00×10 <sup>6</sup>  | 0.0  | 0        |
| 8  | O+HO <sub>2</sub> =O <sub>2</sub> +OH               | 1.40×10 <sup>7</sup>  | 0.0  | 4491     | 18 | H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M=2OH+M  | 1.30×10 <sup>17</sup> | 0.0  | 190418   |
| 9  | 2OH=O+H <sub>2</sub> O                              | 6.00×10 <sup>2</sup>  | 1.3  | 0        | 19 | H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H=HO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>                | 1.60×10 <sup>6</sup>  | 0.0  | 15903    |
| 10 | H+H+M=H <sub>2</sub> +M                             | 1.00×10 <sup>12</sup> | -1.0 | 0        | 20 | H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH=H <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>              | 1.00×10 <sup>7</sup>  | 0.0  | 7533     |

三体效应系数: (5) H<sub>2</sub>O=18.6×10<sup>-6</sup>, H<sub>2</sub>=2.8618.6×10<sup>-6</sup>; (10) H<sub>2</sub>O=0, H<sub>2</sub>=0; (13) H<sub>2</sub>O=5.018.6×10<sup>-6</sup>; (14) H<sub>2</sub>O=5.018.6×10<sup>-6</sup>; 其它为 1.018.6×10<sup>-6</sup>。

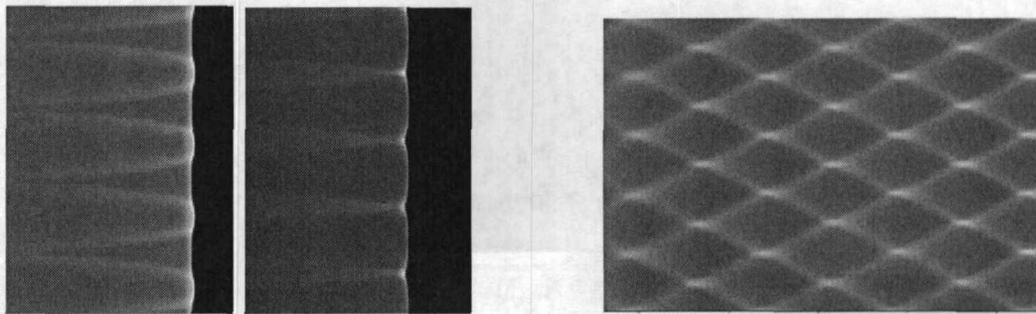


图3 爆轰波的三波对撞过程和数值胞格结构(800×200)

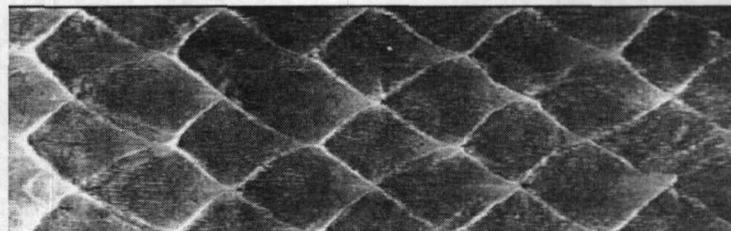


图4 Achasov O V 和 Penyazkov O G 2002 年实验得到爆轰波胞格结构

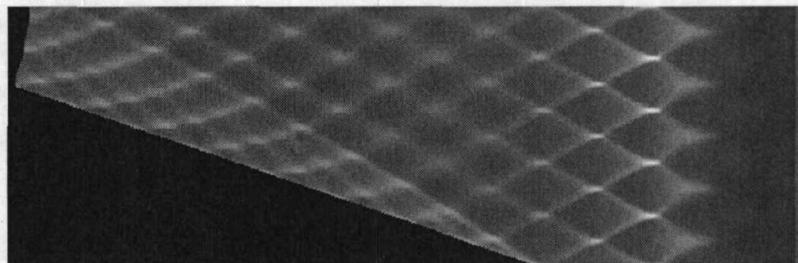


图5 考虑化学组分二阶段化学反应模型得到的爆轰波绕 19.3 度楔块时数值模拟结果(600×200)



