

## 正向爆轰驱动高焓激波风洞的数值模拟

刘长礼, 张德良\*, 胡宗民, 姜宗林

(中国科学院力学研究所LHD, 北京 100080)

**摘要:**对充满氢氧可燃气体、带扩容腔的正向爆轰驱动的激波风洞进行了数值模拟。计算采用了欧拉方程, 频散可控耗散差分格式(DCD)和改进的二阶段化学反应模型。在扩容腔附近采用二维轴对称计算模型, 而在驱动段和被驱动段的直管道部分则采用一维计算模型。本文分析了爆轰波在管道中的传播、反射和绕射过程。计算结果表明扩容腔的尺寸对爆轰波的传播、反射、汇聚等起着决定性的作用; 带扩容腔的正向爆轰驱动的激波风洞能够得到平稳的持续时间较长的气流, 提高了实验的精确度和可重复性。

**关键词:**高焓激波风洞; 爆轰波; DCD; 二阶段化学反应模型

**中图分类号:** O382; V277.3; V211.751 **文献标识码:** A

## 1 引言

为研究超声速和高超声速飞行器再入大气层等课题, 需要设计一种在实验段能获得压强较高和气流平稳、持续时间较长的高焓实验设备。力学所LHD实验室提出了正向爆轰驱动高焓激波风洞的概念, 实验结果表明正向爆轰驱动风洞的设计方案对提高高焓激波风洞性能是可行的。在进一步的实验中又发现正向爆轰驱动激波风洞的实验气流不够平稳, 持续时间不能满足实验需要; 为此, 姜宗林于1999年提出在正向爆轰驱动激波风洞中附加一个扩容腔的设计方案<sup>[1]</sup>。实验和数值模拟结果表明改进后的激波风洞性能得到很大提高。实验还发现激波风洞性能与扩容腔的几何尺寸有着十分密切的关系, 因此, 如何设计扩容腔成为提高激波风洞性能的重要问题, 有关这方面的研究目前尚不充分, 有待深入研究。

本文应用频散可控耗散差分格式(DCD)<sup>[2,3]</sup>和M. Sichel等人改进的包含多个组分的二阶段化学反应模型<sup>[4]</sup>对化学恰当比的氢氧可燃气体的爆轰波在二维轴对称带扩容腔的管道内传播过程进行了数值模拟; 文中对爆轰波在管道中的传播、反射和绕射过程进行了分析; 对爆轰波在一定条件下进入扩容腔时, 爆轰波绕射会引起的压强降低等现

象, 以及扩容腔尺寸对爆轰波传播的影响进行了研究。计算结果表明, 扩容腔与爆轰管的半径比对爆轰波的传播起重要作用。带扩容腔的激波风洞可以得到具有较高焓值和压强、平稳的实验气流; 并且, 由于在激波风洞的端壁的反射作用, 使得接触间断到达壁面时间拖后, 从而延长了实验时间。

## 2 物理问题与数学模型

考虑一带扩容腔的圆管状容器内, 充满静态的氢氧可燃气体, 在容器左端有一个平面点火区。可燃气体经过DDT过程形成爆轰波。爆轰波在圆管内传播, 并在扩容腔内绕射和反射形成复杂流场; 随后膜片破裂, 高压气体驱动低压气体, 在被驱动段末端输出实验气体(见图1)。图中扩容腔前部的圆管半径为 $r$ , 扩容腔后部的圆管半径为 $r_1$ , 扩容腔半径为 $R$ , 扩容腔长度为 $L$ ; 驱动段长度为 $L_1$ , 在驱动段采用一维计算; 扩容腔部分长度为 $L_2$ , 在扩容腔部分采用二维计算; 被驱动段长度为 $L_3$ , 在这一段采用一维计算; 流动采用1-D, 2-D相结合的计算模型。我们作如下假定: 1. 可燃气体采用无粘性、无热传导及扩散效应的理想气体; 2. 管端与壁面均为固壁, 无催化效应。

## 2.1 控制方程

无量纲化后的控制方程为

$$\frac{\partial U}{\alpha} + \frac{\partial F(U)}{\alpha x} + \frac{\partial G(U)}{\partial r} + \frac{1}{r} S(U) - S_c = 0$$

(1)

收稿日期: 2003-08-20; 修改稿收到日期: 2003-11-18.

