

文章编号:

双爆轰产生高温燃气的计算与分析

陈兵, 李进平, 陈宏

(中国科学院力学研究所 100190)

摘要: 为了更有效产生高温燃气, 在双爆轰驱动的激波风洞条件下, 提出了一种利用吉布斯自由能法求解热化学平衡态, 计算气体组分来获得燃气的方法。该方法无需考虑物质间的化学反应类型和相应的平衡常数, 大大减小计算量; 并且将该方法引用到双爆轰的理论计算中, 求解 CJ 爆轰和过爆轰后总温、总压的变化趋势, 得到: N_2 含量越高, 总温、总压越小; 爆速越大, 总温、总压越大; 对于相同组分和爆速情况下, P_5 初始压力近似线性关系, T_5 与 N_2 含量近似线性关系。并通过特定反应后的总温和总压($P_0=P_5=5\text{bar}$, $T_0=T_5=4000\text{K}$)计算不同燃料(如 H_2 、 C_2H_2 或 $H_2+C_2H_2$) 与 O_2 恰当混合比但不同 N_2 含量下的起始条件, 得出用 $H_2+C_2H_2$ 燃料的混合气体时, N_2 的改变对初始压力和所需爆速的影响较小, 在实验中容易调控, 为实验状态调试提供理论基础。

关键词: 吉布斯自由能法、双爆轰、过爆轰

中图分类号: **文献标识码:** A

0 引言

吸气式发动机用燃料与来流空气燃烧产生燃气, 但在地面试验条件下, 由于来流总温相当高(通常 $T_0 \geq 2000\text{K}$), 将空气加热到如此高的温度, 不仅耗资巨大, 而且存在相当大的技术难度。例如采用电弧加热, 加热后的空气污染程度比较高; 用激波管技术加热空气, 其实验持续时间太短很难再与燃料均匀混合并充分燃烧; 当前广泛应用的烧氢补氧方法产生燃气, 优点是实验时间比较长, 但难以满足更高总温要求, 而且燃气组分与真实气体相差较大。由于上述原因, 真实组分燃气的产生和污染气体效应的研究就显得尤为重要。

为了改善前向爆轰驱动的激波风洞流场品质, 俞鸿儒首先提出用双爆轰驱动的方法^[1], 陈宏将该方法首先应用到了高温燃气的产生^[2]。与前面几种方法相比, 双爆轰技术的优势非常明显, 不仅所产生燃气的组分、温度和压力满足要求, 而且装置结

构简单, 实验费用低廉。

燃气的种类很多, 有氢燃料或碳氢燃料的理想燃气, 有燃料当量比不是1的燃气, 还有专门用于研究污染气体效应的非理想燃气。为了获得所需温度和压力的燃气和较长时间的平稳状态, 实验中不仅要消除爆轰波后的泰勒波, 而且要达到缝合状态运行, 实验中调试不同燃气状态相当繁琐。因此, 在调试前需要进行初步数值计算。

国内外对于化学平衡组分的计算主要分为: 化学平衡常数法和吉布斯自由能法。化学平衡常数法通过确定处于平衡态的产物之间的反应类型来计算产物的摩尔分数和物性, 如果产物的种类不是很多, 这种方法还是简单易行的。但是, 在计算之前, 必须首先凭经验在与产物相关的成千上百种反应中确立几种反应以便计算, 同时还必须获得这些反应的反应常数, 这种人为的选取过程不可避免地引入了误差。而吉布斯自由能法是指达到化学平衡时平衡

收稿日期: ; 修订日期:

作者简介: 陈兵(1984-), 男, 湖南, 博士, 高温空气动力学; E-mail: chenbing@imech.ac.cn

态的产物的自由能最小的一种化学平衡组分计算方法，该方法无须人为选取化学反应类型和计算反应的过程量，只需直接计算与反应过程无关的平衡态产物，因此计算将更为精确，具有更大的优越性。

本文是在双爆轰的理论基础上运用吉布斯自由能法^[3]来计算热化学平衡态时的产物组成和热物性，通过双爆轰的机理对高温燃气的的需求状态参数进行数值计算，分析不同气体组分下的状态调试方向和对爆速的变化趋势，以获得合理的初始温度、压力和气体组成，为实验状态调试提供理论基础。

