

文章编号: 0258-1825(2009)03-0363-06

# 对数值模拟气相爆轰中二阶段化学反应模型再研究

王 刚<sup>1</sup>, 张德良<sup>2</sup>, 刘凯欣<sup>1</sup>

(1. 北京大学工学院力学与空天技术系湍流与复杂系统国家重点实验室, 北京 100871;

2. 中国科学院力学研究所, 北京 100080)

**摘 要:**采用改进的高精度时-空守恒元解元算法(the space-time conservation element and solution element method, CE/SE method)和考虑组分的二阶段化学反应模型(Sichel 的二步模型)对气相爆轰问题的数值模拟进行了分析。分析发现采用 Sichel 的二步模型得到的数值结果虽然比早期二阶段化学反应模型(旧二步模型)更接近实验值,但是仍然不能得到爆轰过程准确气体动力学参数。为此通过修改组分的质量分数分布形式对 Sichel 的二步模型进行了改造,然后采用新的二步模型对平面爆轰波进行了数值模拟。数值结果表明采用新的二步模型计算得到气体动力学参数更接近于实验值和基元反应模型的计算值,在计算精度上有较大提高。

**关键词:**CE/SE 算法;爆轰波;二阶段化学反应模型;数值模拟

**中图分类号:**O38      **文献标识码:**A

## 0 引 言

爆轰波形成与传播是航天工程、武器研制和爆轰物理中十分重要和复杂基本课题<sup>[1]</sup>。长期以来,爆轰波形成与传播的研究主要是通过实验手段进行的<sup>[2]</sup>。随着计算机科学和计算流体力学的发展,爆轰波形成与传播的数值模拟成为可能。在数值模拟爆轰问题时主要处理好两方面的问题,一是如何高精度捕捉爆轰波强间断,二是如何处理爆轰过程中化学反应和能量释放。随着各种高精度数值算法的出现,高精度捕捉爆轰波强间断已基本解决。而第二个问题的关键是建立真实、正确的化学反应模型。多年来数值模拟爆轰过程的化学反应模型已基本建立,并得到广泛应用,它们是:C-J (Chapman-Jouquet) 模型、二阶段化学反应模型(二步模型)和基元反应模型。

一般说来采用基元反应模型来计算爆轰过程能得到比较准确和精细的结果,但是采用基元反应模型往往对计算机要求较高,计算存储量很大,计算时间也很长;二步模型虽然计算结果比基元反应模型的结果要粗一些,但是在总体上它能够反映爆轰过程的主要特征和现象,而它对计算机要求较低,计算量较小,这对工程应用有很大的优势。因此二阶段化学反应模型无论在爆轰物理基础研究还是爆轰波工程应用

上都具有一定的价值,仍然受到学者的关注。

二步模型基于爆轰波阵面的 ZND (Zeldovich-von Neumann-Doring) 模型,它将复杂的反应过程简化两个阶段:诱导阶段和放热阶段。一开始二步模型在爆轰问题中得到广泛应用,但是随着研究和应用的深入,发现由于计算中只考虑了化学热能的释放,没有考虑化学组分反应前后的变化,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,2002 年 Sichel 等提出了一种考虑组分的二步模型,我们称为 Sichel 的二步模型<sup>[3]</sup>。Sichel 等验证了该模型的化学反应诱导时间能够与基元反应模型较好吻合,因此 Sichel 的二步模型在爆轰点火问题的数值模拟中得到应用<sup>[4]</sup>,但是该模型是否能够准确地反映爆轰波传播特性并没有得到验证。我们通过分析,修改组分的质量分数分布形式对 Sichel 的二步模型进行了改造,然后采用新的二步模型对平面爆轰波进行了数值模拟,并对计算结果进行分析、验证和讨论。

本文采用改进的高精度 CE/SE 算法和新的二步模型对爆轰波传播问题进行分析、验证和讨论。数值结果表明采用新的二步模型计算得到气体动力学参数更接近于基元反应模型的计算值,在计算精度上有较大提高。

\*收稿日期:2008-04-03; 修订日期:2008-10-13

基金项目:国家自然科学基金(10572002)