图6 爆轰波在19.3度楔面上反射时得到的实验结果

## 6 结论

本文应用基元反应模型和考虑化学组分二阶段化学反应模型以及改进的 CE/SE 算法对可燃混合气体  $2\text{H}_2+\text{O}_2$  的爆轰波在直通道传播和在楔面上反射过程进行了数值模拟, 并将计算结果与实验结果进行了比较。可以得到以下结论: (1)我们首次采用考虑化学组分二阶段化学反应模型和改进的 CE/SE 方法计算爆轰波传播和马赫反射是成功的, 它能够准确模拟爆轰波横波效应和三波对撞过程, 能够准确地反映马赫反射前后胞格结构的变化, 所得到的胞格结构和实验结果十分吻合。(2)我们首次把改进的 CE/SE 算法推广爆轰波传播和马赫反射计算中, 计算实践表明改进的 CE/SE 算法能直接求解间断, 具有单元结构简单、清晰和编程方便、计算时间少和计算精度高的优点。

## 参考文献

- [1] 常利娜, 张德良, 胡宗民, 姜宗林. 频散可控格式的一种推广形式及其在爆轰波马赫反射中应用[J]. 计算物理, 2005,22(3): 189-196.
- [2] 郭长铭, 张德良, 谢巍. 气相爆轰波在障碍物上 Mach 反射的实验验证. 实验力学, 2000, 15(3): 298-305.
- [3] Guo C. M., Zhang D. L., Xie W., The Mach Reflection of a Detonation Based on Soot Track Measurements. Combustion and Flame, 2001,127: 2051-2058.
- [4] 张德良, 谢巍, 郭长铭, 等. 气体爆轰胞格结构和马赫反射数值模拟. 爆炸与冲击, 2001, 21(3): 161-167.
- [5] 张德良, 谢巍, 郭长铭, 等. 气体爆轰胞格结构和马赫反射数值模拟. 爆炸与冲击, 2001, 21(3): 161-167.
- [6] 王昌建, 郭长铭, 徐胜利, 张寒虹. 气相爆轰在 T 形管中传播现象的实验研究. 力学学报, 2004, 36(1): 16-23.
- [7] 王昌建, 徐胜利, 费立森, 郭长铭. 弯管内爆轰波传播的流场显示和数值模拟. 力学学报, 2006, 38(1): 9-15.
- [8] 王昌建, 徐胜利. 直管内胞格爆轰的基元反应数值研究. 爆炸与冲击, 2005, 25(5): 405-416.
- [9] Shiro T., Toshitaka F., Numerical Simulation on the Establishment of Gaseous Detonation. Progress in Astronautics and Aeronautics. 1984, 94: 186-200.
- [10] Sichel M., Tonello N. A., Oran E. S., et al., A Two-step Kinetics Model for Numerical Simulation of Explosions and Detonations in  $\text{H}_2\text{-O}_2$  Mixtures. Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical Physical and Engineering Sciences. 458 (2017) 2002: 49-82.
- [11] Chang S. C., The Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element—A New Approach for Solving the Navier-Stokes Equations and Euler Equation. Journal of Computational Physics, 1995, 119: 295~324.
- [12] Chang S. C., Wang X. Y., Chow C. Y. The Space-Time Conservation Element and Solution Element Method—A New High-Resolution and Genuinely Multidimensional Paradigm for Solving Conservation Laws. I. The Two Dimensional Time Marching Schemes. NASA/TM-1998-208843.
- [13] 张增产, 沈孟育. 一种严格保证时空守恒律的数值方法. 计算物理, 1997, 14(6): 834-840.
- [14] Liu K. X., Wang J. T., Analysis of High Accuracy Conservation-Element and Solution-Element Schemes[J]. China Physics Letter, 2004, 21:2085~2088.
- [15] Jorgenson P. C. E., Loh C. Y., Computing Axisymmetric Jet Screech Tones using Unstructured Grids. AIAA-2002-3889
- [16] McBride B. J., Zehe M. J., Gordon S., NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual

species[R]. NASA/Tp-2202—211556, 2002.

[17] 胡宗民, 高云亮, 张德良, 杨国伟, 姜宗林. 爆轰波在楔面上反射数值分析. 力学学报, 2004, 36(4): 385-392

## Numerical study on gas detonation structure

WANG Gang<sup>1</sup>, ZHANG De-liang<sup>2</sup>, LIU Kai-xin<sup>1</sup>

(1. *College of Engineering, Peking University, Beijing*)

(2. *Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing*)

**Abstract:** The propagation and Mach reflection of detonation wave were simulated by a new two-step chemical reaction model whose components are calculated. The data which the new model need was computed by the detailed chemical reaction model. The computational results were in a good agreement with experiments. The numerical results also can accurately describe the changes of cellular structures between before Mach reflect and after. So the improvement on CE/SE method is successful, and it is feasible to simulate the propagation and Mach reflection of detonation wave by the improved CE/SE method.

**Key words:** CE/SE method; detonation wave; cellular structure; numerical simulation; Mach reflection; detailed chemical reaction model