1 双爆轰驱动原理

将常温空气和燃料按照实际比例预先充分混合，然后用爆轰的方式充分燃烧产生热力学参数和组分满足要求的实验燃气。由于单爆轰波后伴随Taylor波，流场不均匀，故采用双爆轰驱动。其具体原理如图1：在爆轰驱动段主膜片附近点火后产生一个较强的爆轰波向上游传播，爆轰驱动段中的气体经过爆轰波和紧随的Taylor稀疏波产生足够高的温度和压力，使爆轰段中的混合气体直接起始爆轰，并产生没有Taylor稀疏波的CJ爆轰波或过爆轰波并在末端形成符合缝合条件的反射激波，从而在P5区形成所要求高温燃气。通过调节爆轰驱动段中的混合气体组分和两段初始压力之比，来改变P5区燃气温度和压力，并保持缝合条件以尽可能地延长实验时间。

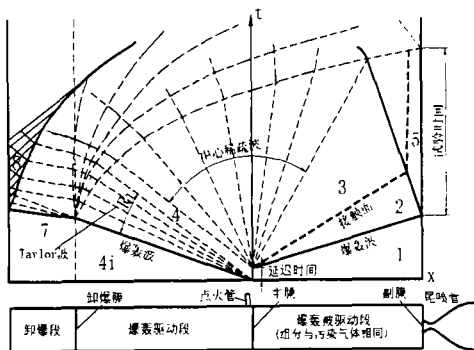


图1 双爆轰驱动产生燃气原理图

Fig.1 the schematic of double detonation drivers to produce gas

2 吉布斯自由能法

吉布斯自由能法就是利用拉格朗日乘子与原子守恒关系对系统的Gibbs函数进行最小化过程，该方法通过计算拉格朗日乘子，来达到计算某温度和压强下平衡态物质的组成的过程。

混合气体吉布斯函数^[3]为：

$$\frac{G}{RT} = \sum_{i=1}^m \left(\frac{x_i G_i^0}{RT} + x_i \ln \frac{x_i}{\sum x_i} + x_i \ln p \right)$$

其中 G_i^0 为 i 气体的单位摩尔自由能， x_i 为 i 气体的摩尔量， R 为摩尔气体常量， T 为混合气体温度：

根据化学反应元素守恒原理可以得到：

$$\sum_{i=1}^m a_{ij} x_i - b_j = 0$$

其中： a_{ij} 为 i 物质中 j 元素的含量， b_j 为 j 元素总含量：

根据自由能最小原理我们可以得到：

$$f(x_1, \dots, x_m) = \sum_{i=1}^m x_i \left(\frac{G_i^0}{RT} + \ln \frac{x_i}{\sum x_i} + \ln p \right) - \sum_{j=1}^n \lambda_j \sum_{i=1}^m (a_{ij} x_i - b_j)$$

其中 λ_j 为拉格朗日乘子。

通过把 $\frac{\partial f(x_1, \dots, x_m)}{\partial x_i}$ 在 (y_1, \dots, y_m) 点一阶泰勒展开，得到基本的迭代公式为：

$$\sum_{i=1}^m y_i \left(\frac{G_i^0}{RT} + \ln \frac{y_i}{\sum y_i} + \ln p \right) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \sum_{i=1}^m y_i a_{ij}$$

$$\sum_{i=1}^m \left(-a_{ij} y_i \left(\frac{G_i^0}{RT} + \ln \frac{y_i}{\sum y_i} + \ln p \right) \right) + \sum_{i=1}^m \lambda_j \sum_{i=1}^m a_{ik} a_{ij} y_i - b_j = 0$$

其中 λ_j ， $\sum x_i / \sum y_i$ 为求解参量。

求解出未知量后代入下式就能够得到该温度下

的物质的组成

$$x_i = -h_i + y_i \left(\sum x_i / \sum y_i + \sum_{j=1}^n \lambda_j a_{ij} \right)$$