作者简介:王 刚(1980-),男,山东省人,博士研究生,主要从事爆轰波数值模拟研究。

# 1 化学反应模型及数值方法

## 1.1 Sichel 的二步模型

二步模型中的诱导进行度  $\alpha$  和反应进行度  $\beta$  由各自的变化速率  $\dot{\alpha}$ 、 $\dot{\beta}$  决定,其中  $\alpha$  和  $\beta$  的初值为 1,反应完成后的值为 0。在 Sichel 的二步模型中  $\dot{\alpha}$  和  $\dot{\beta}$  形式为:

$$\begin{cases} \dot{\alpha} = \frac{P}{3R_0 T} \times \exp\left[35.1715 - \frac{8530.6}{T} - 7.22 \times 10^{-11} P^2 \exp\left(\frac{21205}{T}\right)\right] \\ \dot{\beta} = \begin{cases} 0, & \alpha > 0 \\ (1 - \alpha) \times a \times \exp\left(-\frac{b}{T}\right) + c, & \alpha \leq 0 \end{cases} \end{cases} \quad (1)$$

其中:  $P$  为压强,单位是大气压 (atm);  $T$  为温度,单位是 K;  $R_0$  ( $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ) 为普适气体常数;  $a$ 、 $b$ 、 $c$  为常数。

在 Sichel 的二步模型中假设各种组分质量分数随着反应进行度  $\alpha$  以相同的速率变化,即各组分的质量分数按照  $Y_i = (Y_{Ri} - Y_{Pi}) \alpha + Y_{Pi}$  线性分布。各组份浓度  $Y_i = (Y_{Ri} - Y_{Pi}) \alpha + Y_{Pi}$ ,其中  $Y_{Ri}$  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。  $Y_{Ri}$  和  $Y_{Pi}$  可采用基元反应的计算结果。

## 1.2 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,使用 Euler 方程组来描述气相爆轰波的反应和传播过程:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = S \quad (2)$$

其中:  $Q = \begin{pmatrix} u \\ v \\ E \end{pmatrix}$ ,  $E = \begin{pmatrix} u \\ u^2 + p \\ uv \\ (E + p)u \\ u \\ u \end{pmatrix}$ ,

$F = \begin{pmatrix} v \\ uv \\ v^2 + p \\ (E + p)v \\ v \\ v \end{pmatrix}$ ,  $S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,

$u$ 、 $v$ 、 $p$  分别是密度、 $x$  方向的速度分量、 $y$  方向的速度分量、压强。 $E$  为单位体积的总能,具体形式如下:

$$E = h - p + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) \quad (3)$$

其中比焓  $h$  通过  $h = h(i, T)$  求得<sup>[5]</sup>,  $i$  为第  $i$  个组分的质量密度;压力  $p$  通过理想气体状态方程  $p = RT$  求得。

## 1.3 改进的高精度 CE/SE 算法

自从 1995 年 Chang 提出 CE/SE 方算法以来<sup>[6]</sup>,CE/SE 算法在计算流体力学中得到了广泛应用和发展。但是在应用中我们发现 CE/SE 方算法也存在单元结构复杂、程序编写复杂和很难向三维推广等问题。为此,我们首先对 CE/SE 算法的网格设置做了大的改进<sup>[7]</sup>推导出一种实用的二维二阶精度 CE/SE 算法的差分格式<sup>[8-9]</sup>。这种改进后的高精度 CE/SE 算法具有守恒性好、算法简单、编程方便、计算精度高、计算效率和计算效果好、便于向三维问题推广的特点。图 1 为改进的 CE/SE 算法的解元和守恒元结构。