基金项目: 国家自然科学基金; 中国工程物理研究院(10276035)资助项目.

作者简介: 刘长礼(1978-), 男, 硕士;

张德良\*(1939-), 男, 教授.

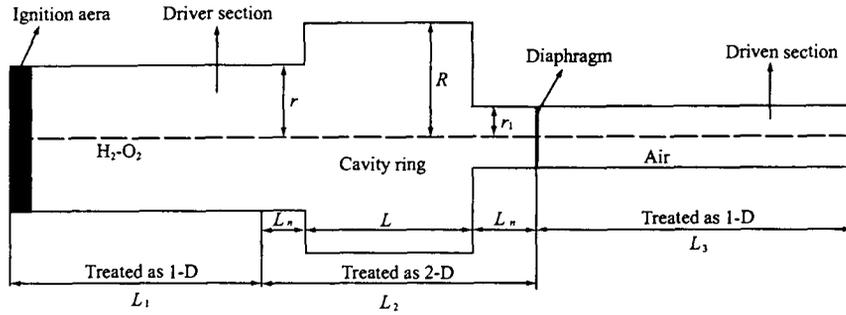


图 1 爆表管计算模型示意图  
Fig. 1 Sketch of computational domain of detonation tube

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \\ \rho \alpha \\ \rho \beta \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e + p)u \\ \rho au \\ \rho \beta u \end{pmatrix}, G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ (e + p)v \\ \rho av \\ \rho \beta v \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 \\ (e + p)v \\ \rho av \\ \rho \beta v \end{pmatrix}, S_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \rho \dot{\omega}_\alpha \\ \rho \dot{\omega}_\beta \end{pmatrix}$$

采用理想气体状态方程:  $p = \rho RT$ 。其中  $\rho$  和  $p$  分别为可燃气体的密度和压强,  $u$  和  $v$  分别为  $x$  和  $r$  方向的速度,  $e$  为单位体积可燃气体的总能,  $\alpha$  和  $\beta$  分别为诱导反应进行度和放热反应进行度,  $\dot{\omega}_\alpha$  和  $\dot{\omega}_\beta$  为诱导反应和放热反应的反应速率。

### 2.2 改进的二阶段化学反应模型

早期的二阶段化学反应模型中只考虑了活化能的释放, 而不考虑化学组分在反应前后的变化, 由此所得到的最终化学组分结果是不合理的, 这会导致某些气体动力学参数的计算错误。为弥补这一缺陷, Sichel 等人提出了一种考虑多个组分的二阶段化学反应模型<sup>[4]</sup>。与原先的二阶段化学反应模型的主要区别是在模型中考虑了化学反应前后组分的变化, 并且, 以化学组分的变化来描述化学反应的进行, 而原先模型中是用活化能来描述。

我们用一无量纲的变量  $\alpha (0 \rightarrow 1)$  来表示诱导反应进行的程度, 其物理意义为: 诱导反应所逝去的时间。诱导反应方程为

$$\frac{\partial(\rho\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho av) = \rho \dot{\omega}_\alpha \quad (2a)$$

$$\dot{\omega}_\alpha = \frac{p}{3R_0 T} \times \exp \left[ \begin{matrix} 35.1715 - 8530.6/T \\ -7.22 \times 10^{-11} p^2 \exp(21205/T) \end{matrix} \right] \quad (2b)$$

其中压强  $p$  的单位是大气压(atm), 温度  $T$  的单位为 K,  $R_0$  为普适气体常数 ( $R_0 = 8.314 \text{ J/mol K}$ )。

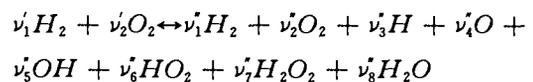
在放热阶段用无量纲变量  $\beta (0 \rightarrow 1)$  来表示放热反应进行的程度, 其物理意义为: 放热反应所逝去的时间。放热反应方程为

$$\frac{\partial(\rho\beta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \beta v) = \rho \dot{\omega}_\beta \quad (3a)$$

$$\dot{\omega}_\beta = (1 - \beta) \times a \times \exp \left( -\frac{b}{T} \right) + c \quad (3b)$$