由于自定义初始组成的不确定性，需要通过多次迭代才能求解出合理的物质组成。

3 双爆轰计算分析

3.1 爆轰分析

对于CJ爆轰^[4]或过爆轰的计算可以采用基本的激波关系来处理，其方程组为：

$$\begin{aligned} \rho_0(D-u_0) &= \rho_1(D-u_1) \\ p_0 + \rho_0(D-u_0)^2 &= p_1 + \rho_1(D-u_1)^2 \\ h_0 + 0.5(D-u_0)^2 &= h_1 + 0.5(D-u_1)^2 \\ h_1 &= c_p(x_1, \dots, x_m, T_1)T_1 \end{aligned} \quad (2)$$

其中D为爆轰波速度，当为CJ爆轰时 $D = D_{CJ} = \sqrt{2(\gamma^2 - 1)Q}$ ，Q为化学反应的释放能，当为过爆轰时采用指定的爆速，一般 $D \geq D_{CJ}$ ，其中下标0表示波前气体，1表示波后气体。

对于CJ爆轰，一般 $u_0 = 0$ ， $D - u_1 = a_1$ ， a_1 为波后气体声速。

代入可以得到：

$$\begin{aligned} \frac{p_0}{p_1} &= 1 - \gamma_1 \left(\frac{\rho_1}{\rho_0} - 1 \right) \\ h_1 &= h_0 + \frac{R\gamma_1 T_1}{2M_1} \left[\left(\frac{\rho_1}{\rho_0} \right)^2 - 1 \right] \\ h_2 &= c_p(x_1, \dots, x_m, T_1)T_1 \end{aligned}$$

对于过爆轰状态： u_0 、 D 为已知，代入方程即可以求解。

在已知初始组分下，我们只要合理假设波后温度，结合吉布斯自由能法，迭代求解密度比关系，使得 $h_1 = h_2$ 为止，得到的状态即为波后气体状态。

2.2 反射分析

波后气体通过求解该爆轰波的固壁反射^[5]过程

就得到所需污染燃气状态，具体关系为：

$$\begin{aligned} \rho_5 V_{rs} &= \rho_1 (V_{rs} - u_1) \\ p_5 + \rho_5 V_{rs}^2 &= p_1 + \rho_1 (V_{rs} - u_1)^2 \\ h_5 + 0.5 V_{rs}^2 &= h_1 + 0.5 (V_{rs} - u_1)^2 \\ h_5 &= c_p(x_1, \dots, x_m, T_5)T_5 \end{aligned} \quad (3)$$

V_{rs} 为爆轰波通过壁面后的反射波的波速，下标5表示反射后的气体。

$$\begin{aligned} \frac{p_5}{p_1} &= 1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1} \frac{\rho_5}{\rho_1} \left(\frac{\rho_5}{\rho_1} - 1 \right) \\ h_5 &= h_1 + \frac{u_1}{2} \left[1 + 2 \left(\frac{\rho_5}{\rho_1} - 1 \right) \right] \\ h_5 &= c_p(x_1, \dots, x_m, T_5)T_5 \end{aligned}$$

同理假设反射后温度，结合吉布斯自由能法，迭代求解密度比关系，使得 $h_5 = h_5^*$ 为止，得到的状态即为波后气体状态。

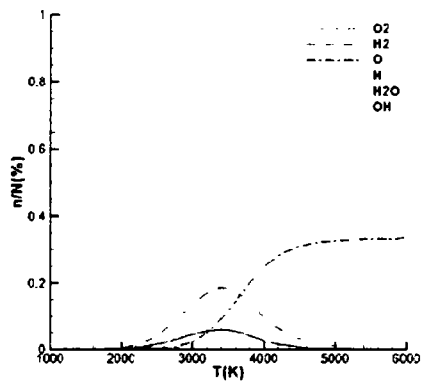
在对公式(2)和(3)的迭代计算中始终存在温度和压力的变化，这也说明计算过程始终存在组分的耦合；而通过公式(2)和(3)可以看出，两者之间存在中间状态1；由此可知求解所需要的污染气体的燃气状态必须是三者之间相互耦合计算的结果。因此该计算是一个上面三个方程(方程组)的迭代求解过程。