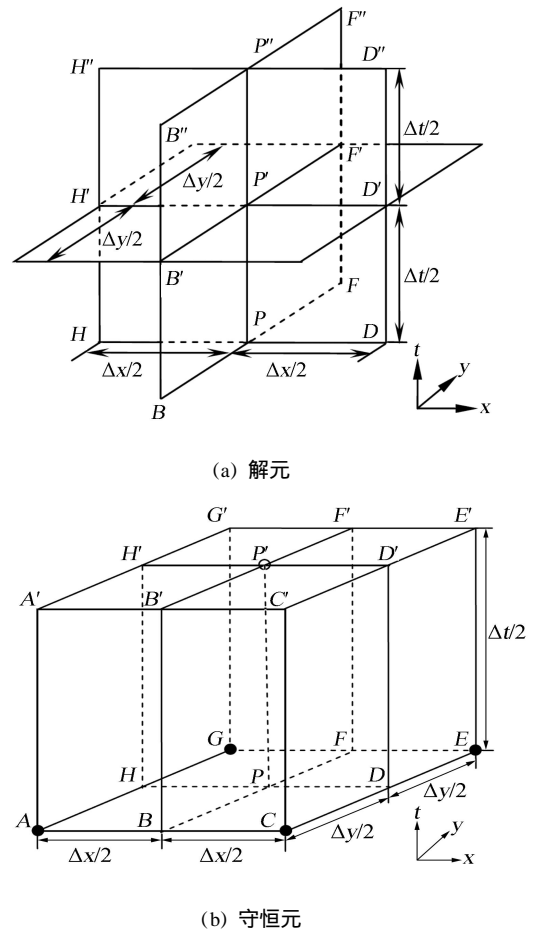


图 1 本文提出的 CE/SE 方法的解元和守恒元网格结构  
Fig. 1 Grid structure of solution element and conservation element in this paper

## 2 Sichel 的二步模型的数值结果及分析

使用改进的高精度 CE/SE 算法和 Sichel 的二步模型对平面爆轰进行数值模拟。物理问题为一长 0.04m 的直管道,管道内充满均匀混合的氢气和氧气 ( $V_{H_2} : V_{O_2} = 2 : 1$ ),初始压力为 1atm,初始温度为 298 K,边界采用固壁,点火条件为左端区域加高温高压。不同时刻的压力分布见图 2,为典型的爆轰波压力分布。

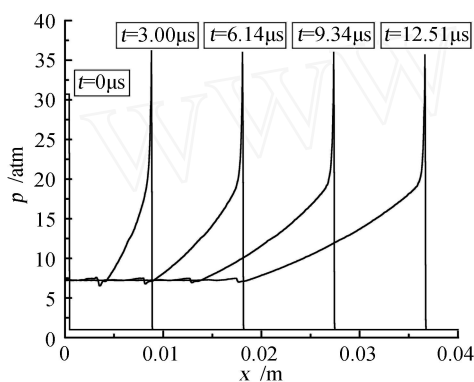


图 2 不同时刻的压力分布图

Fig. 2 Pressure profile at different times

为了考察 Sichel 的二步模型的准确性,表 1 给出了计算得到的爆轰速度、温度、von Neumann 尖峰压力和 C-J 压力,同时在表中也给出了 C-J 理论值、实验值<sup>[10]</sup>和其它化学反应模型(旧二步模型和基元反应模型)得到的数值结果。通过比较可以发现,各种化学反应模型对爆轰速度的计算结果均比较理想,相对误差均在 3% 以内。但是,压力和温度的计算准确度差别很大。采用旧二步模型得到的计算结果相对误差最大,采用 Sichel 的二步模型得到的温度和 C-J 压力的相对误差分别减少 19% 和 30%。可见 Sichel 的二步模型较旧二步模型计算准确度是有较大幅度提高。

然而,在与基元反应模型计算结果进行比较时,我们发现,采用 Sichel 的二步模型计算得到的物理参数均比采用基元反应模型得到的物理参数值要大。图 3 给出了这两种模型在 10 $\mu$ s 时 O<sub>2</sub> 的质量分数分布。可以看出,由于爆速不同导致的分布位置略有差异,但是二者的分布形式是基本吻合的。Sichel 的二步模型得到的 H<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 的质量分数分布与 O<sub>2</sub> 的类似,也是一条单调曲线,且也能够和基元反应模型的结果基本吻合。进一步研究发现,在 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 爆轰

中,大部分组分的质量分数(例如 H、O、OH、HO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)并不是按照反应进度线性分布的,而是在前导激波后有一个突跃,而后缓慢减少。图 4 给出了两种模型的 H 质量分数分布。因此,Sichel 的二步模型中对组分变化过程的假设是有待改善的。另外我们还发现在 Sichel 的二步模型中,化学反应是在一个较短的有限区域完全进行,而基元反应模型证明实际有效反应区长度要长得多。以上两个原因可能是导致采用 Sichel 的二步模型计算得到的压力和温度较实际和基元反应模型要高的原因。