其中  $a, b$  和  $c$  可以查表<sup>[4]</sup> 得到。

在改进的二阶段化学反应模型中重要的一环是温度的求解。考虑具有 8 个组分的化学反应方程。在二阶段化学反应模型中只考虑两步化学反应, 即诱导反应和放热反应。对于氢氧可燃气体的化学反应式为



$\nu_i$  和  $\nu_i'$  分别表示反应物和生成物的化学计量数。氢氧可燃气体的单位体积的总能和比焓分别为

$$e = \rho h - p + 0.5\rho(u^2 + v^2) \quad (4)$$

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i \quad (5)$$

式中  $Y_i$  为各组分的质量分数,  $N$  为组分数(本文采用的是 8 个组分)。

在改进的二阶段化学反应模型计算过程中, 需要对化学反应速率线性化, 即参加反应的各种组分质量分数以同样的速率变化, 即用同一个  $\beta$  来表示它们的反应速率。在此模型中, 设  $Y_i = \Delta Y_i \beta + Y_{Ri}$ ; 其中  $\Delta Y_i = Y_{Pi} - Y_{Ri}$ ,  $Y_{Ri}$  为初始反应物中各组分

的质量分数,  $Y_{Pi}$  为反应达到平衡后产物中各组分的质量分数。  $Y_{Pi}$  的选择非常重要, 本文中采用的是由胡宗民<sup>[5]</sup>所用的基元反应程序计算的结果。各组分比焓可通过多项式拟合公式<sup>[6]</sup>给出:

$$h_i/(R_i T) = -a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} \ln T + a_3 + a_4 T/2 + a_5 T^2/3 + a_6 T^3/4 + a_7 T^4/5 + b_1/T$$

各组分比热多项式拟合公式:

$$c_{pi}/R_i = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4$$

比焓和比热的关系:

$$h_i = \int c_{pi} dT + h_{oi}$$

式中  $R_i$  为组分气体常数,  $R_i = R_0/W_i$ ;  $R_0$  为普适气体常数,  $W_i$  为组分的摩尔质量。

混合物压力计算公式由道尔顿分压定律给出:

$$p = \rho T \sum Y_i R_i \quad (6)$$

从式(4)~式(6)可以推出关于温度  $T$  的函数:

$$F(T) = \rho \sum_{i=1}^N Y_i h_i - \left( e - \frac{\rho}{2} (u^2 + v^2) \right) - \rho \sum_{i=1}^N Y_i R_i T \quad (7)$$

由  $F(T) = 0$  可以求出温度  $T$ 。

在温度的计算过程中, 本文使用牛顿迭代法来求解, 其计算公式为

$$T_{n+1} = T_n - F(T_n)/F'(T_n)$$

其中  $F'(T) = d(F(T))/dT = \rho(c_p - R)$ 。

### 3 数值计算方法

#### 3.1 计算格式与初、边值条件

本文采用姜宗林提出的频散可控耗散差分格式(DCD)<sup>[2,3]</sup>, 并使用了 Steger-Warming 矢量通量分裂<sup>[7]</sup>方法。

所有边界都采用固壁条件。

在对称轴处( $r = 0$ ), 采用对称边界条件, 数学上处理和固壁条件一致。

爆轰管内充满可燃气体, 速度为零、温度为 298.15 K、压强为 1.0 atm; 点火区温度和压强分别是非点火区的温度和压强  $n_1$  和  $n_2$  倍;  $n_1$  和  $n_2$  的取值必须保证管内可燃气体能被点燃, 并能形成爆轰波。根据计算经验,  $n_1$  和  $n_2$  分别取为 4 和 40。由此可得到初始条件( $t = 0$ )如下:

$$0 < x < l_0; 0 < r < R, u = 0, v = 0$$

$$p = n_2 p_0, T = n_1 T_0, \rho = \rho_0$$

$$l_0 < x < L, 0 < r < R; u = 0, v = 0$$

$$p = p_0, T = T_0, \rho = \rho_0$$

#### 3.2 被驱动段的接触间断捕捉法

在被驱动段中, 接触间断后为氢氧可燃气体的燃烧产物, 不能作为实验气体, 所以需要精确计算接触间断的位置; 本文采用简单的 MAC 方法<sup>[8]</sup>来捕捉被驱动段中接触间断的位置。