4 计算结果分析

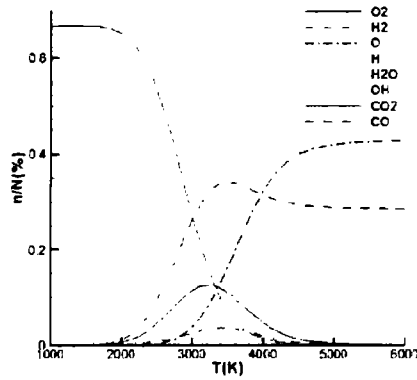
4.1 平衡态物质组分分析

采用 H_2 、 C_2H_2 以及 O_2 的不同混合比为例，使用吉布斯自由能法，产物由 O_2 、 CO_2 、 CO 、 OH 、 H_2O 、 O 、 H 、 H_2 组成。从图2中可以看到温度较低时，有H和O元素的混合气体2000K低温下主要是以 H_2O 的形式存在，而随着温度增加， H_2O 百分比逐渐减少， H_2 和 O_2 的百分比增加，在3200K左右时达到最大，然后都解离成H和O；而有C和O存在的混合气体，在2000K以下主要以 CO_2 存在，随着温度增加， CO 、 O_2 百分比会逐渐增加，在3100K左右达到最大，温度继续增加， CO 的百分比会稍微减小并最终达到平衡。实际上由于元素守恒， CO 的含量会在4600K左

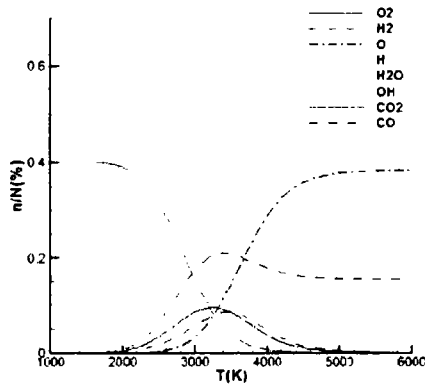
右达到最大，而 H 和 O 的含量在 5000K 左右达到最大。



a) $2H_2+O_2$



b) $C_2H_2+2.5O_2$



c) $2H_2+C_2H_2+3.5O_2$

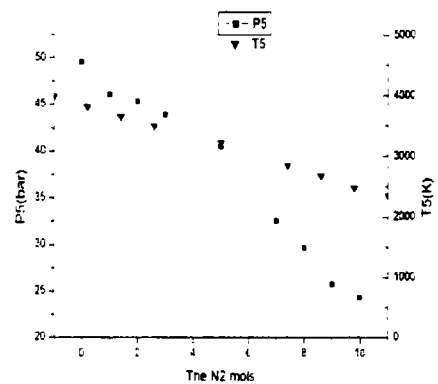
图 2 不同温度下(压力为 1bar)平衡态物质分析

Fig. 2 the equilibrium material analysis in different temperatures (the pressure of 1bar)

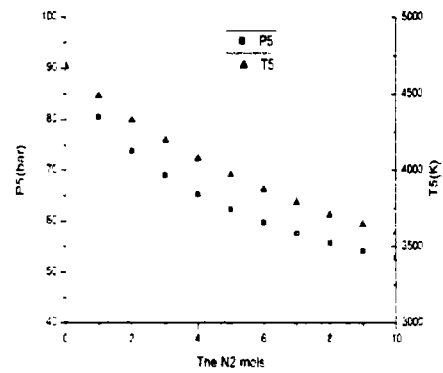
4.2 双爆轰分析

对于双爆轰状态，我们感兴趣的是 CJ 爆轰状态时 P_5 与 T_5 ，而在状态调试时，是根据不同的 N_2 含量来进行调试，假设初始压力为 1bar，初始温度为 300K，可以获得如图 3 所示结果。从图 3 可以看到，对于三种不同的混合燃气，其 N_2 含量越高， T_5 与 P_5

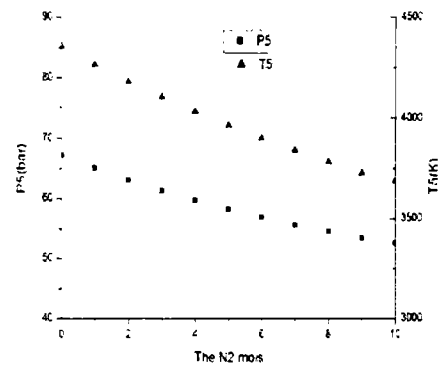
的值越小；同时 T_5 与 N_2 含量呈线性关系，而 P_5 的关系比较复杂，没有明显的关系。