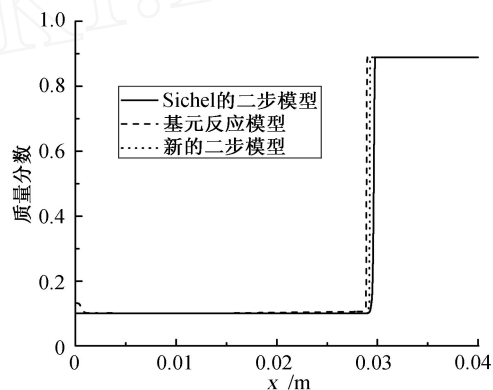


图 3 O<sub>2</sub> 质量分数分布

Fig. 3 Mass fraction profile of O<sub>2</sub>

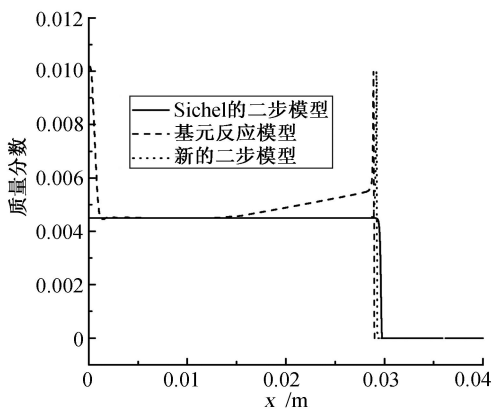


图 4 H 质量分数分布

Fig. 4 Mass fraction profile of H

## 3 Sichel 的二步模型的改进及应用

### 3.1 改进方法

根据上面的分析可以看出,Sichel 的二步模型存在两个缺陷:(1) 化学反应区域较短,这是二步模型的普遍问题,要通过改进反应速率的形式来完善,

但大量数值结果表明,现有的反应速率形式能够满足工程需要,即使旧二步模型得到的爆速也是相当准确的;(2) 组分质量分数分布过于简单,这可能是引起 Sichel 的二步模型计算误差的一个主要原因,为此我们通过修改组分质量分数分布形式对 Sichel 的二步模型进行改进。

表 1 实验值,C-J 理论值和四种模型结果  
Table 1 Results by experiments, C-J theory and four chemical reaction models

	爆速 / $m \cdot s^{-1}$	温度 / K	von Neumann 尖峰的压力/atm	C-J 压力 / atm
实验	2825	3583	27.1	18.6
C-J 理论值	2853	-	34.16	18.59
旧二步模型	2784	2466	28.5	12.55
Sichel 的二步模型	2908	4037	35.1	19.03
基元反应模型	2826	3421	31.4	18.60
新的二步模型	2845	3726	34.5	18.77

在放热阶段,对每个组分定义一个中间状态,在中间状态组分质量分数达到最大值  $Y_{Mi}$ ,爆轰波阵面内质量分数没有达到最大值的那些组分就取任意一点作为中间状态,或者不设中间状态。各种组分的中间状态应与反应进行度  $\xi$  对应,得到中间反应进行度  $M_i$ 。在  $M_i$  的两边,组分分别按照  $Y_i$  线性分布,即:

$$\begin{cases} Y_i = (Y_{Ri} - Y_{Mi})(1 - M_i) / (1 - M_i) + Y_{Mi}, & M_i \leq 1 \\ Y_i = (Y_{Mi} - Y_{Pi}) / M_i + Y_{Pi}, & 0 \leq M_i \end{cases} \quad (4)$$

在  $H_2-O_2$  爆轰中, $H$ 、 $O$ 、 $OH$ 、 $HO_2$  和  $H_2O_2$  这五种组分在爆轰波阵面内质量分数会迅速升高并达到一个最大值,随后迅速减少,然后逐渐达到一个平衡值。而  $H_2$ 、 $O_2$ 、 $H_2O$  这三种组分质量分数变化是单调的,本文取另外五种组分的中间状态位置的平均值作为这三种组分的中间状态。