在接触间断位置上设置一个标记点 Maker。当  $t = 0$  时, Maker 点的初始位置为 0; 当  $t = t_n$  时, 已知此点的位置在  $x_m^n$ 。设 Maker 点属于  $[x_j^n, x_{j+1}^n]$ 。采用线性插值方法求解  $x_m^n$  点的速度

$$u_m^n = ((x_m^n - x_j^n)/\Delta x)u_{j+1}^n + (1 - (x_m^n - x_j^n)/\Delta x)u_j^n$$

然后再求解  $t_{n+1}$  时 Maker 点的新位置:

$$x_m^{n+1} = x_m^n + u_m^n \cdot \Delta t$$

### 4 计算结果及分析

本文对充满化学恰当比的氢氧可燃气体的带扩容腔管道的爆轰波传播问题进行了数值模拟, 并初步计算了被驱动段管道中的激波传播过程。在计算中式(3b)的参数  $a$ ,  $b$  和  $c$  分别为:  $a = 1.20e8$ ,  $b = 8e3$ ,  $c = 0$ 。计算中  $x$  和  $r$  方向采用的网格间距分别为 0.7 mm 和 0.8 mm。

#### 4.1 爆轰波在一维管道中的传播过程分析

首先, 我们计算了爆轰波在驱动段管道中的传播过程, 采用一维计算模型。管道长度为 4.9 m, 其中氢氧可燃气体为  $H_2 : O_2 = 2 : 1$ , 初始压强和温度为 1.01325 atm 和 298.15 K, 气体初始速度为零。计算结果列在图 2 中。

从图 2 的计算结果可以看到, 已经形成了稳定的爆轰波。爆轰波的峰值压强可以稳定在 21.5 atm 左右, 波后压强为 7.23 atm, 爆速为 2945 m/s。在此条件下, C-J 理论爆速为 2862 m/s, 相对误差为 2.9%。计算的爆速与 C-J 理论爆速相差十分小, 说明计算结果是可信的。

#### 4.2 爆轰波在扩容腔中的传播

接着我们对爆轰波在扩容腔中传播过程进行了数值模拟。由于扩容腔的存在, 计算采用二维模型。计算区域总长 700 mm, 扩容腔前的爆轰管长 160 mm, 半径 53 mm, 扩容腔长 400 mm, 半径为 80 mm; 扩容腔后的附加段长 140 mm, 半径 34 mm。

图 3 记录了爆轰波从一维计算区域传播到二维的计算区域后的传播情况, 显示了爆轰波在扩容腔内的传播、反射以及汇聚等现象。图 3(a) 和图 3(b) 显示爆轰波从一维的计算区域传播到二维的

计算区域并进入扩容腔,通过拐角后爆轰波向四周扩展,形成膨胀波,在膨胀波作用下爆轰波上端出现局部压强和温度下降现象。当爆轰波和扩容腔的上壁相互碰撞,从壁面反射回来的爆轰波压强和温度迅速提升;这一爆轰波继续向前传播,在轴线附近汇聚,形成更强的爆轰波图 3(c)。图 3(c)中爆轰波的波阵面比较平直,说明扩容腔的长度已经足够长了,不需要再增加扩容腔的长度了;但考虑到真实气体效应以及壁面的粘性等因素,扩容腔仍需再略长一些。

爆轰波传到扩容腔后侧壁面时又会被反射,形成了一道上行激波(由于爆轰波过后已没有可反应的气体,所以这时波阵面是激波,见图 3(d)和图 3(e)。该激波使得扩容腔内,由于扩容而降下来的压强再次升高,这就为扩容腔后面管道中的传播过程提供压强平稳的气流,在扩容腔后面的管道里稳定传播,并有一个较长时间的稳定传播过程,这对实验十分有利。由于腔内可燃气体已被烧完,反射激波在扩容腔内传播时会逐步减弱,见图 3(f)。

