

文章编号:

# 爆轰驱动产生燃气的新方法

陈兵, 李进平, 陈宏, 姜阳, 俞鸿儒

(中国科学院力学研究所 100190)

**摘要:** 由于爆轰驱动激波风洞进行高温燃气实验存在的优势, 提出了一种通过采用吉布斯自由能法求解热化学平衡态计算气体组分来达到爆轰驱动激波风洞状态调试的方法, 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, 求解不同 N<sub>2</sub> 含量的初始燃气状态的 CJ 爆轰和过爆轰对双爆轰总温、总压的影响: N<sub>2</sub> 含量越高, 总温、总压越小; 过爆轰爆速越大, 总温、总压越大。并通过在一定总温和总压( $P_0=5\text{bar}$ ,  $T_0=4000\text{K}$ )下 H<sub>2</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 和当量比 O<sub>2</sub> 在不同 N<sub>2</sub> 含量下的爆轰起始需求计算, 得到了 H<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 混合气体的状态变化较小, 容易在实验中进行调控, 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

在高超等实验中燃气可采用空气与燃料燃烧生成, 但在高超声速吸气条件下, 由于来流总温相当高 ( $T_0 \geq 3000\text{K}$ ), 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; 若采用当前广泛应用的燃烧补氧方法产生燃气, 不仅其总温难以满足要求, 而且燃气组分与要求相差过大, 不能采用。上述种种不足, 使得高超等方向的研究难以在温度上得到突破。

在爆轰驱动激波风洞日益发展的基础上, 俞鸿儒<sup>[1]</sup>提出用双爆轰法产生燃气的方法, 具体原理如图 1。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。因此为很好的进行组分对比的燃气研究方法。

双爆轰主要分为两种驱动情况: 正常爆轰 (CJ 爆轰) 和过爆轰。对于正常爆轰数值计算需要有爆轰模型的存在, 国内外主要的爆轰模型有: 20 世纪初 Chapman 和 Jouguet 提出的 CJ 模型和 20 世纪 40 年代 Von Neumann 和 Doring 等提出的 ZND 模型。本文根据双爆轰的特点以及模型的简单化需求, 对正常爆轰计算采用 CJ 爆轰模型。

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

1

181

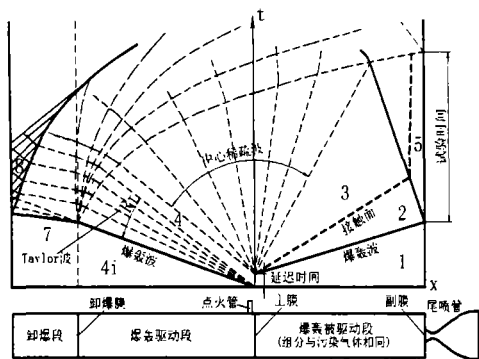


图 1 双爆轰驱动产生燃气原理图

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

既然要计算爆轰，那么对化学平衡组分的计算就必不可少，在国内外化学平衡组分计算主要分为：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。当反应条件诸如温度和压力发生变化时，产物之间的平衡关系也不可避免地发生了变化，如果反应类型仍与以前相同，将会引入更大的误差。而吉布斯自由能法采用最小自由能函数的概念，通过迭代求解得到，无须人为选取化学反应来计算反应过程量，而是通过直接计算初始和最终量的与过程无关的方法，因此计算将更为精确，具有更大的优越性。

本文是在双爆轰的基础上运用吉布斯自由能法[2]来计算热化学平衡态时爆轰的产物组成和热物性，通过双爆轰的机理对需求状态参数进行数值计算，分析不同需求下的状态调试方向和变化趋势，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 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<sup>[3]</sup>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  $\lambda_j$  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：

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

其中  $\lambda_j$ ， $\sum x_i / \sum y_i$  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。

## 2 双爆轰计算分析

### 2.1 爆轰分析

对于CJ爆轰<sup>[4]</sup>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<sup>[5]</sup>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。