### 3.2 数值结果及分析

采用改进的高精度 CE/SE 算法和新的二步模型对相同初始条件下的平面爆轰波传播问题进行数值模拟。计算得到的爆轰速度,温度,尖峰压力和 C-J 压力如表 1 所示,可见新的二步模型的数值结果较没有改进前能够更好地和实验吻合。图 3 和图 4 还分别给出了新的二步模型得到的  $O_2$ 、 $H$  质量分数的分布状况。可以发现,由于中间状态的引入, $H$  的质量分数的分布形式能够和基元反应模型得到的  $H$  质量分数的分布较好地相吻合( $O$ 、 $OH$ 、 $HO_2$  和  $H_2O_2$  这

四种组分的情况也类似),并且没有影响  $O_2$  ( $H_2$  和  $H_2O$ ) 的分布形式。这也是新的二步模型得到的爆轰参数能较为准确的原因。由于爆轰速度较准确,各个组分质量分数的分布位置也能和基元反应模型基本吻合。

虽然本文只是在中间反应度  $M_i$  的两边组分仍然随  $Y_i$  线性分布,但得到的数值结果准确性却得到很大提高。以  $M_i$  为分界线,组分随  $Y_i$  的分布采用不同的更准确的形式也会提高二步模型的准确性。本文使用的  $H_2-O_2$  爆轰中,每种组分只需要一个中间状态。但对于较复杂的化学反应过程,可能需要确定多个中间状态,这也就对应多个中间反应进行度,组分在各个中间反应进行度之间随  $Y_i$  线性(或其它形式)分布。值得一提的是这种新的二步模型较 Sichel 的二步模型没有增加计算量和存储量。

### 3.3 爆轰波马赫反射

爆轰波在楔面上反射问题是研究爆轰波传播过程中复杂波系的基础,本文使用新的二步模型和改进的高精度 CE/SE 算法对爆轰波的马赫反射问题进行数值模拟。图 5 为得到的数值结果,能够和图 6 所示的实验结果<sup>[2]</sup>基本吻合。例如爆轰波胞格长宽比为 0.5,而实验结果为 0.5~0.6,胞格的其它几何尺寸也能和实验结果较好吻合;三波点迹线夹角为  $11.3^\circ$  左右,实验结果为  $11.5^\circ \sim 13.0^\circ$ <sup>[2]</sup>。

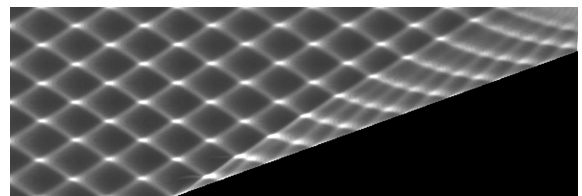


图 5 爆轰波马赫反射得到的数值胞格结构( $19.3^\circ, 600 \times 200$ )

Fig. 5 Numerical result of Mach reflection of detonation wave( $19.3^\circ, 600 \times 200$ )

新的二步模型能够对爆轰波的胞格结构及其变化过程进行准确模拟。通过观察可以发现爆轰波在楔面上反射具有以下现象:(1) 三波点轨迹不是一条直线;(2) 反射后的胞格尺寸,即三波点轨迹和楔面之间部分的胞格尺寸明显变小,且形状不规则;(3) 三波点轨迹上方的一层胞格形状也产生变化。现象(1)的主要原因是爆轰波中的横波结构对反射波产生扰动,导致三波点轨迹不是一条直线。对于相同的楔面角度,实际计算中还发现,爆轰波胞格结构的不同

部位和楔面首先作用将产生不同位置的三波点轨迹,这点和实验结果是一致的。现象(2)主要是由于爆轰波和楔面作用发生马赫反射,马赫杆后的压力和密度提高,导致胞格尺寸变小。现象(3)是由于三波点和马赫杆在传播过程中没有影响到三波点轨迹以上的流场,即三波点轨迹上方一层胞格的上半部分没有受到反射波的影响,但下半部分受到三波点和马赫杆影响,导致胞格变形。

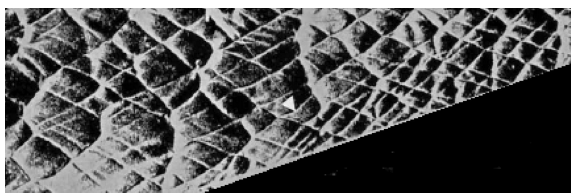


图6 实验得到的胞格结构<sup>[2](19.3)</sup>

Fig.6 Experiment result of Mach reflection of detonation wave<sup>[2](19.3)</sup>