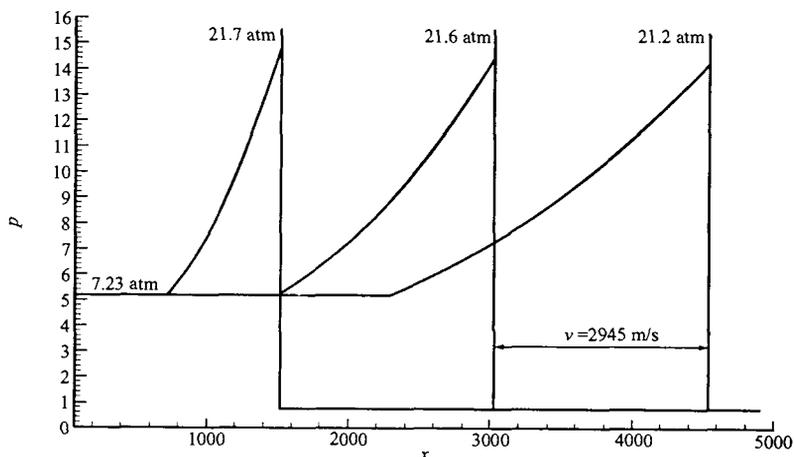


图 2 爆轰波在 1-D 管道内传播的无量纲压强图  
Fig. 2 Pressure of detonation propagations in 1-D tube

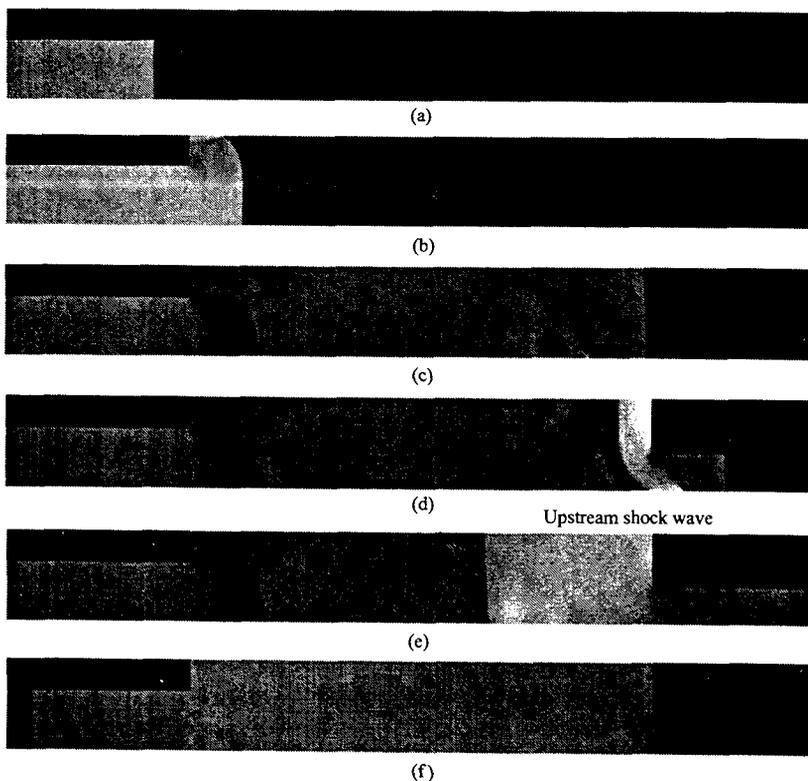


图 3 爆轰波在扩容腔内 ( $L = 400 \text{ mm}, R = 80 \text{ mm}$ ) 传播的压强云图  
Fig. 3 Pressure flood contour of detonation propagations in the cavity ring ( $L = 400 \text{ mm}, R = 80 \text{ mm}$ )