a) $2H_2+O_2+nN_2$



b) $C_2H_2+2.5O_2+nN_2$



c) $2H_2+C_2H_2+3.5O_2+nN_2$

图 3 N_2 含量与 CJ 双爆轰 P_5 与 T_5 分析

Fig. 3 P_5 and T_5 for CJ double detonation with different N_2 content

双爆轰的另一状态是过爆轰状态，这种状态主要是用于对于无污染气体状态的调试，这种状态调试主要是调整爆轰波速度，来达到更高的能量状态。图 4 就是根据不同爆轰波速度情况下的初始温度为 300K，初始压力为 1bar 时双爆轰 P_5 与 T_5 状态调试曲线，从图中可以看出， H_2 爆轰时 N_2 含量越高，相同爆轰波速度下 T_5 与 P_5 越高； C_2H_2 的在小于

2500m/s 的爆速下 N_2 含量越高, T_5 越低, 这可能是由于 C_2H_2 的 CJ 爆速较高, 可能存在 T_5 的某个拐点, 因此会导致不同 N_2 含量 T_5 在某一爆速下相同; 同时根据图 4 可以看出相同初始状态下爆速越高, T_5 与 P_5 越大。呈现近似正比关系。

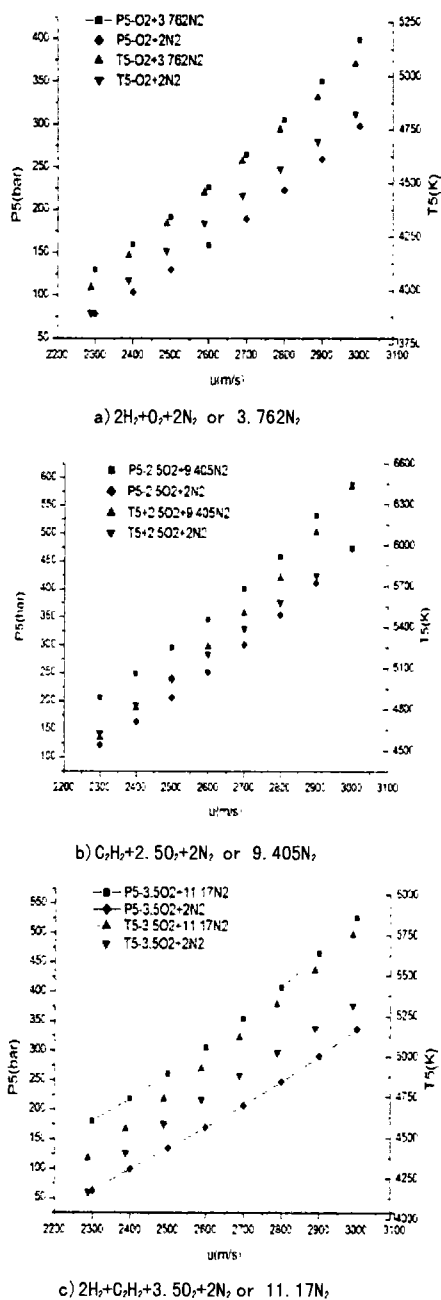


图 4 不同爆轰波速度下过爆轰 P_5 与 T_5 分析

Fig. 4 P_5 and T_5 for over detonation with different Detonation velocity

如图 5, 通过对不同初始压力进行 CJ 爆轰计算, 得到 P_5 基本上与初始压力成正比, 而 T_5 与初始压力基本无关; 过爆轰状态也存在同样的变化趋势。因