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

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。

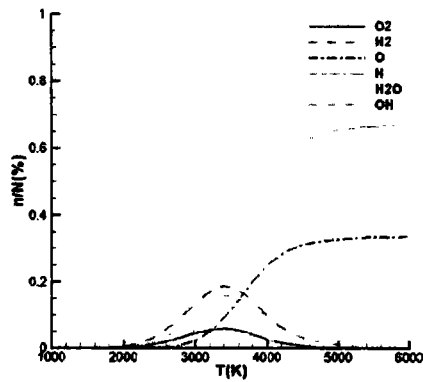
在对公式(2)和(3)的迭代计算中始终存在温度和压力的变化，这也说明计算过程始终存在组分的耦合；而通过公式(2)和(3)可以看出，两者之间存在中间状态 1；由此可知求解所需要的污染气体的燃气状态必须是三者之间相互耦合计算的结果。因此该计算是一个上面三个方程(方程组)的迭代求解过程。

## 3 计算结果分析

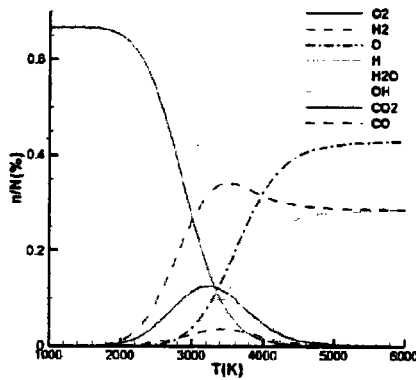
### 3.1 平衡态物质组分分析

以下结果是采用 H<sub>2</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 以及 O<sub>2</sub> 混合为例，使用吉布斯自由能法，产物由 O<sub>2</sub>、CO<sub>2</sub>、CO、OH、H<sub>2</sub>O、O、H、H<sub>2</sub> 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<sub>2</sub>O 的形式存在，而随着温度增加，H<sub>2</sub>O 百分比逐渐减少，H<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub> 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<sub>2</sub> 存在，随着温度增加，CO、O<sub>2</sub> 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

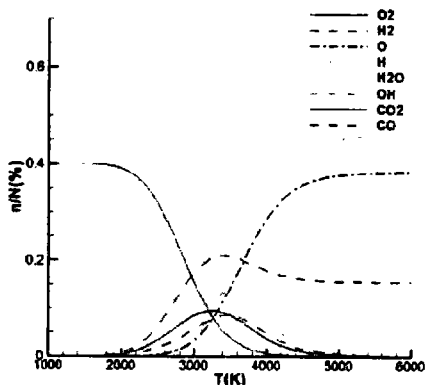
含量会在 4600K 左右达到最大，而 H 和 O 的含量在 5000K 左右达到最大。



a) 2H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>



b) C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>+2.5O<sub>2</sub>



c) 2H<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>+3.5O<sub>2</sub>

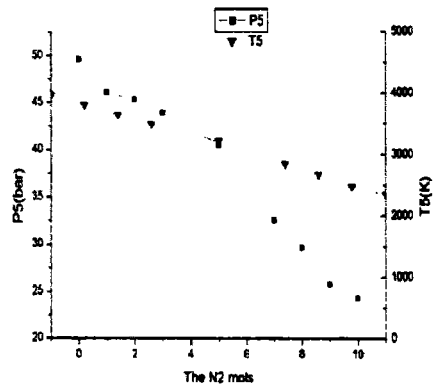
图 2 不同温度下(压力为 1bar)平衡态物质分析

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

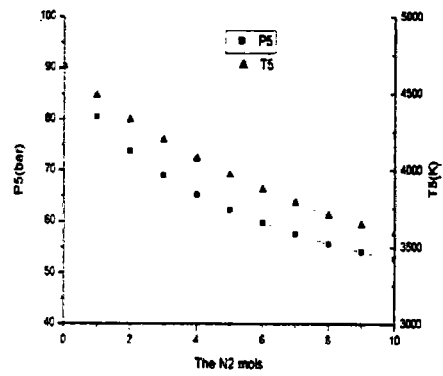
### 3.2 双爆轰分析

对于双爆轰状态，我们感兴趣的是 CJ 爆轰状态时 P5 与 T5，而在状态调试时，是根据不同的 N<sub>2</sub> 含量来进行调试，因此假设初始压力为 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，N<sub>2</sub> 含量越高，T5 与 P5 的值越小，而 P5 基本上与初始压力成正比，而 T5 与初始压力基本上无