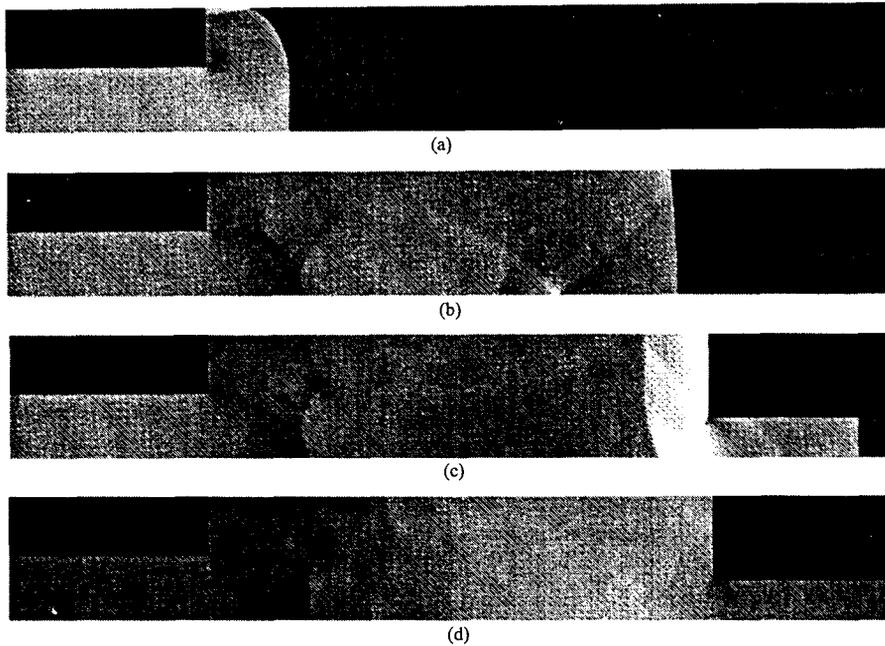


图 4 爆轰波在不同扩容腔( $L = 400 \text{ mm}$ ,  $R = 100 \text{ mm}$ )内传播的压强云图

Fig. 4 Pressure flood contour of detonation propagations in deferent cavity ring( $L = 400 \text{ mm}$ ,  $R = 100 \text{ mm}$ )

### 4.3 扩容腔尺寸对爆轰波传播的影响

扩容腔尺寸对爆轰波传播有着十分重要的影响,为此我们对不同的扩容腔尺寸进行了数值模拟。从 4.2 节的讨论中我们已经知道增加扩容腔长度的意义不大,所以在这里我们只讨论扩容腔半径大小的作用。图 4 给出了一个不同扩容腔尺寸( $L = 400 \text{ mm}$ ,  $R = 100 \text{ mm}$ )的计算结果。

计算结果表明,在图 4(b) 中爆轰波已经接近于平面,也就是说在增加扩容腔半径后,扩容腔的这个长度可以保证爆轰波传播比较平稳,波阵面比较平直、均匀。而在图 4(d) 中反射的上行激波波阵面变得十分模糊,不能辨认。说明扩容腔的半径过大,激波容易衰减,甚至消失。

通过对不同尺寸扩容腔的计算分析可以发现,为了在扩容腔后面管道中得到比较平稳的气流,至少应该符合如下条件: $R/r$  不宜过大,当其大于 2 时,所得结果不理想; $L/R$  不宜太小,当其小于 4 时,气流不够平稳、均匀; $r/r_1$  至少应该大于 1,否则扩容腔后面管道内的平稳气流持续时间太短。

### 4.4 激波在被驱动的激波管中的传播

爆轰波在通过扩容腔后,由于扩容腔内的可燃气体已经大大减少。同时被驱动段内是抽空的低压空气,这时爆轰波在被驱动段内已经衰减为激波,因此在被驱动段内流动计算中,我们可以采用 1-D 的计算模型,关闭了化学反应,并且认为两种气体

的比热比相同,都是 1.4。被驱动段内的空气压强为 0.2 atm,温度为 298.15 K,长为 7.0 m。

计算结果表明在这种反射型激波风洞中可以得到较高的、平稳的压强波形,并且接触间断需要很长时间才能抵达被驱动段末端,这大大加长了实验时间。此外,我们知道,总焓和压强的高低是由膜片前后初始压强比所决定的,比值越大总焓和压强的数值就越高;相反,得不到高焓值和高压强值,由此我们可以根据实验要求来选择初始压强比。