此在状态调试时, 可以根据需求温度来得到 N_2 含量, 根据 P_5 的关系比来获得初始压力。

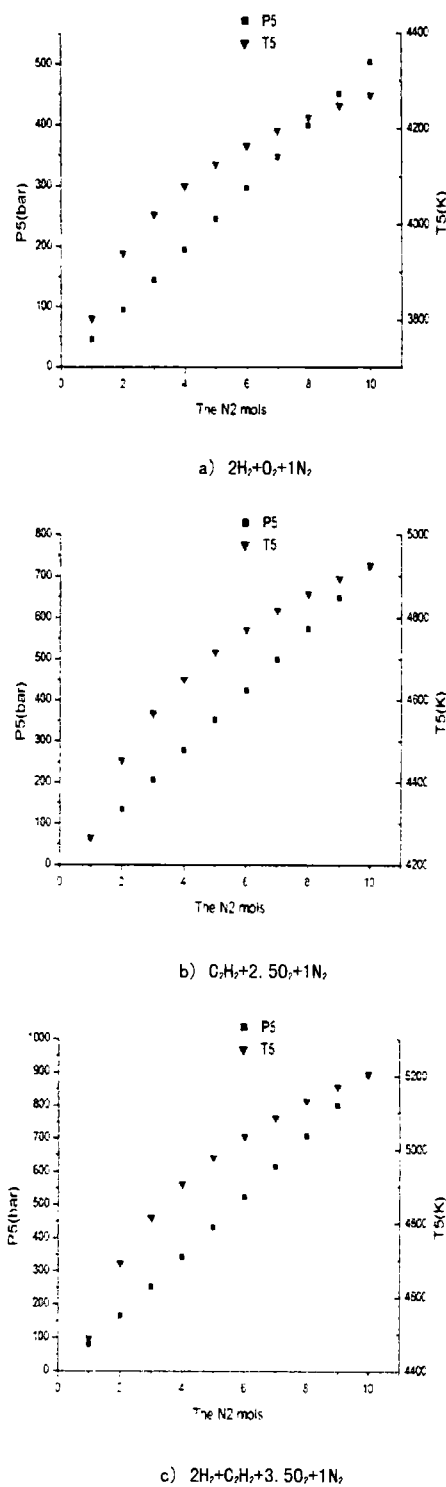


图 5 不同初始压力下 CJ 爆轰 P_5 与 T_5 分析

Fig. 4 P_5 and T_5 for CJ detonation with different initial pressure

4.3 已知需求总压和总温下的双爆轰初始状态分析

在下面的分析中, 根据需求我们选用 $P_5=5\text{bar}$,

$T_5=4000\text{K}$ 作为需求状态, 针对 H_2 、 C_2H_2 以及 $H_2+C_2H_2$

5 结论

本文采用的吉布斯自由能法来计算热化学平衡态的污染气体组分，并且将其运用到双爆轰实验状态调试以及实验气流状态的选取上，得到了：

吉布斯自由能法对 H_2 、 C_2H_2 以及 O_2 的不同混合比为例的平衡态物质组分计算时，可以看到 CO_2 和 H_2O 在 2000K 以下解离程度很小，大于 2000K 后随着温度增加解离程度越来越大，并最终完全解离成 CO 、 H 和 O 。

求解 $P_1=1bar$ ， $T_1=300K$ 时不同 N_2 含量的 CJ 爆轰和过爆轰后总温、总压的变化趋势： N_2 含量越高，总温、总压越小；爆速越大，总温、总压越大。

双爆轰计算时， P_5 基本上与初始压力成正比，而 T_5 与初始压力关系不大，因此在状态调试时，可以根据需求温度来得到 N_2 含量，根据 P_5 的关系比来获得初始压力。

求解特定反应后的总温和总压 ($P_0=5bar, T_0=4000K$) 计算不同燃料 (如 H_2 、 C_2H_2 或 $H_2+C_2H_2$) 与 O_2 恰当混合比但不同 N_2 含量下的起始条件，得出用 $H_2+C_2H_2$ 燃料的混合气体时， N_2 的改变对初始压力和所需爆速的影响较小。该结论能够对实验状态调试提供合理的调整方向，降低实验难度，对试验状态选取和调试有指导作用。

参考文献

- [1] CHEN Hong, FENG Heng, YU Hongru. Double detonation drivers for a shock tube/tunnel. Science in China Ser. G Physics, Mechanics & Astronomy, 2004,47(4): 502-512
- [2] 陈宏, 李斌, 李进平等. 高超声速吸气发动机燃气模拟装置[J]. 空气动力学学报, 2009, 27(增刊):34-39
- [3] 阎小俊, 蒋德明. 一种计算热化学平衡态的新算法[J]. 西安交通大学学报, 西安: 2000,34(7): 5-8
- [4] 汪志诚. 热力学统计物理(第四版)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2010:109-133
- [5] 孙承纬, 卫玉章, 周之奎. 应用爆轰物理[M]. 北京: 国防工业出版社, 2000. 7(3):1-19.
- [6] 董秉纲, 孔祥言, 邓国华. 气体动力学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1996:57-76,347-354
- [7] 陈强. 激波管流动的理论及实验技术[M]. 合肥: 中国科学技术大