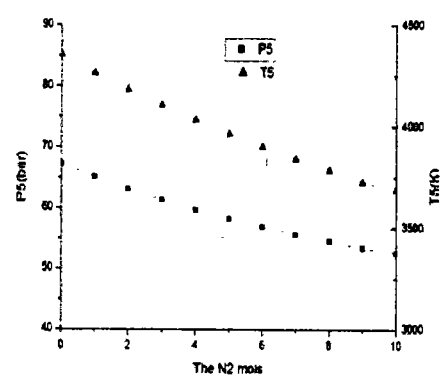
关，因此，在状态调试时，可以根据需求温度来得到 N<sub>2</sub> 含量，根据 P5 的关系比来获得初始压力。



a) 2H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>+nN<sub>2</sub>



b) C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>+2.5O<sub>2</sub>+nN<sub>2</sub>



c) 2H<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>+3.5O<sub>2</sub>+nN<sub>2</sub>

图 3 N<sub>2</sub> 含量与 CJ 双爆轰 P5 与 T5 分析

Fig.3 P5 and T5 for CJ double detonation with different N<sub>2</sub> 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 P5 与 T5 状态调试曲线，从图中可以看出，H<sub>2</sub> 爆轰时 N<sub>2</sub> 含量越高，相同爆轰波速度下 T5 与 P5 越高；C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 的在小于 2500m/s 的爆速下 N<sub>2</sub> 含量越高，T5 越低，这可能是

由于C2H2的CJ爆速较高,可能存在T5的某个拐点,因此会导致不同N2含量T5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,T5与P5越大。呈现近似正比关系,我们可以按照3.2的关系来求得所需状态的初始值。

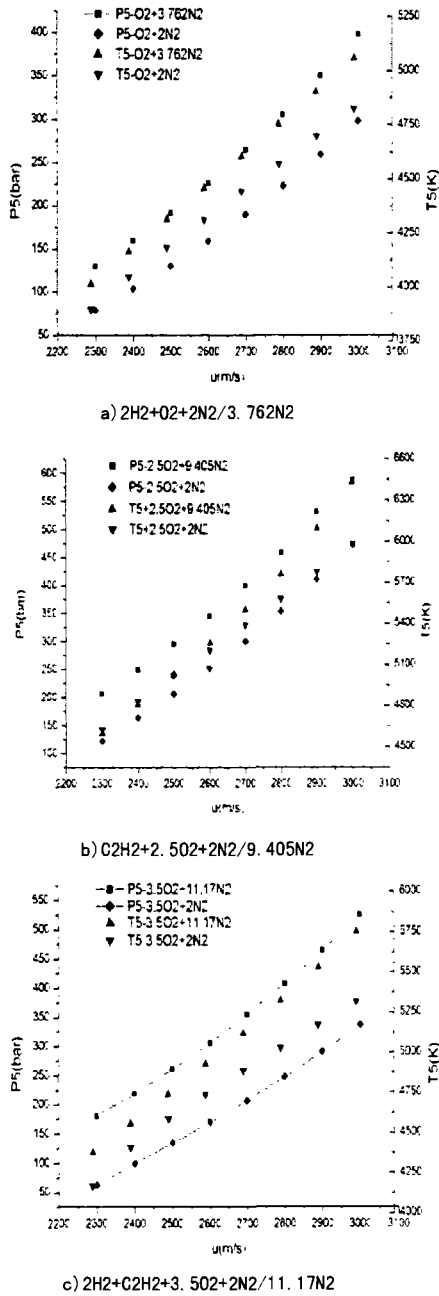


图4 不同爆轰波速度下双爆轰 P5 与 T5 分析  
Fig.4 P5 and T5 for double detonation with different Detonation velocity