## 5 结 论

本文采用改进后的二阶段化学反应模型和频散可控耗散差分格式(DCD)对化学恰当比的氢气/氧气可燃气体爆轰波在二维轴对称、带扩容腔的管道内传播过程进行了数值模拟。计算结果表明,改进后的二阶段化学反应模型可以反映爆轰波在带扩容腔管道内的传播、绕射和反射过程的各种现象,效果比较满意。扩容腔尺寸对爆轰波的传播起着重要作用,而且会影响稳定爆轰的形成,为了在扩容腔后面被驱动段中得到平稳的、持续时间较长的气流,扩容腔尺寸必须有一定的满足要求。

相对基元化学反应模型来说,二阶段化学反应模型比较简单,计算的工作量比较小,因此有利于对实际工程问题的应用,可用来对可燃气体爆轰过程的预报和分析。

在爆轰波传播过程中存在着复杂的燃烧波、激波和爆轰波等间断面,因此捕捉这些复杂的间断面及其相互作用是一个很重要的问题。本文计算结果表明用高分辨率的DCD差分格式可以分辨这些复杂的结构。

计算结果表明,对于爆轰波在带扩容腔的管道内传播过程本文采用1-D、2-D模型的拼接的方法是合理的,并且大大地减少了计算时间,这对真实的大型激波风洞全尺寸的数值模拟创造了条件。

### 参考文献(References):

- [1] JIANG Z L, et al. Forward-running detonation drivers for high-enthalpy shock tunnels [J]. *AIAA Journal*, Oct, 2002, **40**(10): 2009-2016.
- [2] JIANG Z L. On dispersion-control principles for non-oscillatory shock-capturing schemes [J]. *ACTA Mechanica Sinica*, 2004, **20**(1):1-15.
- [3] JIANG Z L, et al. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J]. *Computational Fluid Dynamics Journal*, 1995, **4**(2): 137-150.
- [4] SICHEL M, et al. A two-step kinetics model for numerical simulation of explosions and detonations in H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> mixtures [J]. *Proc R Soc London A*, 2002, **458**(2017):49-82.
- [5] 胡宗民,张德良,刘长礼,等. 气相爆轰波基元反应模型数值模拟[J]. 北京理工大学学报,2003,4(23)(增刊): 110 -115. (HU Zong-min, ZHANG De-liang, LIU Chang-li, et al. Numerical simulation of gaseous detonation wave with detailed chemical reaction model[J]. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2003, **23**(Supplement): 110-115. (in Chinese))
- [6] MCBRIDE B J, ZEHE M J, SANFORD Gordon. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species[R]. NASA/TP-2002,211-556.
- [7] STEGER J L, WARMING R F. Flux vector splitting of the inviscid gas dynamic equations with applications to finite difference method [J]. *J Computational Physics*, 1981, **40**:263-293.
- [8] FANCIS H, HARLOW J, EDDIE Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface[J]. *J Physics of Fluid*, 1965, **8**(12):2182-2189.

## Numerical simulation of forward-running detonation drivers for high-enthalpy shock tunnels

LIU Chang-li, ZHANG De-liang\*, HU Zong-min, JIANG Zong-lin  
(LHD, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract:** In this paper the numerical simulations of detonation wave propagation in a tube with a cavity ring are conducted by solving axis-symmetric Euler equations. The Dispersion Controlled Dissipation (DCD) scheme is adopted and the modified two-step chemical reaction model of stoichiometric oxygen-hydrogen mixture is accepted. Two-dimensional Euler equations are used in the cavity ring and one-dimension Euler equations are used in others. The propagation, reflection and focus of the detonation wave are analyzed. The numerical results show that the ratio of the cavity radius to that of detonation tubes plays an important role in detonation wave interaction in the cavity. A strong up-stream traveling shock wave can be formed through detonation wave reflections and shock wave focus, which can elevate the flow pressure that has decreased because of expansions waves effect. Results show also that a steady, long-drawn flow can be got at the end of the shock tube, which contribute to experimentation.

**Key words:** high-enthalpy shock tunnel; detonation; DCD scheme; two-step chemical reaction model