的混合气体进行数值计算，计算结果如图 6，从图中可以看出， N_2 含量增加，其爆速需求减小，针对 H_2 的状态，爆速的减小幅度较大，而 C_2H_2 的减小幅度很小；从图中 P_1 曲线可以看出， H_2 状态下 N_2 含量越高， P_1 需求也大，但增加幅度很小，而 C_2H_2 的 P_1 变化趋势相反， N_2 含量越高， P_1 需求越小，变化幅度也比 H_2 大；而从图中可以看出 $H_2+C_2H_2$ 可认为是上述两种的混合体，因此 P_1 和爆速变化都很小，更加容易操作和状态变化调试。

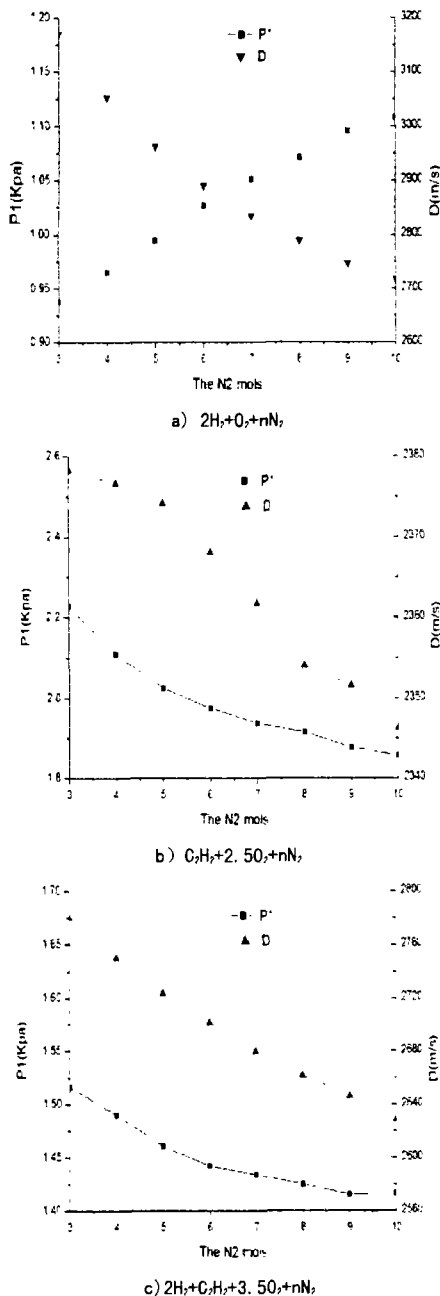


图 6 P5=5bar, T5=4000K 时各气体初始状态分析

Fig. 6 the initial state gases for different Components

Calculation of the Double Detonation to produce High-temperature Gas

Chen Bing, Li Jinping, Chen Hong

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences 100190)

Abstract: As the advantages of the detonation-driven shock tunnel used in high temperature combustion gas produce, this paper proposed a Gibbs free energy method to solve the thermo chemical equilibrium calculations of gas component to calculate the detonation-driven shock tunnel debugging, this method need not consider the type of chemical reaction, so that greatly reduced the amount of calculation: this paper using this method to calculate the dual detonation, and solving the detonation total temperature and pressure for CJ detonation and over detonation pairs to with the initial gas state of different N₂ content, and obtain there are: The higher the content of N₂, the smaller total temperature and pressure: The greater the detonation detonation velocity, the greater the total temperature and pressure. The last, in this paper calculate the certain total temperature pressure ($P_0=5\text{bar}, T_0=4000\text{K}$) under H₂, C₂H₂, H₂+C₂H₂ and the compared to O₂, the detonation start demand in the different N₂ content, and obtained that the state of H₂+C₂H₂ gas mixture is smaller changers of state and easy to control in experiments, so this provide the theoretical basis for the experimental status debugging.

Keywords: Gibbs free energy, double detonation, over detonation