### 3.3 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 P5=5bar, T5=4000K 作为需求状态,针对 H2、C2H2 以及 H2+C2H2

的混合气体进行数值计算,计算结果如图5,从图中可以看出, N2 含量增加,其爆速需求减小,针对 H2 的状态,爆速的减小幅度较大,而 C2H2 的减小幅度很小;从图中 P1 曲线可以看出, H2 状态下 N2 含量越高, P1 需求也大,但增加幅度很小,而 C2H2 的 P1 变化趋势相反, N2 含量越高, P1 需求越小,变化幅度也比 H2 大 而从图中可以看出 H2+C2H2 可认为是上述两种的混合体,因此 P1 和爆速变化都很小,更加容易操作和状态变化调试。

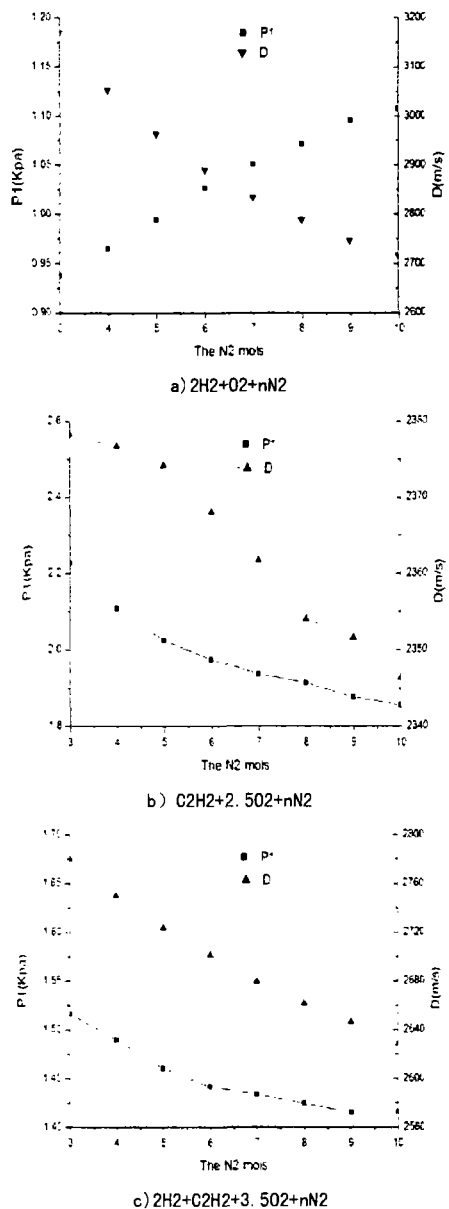


图5 P5=5bar, T5=4000K 时各气体初始状态分析  
Fig5 the initial state gases for different Components at 5=5bar, T5=4000K

## 4 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的选取上, 能够对实验状态调试提供合理的调整方向, 降低实验难度。因此该计算对试验状态选取和调试有指导作用。

## 参考文献

[1] Yu HR, Oxy-hydrogen Combustion and Detonation Driven

Shock Tube, Acta Mechanica Sinica, 1999, 15(2):97~107

[2] 阎小俊, 蒋德明. 一种计算热化学平衡态的新算法[J]. 交通大学学报, 西安: 2000, 34(7): 5~8

[3] 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

[4] 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.

[5] 童秉纲, 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

[6] 陈强. 激波管流动的理论及实验技术. [M] 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1979:80~167, 260~272

## A new method to produce Combustion Gases through the Detonation Shock Tube

Chen Bing, Li Jinping, Chen, Jiang Yang, Yu Hongru

(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 N<sub>2</sub> content, and obtain there are: The higher the content of N<sub>2</sub>, the smaller total temperature and pressure: The greater the detonation velocity, the greater the total temperature and pressure. The last, in this paper calculate the certain total temperature pressure (P<sub>0</sub>=5bar, T<sub>0</sub>=4000K) under H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> and the compared to O<sub>2</sub>, the detonation start demand in the different N<sub>2</sub> content, and obtained that the state of H<sub>2</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 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