## 4 结论

本文使用改进的高精度 CE/SE 算法对 Sichel 的二步模型在气相爆轰数值模拟中的应用进行了验证和讨论。通过分析,发现了 Sichel 的二步模型存在的问题,提出了一种新的二步模型,在此模型中假定在放热阶段中的组分有一个中间状态,并改变组分分布形式。通过对平面爆轰波的数值模拟和分析,说明了采用该模型计算得到的物理参数比采用旧二步模型、Sichel 的二步模型得到的物理参数更接近于实验值和基元反应模型值(例如温度)。新的二步模型并没有增加计算量和存储量,但模型准确度得到很大提高。最后采用新的二步模型对爆轰波马赫反射进行了数值模拟,并对爆轰波在楔面上马赫反射的主要现象进行了分析,计算结果和实验能够较好吻合,说明了新的二步模型能够较准确地模拟爆轰波胞格结构和爆轰波马赫反射问题。

## 参 考 文 献:

[1] NIKOLAEV Y A, VASILEV A A, UL YANITSKII B

Y. Gas detonation and its application in engineering and technologies [J]. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2003, 39(4): 382-410.

- [2] GUO C M, ZHANG D L, XIE W. The mach reflection of a detonation based on soot track measurements [J]. *Combustion and Flame*, 2001, 127(4): 2051-2058.
- [3] SICHEL M, TONELLO N A, ORAN E S, JONES D A. A two-step kinetics model for numerical simulation of explosions and detonations in H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> mixtures [J]. *Proceedings of the Royal Society of London Series A- Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 2002, 458(2017): 49-82.
- [4] SHARPE G J. Shock-induced ignition for a two-step chain-branching kinetics model [J]. *Physics of Fluids*, 2002, 14(12): 4372-4388.
- [5] MCBRIDE B J, ZEHE M J, GORDON S. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species [R]. NASA TP 2002-211556, 2002.
- [6] CHANG S C. The method of space-time conservation element and solution element—a new approach for solving the Navier-Stokes and Euler equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 119(2): 295-324.
- [7] 张德良, 谢巍, 郭长铭, 胡湘渝. 气相爆轰胞格结构和马赫反射数值模拟 [J]. *爆炸与冲击*, 2001, 21(3): 161-167. (ZHANG D L, XIE W, GUO C M, HU X Y. Numerical simulation of cellular structures and Mach reflection of gaseous detonation waves [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2001, 21(3): 161-167).
- [8] LIU K X, WANG J T. Analysis of high accuracy conservation element and solution element schemes [J]. *Chinese Physics Letters*, 2004, 21(11): 2085-2088.
- [9] 王景焘. 时空守恒元解元方法 (CE/SE) 的高阶精度格式及其应用 [D]. [博士论文]. 北京大学, 2007. (WANG J T. High-order scheme of space-time conservation element and solution element method (CE/SE method) and its applications [D]. [Dissertation for Ph. D.]. Peking University, 2007).
- [10] NETTLETON M A. Gaseous detonations: their nature, effects and control [M]. London, New York, Chapman and Hall: 30-31. 1987.

## Re-study on the two-step chemical reaction model in numerical simulation of gaseous detonation

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

(1. *L TCS and Department of Mechanics and Aerospace Engineering, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China;*

*2. Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)*

**Abstract**: Numerical simulations of the gaseous detonations are performed by using the extended CE/ SE method (the space-time Conservation Element and Solution Element method) with high-order accuracy and the two-step chemical reaction model with species (Sichel 's two-step chemical reaction model). The analysis results show that Sichel 's two-step chemical reaction model also can 't obtain the exact gasdynamics parameters, though it is more accurate than the original two-step chemical reaction model. The Sichel 's two-step chemical reaction model is improved by modifying the distribution of components ' mass fractions. A planar detonation problem is simulated by the new two-step chemical reaction model. Gasdynamics parameters obtained using the new two-step chemical reaction model agree well with the experimental results and the numerical results of the detailed chemical reaction model. The computational accuracy using the new two-step chemical reaction model is evidently improved.

**Key words**: CE/ SE method; detonation wave; two-step chemical reaction model; numerical simulation